



HAL
open science

Grandes déviations d'exposants de Lyapunov dans les systèmes étendus

Tanguy Laffargue

► **To cite this version:**

Tanguy Laffargue. Grandes déviations d'exposants de Lyapunov dans les systèmes étendus. Mécanique statistique [cond-mat.stat-mech]. Université Paris Diderot (Paris 7), 2015. Français. NNT: . tel-01138333

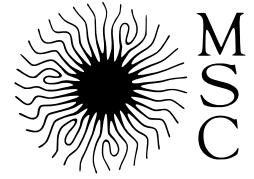
HAL Id: tel-01138333

<https://theses.hal.science/tel-01138333v1>

Submitted on 1 Apr 2015

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

Spécialité : Physique théorique

présentée par

Tanguy LAFFARGUE

Grandes déviations d'exposants de Lyapunov dans les systèmes étendus

Thèse dirigée par Frédéric VAN WIJLAND

Soutenue le 26 janvier 2015

Devant le jury composé de :

Cédric BERNARDIN	Examineur
Thierry BODINEAU	Président
Freddy BOUCHET	Rapporteur
Bernard DERRIDA	Examineur
Roberto LIVI	Rapporteur
Julien TAILLEUR	Examineur
Frédéric VAN WIJLAND	Directeur de thèse

Remerciements

Je voudrais remercier Freddy Bouchet et Roberto Livi pour avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse et pour leurs remarques précises, qui m'ont permis de peaufiner mon manuscrit. Je souhaiterais aussi remercier Thierry Bodineau, Cédric Bernardin et Bernard Derrida pour avoir accepté de faire partie du jury de ma thèse.

Je remercie également mes trois encadrants au cours de cette thèse, à commencer par mon directeur de thèse, Frédéric van Wijland. Sa disponibilité (même à 9000 km de distance pendant les derniers mois), sa patience, sa passion et sa pédagogie en font un formateur hors pair, au contact de qui j'ai énormément appris. Je ne compte le nombre de fois où je l'ai dérangé sans prévenir pour une question qui devait lui sembler triviale mais sur laquelle je bloquais depuis des heures, et il a toujours pris le temps d'y répondre, souvent immédiatement, en m'expliquant d'autant de manières différentes que nécessaire jusqu'à ce qu'il soit sûr que j'avais bien tout compris. Et s'il devait recommencer une semaine plus tard parce qu'en y réfléchissant davantage je n'étais plus convaincu, il le faisait de bon cœur. Du fait de son humour, de sa franchise et de son ouverture, j'ai eu grand plaisir à discuter avec lui, de physique comme de tout le reste, et j'espère que cela continuera après mon départ du labo. Pour toutes ces raisons, je m'estime très chanceux d'avoir pu faire ma thèse avec Fred.

Je suis d'ailleurs très reconnaissant envers Julien Tailleur pour m'avoir, entre autres, aiguillé vers Fred au moment de choisir une thèse. J'ai rencontré Julien lors de mon stage de Master 1 à l'université d'Édimbourg, et il est rapidement devenu une sorte de « grand frère » pour moi. Ses conseils depuis lors m'ont été d'une grande aide, même si je n'en ai parfois pas tenu compte (et je l'ai généralement rapidement regretté). Il est la personne auprès de qui j'ai le plus appris en physique numérique, calcul scientifique et traitement/représentation de données. J'ai eu beaucoup de plaisir à travailler avec lui pendant mon stage et pendant ma thèse.

Mon dernier encadrant était Peter Sollich à King's College London, où j'ai passé ma quatrième année d'ENS/première année de thèse. Je le remercie pour son accueil très chaleureux. J'ai beaucoup apprécié nos discussions lors de nos *meetings* hebdomadaires. Son accessibilité, sa gentillesse, son organisation, sa vivacité d'esprit et sa culture physique/mathématique sans fin sont des modèles pour moi.

Je souhaiterais également remercier tous les chercheurs avec lesquels j'ai interagi avant et pendant ma thèse, et tout particulièrement Martin Evans qui m'a accueilli en stage de M1 à Édimbourg, Paolo Visco pour ses remarques pertinentes lors de la répétition de ma soutenance, Hugo Touchette pour les discussions sur l'Afrique du Sud et l'après-thèse, Eytan Katzav pour ses conseils lors de mes premiers TDs à Londres, Andrea Parmeggiani pour les discussions à une heure du

matin à Louvain, Fabien Montel, Gaëlle Charon, Atef Asnacios, Jean-Baptiste Fournier, Sylvie Hénon, Loïc Auvray, et plus généralement tous les chercheurs du laboratoire MSC, qui, avec tous les personnels d'encadrement, font que ce laboratoire est un lieu où il fait bon travailler. Parmi ces derniers, je remercie plus spécifiquement Alain Richert pour les discussions diverses et variées, les responsables informatiques (Jean Hubert et Wilfrid Niobet) pour leur aide et leurs explications, et les responsables administratifs (Carole Barache, Nadine Beyer, Lucie Bouchu et Sarah Semhoun).

Je voudrais aussi remercier les différents enseignants qui m'ont donné le goût des sciences. Cela commence au lycée Jules Verne de Nantes par Gabrielle Masson qui m'a fait apprécier la physique en 2^{nde}, Sébastien Deniaud dont les blagues à répétition rendaient ses cours de biologie et de géologie passionnants, Brigitte Doisneau qui m'a fait prendre conscience de l'importance de la rigueur et de la clarté des démonstrations en maths, Jean-Pierre Faucou pour avoir permis que la transition vers la prépa se passe sans heurt en maths et Michel Hardy dont la pédagogie et l'humour m'ont fait aimer à nouveau la physique après une année de 1^{ère} qui m'en avait presque dégoûté. Cela se poursuit ensuite au lycée Clemenceau de Nantes avec Sylvie Haurat qui m'a fait aimer la chimie (et plus particulièrement la chimie organique), Ludovic Rion dont la pédagogie et la passion ont grandement joué dans mon choix de faire de la physique après la prépa, Paul Barbaroux dont la capacité à expliquer de façon intuitive les propriétés et les imbrications entre les différents objets mathématiques m'a permis de vraiment aimer les maths et Béatrice Camélio pour sa pédagogie. Puis cela se termine à l'ENS Cachan, à l'ENS Paris et à l'université Pierre et Marie Curie avec Nicolas Sator qui m'a fait découvrir la physique statistique (et la mécanique hamiltonienne) et m'a ainsi détourné de la physique des particules vers laquelle je voulais alors m'orienter, Alain Comtet qui m'a initié à la théorie des groupes et à l'intégrale de chemin, Jean-Bernard Zuber dont le cours de théorie des groupes est un modèle de clarté, Henk Hilhorst pour sa rigueur et sa volonté de toujours répondre aux questions précisément sans chercher à « mettre de disquette » (© François Landes), Bernard Derrida pour sa pédagogie, Werner Krauth pour sa capacité à présenter de manière simple des algorithmes compliqués et Vivien Lecomte pour ses réponses toujours précises et rigoureuses à mes questions lors des TDs associés au cours de Werner Krauth.

Je remercie également les thésards et post-doctorants avec qui j'ai interagi pendant ma thèse : tous les participants et les organisateurs de l'école d'été *International Summer School Fundamental Problems in Statistical Physics XIII* à Louvain (Belgique) qui ont permis de rendre ces deux semaines très agréables (alors que l'idée de passer deux semaines dans un monastère en Flandre ne me réjouissait pas spécialement), Francesco pour son accueil lors de mon arrivée à KCL, Matt pour avoir illustré mon cahier avec ses œuvres d'art et pour le « *word of the day* », Mehmet, Marianne, Asénath, Marion, Mehdi, Sarkis, David, Clément, Timothée, Tommy, Matthieu, Stéphane, Maxime, Iris, les occupants de la 768A (Rémi, Luc, Pauline, Kévin, Florent, Lam, Thomas, Étienne, Gwen, Simon et Agnese), et Alex pour les « dîners » au labo pendant la phase de rédaction et avec qui c'est un plaisir de partager un bureau depuis la rentrée.

Un grand merci à tous mes amis pour leur soutien, en particulier : mes colocataires au cours de cette thèse (Mikey, Kathryn, Jenny, Elisa, William, Lola, Xavier et Fleur), les potes de prépa (Damien, Victoire, Marion, Marine, Chloé, Édouard, Jacobs, Julien, Alex, Dany), les cachannais (Boris, Guillaume, Guillaume KKK, Pauline, Rémi, Thomas), Anas pour l'organisation du voyage au Maroc (ainsi que Mag, Rachid, Rémi, Saloua et Sonia), François le bot, Marguerite, Byron, Caddie, Jana, Louise, PEF, Flo, Marine, Léa, Chloé, Harmonie, Sarah, Lola, Loïc, Simon, Chloé, la FaT TeaM (Guilhem, Jules, Pierre), Hushark, JP Fish, Crash, Jack Sparrow, Gordon et Hendrick. Je remercie aussi Calvin et David qui ont été présents jusqu'au dernier moment.

Pour finir, je souhaiterais remercier toute ma famille, et en particulier ma grand-mère qui a été très présente dans mon enfance et a très tôt aiguisé ma curiosité, ce qui a sans doute contribué à mon attrait pour les sciences, ainsi que mes parents qui ont toujours tout fait pour que je ne manque de rien, que je fasse ce qu'il me plaît et que je sois heureux. J'ai une pensée particulière pour mon oncle, Jacques Laffargue, qui m'a initié à l'informatique et dont la rédaction de cette thèse a été marquée par la maladie et le décès. Enfin, je remercie Mahmoud pour ce qu'il représente et Audrey pour son amour, son soutien et sa patience pendant la rédaction de cette thèse.

Table des matières

Remerciements	iii
Table des matières	vii
Introduction	1
1 Exposants de Lyapunov	5
1.1 Motivations	5
1.1.1 Turbulence	6
1.1.2 Transition vitreuse	6
1.1.3 Trajectoires de chaoticité atypique	8
1.2 Définitions	9
1.2.1 Dynamique tangente	9
1.2.2 Spectre de Lyapunov	10
1.2.3 Définition alternative des exposants de Lyapunov à temps finis	10
1.3 Propriétés	13
1.3.1 Structure de l'espace des phases	13
1.3.2 Complexité dynamique	14
1.3.3 Dynamique hamiltonienne	14
1.4 Fluctuations d'exposants de Lyapunov	15
1.4.1 Automoyennage du plus grand exposant de Lyapunov	15
1.4.2 Loi d'échelle aux temps longs	16
2 Formalisme thermodynamique	17
2.1 Rappels de thermodynamique statistique	17
2.1.1 L'ensemble microcanonique	17
2.1.2 L'ensemble canonique	19
2.2 La thermodynamique des trajectoires	20
2.2.1 Plus grand exposant de Lyapunov	20
2.2.2 Une température pour la chaoticité	21
2.2.3 Analogie avec la thermodynamique	21
2.2.4 Généralisation à k exposants de Lyapunov	22
3 Dynamique biaisée par les Lyapunov (LWD)	25
3.1 Principe de l'algorithme	25

3.1.1	Échantillonner des évènements rares	25
3.1.2	Dynamique des populations	26
3.2	Ingrédients supplémentaires	27
3.2.1	Ajout d'un bruit	27
3.2.2	Vecteur tangent normalisé	28
3.2.3	Population finie	28
3.2.4	Méthode alternative au clonage : le rééchantillonnage	29
3.2.5	Analogie avec l'évolution	29
3.3	Mesure des exposants de Lyapunov	29
3.4	Implémentation effective de la LWD	32
3.5	Choix des paramètres	33
4	Applications de la LWD	35
4.1	Deux particules dans un double puits	36
4.1.1	Variété invariante normalement hyperbolique	36
4.1.2	Présentation du système	36
4.1.3	Localisation des NHIMs	37
4.2	Chaîne Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou	37
4.2.1	Présentation du système	37
4.2.2	Implémentation numérique	39
4.2.3	Solitons et modes de respiration chaotiques	39
4.2.4	Plusieurs modes de respiration chaotiques	41
4.2.5	Énergie libre dynamique	43
4.3	Chaîne d'applications en forme de tente couplées	44
4.3.1	Présentation du modèle	44
4.3.2	Ajout du bruit	45
4.3.3	Approximation gaussienne	46
4.3.4	Mesure de l'énergie libre avec la LWD	47
4.4	Conclusion LWD	50
5	Fluctuations de l'exposant de Lyapunov maximal dans les systèmes diffusifs	51
5.1	Contexte	51
5.2	Modèles étudiés	53
5.2.1	Particules libres	53
5.2.2	Processus d'exclusion simple symétrique	53
5.2.3	Modèle de Kipnis-Marchioro-Presutti	53
5.3	Hydrodynamique fluctuante	54
5.4	Exposant de Lyapunov	55
5.5	Fonction de partition dynamique	56
5.6	Action associée à la fonction de partition	57
5.7	Méthode du col	58
5.8	Résultats	60
5.9	Cas particulier du SSEP en $\rho_0 = 1/2$	61
5.9.1	Col stationnaire et uniforme	61
5.9.2	Récapitulatif	63
5.9.3	Fluctuations au voisinage du col	64
5.9.4	Perspectives	64
6	Applications aux modèles microscopiques	67

6.1	Exposant de Lyapunov dans les processus sur réseau	68
6.1.1	Problème de la définition de la dynamique jointe	68
6.1.2	Définition de l'exposant de Lyapunov	69
6.1.3	Lien avec la propagation de défauts	70
6.2	Modèle de Kipnis-Marchioro-Presutti	70
6.2.1	Exposant de Lyapunov	71
6.2.2	Vérification numérique	73
6.3	Processus d'exclusion simple symétrique	76
6.3.1	Exposant de Lyapunov	76
6.3.2	Construction d'une hydrodynamique fluctuante pour u	77
6.3.3	Équivalence avec $A + B \rightarrow \emptyset$	82
6.3.4	Processus $A + B \rightarrow \emptyset$ en taille finie	85
6.3.5	Vérification numérique	89
6.4	Conclusion	91
Conclusion et perspectives		93
A Produit extérieur		95
A.1	Produit extérieur	95
A.1.1	Définition	95
A.1.2	Illustration des propriétés du produit extérieur	95
A.2	Puissance extérieure	96
A.3	Algèbre extérieure	96
A.4	Produit scalaire	96
A.5	Lien avec les volumes des parallélépipèdes	97
B Principe de grandes déviations		99
B.1	Pile ou face	99
B.2	Principe de grandes déviations	101
B.3	Propriétés	102
B.3.1	Fonctions génératrices	102
B.3.2	Théorème de Gärtner-Ellis	102
B.3.3	Théorème de Varadhan	102
B.3.4	Propriétés de l'énergie libre	103
C Dynamique des vecteurs tangents orthogonaux		105
C.1	Notations	105
C.2	Initialisation	105
C.3	Hérédité	106
C.4	Conclusion	107
D Intégrateur symplectique de Yoshida		109
D.1	Intégrateur symplectique	109
D.2	Construction d'intégrateurs symplectiques par la méthode de séparation	110
D.3	Intégrateurs symplectiques à coefficients exacts	112
D.3.1	Ordre 1 : méthode d'Euler symplectique	112
D.3.2	Ordre 2 : intégrateur <i>Leapfrog</i>	112
D.3.3	Ordres supérieurs	113
D.4	Intégrateurs symplectiques à coefficients numériques	113
D.5	Réduction du nombre d'opérations en pratique	114

E	Résolution perturbative des équations de col	115
E.1	Rappel des équations de col	115
E.2	Ordre zéro en α	116
E.3	Ordre un en α	117
E.3.1	Champ $\bar{\nu}_1$	117
E.3.2	Champ \bar{r}_1 et multiplicateur de Lagrange g_1	117
E.3.3	Champ r_1	118
E.3.4	Champ ν_1	118
E.3.5	Récapitulatif	119
E.4	Ordre arbitraire en α	119
F	Exposant de Lyapunov d'une particule brownienne	121
F.1	Bruit intrinsèque à la particule	121
F.2	Bruit dû à l'environnement	122
F.2.1	Définition du bruit	122
F.2.2	Discrétisation de l'équation de Langevin	122
F.2.3	Propriétés de la fonction de corrélation spatiale C	123
F.2.4	Calcul de l'exposant de Lyapunov	123
G	Construction de l'hydrodynamique fluctuante pour les particules libres	127
G.1	États nombres et opérateurs bosoniques	127
G.2	Opérateur densité et conjugué	128
G.3	Équation maîtresse et observables	129
G.4	États cohérents	129
G.5	Condition initiale	130
G.6	Forme normale d'un opérateur	131
G.7	Passage à une théorie des champs	131
G.8	Dérivation de l'hydrodynamique fluctuante	132
H	Simulation numérique du processus $A + B \rightarrow \emptyset$	135
H.1	Simulation directe	135
H.2	Renormalized Reaction-Cell method (RRC)	136
H.2.1	Principe	136
H.2.2	Exclusion	137
H.3	RRC sans rejet	138
H.3.1	Algorithme	138
H.3.2	Application : prédiction de Toussaint et Wilczek	139
	Bibliographie	141
	Publications	155
	Principaux résultats	157

Introduction

Un système est à l'équilibre thermodynamique s'il ne présente ni flux stationnaire (de chaleur, de matière, de quantité de mouvement, etc.), ni réaction chimique. On peut alors décrire ses propriétés à l'aide de quelques observables macroscopiques : sa température, son volume, sa pression, etc. Un système macroscopique étant composé d'un très grand nombre de particules (de l'ordre de 10^{23} particules), il est étonnant qu'il puisse être décrit par un si petit nombre de variables. La physique statistique a pour but de faire le lien entre les caractéristiques des composants microscopiques d'un système et ses propriétés macroscopiques, et permet ainsi d'expliquer pourquoi si peu d'observables suffisent. Au lieu de calculer le comportement de chaque particule exactement, ce qui demanderait une puissance de calcul gigantesque et un degré d'information inouï, elle adopte un traitement statistique et s'intéresse à la probabilité d'observer un certain état ou événement. En effet, un état macroscopique donné, appelé un macro-état, correspond à une multitude d'états microscopiques, appelés micro-états, et le système, même s'il est à l'équilibre, n'est pas figé. On observe en permanence des échanges de chaleur ou de matière, qui se compensent néanmoins sur des échelles de temps très courtes. Ainsi, le micro-état du système fluctue continuellement, sans changer de macro-état pour autant.

De par la nature statistique de cette approche, les observables macroscopiques n'ont plus une valeur donnée, mais une probabilité de prendre une certaine valeur. Cependant, dans la limite qui nous intéresse, à savoir celle des systèmes macroscopiques, les distributions de probabilité se piquent autour de leur moyenne. À notre échelle, les observables prennent alors la valeur de la moyenne de leur distribution de probabilité. Ainsi, cela a bien un sens de parler de la pression, de la température, etc. Les fluctuations autour de cette valeur moyenne, difficiles à observer en pratique pour un système à l'équilibre, sont cependant cruciales pour étudier les transitions de phase, pour comprendre l'évolution du système lorsqu'on fait varier un de ses paramètres et pour trouver les chemins réactionnels dans les processus activés. Il est donc important d'y avoir accès et la physique statistique d'équilibre le permet au prix de calculs ou de simulations parfois complexes. Cette approche est donc une manière simple et élégante de traiter les systèmes comportant un grand nombre de particules en interaction, tant qu'ils sont à l'équilibre thermodynamique.

De nombreux systèmes étendus sont néanmoins bloqués hors d'équilibre. C'est par exemple le cas des systèmes turbulents, dans lesquels il y a de manière évidente des flux de matière, couplés à des flux d'énergie. C'est aussi le cas des systèmes vitreux, qui sont refroidis trop vite pour avoir le temps d'atteindre l'équilibre et se retrouvent bloqués dans un état hors d'équilibre. Tous ces systèmes mettent en jeu un très grand nombre de particules, dont les dynamiques microscopiques individuelles ne diffèrent cependant pas de celles ayant cours dans leurs analogues d'équilibre, et

on aimerait pouvoir leur appliquer un traitement statistique. Contrairement au cas de l'équilibre, il n'existe pas d'approche générale pour le faire. Un point commun entre de nombreux systèmes hors d'équilibre est que leur dynamique est composée d'un mélange de structures très différentes, donnant une impression de chaos et de désordre spatial et temporel. Par exemple, on observe le phénomène d'intermittence dans un écoulement turbulent, qui correspond à l'apparition et à la disparition d'une zone laminaire au milieu de l'écoulement. De même, dans de nombreux systèmes non linéaires, allant des condensats de Bose-Einstein [1] aux molécules biologiques [2] en passant par les cristaux [3], le transport de l'énergie est assuré par deux types de structures qui coexistent : les solitons, très stables, qui ont une trajectoire balistique, et les modes de respiration chaotiques, éphémères, qui suivent une trajectoire aléatoire. Dans le cas des verres, on observe la disparition de toute dynamique de réorganisation spatiale à l'exception de zones localisées.

Réussir à classer les trajectoires et regarder l'importance relative des différentes structures qui en émergent permettrait de mieux comprendre la dynamique de ces systèmes. Pour ce faire, il faut choisir une observable pour discriminer entre les différents types de trajectoires. Un candidat naturel est le spectre de Lyapunov, qui décrit la stabilité des trajectoires en regardant comment deux trajectoires avec des conditions initiales proches évoluent et fournit donc une connaissance approfondie de l'espace des phases. Plus précisément, il mesure le taux de dilatation ou de compression d'un petit volume attaché à la trajectoire. Mais c'est la moyenne temporelle d'une quantité fluctuante. Il est donc difficile d'accéder à ses fluctuations aux temps longs. On retrouve le même phénomène qu'en physique statistique d'équilibre, où les observables se piquent dans la limite thermodynamique. Il serait donc intéressant de pouvoir suivre la même approche, en se fondant non pas sur les configurations mais sur les trajectoires. C'est exactement ce que met en œuvre le formalisme thermodynamique de Sinai, Ruelle et Bowen [4–8]. Il décompose la dynamique en des groupes de trajectoires avec des propriétés communes, un peu comme un prisme décompose la lumière en ses composantes élémentaires, et permet d'accéder aux fluctuations de quantités ayant tendance à se moyennner dans le temps.

La motivation première de cette thèse était d'utiliser cette approche pour étudier la transition vitreuse, en cherchant la signature d'une brisure d'ergodicité pouvant expliquer l'apparition de zones gelées et de zones actives. Les fluctuations d'exposants de Lyapunov n'ayant jamais été calculées analytiquement dans des systèmes étendus, il fallait se familiariser avec le formalisme et commencer avec des cas dont la dynamique est plus accessible aux outils théoriques, avant d'attaquer la dynamique vitreuse. De plus, une approche assez générale en physique statistique pour étudier un phénomène est de ne garder que les composants indispensables à l'émergence de ce phénomène. Nous avons donc commencé par appliquer ce formalisme à des modèles ayant une dynamique diffusive. Ces modèles peuvent décrire des particules se déplaçant aléatoirement avec une interaction de cœur dur, ou la conduction de la chaleur. Par rapport à un fluide réel et ses champs conservés multiples, on ne garde qu'un champ conservé (les modes de densité ou d'énergie), et l'on réduit la dimension spatiale. Le lecteur réalisera que ces deux seuls ingrédients recèlent déjà une grande richesse phénoménologique. De ce fait, calculer les fluctuations d'exposants de Lyapunov dans ces modèles et comprendre les résultats obtenus aura finalement pris toute cette thèse. Il ne sera donc pas question d'application à des modèles de systèmes vitreux dans ce manuscrit.

Notre travail s'est au contraire développé dans des directions en lien avec d'autres domaines de la physique statistique. Ainsi, le calcul des exposants de Lyapunov s'est révélé proche de la propagation de défauts, dans laquelle on insère un défaut dans le système et on regarde comment il évolue. Est-il éliminé ? A-t-il tendance à croître et à modifier complètement le système ? De plus, dans les systèmes diffusifs, l'évolution de la différence entre nos deux systèmes est générale-

ment équivalente à un processus de réaction-diffusion, ce qui permet, dans le cas où ce processus est intéressant en lui-même, d'obtenir de nouveaux résultats à son égard. Par ailleurs, en nous confrontant à ces modèles simples, nous avons également réalisé à quel point l'outil numérique serait nécessaire à l'étude de systèmes plus complexes. Plutôt que de poursuivre plus en avant des études analytiques de modèles simples, nous avons choisi de nous intéresser également à l'étude numérique des fluctuations d'exposants de Lyapunov, à l'aide d'un algorithme de dynamique des populations : la dynamique biaisée par les Lyapunov [9]. Des améliorations de cet algorithme nous ont permis d'obtenir de nouveaux résultats sur la chaîne d'oscillateurs non linéaires couplés de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou, qui sert souvent à illustrer la cohabitation entre structures solitoniques et modes de respiration chaotiques.

La première partie de cette thèse (chapitres 1 et 2) est une présentation des différentes grandeurs utilisées dans celle-ci et du formalisme thermodynamique. Nous commencerons par le spectre de Lyapunov et ses propriétés, puis nous expliquerons intuitivement pourquoi il est généralement très difficile d'accéder à ses fluctuations. Cela conduira à l'introduction du formalisme thermodynamique pour les trajectoires et des grandeurs associées : température pour la chaotité, fonction de partition dynamique et énergie libre dynamique.

Dans la deuxième partie (chapitres 3 et 4), nous mettrons en œuvre ce formalisme numériquement à l'aide de la dynamique biaisée par les Lyapunov, qui permet d'échantillonner des trajectoires avec une valeur moyenne des exposants de Lyapunov fixée. Cet algorithme sera ensuite appliqué à un système modèle (deux particules dans un double puits) pour illustrer son fonctionnement, puis à la chaîne de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou, où il permet d'isoler les solitons et les modes de respiration chaotiques. Pour finir, il sera utilisé pour mesurer l'énergie libre dynamique dans cette dernière et dans une chaîne d'applications en forme de tente couplées.

La troisième partie (chapitres 5 et 6) est une étude analytique des systèmes diffusifs. Après une rapide introduction de trois modèles caractéristiques, les particules libres, le processus d'exclusion simple symétrique et le modèle de conduction thermique de Kipnis-Marchioro-Presutti, nous présenterons un cadre commun pour décrire ces modèles dans la limite macroscopique : l'hydrodynamique fluctuante. En se fondant sur cette description et sur les méthodes de la théorie des champs, nous calculerons les premiers cumulants du plus grand exposant de Lyapunov. Ces résultats permettront alors d'obtenir une expression analytique pour la décroissance du nombre de particules dans le processus de réaction-diffusion d'annihilation de paires à deux espèces en taille finie.

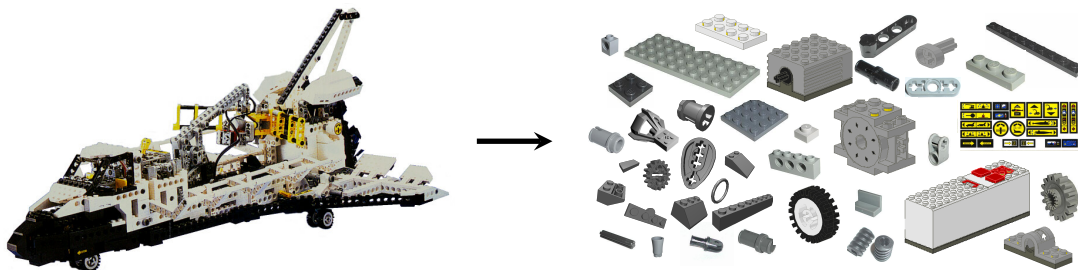
Chapitre 1

Exposants de Lyapunov

Ce chapitre présente le spectre de Lyapunov et ses propriétés. Il existe plusieurs définitions des exposants de Lyapunov à temps fini; on en donnera deux ici, et on justifiera le choix de celle utilisée dans cette thèse. Ce chapitre fixe aussi un certain nombre de définitions et de notations qui seront utilisées tout au long de ce manuscrit.

1.1 Motivations

Le spectre de Lyapunov est une quantité centrale de la théorie des systèmes dynamiques et de la théorie du chaos. C'est une mesure de la sensibilité aux conditions initiales d'une trajectoire, donc de sa stabilité ou de sa chaoticité. Nous verrons dans la suite que les exposants de Lyapunov apparaissent aussi comme la moyenne temporelle d'une quantité fluctuante et possèdent donc en général une valeur typique pour un système donné. Mais il est parfois intéressant de décomposer la dynamique en ses différents ingrédients, pour élucider le comportement complexe qui résulte de ce mélange. C'est notamment le cas quand on s'intéresse à la turbulence ou à la transition vitreuse, comme nous allons le voir maintenant.



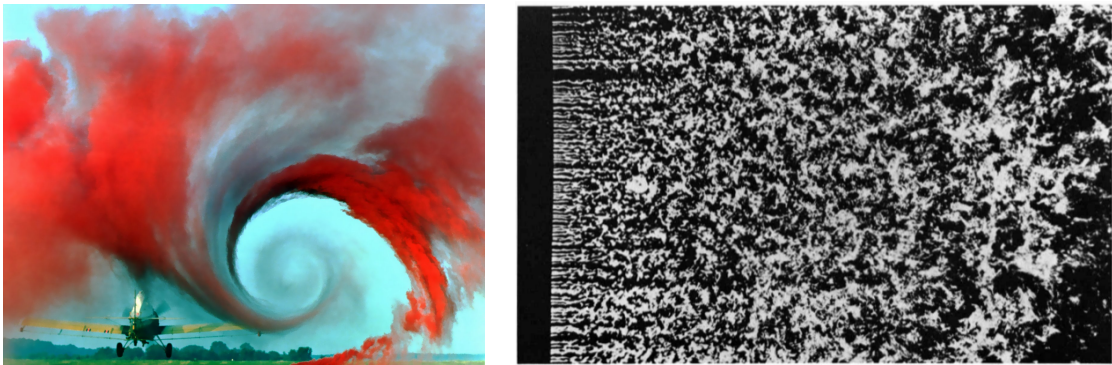


Figure 1.1 – Écoulements turbulents. **Gauche** : Écoulement de l'air derrière l'aile d'un avion agricole, rendu visible par de la fumée colorée s'élevant du sol. Cette image provient du Langley Research Center de la NASA. **Droite** : Turbulence homogène derrière une grille. Photographie de Thomas Corke et Hassan Nagib, extraite de [10].

1.1.1 Turbulence

L'apparition de la turbulence correspond à l'émergence de trajectoires chaotiques dans un écoulement préalablement régulier. Ce phénomène est présent dans tous les fluides et à toutes les échelles (voir la figure 1.1 pour deux exemples). En effet, on observe de la turbulence aussi bien dans l'écoulement sanguin que dans les étoiles. Léonard de Vinci, il y a environ 500 ans, fut l'un des premiers à voir en la turbulence un comportement particulier des fluides, et à l'étudier. Il fallut cependant attendre la fin du XIX^{ème} siècle et Osborne Reynolds [11] pour que la communauté scientifique se penche réellement sur le problème de l'apparition de la turbulence. Depuis, de nombreux physiciens ont essayé de la décrire et de l'expliquer (voir [12] pour un résumé des différentes théories et approches). Mais la turbulence demeure pour l'instant grandement incomprise, et une théorie permettant de prédire son apparition, son évolution et ses propriétés manque toujours à l'appel.

Une des théories le plus utilisées et le plus souvent citées est la théorie K41 de Kolmogorov [13], qui postule un certain nombre de symétries de l'écoulement turbulent (statistiquement réalisées). Cette théorie est toutefois inexacte dans sa caractérisation des fluctuations du champ de vitesse. En effet, on observe fréquemment dans les écoulements turbulents le phénomène d'intermittence, qui correspond à l'apparition et à la disparition d'un écoulement laminaire au milieu de la turbulence. Ce phénomène brise l'invariance par translation temporelle et par translation spatiale, et le comprendre est crucial pour espérer bâtir une théorie complète de la turbulence. Le phénomène d'intermittence semble être généré par des structures localisées spatialement qui apparaissent et disparaissent dans l'écoulement [14, 15]. Ces structures, responsables de l'apparition de zones laminaires, doivent donc être associées à des exposants de Lyapunov anormalement petits comparés à ceux de l'écoulement environnant, turbulent, ce qui peut être un moyen de les localiser et de les étudier.

1.1.2 Transition vitreuse

Passons maintenant à un autre exemple, associé à une dynamique complètement différente, celui de la formation des verres. Un verre est un solide amorphe : il a les propriétés dynamiques

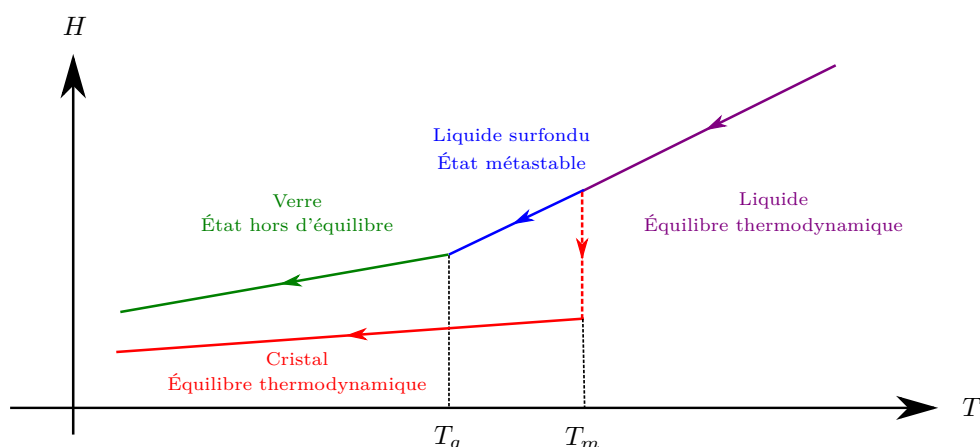


Figure 1.2 – Évolution de l'enthalpie H d'un liquide quand la température diminue. Un refroidissement lent, permettant au corps de rester en permanence à l'équilibre thermodynamique, conduit à la formation d'un cristal alors qu'un refroidissement rapide conduit à un liquide surfondu, puis à un verre. Le température de transition vitreuse T_g dépend du protocole de refroidissement, alors que la température de cristallisation T_m est une caractéristique intrinsèque du liquide.

d'un solide mais la structure désordonnée d'un liquide. Il s'agit d'un état hors d'équilibre, qui relaxe infiniment lentement vers l'équilibre thermodynamique dès sa formation. Mais son temps de relaxation peut être tellement grand qu'il apparaît comme « stable ». Par exemple, le temps de relaxation du verre composant le vitrail des cathédrales est d'au moins 10^{32} années [16], donc bien supérieur à l'âge de l'univers qui est de 10^{10} années.

Quand on refroidit lentement un liquide, il subit une transition de phase à sa température de solidification T_m : il cristallise, c'est-à-dire qu'il passe de l'état liquide (désordonné) à l'état solide (cristallin donc ordonné). Cette transition de phase est dite du premier ordre car certains potentiels thermodynamiques, comme par exemple l'enthalpie H , sont discontinus à la transition (voir la figure 1.2). Au-dessus de T_m , le liquide est l'état stable thermodynamiquement alors qu'en dessous, c'est le cristal. Si maintenant on refroidit ce même liquide très rapidement (on réalise ce qu'on appelle une trempe), l'empêchant ainsi d'atteindre l'équilibre thermodynamique, il ne va pas cristalliser à la température T_m mais va rester liquide, sans discontinuité de ses potentiels thermodynamiques. En effet, l'état liquide n'est plus l'état le plus stable, mais demeure un état d'équilibre, séparé de l'état le plus stable (l'état solide) par une barrière d'énergie, appelée énergie d'activation. Le système est alors dans un état métastable et on obtient un liquide surfondu. Si on continue à refroidir ce liquide, sa viscosité va augmenter rapidement, rendant de plus en plus difficile sa réorganisation spatiale pour s'adapter à la diminution de la température, jusqu'à ce qu'il bascule hors d'équilibre : on obtient un verre. Ce passage hors d'équilibre s'accompagne d'un changement de comportement des potentiels thermodynamiques et est appelé la transition vitreuse. La température à laquelle ce basculement a lieu, qui dépend du protocole de trempe, est appelée la température de transition vitreuse T_g . Un verre est donc un système hors d'équilibre, dont les propriétés évoluent avec le temps dès l'instant de sa formation. C'est le phénomène de vieillissement. On a ici présenté la trempe en température, mais il y a d'autres moyens d'obtenir un verre, notamment en augmentant la pression d'un liquide à température fixée ou en augmentant la fraction volumique d'une suspension colloïdale.

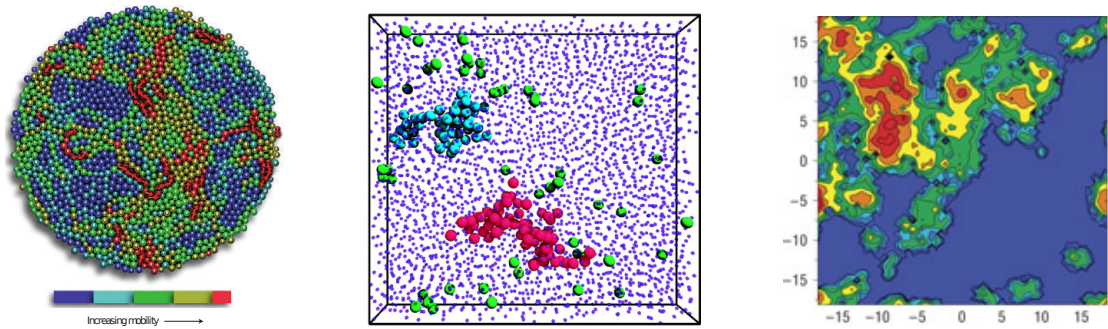


Figure 1.3 – Trois exemples d’hétérogénéités dynamiques [17]. Sur chaque figure, les particules avec une mobilité similaire semblent s’agréger. **Gauche** : Gaz granulaire de perles [18]. Le code couleur indique la mobilité, croissante du bleu vers le rouge. **Milieu** : Suspension colloïdale de sphères dures, où les particules les plus mobiles sont mises en évidence [19]. **Droite** : Simulation numérique d’un système bidimensionnel de disques répulsifs [20]. Le code couleur indique si l’environnement des particules varie peu (bleu) ou varie beaucoup (rouge).

Gauche : Réimprimé avec la permission de Macmillan Publishers Ltd : *Nature Physics* 3, 260–264, copyright 2007. *Milieu* : Extrait de *Science* 287, 627–631 (2000). Réimprimé avec la permission de l’AAAS. *Droite* : Réimprimé avec la permission de Macmillan Publishers Ltd : *Nature Physics* 4, 711–715, copyright 2008.

Malgré de nombreuses données expérimentales, cette transition est encore mal comprise théoriquement. Contrairement à la cristallisation, qui s’accompagne d’un changement structural important (d’un état désordonné à un état ordonné), la structure du liquide ne change pas radicalement pendant tout le processus de trempe, que ce soit à la température de solidification ou à la température de transition vitreuse. On observe en revanche un ralentissement de la dynamique à l’approche de la transition vitreuse, associé à l’apparition d’hétérogénéités dynamiques (voir la figure 1.3). En effet, des pans entiers de l’espace peuvent cesser toute activité dynamique, alors que le reste du système conserve une activité normale. Ces hétérogénéités sont aujourd’hui considérées comme un élément central de la transition vitreuse. Une façon d’étudier leur formation est de rechercher des trajectoires anormalement stables, segmentant l’espace des phases en différentes sous-parties, et conduisant à une brisure d’ergodicité [21, 22].

1.1.3 Trajectoires de chaoticité atypique

Les deux exemples précédents nous montrent qu’il est important d’être capable d’isoler des trajectoires de chaoticité atypique. En effet, lors du passage d’un écoulement laminaire à un écoulement turbulent, on assiste à l’apparition progressive de trajectoires chaotiques, puis une fois la turbulence totalement développée, il est intéressant d’être capable de localiser les trajectoires anormalement stables pour étudier le phénomène d’intermittence.

Concernant la transition vitreuse, comprendre l’apparition des hétérogénéités dynamiques semble crucial, et cela ne peut pas être fait en se focalisant uniquement sur le comportement typique. Il faut aussi aller sonder les trajectoires atypiques, dans l’espoir de détecter une brisure d’ergodicité. Cette approche a déjà été utilisée, en prenant l’activité dynamique comme observable discriminante [23–25]. Dans le cas d’un modèle sur réseau, l’activité a une définition simple et univoque : il s’agit du nombre total de sauts entre les sites. Elle permet de distinguer les zones où les particules sont fortement mobiles de celles où elles sont majoritairement immobiles, mais elle

ne renseigne pas sur la taille typique des mouvements des particules ou sur la structure fine de l'espace des phases. De plus, sa définition est ambiguë dans le cas où l'espace est continu [24, 25]. En effet, il faut discrétiser l'espace de façon adaptée : si la discrétisation est trop fine, on va juste mesurer l'agitation thermique (et perdre énormément de temps de calcul s'il s'agit d'une simulation numérique), alors que si la discrétisation est trop grossière, on risque de manquer les zones de forte activité dynamique qui peuvent être extrêmement localisées. C'est pour cela que nous avons choisi de nous concentrer sur une autre observable pour rechercher une brisure d'ergodicité conduisant à une séparation de l'espace des phases en des domaines indépendants : le spectre de Lyapunov, qui apparaît comme une observable naturelle que ce soit pour caractériser des trajectoires anormalement stables ou anormalement chaotiques. Nous allons maintenant le définir.

1.2 Définitions

Il existe plusieurs définitions des exposants de Lyapunov à temps fini. Dans cette section, nous en proposerons deux. La première, que nous n'utiliserons plus dans la suite, est la plus rigoureuse, car elle est indépendante de l'orientation initiale du vecteur tangent, mais elle est difficilement exploitable pour les systèmes de haute dimension. De plus, elle permet de comprendre l'origine de la seconde définition, qui est elle plus pratique pour réaliser des calculs ou des simulations. C'est cette dernière qui sera utilisée tout au long de cette thèse.

1.2.1 Dynamique tangente

Considérons un système dont l'état à l'instant t est décrit par le vecteur à D dimensions $\mathbf{x}(t)$ dont l'évolution est gouvernée par une fonction \mathbf{f} telle que

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)). \quad (1.1)$$

On s'intéresse à la stabilité d'une trajectoire sous l'effet d'une petite perturbation. Soit \mathbf{u} un vecteur tel que $\mathbf{x} + \mathbf{u}$ soit toujours solution de (1.1) et $\|\mathbf{u}\| \ll \|\mathbf{x}\|$. Ce vecteur est appelé un vecteur tangent et il représente la perturbation infinitésimale autour de la trajectoire \mathbf{x} . Il évolue selon la linéarisation de l'équation (1.1)

$$\dot{\mathbf{u}}(t) = J_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}(t)) \mathbf{u}(t) \quad (1.2)$$

où $J_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}(t))$ est la matrice jacobienne de \mathbf{f} en $\mathbf{x}(t)$. Cette équation décrit l'évolution temporelle de l'espace tangent à la trajectoire \mathbf{x} : c'est la dynamique tangente associée à la trajectoire \mathbf{x} . On introduit l'opérateur d'évolution $U(t)$ associé à cette dynamique ; il s'agit de la solution de l'équation matricielle

$$\dot{U}(t) = J_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}(t)) U(t). \quad (1.3)$$

On déduit alors de l'équation (1.2) la dynamique tangente

$$\mathbf{u}(t) = U(t) \mathbf{u}(0). \quad (1.4)$$

1.2.2 Spectre de Lyapunov

L'évolution de la norme du vecteur tangent est donnée par

$$\|\mathbf{u}(t)\|^2 = \mathbf{u}^\dagger(0)U^\dagger(t)U(t)\mathbf{u}(0). \quad (1.5)$$

La matrice $U^\dagger(t)U(t)$ est symétrique positive. Elle est donc diagonalisable dans une base orthonormée et ses valeurs propres sont positives. Les exposants de Lyapunov à temps finis $\{\lambda_i(t)\}$ sont les valeurs propres de l'opérateur $\frac{1}{2t} \ln [U^\dagger(t)U(t)]$, ordonnées ainsi : $\lambda_1(t) \geq \dots \geq \lambda_D(t)$.

Dans la limite $t \rightarrow \infty$, la matrice $[U^\dagger(t)U(t)]^{\frac{1}{2t}}$ converge vers une matrice dont le spectre est le spectre de Lyapunov $\{\lambda_i\}_{i \in \llbracket 1, D \rrbracket}$. On a alors la définition suivante des exposants de Lyapunov :

$$\lambda_i \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \lambda_i(t). \quad (1.6)$$

La matrice $U(t)$ variant en fonction de la trajectoire suivie, les exposants de Lyapunov dépendent a priori de la condition initiale $\mathbf{x}(0)$. Mais on se rend bien compte intuitivement que toutes les conditions initiales conduisant au même attracteur vont donner le même spectre de Lyapunov. En effet, une fois sur l'attracteur, toutes les trajectoires suivent le même parcours en boucle. Ceci peut être prouvé rigoureusement à l'aide du théorème ergodique multiplicatif d'Oseledets [26–29], qui assure que toutes les conditions initiales d'un même bassin d'attraction, à l'exception d'un ensemble de mesure nulle, conduisent au même spectre de Lyapunov.

1.2.3 Définition alternative des exposants de Lyapunov à temps finis

La définition précédente n'est pas utilisable pour suivre l'évolution des exposants de Lyapunov numériquement ou dans des systèmes de grande dimension : elle demande, pour extraire les exposants de Lyapunov à temps fini, de résoudre une équation matricielle pour déterminer la matrice $U(t)$, de calculer son adjoint $U^\dagger(t)$, puis de diagonaliser le produit $U^\dagger(t)U(t)$. C'est pourquoi nous allons lui préférer une autre définition, plus adaptée pour traiter les systèmes de haute dimension et qui donne bien les mêmes exposants de Lyapunov dans la limite $t \rightarrow \infty$. Pour comprendre d'où vient cette définition alternative, partons de la définition précédente.

Plus grand exposant de Lyapunov

On se place dans la limite $t \rightarrow \infty$, pour que la matrice $[U^\dagger(t)U(t)]^{\frac{1}{2t}}$ ait convergé. D'un point de vue plus physique, on se place en régime stationnaire. On note \mathbf{e}_i le vecteur propre associé à λ_i , de telle façon que $(\mathbf{e}_i)_{i \in \llbracket 1, D \rrbracket}$ forme une base orthonormée. On peut alors décomposer $\mathbf{u}(0)$ sur cette base :

$$\mathbf{u}(0) = \sum_{i=1}^D \alpha_i \mathbf{e}_i. \quad (1.7)$$

L'évolution de la norme du vecteur tangent est maintenant donnée par

$$\|\mathbf{u}(t)\|^2 = \sum_{i=1}^D e^{2t\lambda_i(t)} \alpha_i^2 \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} [e^{t\lambda_1} \alpha_1]^2 \quad (1.8)$$

qui est dominée aux temps longs par le terme contenant le plus grand exposant de Lyapunov λ_1 . On peut donc aussi calculer le plus grand exposant de Lyapunov de la façon suivante :

$$\lambda_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{u}(t)\|}{\|\mathbf{u}(0)\|} \quad (1.9)$$

On vient d'obtenir une définition, équivalente à la première, du plus grand exposant de Lyapunov. C'est elle qui justifie la définition alternative [30–33] suivante du plus grand exposant de Lyapunov à temps fini :

$$\lambda_1(t) \equiv \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{u}(t)\|}{\|\mathbf{u}(0)\|} \quad (1.10)$$

Cette définition n'est pas en général équivalente à celle de la section 1.2.2, comme on peut le voir facilement sur l'équation (1.8). Ses fluctuations sont donc a priori différentes. En revanche, elle redonne bien l'exposant de Lyapunov dans la limite $t \rightarrow \infty$ et elle est beaucoup plus facile à mettre en œuvre numériquement et analytiquement dans certains cas, notamment dans les systèmes de haute dimension.

Généralisation au reste du spectre de Lyapunov

On peut étendre de la même façon cette définition aux exposants de Lyapunov suivants. Pour cela, on considère k vecteurs tangents $\{\mathbf{u}_i\}_{i \in [1, k]}$ et on introduit le k -vecteur V_k qui est le produit extérieur de ces k vecteurs (voir l'annexe A pour un résumé sur le produit extérieur) :

$$V_k \equiv \mathbf{u}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{u}_k. \quad (1.11)$$

En utilisant le produit scalaire sur l'algèbre extérieure des k -vecteurs

$$\langle \mathbf{u}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{u}_k | \mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k \rangle \equiv \det M \text{ avec } M_{ij} = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{v}_j, \quad (1.12)$$

on peut exprimer le volume \mathcal{V}_k du parallélépipède construit sur les vecteurs $\{\mathbf{u}_i\}_{i \in [1, k]}$

$$\mathcal{V}_k = \|V_k\| = \langle \mathbf{u}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{u}_k | \mathbf{u}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{u}_k \rangle^{1/2}. \quad (1.13)$$

Regardons comment ce volume évolue au cours du temps. Pour cela, décomposons chaque vecteur composant $V_k(0)$ sur la base $(\mathbf{e}_i)_{i \in [1, D]}$:

$$\mathbf{u}_j(0) = \sum_{i=1}^D \alpha_i^{(j)} \mathbf{e}_i. \quad (1.14)$$

En utilisant la bilinéarité du produit extérieur, on peut écrire

$$V_k(0) = \sum_{i_1=1}^D \cdots \sum_{i_k=1}^D \prod_{j=1}^k \alpha_{i_j}^{(j)} \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k}. \quad (1.15)$$

Le produit extérieur étant antisymétrique, les i_j doivent être distincts deux à deux. On peut alors simplifier les sommes sur les i_j , en introduisant les permutations de k éléments σ et leur signature $\varepsilon(\sigma)$:

$$V_k(0) = \sum_{i_1 < \cdots < i_k} \sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) \prod_{j=1}^k \alpha_{i_j}^{(\sigma(j))} \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k}. \quad (1.16)$$

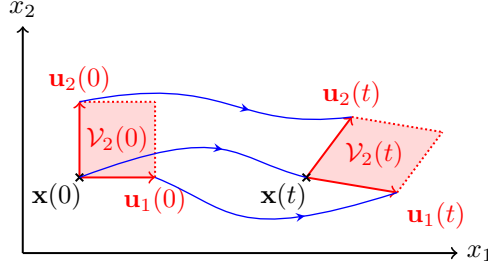


Figure 1.4 – Illustration de la définition alternative des exposants de Lyapunov dans un système de dimension 2. Le premier exposant est donné par $\lambda_1(t) = \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{u}_1(t)\|}{\|\mathbf{u}_1(0)\|}$, alors que le deuxième est donné par $\lambda_2(t) = \frac{1}{t} \ln \frac{\mathcal{V}_2(t)}{\mathcal{V}_2(0)} - \lambda_1$.

La signature d'une permutation σ vaut $+1$ si σ est composée d'un nombre pair de transpositions et -1 si elle en est composée d'un nombre impair. Ce qui nous intéresse est le produit scalaire

$$\langle V_k(t) | V_k(t) \rangle = \langle U(t)V_k(0) | U(t)V_k(0) \rangle = \langle V_k(0) | U^\dagger(t)U(t)V_k(0) \rangle \quad (1.17)$$

où $U(t)(\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j)$ signifie $(U(t)\mathbf{e}_i) \wedge (U(t)\mathbf{e}_j)$. En remarquant que

$$\langle \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k} | \mathbf{e}_{j_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{j_k} \rangle = \begin{cases} \varepsilon(\sigma) & \text{si les } j_n \text{ sont distincts deux à deux et sont reliés} \\ & \text{aux } i_n \text{ par la permutation } \sigma \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.18)$$

on arrive à

$$\langle V_k(t) | V_k(t) \rangle = \sum_{i_1 < \cdots < i_k} \left[\sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) \prod_{j=1}^k \alpha_{i_j}^{(\sigma(j))} \right]^2 e^{2t[\lambda_{i_1} + \cdots + \lambda_{i_k}]} \quad (1.19)$$

Si les vecteurs tangents choisis au départ sont génériques, c'est-à-dire si la composante du vecteur tangent \mathbf{u}_i selon le vecteur propre \mathbf{e}_i n'est pas nulle, cette somme est dominée aux temps longs par les k plus grands exposants de Lyapunov $\lambda_1 + \cdots + \lambda_k$:

$$\mathcal{V}_k(t)^2 = \langle V_k(t) | V_k(t) \rangle \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \left[e^{t[\lambda_1 + \cdots + \lambda_k]} \sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) \prod_{j=1}^k \alpha_{i_j}^{(\sigma(j))} \right]^2 \quad (1.20)$$

On obtient donc une définition récurrente des exposants de Lyapunov

$$\lambda_1 + \cdots + \lambda_k = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\mathcal{V}_k(t)}{\mathcal{V}_k(0)}. \quad (1.21)$$

En se basant sur cette relation, on définit maintenant les exposants de Lyapunov à temps fini de manière récurrente (voir la figure 1.4 pour une illustration)

$$\lambda_1(t) + \cdots + \lambda_k(t) = \frac{1}{t} \ln \frac{\mathcal{V}_k(t)}{\mathcal{V}_k(0)}. \quad (1.22)$$

À nouveau, cette définition n'est pas équivalente à la première définition donnée des exposants de Lyapunov à temps fini, mais c'est celle-ci qui sera utilisée dans toute cette thèse. On remarque

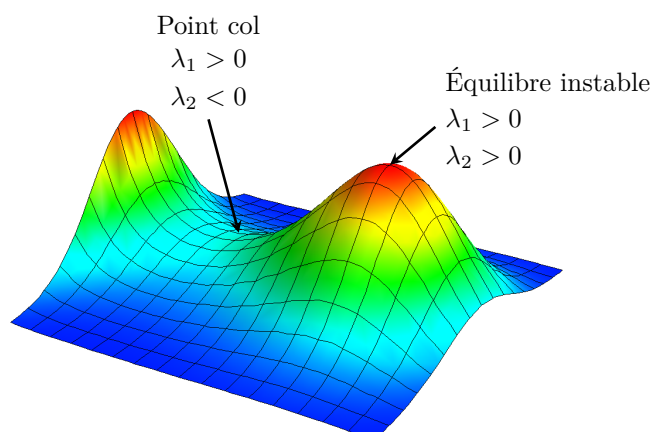


Figure 1.5 – Potentiel U associé à la dynamique suramortie $\dot{\mathbf{r}}(t) = -\frac{\nabla U}{\zeta}$ (le système tend à minimiser son potentiel). On identifie deux points caractéristiques dans ce paysage : un point col, qui correspond à un point d'équilibre ($\nabla U = \mathbf{0}$) avec une direction stable ($\lambda_2 < 0$) et une direction instable ($\lambda_1 > 0$), et un point d'équilibre instable (deux directions instables : $\lambda_1 > 0$ et $\lambda_2 > 0$). Un point d'équilibre stable ($\lambda_1 < 0$ et $\lambda_2 < 0$) correspondrait à un puits.

qu'elle ajoute une source de fluctuations supplémentaire. En effet, alors que la première définition ne dépendait que de la condition initiale, celle-ci dépend en plus de l'orientation initiale des vecteurs tangents, qui peuvent mettre plus ou moins de temps à s'aligner selon les vecteurs propres \mathbf{e}_i .

De plus, il faudra aussi faire attention aux cas où un des vecteurs tangents initiaux est dans un hyperplan orthogonal à un des vecteurs propres. Dans ce cas-là, on peut avoir des inversions dans l'ordre des exposants de Lyapunov ou manquer des exposants de Lyapunov. Par exemple, si le vecteur \mathbf{u}_3 est dans l'hyperplan orthogonal à \mathbf{e}_3 , alors il sera associé à λ_4 et \mathbf{u}_4 sera associé à λ_3 .

1.3 Propriétés

1.3.1 Structure de l'espace des phases

Le spectre de Lyapunov mesure la sensibilité aux conditions initiales. En effet, si on considère $\mathbf{x}(0)$ comme la position initiale réelle du système et $\mathbf{x}(0) + \mathbf{u}(0)$ comme la position initiale mesurée du système, alors $\mathbf{u}(t)$ est l'écart au temps t entre la trajectoire réelle et la trajectoire calculée à partir de la position mesurée. Ainsi, si $\lambda_1 < 0$, la distance $\|\mathbf{u}(t)\|$ entre ces deux trajectoires tend exponentiellement vers 0. Inversement, si $\lambda_1 > 0$, la trajectoire calculée s'éloigne exponentiellement de la trajectoire réelle et on ne peut rapidement plus rien dire sur l'évolution du système : le système présente une sensibilité aux conditions initiales. De façon plus générale, les vecteurs propres $\mathbf{e}_i(t)$ définissent les directions stables/contractantes ($\lambda_i < 0$) et instables/dilatantes ($\lambda_i > 0$) de l'espace des phases à un instant donné (voir la figure 1.5), alors que les exposants de Lyapunov λ_i associés permettent de quantifier à quel point une direction est contractante ou

dilatante. Ainsi, dans le cas où par exemple tout le spectre de Lyapunov est négatif, les valeurs des exposants de Lyapunov permettent de séparer les directions où la dynamique relaxe très rapidement (les directions associées aux plus petits exposants de Lyapunov, c'est-à-dire aux plus grands en valeur absolue) des directions où la relaxation est plus lente (les directions associées aux plus grands exposants de Lyapunov, c'est-à-dire aux plus petits en valeur absolue).

1.3.2 Complexité dynamique

Quand on étudie un système, on aimerait souvent pouvoir prédire son évolution. Mais on n'a pas toujours une connaissance parfaite de l'état du système, ni de sa dynamique. Pour mesurer ce degré d'ignorance, ce défaut d'information sur l'état dans lequel il se trouve, on utilise une quantité appelée l'entropie de Shannon [34]. On peut aussi définir cette quantité sur l'ensemble des trajectoires, c'est ce qu'on appelle alors l'entropie de Kolmogorov-Sinai h_{KS} . Pour les systèmes dynamiques déterministes, cette quantité est directement reliée au spectre de Lyapunov (sous certaines conditions sur la mesure stationnaire), via la formule de Pesin [35]

$$h_{KS} = \sum_{\lambda_i > 0} \lambda_i \quad (1.23)$$

qui indique que l'entropie de Kolmogorov-Sinai est la somme des exposants de Lyapunov positifs. Dans les systèmes stochastiques hors d'équilibre, cette quantité est directement reliée à la brisure de la réversibilité temporelle, ce qui permet de mesurer sa production expérimentalement [36,37].

1.3.3 Dynamique hamiltonienne

Dans un système hamiltonien, le théorème de Liouville nous dit que le volume de l'espace des phases est conservé le long des trajectoires du système. Une conséquence directe de ce théorème est que la somme des exposants de Lyapunov est nulle

$$\sum_i^{2D} \lambda_i = 0. \quad (1.24)$$

Plus précisément, du fait de la structure symplectique de l'espace, les exposants de Lyapunov viennent par paire de somme nulle [27, 38] :

$$\lambda_i = -\lambda_{2D-i+1}. \quad (1.25)$$

Cela signifie que le spectre de Lyapunov est symétrique. D'un point de vue plus physique, c'est une illustration de l'invariance de la dynamique hamiltonienne sous renversement du temps.

Dans le cas où le système hamiltonien est amorti, cette relation est modifiée. En effet, si l'évolution de notre système (\mathbf{q}, \mathbf{p}) est donnée par les équations

$$\begin{cases} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \gamma p_i + \sqrt{2\gamma T} \eta_i \end{cases} \quad (1.26)$$

où H est l'hamiltonien du système, γ l'intensité de l'amortissement et $\boldsymbol{\eta}$ un bruit blanc gaussien de variance unité, alors [39]

$$\lambda_i + \frac{\gamma}{2} = -(\lambda_{2D-i+1} + \frac{\gamma}{2}). \quad (1.27)$$

Le spectre de Lyapunov est maintenant symétrique autour de $-\frac{\gamma}{2}$. Cette relation est aussi correcte quand on prend un système sans bruit ($T = 0$) [40]. La somme des exposants de Lyapunov n'est alors plus nulle, et vaut

$$\sum_i^{2D} \lambda_i = -D\gamma. \quad (1.28)$$

1.4 Fluctuations d'exposants de Lyapunov

Si le système possède une mesure ergodique, le théorème ergodique multiplicatif d'Oseledets [26, 29] garantit que dans la limite $t \rightarrow \infty$ les exposants de Lyapunov convergent vers une valeur donnée, indépendamment de la trajectoire, hormis sur un ensemble de mesure nulle. En revanche, rien n'empêche les exposants de Lyapunov à temps finis de fluctuer d'une trajectoire à l'autre. Il est alors intéressant d'étudier ces fluctuations, qui peuvent nous renseigner sur la coexistence de plusieurs régimes dynamiques comme expliqué dans la section 1.1.

Dans cette section, nous allons nous concentrer sur le plus grand exposant de Lyapunov, et donner un argument intuitif pour comprendre comment les fluctuations de cet exposant varient. Dorénavant, « plus grand » sera généralement omis et à chaque fois qu'il sera question de « l'exposant de Lyapunov », il s'agira du plus grand exposant de Lyapunov.

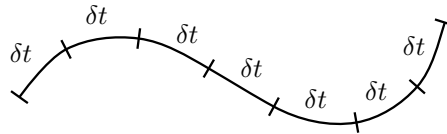
1.4.1 Automoyennage du plus grand exposant de Lyapunov

On suppose que le temps de corrélation de la trajectoire est fini. On peut décrire ces fluctuations à l'aide de la distribution de probabilité $P(\lambda, t)$ associée à la probabilité que l'exposant de Lyapunov à temps fini $\lambda(t)$ prenne la valeur λ au temps t .

Vu que $P(\lambda, t) \in [0, +\infty[$, on peut toujours l'écrire comme

$$P(\lambda, t) = \exp[-\mathcal{I}(\lambda, t)] \quad (1.29)$$

avec $\mathcal{I}(\lambda, t) \in]-\infty, +\infty]$. Considérons une trajectoire de durée t et de temps de corrélation τ , tel que $\tau \ll t$. On peut la voir comme N « tranches » de durée δt , telle que $\tau \ll \delta t \ll t$, ce qui revient à $N \gg 1$.



On a alors

$$e^{\lambda t} = \frac{\|\mathbf{u}(t)\|}{\|\mathbf{u}(0)\|} = \prod_{k=1}^N \frac{\|\mathbf{u}(k\delta t)\|}{\|\mathbf{u}((k-1)\delta t)\|} = e^{(\lambda_1 + \dots + \lambda_N)\delta t} \quad (1.30)$$

où λ_i est l'exposant de Lyapunov mesuré sur la tranche i . Cela implique

$$\lambda(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \lambda_k(\delta t). \quad (1.31)$$

Ainsi, l'exposant de Lyapunov de la trajectoire complète est la moyenne des exposants de Lyapunov sur les sous-trajectoires indépendantes. En effet, elles peuvent être considérées comme indépendantes vu que $\tau \ll \delta t$. L'exposant de Lyapunov apparaît donc comme une quantité automoyennante.

1.4.2 Loi d'échelle aux temps longs

Quand on la transpose à la distribution de probabilité, cette propriété mène à

$$P(\lambda, t) = \int \prod_k d\lambda_k P(\lambda_1, \delta t) \dots P(\lambda_N, \delta t) = \int \prod_k d\lambda_k \exp[-\sum_{k=1}^N \mathcal{I}(\lambda_k, t)]. \quad (1.32)$$

$(\lambda_1 + \dots + \lambda_N) = N\lambda$ $(\lambda_1 + \dots + \lambda_N) = N\lambda$

Dans l'exponentielle, on a une somme de N termes d'ordre 1 en temps, vu que $\mathcal{I}(\lambda_i, \delta t)$ ne dépend pas du nombre total de tranches donc de t . L'argument de l'exponentielle est donc d'ordre N , ce qui est la même chose qu'être d'ordre t vu que $t = N\delta t$. L'intégrale est alors dominée par la valeur des λ_i qui minimise l'argument de l'exponentielle dans la limite des temps longs, ce qui revient à la limite $N \gg 1$.

En remplaçant λ_N par $N\lambda - \sum_{k=1}^{N-1} \lambda_k$ dans le dernier terme de la somme pour tenir compte de la contrainte sur le domaine d'intégration, puis en annulant la dérivée partielle par rapport à λ_i pour trouver une extremum, on arrive à $\mathcal{I}'(\lambda_i, t) = \mathcal{I}'(\lambda_N, t)$ pour tout i dans $[[1, N-1]]$. On constate alors que prendre tous les exposants de Lyapunov λ_i égaux à λ extrémalise l'argument de l'exponentielle, ce qui permet de déduire que l'exposant de Lyapunov obéit à un principe de grandes déviations [41] (voir l'annexe B pour plus de détails sur le principe de grandes déviations)

$$P(\lambda, t) \underset{t \rightarrow +\infty}{\approx} e^{-tI(\lambda)} \text{ avec } I(\lambda) = \underset{t \rightarrow +\infty}{\mathcal{O}(1)} \quad (1.33)$$

où l'on a posé $I(\lambda) = \frac{\mathcal{I}(\lambda, \delta t)}{\delta t}$.

La distribution de probabilité $P(\lambda, t)$ devient donc de plus en plus piquée à mesure que le temps augmente, et elle se concentre autour de sa valeur typique λ^* , qui vérifie $I'(\lambda^*) = 0$. Étudier les fluctuations d'exposants de Lyapunov est donc un problème de recherche d'évènements rares ; c'est pourquoi c'est en général extrêmement difficile.

Chapitre 2

Formalisme thermodynamique

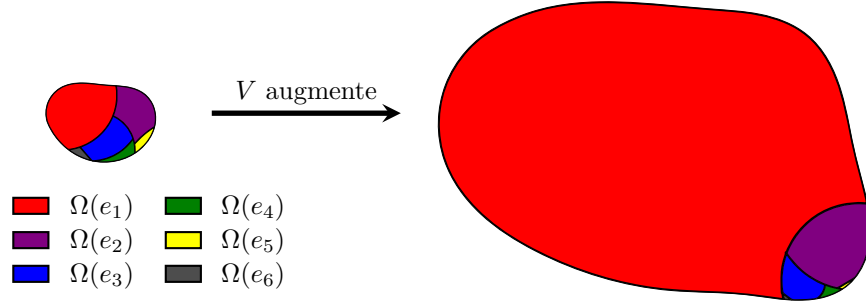
Comme on l'a vu dans le chapitre précédent, la distribution de probabilité de λ se pique de plus en plus au fur et à mesure que le temps augmente, ce qui rend extrêmement difficile l'accès aux fluctuations des exposants de Lyapunov. On est confronté au même problème en thermodynamique, où la majorité des micro-états ont la même énergie. Mais on sait comment faire expérimentalement pour obtenir des états d'énergie atypique donnée : il suffit de changer la température. On sait aussi comment mesurer expérimentalement ou calculer les fluctuations d'énergie (la capacité thermique C_v). Le cadre théorique associé est la thermodynamique statistique. En suivant la même approche et en remplaçant les configurations par les trajectoires, on peut définir théoriquement une température pour la chaoticité des trajectoires, ce qui permet d'accéder analytiquement ou numériquement à des trajectoires d'exposants de Lyapunov atypiques : c'est la thermodynamique des trajectoires. En revanche, cette température n'a pas de réalité physique immédiate et n'est pas contrôlable expérimentalement de manière simple.

Dans ce chapitre, nous allons rappeler les idées de base de la thermodynamique statistique, ce qui permettra ensuite de voir facilement les connexions avec la thermodynamique des trajectoires. Une fois ce rappel fait, nous présenterons comment ces idées peuvent être transposées à l'espace des trajectoires pour déterminer les fluctuations d'exposants de Lyapunov.

2.1 Rappels de thermodynamique statistique

2.1.1 L'ensemble microcanonique

Soit un système isolé composé de N particules, occupant un volume V et dont l'énergie totale est E . Le système étant isolé, son énergie E et son nombre de particules N sont fixés et il ne peut être trouvé que dans un nombre fini de micro-états $\Omega(E, V, N)$. D'après le postulat de la physique statistique, chacun de ces micro-états est équiprobable. La probabilité du micro-état i d'énergie E_i est alors $p_i = \delta(E_i - E)/\Omega$. Comme un macro-état (E, V, N) correspond à $\Omega(E, V, N)$ micro-états, on a un défaut d'information sur le système quand on ne connaît que son macro-état. Ce



Pourtant, si on prend un verre d'eau à 20°C et qu'on veut observer un état d'énergie atypiquement faible, on sait comment l'obtenir : on met le verre au congélateur, et on attend que l'eau gèle, réduisant ainsi fortement son énergie en adoptant une structure cristalline. Inversement, si on veut un état de haute énergie, on va chauffer le verre jusqu'à porter son contenu à ébullition. La température semble donc être l'outil idéal pour aller sonder des états d'énergie atypique, ce qui conduit à la définition de l'ensemble canonique.

2.1.2 L'ensemble canonique

On omettra dans ce paragraphe les dépendances en V et N , vu qu'on fixe ces deux paramètres. On considère le système précédent et, au lieu de l'isoler, on le met au contact d'un thermostat de température T , qui impose alors sa température à notre système et fixe ainsi son énergie moyenne. La probabilité d'observer un micro-état d'énergie E est maintenant

$$P(E) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E} \quad (2.6)$$

où $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$. La fonction de partition $Z(\beta)$ est une constante de normalisation

$$Z(\beta) \equiv \int e^{-\beta E} \Omega(E) dE = \int e^{\beta V [s(e)T - e]} de \quad (2.7)$$

qui permet d'extraire de nombreuses propriétés du système, comme par exemple son énergie moyenne, qui correspond à l'énergie interne en thermodynamique :

$$U \equiv \langle E \rangle = -\partial_\beta \ln Z. \quad (2.8)$$

L'équation (2.6) nous montre l'effet de la température. Plus la température est faible (donc β grand), plus les états d'énergie faible ont une probabilité élevée, et inversement. En ajustant ce paramètre, on peut donc donner plus ou moins de poids à certains états et obtenir facilement des états d'énergie donnée. La température permet d'explorer le paysage énergétique.

On introduit maintenant l'énergie libre $F \equiv -\beta^{-1} \ln Z$ et l'énergie libre volumique $f \equiv F/V$, dont les non-analycités signalent la présence d'une transition de phase. On peut alors écrire

$$Z(\beta) = e^{-\beta V f(\beta)}. \quad (2.9)$$

On remarque que dans la limite $V \rightarrow \infty$, qui correspond à la limite thermodynamique, l'intégrale dans l'équation (2.7) est dominée par le maximum du terme entre crochets. On applique ce qu'on appelle la méthode de Laplace dans le cas réel et la méthode du col dans le cas complexe. On obtient alors

$$f(\beta) = \inf_e [e - Ts(e)]. \quad (2.10)$$

On reconnaît, à un facteur près, la transformation de Legendre-Fenchel. Si l'entropie est strictement concave, cette transformation se réduit à la transformation de Legendre et on a alors

$$f(\beta) = e^* - Ts(e^*) \quad (2.11)$$

où e^* est la valeur de l'énergie volumique qui minimise le crochet dans l'exponentielle de (2.7). Elle est donnée par la relation

$$s'(e^*) = \frac{1}{T}. \quad (2.12)$$

Mais que représente cette énergie $E^* = e^*V$? Si on regarde la distribution de probabilité des énergies du système à la température β (par abus de langage, on appellera β la température)

$$P_\beta(E) = P(E) \Omega(E) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E} \Omega(E), \quad (2.13)$$

on constate qu'elle suit elle aussi un principe de grandes déviations

$$P_\beta(E = eV) \underset{V \rightarrow +\infty}{\approx} e^{-\beta V [f(\beta) + e - Ts(e)]}. \quad (2.14)$$

Comme $f(\beta)$ ne dépend pas de e , on se retrouve avec la même fonction que précédemment à extrémiser, et la valeur la plus probable est E^* . Cette énergie représente donc l'énergie typique du système. De plus, d'après la relation (2.8), $U \equiv \langle E \rangle = E^*$. L'énergie la plus probable et l'énergie moyenne sont donc les mêmes, et on peut fixer cette dernière en jouant sur la température du thermostat, comme nous le montre la relation (2.12). On reconnaît alors dans l'équation (2.11) la définition bien connue en thermodynamique de l'énergie libre $F = U - TS$.

2.2 La thermodynamique des trajectoires

On vient de rappeler qu'en thermodynamique la température permet d'aller sonder des états d'énergie atypique. Dans les années 1970, Sinai, Ruelle et Bowen [4–8] ont développé un cadre qui permet de réaliser le même objectif dans l'espace des trajectoires, le formalisme thermodynamique. Cette approche classe les trajectoires en fonction de la valeur d'une observable, qui sera le spectre de Lyapunov ici, et associe à cette dernière l'équivalent d'une température qui permet d'aller sonder des états atypiques.

2.2.1 Plus grand exposant de Lyapunov

Par souci de pédagogie, nous allons nous concentrer sur le plus grand exposant de Lyapunov dans cette section. La généralisation aux cas de plusieurs exposants de Lyapunov, qui sera utile notamment pour l'étude de la chaîne de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (section 4.2), sera donnée dans la section 2.2.4.

Soit $P(\lambda, t)$ la distribution associée à la probabilité que l'exposant de Lyapunov à temps fini prenne la valeur λ au temps t . Comme on l'a vu dans la section 1.4.2, cette distribution de probabilité suit un principe de grandes déviations

$$P(\lambda, t) \underset{t \rightarrow +\infty}{\approx} e^{-tI(\lambda)}. \quad (2.15)$$

Il est donc difficile d'avoir accès aux fluctuations autour de la valeur la plus probable λ^* , qui correspond au minimum de I et satisfait $I'(\lambda^*) = 0$.

On introduit un paramètre α conjugué à l'exposant de Lyapunov λ , et on l'utilise pour déformer la distribution de probabilité. On définit alors la distribution canonique

$$P_\alpha(\lambda, t) \equiv \frac{1}{Z(\alpha, t)} e^{\alpha \lambda t} P(\lambda, t) \quad (2.16)$$

où $Z(\alpha, t) \equiv \langle e^{\alpha \lambda t} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\alpha \lambda t} P(\lambda, t) d\lambda$ est la fonction de partition dynamique. D'un point de vue mathématique, c'est la fonction génératrice des moments.

D'après le théorème de Varadhan [42] (voir la section B.3.3 de l'annexe B), comme $P(\lambda, t)$ satisfait un principe de grandes déviations, la fonction de partition dynamique varie comme

$$Z(\alpha, t) \underset{t \rightarrow +\infty}{\approx} e^{t\varphi(\alpha)} \quad (2.17)$$

où l'énergie libre dynamique φ est la transformée de Legendre-Fenchel de la fonction de taux I :

$$\varphi(\alpha) = \sup_{\lambda} [\alpha\lambda - I(\lambda)]. \quad (2.18)$$

D'un point de vue mathématique, c'est la limite de la fonction génératrice des cumulants quand $t \rightarrow +\infty$. Elle permet d'étendre le langage des transitions de phase aux systèmes dynamiques, au travers de la notion de transitions de phase dynamique [43–46].

2.2.2 Une température pour la chaoticité

Dans l'équation (2.16), la déformation de la mesure de probabilité vient du terme exponentiel, la fonction de partition dynamique n'étant là que pour des raisons de normalisation. Un α positif va donner plus de poids aux grands exposants de Lyapunov et moins de poids aux petits : il va donc favoriser les trajectoires anormalement chaotiques. Inversement, un α négatif va augmenter le poids des petits λ et diminuer celui des grands λ , favorisant ainsi les trajectoires anormalement stables.

Plus précisément, en combinant les équations (2.15), (2.16) et (2.17), on montre que la distribution canonique suit elle aussi un principe de grandes déviations

$$P_{\alpha}(\lambda, t) \underset{t \rightarrow +\infty}{\approx} e^{-t[I(\lambda) - \varphi(\alpha) - \alpha\lambda]}. \quad (2.19)$$

Aux temps longs, elle est donc dominée par sa valeur typique λ_{α}^* , qui minimise la fonction de taux $I_{\alpha}(\lambda) = I(\lambda) - \varphi(\alpha) - \alpha\lambda$ associée à l'équation précédente et vérifie $I'(\lambda_{\alpha}^*) = \alpha$. Ainsi, en ajustant α , on peut fixer précisément la valeur de l'exposant de Lyapunov typique et α joue bien le rôle d'une température pour la chaoticité.

Mais, contrairement à la température T , il ne semble pas possible de fixer α lors d'une expérience. Ce paramètre n'a pas d'interprétation physique simple et ne paraît être qu'un outil à la disposition du théoricien pour aller sonder des états de chaoticité atypique (voir le chapitre 5 pour un exemple d'application basé sur la théorie des champs). Il est en revanche possible de le fixer dans une simulation, en échantillonnant les trajectoires selon les poids donnés par l'équation (2.16) (voir le chapitre 3 pour un exemple d'algorithme).

2.2.3 Analogie avec la thermodynamique

La thermodynamique des trajectoires est construite exactement sur le modèle de la physique statistique à l'équilibre thermodynamique. Les principales analogies entre les deux formalismes sont résumées dans le tableau suivant.

Quantité	Thermodynamique	Systèmes dynamiques
Macro-état	e	λ
Volume	V	t
Entropie	$s(\rho) = \lim_{V \rightarrow +\infty} \frac{k_B}{V} \ln \Omega(e, V)$	$I(\lambda) = \lim_{t \rightarrow +\infty} -\frac{1}{t} \ln P(\lambda, t)$
« Température »	β	$-\alpha$
Fonction de partition	$Z(\beta, V) = \int e^{-\beta e V} \Omega(e, V) de$	$Z(\alpha, t) = \int e^{\alpha \lambda t} P(\lambda, t) d\lambda$
Énergie libre	$f(\beta) = \lim_{V \rightarrow +\infty} -\frac{1}{\beta V} \ln Z(\beta, V)$	$\varphi(\alpha) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{t} \ln Z(\alpha, t)$
Lien avec l'entropie	$f(\beta) = \frac{1}{\beta} \inf_e [\beta e - k_B s(e)]$	$\varphi(\alpha) = \sup_\lambda [\alpha \lambda - I(\alpha)]$
Macro-état typique	e_β^* tel que $s'(e_\beta^*) = k_B \beta$	λ_α^* tel que $I'(\lambda_\alpha^*) = \alpha$

Les différences dans les préfacteurs et dans les signes sont dues à des raisons historiques : la physique statistique d'équilibre devait se raccrocher aux définitions existantes (température, entropie, énergie libre) alors que la thermodynamique des trajectoires provient de la communauté des systèmes dynamiques et est restée plus proche du langage de la théorie des probabilités (principe de grandes déviations, fonction de taux, fonction génératrice des moments, fonction génératrice des cumulants).

2.2.4 Généralisation à k exposants de Lyapunov

Jusqu'à présent, on s'est concentré sur le plus grand exposant de Lyapunov, mais il est parfois intéressant d'aller sonder les états avec plusieurs exposants de Lyapunov atypiques comme nous le verrons dans la suite. On va donc maintenant généraliser ce formalisme à plusieurs exposants de Lyapunov. Soit $P_k(\lambda_1, \dots, \lambda_k, t)$ la distribution associée à la probabilité que le premier exposant de Lyapunov prenne la valeur λ_1 au temps t , que le deuxième prenne la valeur λ_2 , etc. Elle suit un principe de grandes déviations

$$P_k(\lambda_1, \dots, \lambda_k, t) \underset{t \rightarrow +\infty}{\approx} e^{-t I_k(\lambda_1, \dots, \lambda_k)}. \quad (2.20)$$

À nouveau, la distribution de probabilité se pique de plus en plus autour de la valeur la plus probable $\{\lambda_i^*\}$ des k premiers exposants de Lyapunov, donnée par $\nabla I_k(\lambda_1^*, \dots, \lambda_k^*) = \mathbf{0}$.

On suit la même procédure que précédemment et on introduit une température α_i par exposant de Lyapunov λ_i . La distribution canonique est alors

$$P_{\{\alpha_i\}}(\{\lambda_i\}, t) = \frac{1}{Z_k(\{\alpha_i\}, t)} P_k(\{\lambda_i\}, t) \exp \left[t \sum_{j=1}^k \alpha_j \lambda_j \right]. \quad (2.21)$$

La fonction de partition dynamique Z_k est maintenant

$$Z_k(\{\alpha_i\}, t) \equiv \langle \exp \left[t \sum_{j=1}^k \alpha_j \lambda_j \right] \rangle_{t \rightarrow +\infty} \approx \exp \left[t \varphi_k(\alpha_1, \dots, \alpha_k) \right] \quad (2.22)$$

et l'énergie libre dynamique φ_k est toujours reliée à la fonction de taux I_k par la transformation de Legendre-Fenchel :

$$\varphi_k(\{\alpha_i\}) = \sup_{\{\lambda_i\}} \left[\sum_{j=1}^k \alpha_j \lambda_j - I_k(\{\lambda_i\}) \right]. \quad (2.23)$$

La distribution canonique suit maintenant le principe de grandes déviations

$$P_{\{\alpha_i\}}(\{\lambda_i\}, t) \underset{t \rightarrow +\infty}{\approx} \exp \left(-t \left[I_k(\{\lambda_i\}) - \varphi_k(\{\alpha_i\}) - \sum_{j=1}^k \alpha_j \lambda_j \right] \right). \quad (2.24)$$

et les valeurs typiques $\{\lambda_{i,\alpha}^*\}$ des k premiers exposants de Lyapunov sont données par les équations

$$\left. \frac{\partial I_k}{\partial \lambda_j} \right|_{\{\lambda_{i,\alpha}^*\}} = \alpha_j \text{ avec } j = 1, \dots, k. \quad (2.25)$$

Du fait de la relation d'ordre entre les exposants de Lyapunov, ces équations sont à priori couplées et il n'y a pas de raison pour qu'il en soit autrement. Par exemple, si on fixe tous les α_i à 0 sauf α_3 , on va favoriser les trajectoires avec un troisième exposant de Lyapunov anormalement élevé. Mais comme le troisième exposant de Lyapunov est forcément plus petit que le deuxième, lui-même plus petit que le premier, on va en réalité favoriser des trajectoires dont les trois premiers exposants de Lyapunov sont anormalement grands. On peut voir les différents exposants de Lyapunov comme différentes pièces d'un même bâtiment, chacune munie de son propre thermostat et de son propre radiateur. L'isolation entre les pièces n'étant jamais parfaite, il est impossible de chauffer chaque pièce indépendamment des autres. De plus, si l'on désire que la pièce la plus froide soit à plus de 20°C, il faut que toutes les pièces le soient.

Chapitre 3

Dynamique biaisée par les Lyapunov (LWD)

La température pour la chaotité α n'a pas en général de sens physique évident. En effet, on n'a pas de thermostat pour la chaotité dans un laboratoire. On peut en revanche fixer α dans une simulation numérique, en échantillonnant les trajectoires selon les poids canoniques (2.16). C'est ce que fait la dynamique biaisée par les Lyapunov (notée LWD dans la suite, pour *Lyapunov Weighted Dynamics*), qui est un algorithme de dynamique des populations Monte-Carlo introduit par Tailleur et Kurchan en 2007 [47]. Dans ce chapitre, nous présenterons la LWD et les améliorations apportées à son implémentation dans le cadre de cette thèse.

3.1 Principe de l'algorithme

3.1.1 Échantillonner des événements rares

Avant de présenter en détail l'algorithme dans la section 3.4, on va donner ici l'idée générale sous-jacente. On souhaite échantillonner les trajectoires suivant les poids canoniques, c'est-à-dire générer numériquement des trajectoires avec la distribution (2.16). Pour cela, on va utiliser la LWD, qui est un algorithme Monte-Carlo de dynamique des populations. L'idée centrale est de faire évoluer une population de copies du système, que nous appellerons clones dans la suite, et de les copier et de les tuer de manière contrôlée. Ce type d'algorithme est proche des Monte-Carlo séquentiels ou des diffusions Monte-Carlo [48–54], qui sont souvent utilisés en mécanique quantique pour déterminer l'état fondamental et les états excités du hamiltonien de l'équation de Schrödinger. Il est aussi similaire dans l'esprit avec les algorithmes de type *go with the winners* [55].

Une alternative à cette approche est d'utiliser des algorithmes Monte-Carlo de type Metropolis directement dans l'espace des trajectoires. C'est ce que fait le *Transition Path Sampling* [56–61], qui a été utilisé pour calculer des fonctions de grandes déviations d'observables dynamiques

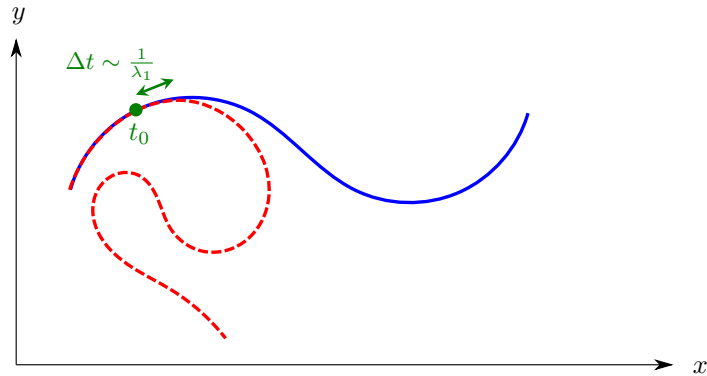


Figure 3.1 – Illustration du *Transition Path Sampling* pour la recherche de trajectoires anormalement chaotiques. La trajectoire bleue est la trajectoire à l’itération n . À l’itération $n + 1$, on modifie un point de cette trajectoire, par exemple au temps t_0 , puis on calcule l’évolution future, ce qui nous donne la trajectoire rouge en pointillés, qui est la nouvelle trajectoire proposée pour cette itération. On accepte alors cette nouvelle trajectoire avec une certaine probabilité, qui n’a pas d’importance pour notre discussion. Dans le cas des trajectoires chaotiques, rapidement après la modification (au bout d’un temps de l’ordre de $1/\lambda_1$), les deux trajectoires deviennent très différentes, et la nouvelle trajectoire proposée n’a plus rien à voir avec la trajectoire initiale. L’algorithme semble donc se réduire à un échantillonnage direct (force brute), et risque de tomber dans les mêmes écueils.

dans des modèles de liquides présentant une transition vitreuse [24, 62–65]. Cet algorithme a aussi été mis en œuvre pour pondérer les trajectoires en utilisant les exposants de Lyapunov [66]. Cependant, il n’a été appliqué pour la recherche de trajectoires chaotiques que dans des systèmes de faible dimension. Pour trouver des trajectoires stables, il est relativement efficace et a permis de retrouver des résultats obtenus par la LWD [47], mais son utilisation est plus difficile pour chercher les trajectoires chaotiques, comme expliqué sur la figure 3.1.

Une autre alternative à la LWD, qui réalise la mesure canonique sur l’espace des trajectoires en utilisant une température α , serait d’essayer d’implémenter un algorithme multi-canonique [67], comme cela a été fait par exemple dans [68]. Plus généralement, il existe de nombreuses méthodes pour échantillonner des événements rares : *Transition Interface Sampling* [69, 70], qui est une variante du *Transition Path Sampling*; *Iterative Measurement-and-Feedback Procedure* [71], qui peut être mise en œuvre dans une expérience de laboratoire; *Forward Flux Sampling* [72–74]; des méthodes pour calculer les points cols des actions [75–81]; etc. Il n’existe pas pour l’instant de comparaison exhaustive (efficacité, simplicité, applications potentielles, etc.) de ces différentes méthodes, et chacun préfère développer son propre algorithme ou se focaliser sur une méthode donnée, ce qui traduit probablement l’état balbutiant du domaine.

3.1.2 Dynamique des populations

Le principe de l’algorithme est le suivant. On considère N_c clones (\mathbf{x}, \mathbf{u}) du système dynamique $\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t))$ et un pas de temps dt . À chaque temps $t_n = n dt$, pour chaque clone j :

- on le fait évoluer avec la dynamique $\dot{\mathbf{x}}_j = \mathbf{f}(\mathbf{x}_j)$ et $\dot{\mathbf{u}}_j = \mathbf{J}_f(\mathbf{x}_j)\mathbf{u}_j$, en utilisant un intégrateur temporel adapté au problème

- on calcule $s_j(t_n) = \frac{\|\mathbf{u}_j(t_n)\|}{\|\mathbf{u}_j(t_{n-1})\|} \simeq e^{\lambda dt}$
- on le remplace, en moyenne, par $s_j(t)^\alpha$ copies

Approximativement, un clone à l'instant initial a donné naissance à $e^{\alpha\lambda t}$ clones au temps t . En effet

$$\prod_{n=1}^{t/dt} s_j(n dt)^\alpha = \prod_{n=1}^{t/dt} \frac{\|\mathbf{u}_j(n dt)\|^\alpha}{\|\mathbf{u}_j((n-1) dt)\|^\alpha} = \frac{\|\mathbf{u}_j(t)\|^\alpha}{\|\mathbf{u}_j(0)\|^\alpha} = e^{\alpha\lambda t}. \quad (3.1)$$

Plus précisément, si la population initiale était suffisamment grande pour être représentative, la probabilité de tirer au temps t un clone dont la trajectoire est $\mathbf{x}(t')$ pour $t' \in [0, t]$ est proportionnelle à $e^{\alpha\lambda t} \mathbb{P}[\mathbf{x}, t]$, où $\mathbb{P}[\mathbf{x}, t]$ est la probabilité que la dynamique non biaisée produise cette même trajectoire. De plus, le rapport entre le nombre total de clones au temps t et le nombre initial de clones

$$\frac{N_c(t)}{N_c(0)} \simeq \langle e^{\alpha\lambda t} \rangle \approx e^{t\mu(\alpha)}. \quad (3.2)$$

permet alors d'accéder à la fonction de partition et à l'énergie libre dynamiques.

Cet algorithme peut être généralisé aux k premiers exposants de Lyapunov, comme nous le verrons dans la section 3.3. Nous avons ici présenté le principe général de l'algorithme. Dans la section suivante, on va introduire quelques raffinements permettant de mettre en œuvre cet algorithme en pratique et d'améliorer la qualité de l'échantillonnage.

3.2 Ingrédients supplémentaires

3.2.1 Ajout d'un bruit

Si on étudie un système déterministe, deux fils issus d'un même clone ont nécessairement la même évolution future, et on se retrouve rapidement à simuler plusieurs fois la même trajectoire. Ceci n'améliore en rien la qualité de l'échantillonnage et n'a aucune raison de révéler des trajectoires atypiques que la force brute raterait. Au contraire, une grande partie de la puissance de calcul est gaspillée pour calculer plusieurs fois la même trajectoire. C'est pourquoi on ajoute un petit bruit à la dynamique, pour empêcher les clones d'être dégénérés et améliorer la qualité de l'échantillonnage. Ce bruit est choisi avec des propriétés adéquates pour le système qu'on étudie : conservation de l'énergie, conservation de l'impulsion, etc.

Le bruit n'étant pas partie intégrante du problème initial, il faut prendre son amplitude ε aussi petite que possible et vérifier que la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ n'est pas singulière. De plus, on peut mettre ε à zéro en fin de simulation pour vérifier que les solutions obtenues sont bien solutions des équations du mouvement du problème initial.

D'un point de vue mathématique, l'ajout d'un petit bruit change la nature du système. La question de savoir si on retrouve, dans la limite de bruit nul, la mesure stationnaire de la dynamique sous-jacente remonte à Kolmogorov [82]. Cette question de la stabilité stochastique [83] est en fait une façon naturelle pour le physicien de définir la mesure stationnaire d'un système dynamique et, lorsqu'une mesure SRB existe, elle peut être retrouvée comme la limite de bruit nul d'un système dynamique stochastique (voir [83] pour une présentation rigoureuse de cette procédure).

3.2.2 Vecteur tangent normalisé

Selon le signe de l'exposant de Lyapunov, la norme du vecteur tangent \mathbf{u} va diverger ou au contraire tendre vers zéro. On va donc rapidement se retrouver avec un problème de précision numérique. En effet, les ordinateurs n'ont pas une précision infinie ; ils travaillent avec un nombre de décimales donné, et les erreurs d'arrondi deviennent importantes lorsqu'on travaille avec des nombres très petits ou très grands. Pour éviter cela, on va renormaliser le vecteur \mathbf{u} régulièrement (par exemple à chaque pas de temps). Cela ne perturbe absolument pas l'évolution de l'algorithme car la dynamique de \mathbf{u} est linéaire, et on stocke son accroissement à chaque pas de temps.

3.2.3 Population finie

Pour éviter de voir le nombre de clones exploser ou tomber à zéro, on maintient une population constante N_c au cours de l'évolution temporelle. Cela est fait en tuant les clones en surplus si le nombre de clones devient supérieur à N_c ou en multipliant des clones existants pour repeupler notre algorithme si le nombre de clones descend en dessous de N_c . Pour éviter d'avoir à tuer ou à copier trop de clones pour maintenir une population constante, on modifie le taux de clonage, en utilisant les poids $w_j = N_c s_j^\alpha / \sum_j s_j^\alpha$ au lieu de s_j^α . On a alors après l'opération de clonage en moyenne N_c clones.

Lors des précédentes utilisations de cet algorithme [47], le clonage était réalisé en écrivant directement dans un nouveau tableau les clones à l'instant t après clonage à partir des clones à l'instant t avant clonage. Cela se traduisait par de nombreuses copies inutiles. En effet, lorsque l'algorithme a trouvé une trajectoire adéquate, il y a peu d'évènements de clonage, et le programme passait son temps à recopier un tableau dans un autre, à quelques cases près. Pour améliorer l'efficacité de l'algorithme, nous avons modifié la phase de clonage, en réduisant le nombre de copies inutiles. Au lieu de copier les clones d'un tableau vers un autre, on ne conserve plus qu'un tableau, et on stocke au fur et à mesure les numéros des clones à tuer ou à clones. On copie ensuite les clones à créer sur les clones à tuer. Puis, on copie (ou tue suivant les cas) les clones excédentaires à la fin du tableau. Pour finir, on ajuste le nombre de clones à N_c en tuant ou clonant des clones existants, choisis aléatoirement. Cela nous a permis d'améliorer grandement l'efficacité de l'algorithme, et d'accéder à des simulations plus longues, avec plus de clones et pour des systèmes plus grands.

Un certain nombre d'autres améliorations ont été nécessaires pour pouvoir mesurer précisément les énergies libres dynamiques. Par exemple, moyenner k simulations de N_c clones donne un bien meilleur résultat qu'une seule simulation de $k \times N_c$ clones, car les clones d'une même simulation ont souvent tendance à être dégénérés. Ensuite, pour effectuer une simulation avec une température α donnée, il est souvent astucieux d'utiliser une intégration thermodynamique : commencer avec $d\alpha \ll \alpha$, effectuer une simulation puis incrémenter $d\alpha$ en $2d\alpha$, et itérer. Ceci permet de suivre de manière « quasi-statique » la solution optimale pour réaliser une grande déviation, de $\alpha \simeq 0$ (facile à obtenir) à un α donné, pour lequel les clones ne trouveraient pas nécessairement l'optimum en partant de configurations aléatoires. En cas de transition de phase du premier ordre, il est toutefois nécessaire d'incrémenter et de décrémenter α pour vérifier qu'il n'y a pas de métastabilité (ce que nous ferons à la section 4.2.5 pour la chaîne Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou). Toutes ces petites astuces peuvent sembler superflues mais elles sont absolument nécessaires pour utiliser ce genre d'algorithmes sur des systèmes complexes comme la chaîne Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou étudiée dans cette thèse (à la section 4.2).

De même, le choix des différents paramètres (nombre de clones N_c , amplitude du bruit ε , température α) est difficile et sera discuté à la fin de ce chapitre, dans la section 3.5, une fois l'algorithme présenté en détail.

3.2.4 Méthode alternative au clonage : le rééchantillonnage

Une alternative au clonage pour maintenir une population constante est de rééchantillonner la population entière à chaque pas de temps, en accord avec les poids w_j . Pour cela, on peut utiliser le *tower sampling* [84]. On construit la fonction cumulative des poids C de façon récurrente en posant $C(0) = 0$ et $C(j \geq 1) = C(j-1) + w_j$. On tire ensuite N_c nombres aléatoires dans l'intervalle $[0, C(N_c)[$, qui vont nous permettre de choisir les N_c trajectoires qui vont composer notre nouvelle population. Pour chaque nombre aléatoire qui tombe dans l'intervalle $[C(j-1), C(j)[$, on ajoute le clone j dans la nouvelle population. Cette approche est souvent utilisée dans les algorithmes Monte-Carlo séquentiels [85].

En principe, les deux approches donnent des résultats similaires, mais la LWD est plus rapide en pratique. En effet, pour $\alpha \simeq 0$, la LWD ne demande quasiment aucun clonage car, pour tous les clones, $w_j \simeq 1$. Le rééchantillonnage nécessite de tirer N_c nombre aléatoires entre 0 et N_c . En moyenne, il y en a un dans chaque intervalle $[j, j+1[$ mais, du fait des fluctuations, beaucoup d'intervalles en contiennent plus d'un et beaucoup n'en contiennent aucun. Plus précisément, pour N_c grand, la probabilité qu'aucun nombre aléatoire ne tombe dans un intervalle est

$$(1 - N_c^{-1})^{N_c} \xrightarrow{N_c \rightarrow +\infty} (e^{-\frac{1}{N_c}})^{N_c} = e^{-1} \quad (3.3)$$

et le nombre d'intervalles vides est alors N_c/e . Le rééchantillonnage demande donc en général plus de copies de configurations que la LWD (en $\alpha = 0$, la LWD ne demande aucun évènement de clonage alors que le rééchantillonnage en demande N_c/e en moyenne). Les fluctuations sont donc plus importantes pour le rééchantillonnage et l'algorithme est plus lent à cause des copies supplémentaires. Les mathématiciens préfèrent cependant cette approche, qui permet de prouver la convergence de ce type d'algorithme (voir [85] et ses références) au détriment de l'efficacité numérique.

3.2.5 Analogie avec l'évolution

Une façon simple de comprendre comment cet algorithme fonctionne est de le voir comme un problème d'évolution. En effet, le clonage joue le rôle de la reproduction, le bruit celui des mutations génétiques et la dépendance en λ du taux de clonage celui de la sélection naturelle. Changer α revient à modifier l'environnement et la convergence de l'algorithme est assurée par la pression de sélection.

3.3 Mesure des exposants de Lyapunov

Dans cette section, on va montrer comment on peut mesurer les k premiers exposants de Lyapunov à partir de la dynamique de k vecteurs tangents. Pour cela, on va reprendre les notations

Il est alors intéressant d'introduire les vecteurs tangents normalisés $\mathbf{v}_i = \mathbf{u}_i / \|\mathbf{u}_i\|$, dont l'évolution est donnée par

$$\forall i \in \llbracket 1, k \rrbracket, \quad \dot{\mathbf{v}}_i = A \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_i (\mathbf{v}_i \cdot A \mathbf{v}_i) - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{v}_j (\mathbf{v}_i \cdot A \mathbf{v}_j + \mathbf{v}_j \cdot A \mathbf{v}_i), \quad (3.12)$$

ce qui mène à

$$\frac{d}{dt} \|V_k\|^2 = 2 \prod_{i=1}^k \|\mathbf{u}_i\|^2 \sum_{j=1}^k \mathbf{v}_j \cdot A \mathbf{v}_j \quad (3.13)$$

$$= 2 \|V_k\|^2 \sum_{j=1}^k \mathbf{v}_j \cdot A \mathbf{v}_j. \quad (3.14)$$

On en déduit

$$\mathcal{V}_k(t) = \mathcal{V}_k(0) \exp \left[\int_0^t \left(\sum_{j=1}^k \mathbf{v}_j \cdot A \mathbf{v}_j \right) dt \right]. \quad (3.15)$$

On peut alors réécrire (3.6) :

$$\forall i \in \llbracket 1, k \rrbracket, \quad \lambda_i(t) = \frac{1}{t} \int_0^t (\mathbf{v}_i \cdot A \mathbf{v}_i) dt. \quad (3.16)$$

Cela peut sembler être un moyen compliqué de suivre l'évolution des exposants de Lyapunov, mais il s'agit en fait de l'analogie en temps continu [86] de l'approche de Benettin *et al* [31–33], qui repose sur le procédé de Gram-Schmidt. En effet, cette méthode correspond à faire évoluer k vecteurs \mathbf{v}_i initialement unitaires et orthogonaux avec la dynamique tangente

$$\dot{\mathbf{v}}_i = A \mathbf{v}_i. \quad (3.17)$$

À chaque pas de temps $t_n = n dt$, ces vecteurs sont réorthogonalisés (en soustrayant du second sa projection sur le premier, du troisième sa projection sur les deux premiers, et ainsi de suite) et renormalisés. Le facteur par lequel il faut diviser le vecteur \mathbf{v}_i pour le renormaliser est alors noté $s_i(n dt)$. Dans la limite $dt \rightarrow 0$, la dynamique de \mathbf{v}_i tend vers (3.12), qui se réinterprète alors comme

$$\dot{\mathbf{v}}_i = \underbrace{\widehat{A \mathbf{v}_i}}_{\text{Dynamique tangente}} - \underbrace{\mathbf{v}_i (\mathbf{v}_i \cdot A \mathbf{v}_i)}_{\text{Renormalisation}} - \underbrace{\sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{v}_j (\mathbf{v}_i \cdot A \mathbf{v}_j + \mathbf{v}_j \cdot A \mathbf{v}_i)}_{\substack{\text{Orthogonalisation aux (i-1) vecteurs précédents} \\ \text{Procédé de Gram-Schmidt}}}. \quad (3.18)$$

En constatant que $s_i = 1 + \mathbf{v}_i (\mathbf{v}_i \cdot A \mathbf{v}_i)$, l'équation (3.16) nous indique comment relier les facteurs de renormalisation s_i à l'exposant de Lyapunov à temps fini λ_i :

$$\prod_{n=1}^{t/dt} s_i(n dt) \simeq \exp \left[\int_0^t (\mathbf{v}_i \cdot A \mathbf{v}_i) dt \right] = \exp [t \lambda_i(t)] \quad (3.19)$$

On sait donc maintenant comment mesurer numériquement les exposants de Lyapunov à temps fini, et on peut donc généraliser la LWD aux k premiers exposants de Lyapunov.

3.4 Implémentation effective de la LWD

On souhaite échantillonner les trajectoires selon les poids canoniques associés aux k températures $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_k)$. Pour cela, on considère une population de N_c clones du système, chacun étant indexé par un entier j allant de 1 à N_c et représenté par un vecteur \mathbf{x} . À chaque clone j , on attache k vecteurs tangents \mathbf{v}_i , avec i allant de 1 à k . On choisit un pas de temps dt et un temps total $t = N dt$. Pour $t = 0$, les N_c copies commencent avec une condition initiale arbitraire. Ensuite, à chaque temps $t_n = n dt$:

1] Pour chaque clone j :

- \mathbf{x} évolue avec la dynamique $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, à laquelle on ajoute un bruit d'amplitude ε avec des propriétés adaptées au problème si le système est déterministe
- chaque vecteur tangent \mathbf{v}_i évolue avec la dynamique tangente $\dot{\mathbf{v}}_i = A \mathbf{v}_i$
- on utilise le procédé de Gram-Schmidt pour réorthonormaliser la famille (\mathbf{v}_i) ; pour chaque vecteur tangent i :

$$\diamond \text{ on rend } \mathbf{v}_i \text{ orthogonal à chaque } \mathbf{v}_{m < i} : \mathbf{v}_i \leftarrow \mathbf{v}_i - \sum_{m=1}^{i-1} \mathbf{v}_m (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_m)$$

$$\diamond \text{ on définit } s_i(n) = \|\mathbf{v}_i\| \text{ et on renormalise } \mathbf{v}_i : \mathbf{v}_i \leftarrow \frac{1}{s_i(n)} \mathbf{v}_i$$

- on utilise les facteurs de renormalisation des vecteurs tangents pour calculer le poids

$$\text{de la trajectoire } w_j(n) = \prod_{i=1}^k s_i(n)^{\alpha_i}$$

2] On calcule le poids moyen

$$R(n) = \frac{1}{N_c} \sum_{j=1}^{N_c} w_j(n) \quad (3.20)$$

3] Chaque clone j est remplacé en moyenne par $w_j(n)/R(n)$ copies. Pour cela, on tire un nombre aléatoire ε_j uniformément dans $[0,1[$ et le clone j est remplacé par $\tau_j = \lfloor \frac{w_j(n)}{R(n)} + \varepsilon_j \rfloor$ copies où $\lfloor \cdot \rfloor$ est la partie entière :

- si $\tau_j = 0$, on supprime le clone j
- si $\tau_j > 1$, on crée $\tau_j - 1$ nouvelles copies du clone j

4] On a donc maintenant $N'_c = \sum_{j=1}^{N_c} \tau_j$ clones. On a donc bien N_c clones en moyenne vu que $\langle N'_c \rangle = N_c$. Mais on ne veut pas que le nombre de clones diffuse librement, et on le maintient donc strictement constant : on supprime $N'_c - N_c$ clones si $N'_c > N_c$ et on en duplique $N_c - N'_c$ si $N'_c < N_c$. Les clones à supprimer ou à dupliquer sont choisis de façon aléatoire, uniformément parmi les N'_c clones.

On a alors accès à la fonction de partition dynamique et à l'énergie libre dynamique :

$$Z(\boldsymbol{\alpha}, t) = \prod_{n=1}^N R(n) \quad (3.21)$$

$$\varphi(\boldsymbol{\alpha}, t) = \frac{1}{t} \sum_{n=1}^N \ln R(n) \quad (3.22)$$

On a aussi accès aux exposants de Lyapunov moyen pour la distribution canonique correspondant aux températures α :

$$\forall i \in \llbracket 1, k \rrbracket, \langle \lambda_i \rangle_{\alpha} = \left\langle \frac{1}{t} \sum_{n=1}^N \ln s_i(n) \right\rangle_{\text{clones}} \quad (3.23)$$

On peut alors les utiliser pour mesurer l'énergie libre dynamique d'une autre façon. En effet, si la formule (3.22) est exacte dans la limite où le nombre de clones tend vers l'infini, elle n'est qu'approchée quand le nombre de clones est fini et la valeur qu'elle donne fluctue entre deux simulations. Une méthode alternative est d'utiliser l'intégration thermodynamique [87], qui est utilisée dans les simulations de dynamique moléculaire pour mesurer l'énergie libre. Elle repose sur l'égalité :

$$\langle \lambda_i \rangle_{\alpha} = \frac{1}{t} \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \ln Z(\alpha, t) = \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \frac{1}{t} \ln Z(\alpha, t) = \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \varphi(\alpha, t) \quad (3.24)$$

On a donc accès au gradient de φ à partir des moyennes des exposants de Lyapunov pour α . On peut alors intégrer ce gradient (calculer sa circulation) sur un chemin γ allant de $\mathbf{0}$ à α . En utilisant le fait que $\varphi(\mathbf{0}) = \frac{1}{t} \ln(1) = 0$, on obtient :

$$\varphi(\alpha, t) = \int_{\gamma: \mathbf{0} \rightarrow \alpha} \nabla \mu(\alpha', t) \cdot d\alpha' = \int_{\gamma} \sum_{i=1}^k \langle \lambda_i \rangle_{\alpha'} d\alpha'_i \quad (3.25)$$

ce qui donne en général une bien meilleure (plus lisse) évaluation de l'énergie libre dynamique que la mesure directe (3.22) basée sur la fonction de partition, mais demande en contrepartie une connaissance fine de l'évolution de $\langle \lambda_i \rangle_{\alpha}$ en fonction de α .

3.5 Choix des paramètres

Lorsqu'on effectue une simulation de LWD, il y a trois paramètres à fixer : la température α , le nombre de clones N_c et l'amplitude du bruit ε . Comment les choisir ? On n'aurait pas ce problème si on avait une mémoire et une puissance de calcul infini : on prendrait $N_c = +\infty$ et $\varepsilon = 0$, et on pourrait balayer tout l'espace des phases. Mais ce n'est malheureusement pas le cas, et on doit faire un compromis entre la vitesse de l'algorithme, la fidélité de la dynamique et la qualité de l'échantillonnage. En effet, on veut N_c le plus petit possible pour pouvoir faire la simulation en un temps raisonnable, mais dans le même temps on veut que notre algorithme soit ergodique et trouve les structures qui maximisent notre fonction de partition, ce qui demande un grand nombre de clones. Il n'y a pas de solution idéale, et on doit adopter une approche pragmatique, basée sur une bonne connaissance de la physique du système et sur un grand nombre d'essais et d'ajustements des paramètres. Il faut notamment bien avoir en tête les conséquences d'un mauvais choix de paramètres.

Si la température α est trop grande, le système peut rester bloqué dans des trajectoires métastables, qui sont optimales localement mais pas globalement. Inversement, si elle est trop petite, la sélection peut ne pas être assez forte pour localiser une structure optimale mais très localisée spatialement, dans laquelle seul un clone va aller et ressortir très rapidement à cause du bruit. Le cas de l'amplitude du bruit est similaire. En effet, si ε est trop petit, les clones n'ont pas le temps de se différencier et le processus de sélection n'est pas efficace. Inversement, si le bruit

est trop important, l'algorithme ne va pas pouvoir trouver des structures très localisées spatialement, surtout si elles sont instables, et l'algorithme risque de rester bloqué dans le premier état métastable qu'il va localiser.

Pour finir, le nombre de clones dépend de ce que l'on veut observer. Généralement, un petit nombre de clones ($N_c \simeq 100$) sera suffisant pour isoler des trajectoires de chaoticité atypique, alors qu'il faudra une population bien plus grande si l'on veut mesurer avec précision les exposants de Lyapunov moyens et l'énergie libre dynamique. Enfin, comme dans n'importe quelle simulation Monte-Carlo, la métastabilité peut poser problème. En effet, la population de clones peut rester bloquer dans un état métastable. Dans ce cas, il vaut mieux lancer plusieurs simulations en parallèle et moyenner $\mu(\alpha, t)$ et les exposants de Lyapunov typiques sur toutes ces simulations plutôt que d'augmenter le nombre de clones.

Chapitre 4

Applications de la LWD

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté la LWD, qui est un algorithme Monte-Carlo de dynamique des populations qui permet d'échantillonner les trajectoires avec les poids canoniques, et ainsi d'isoler des trajectoires de chaoticité atypique et de mesurer l'énergie libre dynamique.

Cet algorithme a été utilisé pour étudier l'apparition du chaos dans l'application standard, la toile d'Arnold dans les systèmes presque intégrables, les solitons et les modes de respiration chaotiques dans la chaîne Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPU) [47] et la stabilité des points de Lagrange dans les systèmes gravitationnels [88]. Des algorithmes reposant sur le même principe mais utilisant une autre observable ont aussi été utilisés pour étudier une vaste gamme de problèmes [89], allant de la recherche de chemins réactionnels [90, 91] au calcul de la fonction de grandes déviations pour diverses observables dans des systèmes de particules en interaction [25, 92–97].

Dans ce chapitre, nous allons présenter les systèmes qui ont été étudiés avec la LWD dans le cadre de cette thèse [88, 98]. Nous commencerons par deux particules dans un double puits. Ce sera l'occasion d'illustrer le fonctionnement de l'algorithme et de présenter sa capacité à trouver les variétés stables et instables émergeant d'un point col. Nous avons utilisé à cet effet une température distincte pour chacun des deux premiers exposants de Lyapunov. Alors que la généralisation de cet algorithme pour biaiser la dynamique avec plusieurs exposants de Lyapunov était mentionnée dans la thèse de Tailleur [99], elle n'avait jamais été implémentée auparavant.

Stimulé par les travaux de Tailleur et Kurchan [47] lors de l'introduction de l'algorithme, nous avons approfondi l'étude de la chaîne FPU. Nous montrerons comment ce système réagit quand on le force à développer plusieurs exposants de Lyapunov anormalement grands. Nous observerons au passage des trajectoires où plusieurs modes de respiration chaotiques coexistent et se croisent sans s'absorber pour autant, ce qui semblait a priori impossible à observer [3].

Nous présenterons également la première mesure de l'énergie libre dynamique associée au plus grand exposant de Lyapunov dans ce système. Cette mesure, qui devrait s'accompagner d'une étude des effets de taille finie, est compatible avec une transition de phase dynamique entre des trajectoires très chaotiques, les modes de respiration chaotiques, et des trajectoires intégrables, les solitons. Les études de taille finie étant particulièrement difficile dans la chaîne FPU, nous tournerons ensuite vers une chaîne d'applications en forme de tente couplées.

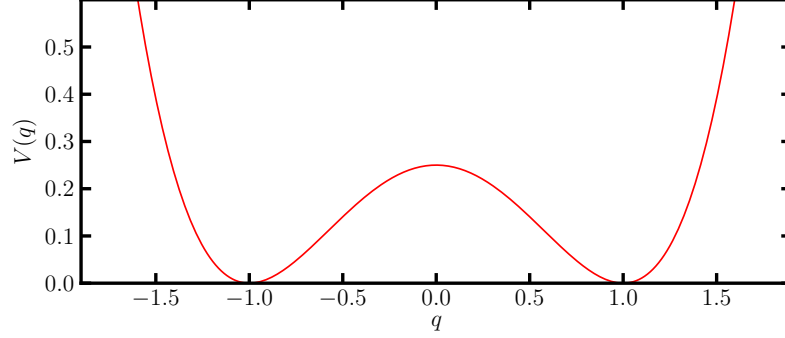


Figure 4.1 – Représentation du potentiel $V(q) = \frac{1}{4}(q^2 - 1)^2$.

4.1 Deux particules dans un double puits

4.1.1 Variété invariante normalement hyperbolique

Les variétés invariantes normalement hyperboliques [100] (appelées NHIMs pour *Normally Hyperbolic Invariant Manifolds*) avec p directions instables sont des variétés invariantes de la dynamique dont les directions normales ont la structure d'un col avec exactement p directions instables. Ces structures peuvent être isolées avec la LWD. En effet, on constate que le clonage de la LWD avec $\alpha_1 = 1$ compense exactement les dilatations de volume induites par l'évolution temporelle pour les trajectoires quittant les cols avec une direction instable [101]. Le clonage stabilise donc la variété instable des NHIMs avec une direction instable, et l'algorithme la visite uniformément. De même, prendre $\alpha_i = 1$ pour $i = \{1, \dots, k\}$ stabilise la variété instable des NHIMs avec k directions instables. Nous allons illustrer cette propriété de la LWD sur un système simple : deux particules dans un double puits.

4.1.2 Présentation du système

On considère un double puits décrit par le potentiel $V(q) = \frac{1}{4}(q^2 - 1)^2$. Les deux puits du potentiel sont donc centrés en $q = -1$ et en $q = 1$ (voir la figure 4.1). Chaque particule i a deux degrés de liberté : sa position q_i et son impulsion p_i . Le système complet a donc quatre degrés de liberté et son hamiltonien est

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1,2} \left[\frac{p_i^2}{2} + \frac{(q_i^2 - 1)^2}{4} \right]. \quad (4.1)$$

Les équations du mouvement sont alors

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = p_i \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -q_i(q_i^2 - 1) \end{cases} \quad (4.2)$$

Ce système a un point col avec deux directions instables, donné par $q_1 = p_1 = q_2 = p_2 = 0$, ainsi que quatre points cols avec une direction instable, donnés respectivement par $q_1 = p_1 = 0$, $q_2 = \pm 1$, $p_2 = 0$ et $q_1 = \pm 1$, $p_1 = 0$, $q_2 = p_2 = 0$.

On lui ajoute maintenant un bruit, pour lever la dégénérescence des clones. Ce qui nous intéresse ici est de trouver les NHIMs facilement. On est donc plus intéressé par sonder tout l'espace des phases rapidement que par la conservation de l'énergie ou de l'impulsion. On se contente donc d'ajouter un bruit blanc gaussien η_i de variance 2ε à l'impulsion, ce qui fait progressivement augmenter l'énergie de nos clones, et on fait commencer nos clones au fond des puits. Les équations du mouvement deviennent

$$\begin{cases} \dot{q}_i &= p_i \\ \dot{p}_i &= -q_i(q_i^2 - 1) + \sqrt{2\varepsilon}\eta_i \end{cases} \quad (4.3)$$

On remarque que ces équations sont la limite de l'équation de Kramers

$$\begin{cases} \dot{q}_i &= p_i \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial V}{\partial q_i} - \gamma p_i + \sqrt{2\gamma k_B T}\eta_i \end{cases} \quad (4.4)$$

lorsque la friction $\gamma \rightarrow 0$ et la température $k_B T \rightarrow +\infty$ en maintenant $\varepsilon = \gamma k_B T$ constant. Cette équation décrit le couplage d'un système hamiltonien avec un bain thermique à la température T . Sa mesure stationnaire est la distribution de Boltzmann ($\propto e^{-H/(k_B T)}$), qui tend vers la mesure uniforme quand $T \rightarrow +\infty$ (mais n'est alors plus normalisable). L'ajout du bruit à notre système permet donc bien de sonder l'espace des phases uniformément.

4.1.3 Localisation des NHIMs

Ce système a deux NHIMs avec une direction instable, correspondant au produit cartésien entre la mesure uniforme sur un puits et le point col sur l'autre puits. Il a aussi un NHIM avec deux directions instables, correspondant au produit cartésien des points cols. On peut voir sur la figure 4.2 que la LWD avec $\alpha_1 = 1$ isole la variété instable d'un des NHIMs avec une direction instable, tandis que la LWD avec $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ isole la variété instable du NHIM avec deux directions instables.

Les simulations ont été réalisées en utilisant l'intégrateur symplectique d'ordre 6 de Yoshida [102] (voir l'annexe D) pour la dynamique hamiltonienne. Alors qu'en principe l'ajout d'un bruit non conservatif rend l'utilisation d'un intégrateur avec de bonnes propriétés de conservation de l'énergie inutile, cela devient essentiel dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ pour éviter que l'intégration des équations hamiltoniennes ne devienne limitante. De plus, il existe des intégrateurs très précis, efficaces et simples à implémenter, comme celui utilisé ici qui correspond à sept utilisations successives de l'intégrateur *Leapfrog* d'ordre 2 (avec des pas de temps dt_i ajustés pour minimiser l'erreur produite). Il serait donc dommage d'utiliser des intégrateurs moins précis vu le faible coût en temps d'écriture et d'exécution du programme.

4.2 Chaîne Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou

4.2.1 Présentation du système

Le modèle précédent était un système de faible dimension, utilisé pour illustrer le fonctionnement de l'algorithme sur un exemple simple. Passons maintenant à un système étendu en interaction : la chaîne Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou [103–105], couramment appelée chaîne FPU. Ce modèle décrit une chaîne d'oscillateurs couplés par un terme harmonique (quadratique en position) et

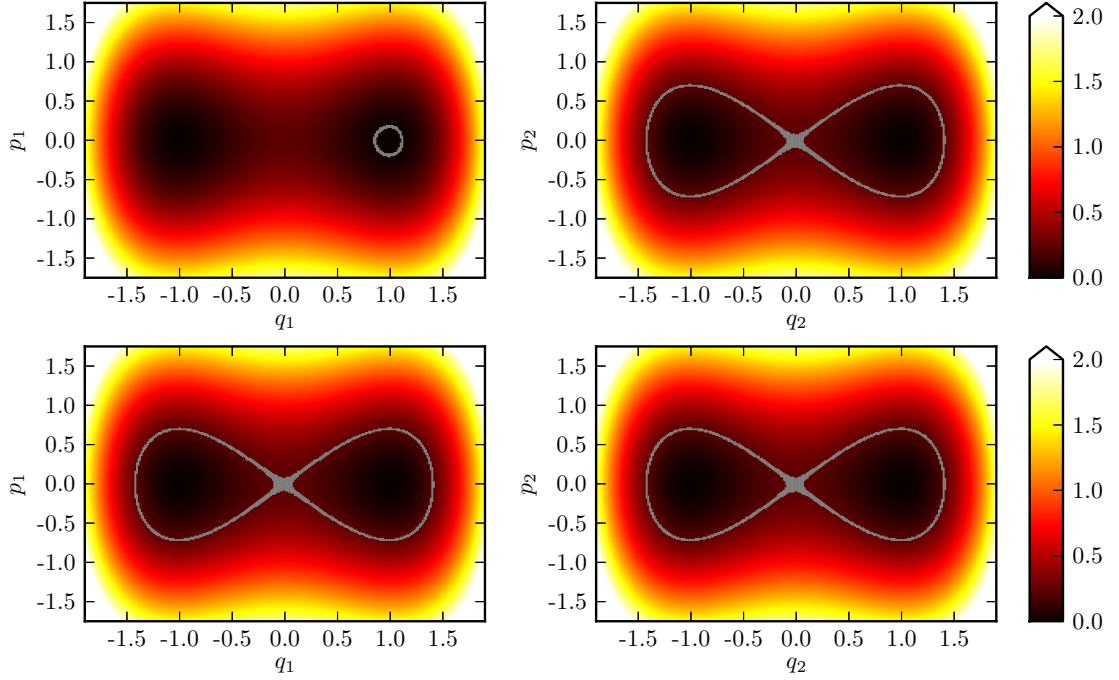


Figure 4.2 – Trajectoires des clones de la LWD pour le système défini par (4.3) lorsque $t \geq 250$. On a utilisé $N_c = 5000$ clones, initialement au fond des puits, et $dt = 10^{-2}$. La variance 2ε du bruit est diminuée au cours de la simulation. On passe de $\varepsilon = 10^{-3}$ pour $t < 60$ à $\varepsilon = 10^{-5}$ pour $60 \leq t < 120$, pour finir par $\varepsilon = 10^{-7}$ pour $t \geq 120$. Les clones sont en gris et le code couleur correspond à l'énergie de la particule. **Haut** : $\alpha_1 = 1$ et $\alpha_{i \geq 2} = 0$. **Bas** : $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ et $\alpha_3 = \alpha_4 = 0$.

par un terme non harmonique (cubique dans le cas de la chaîne α et quartique pour la chaîne β). Il est utilisé pour modéliser aussi bien des cristaux que des biopolymères rigides [106, 107].

Si on ne prend en compte que le terme harmonique, le système est intégrable et les constantes du mouvement sont les énergies des modes de Fourier, appelés modes normaux. Ainsi, si on n'excite initialement que le premier mode normal, toute l'énergie du système reste dans ce mode. L'idée initiale de Fermi, Pasta et Ulam était que l'ajout d'un petit terme non linéaire (en position) allait permettre à l'énergie de diffuser entre les modes normaux et rétablir rapidement l'équipartition de l'énergie. Cette intuition s'est révélée fautive, et ils ont au contraire mis en évidence que le système présentait un comportement récurrent : l'énergie diffuse initialement entre les différents modes normaux, mais retourne quasiment intégralement dans le premier mode après un certain temps (voir la figure 4.3). Ce phénomène, connu sous le nom de paradoxe FPU, a montré que la présence de non-linéarités n'était pas suffisante pour assurer une équipartition rapide de l'énergie (ni à fortiori l'ergodicité du système) et a ouvert la voie à de nombreux développements en théorie du chaos, de l'étude des solitons au théorème KAM.

Dans cette thèse, nous considérons la chaîne β -FPU avec L sites, qui est définie par l'hamiltonien

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^L \left[\frac{p_i^2}{2} + \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{2} + \beta \frac{(q_{i+1} - q_i)^4}{4} \right] \quad (4.5)$$

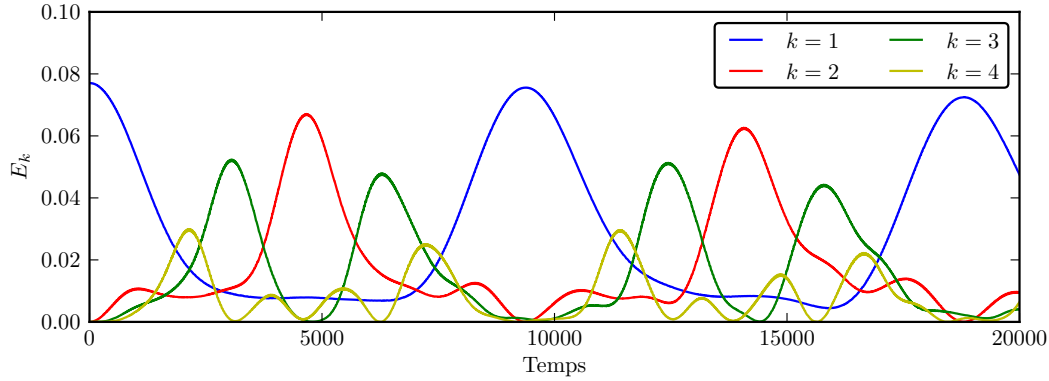


Figure 4.3 – Énergie E_k des premiers modes normaux (\hat{q}_k, \hat{p}_k) , où $\hat{f}_k = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{i=1}^L f_i \sin \frac{ik\pi}{L}$ est la transformée de Fourier discrète de f , dans la chaîne α -FPU dont l'évolution est donnée par $\ddot{q}_i = q_{i+1} - 2q_i + q_{i-1} + \frac{1}{4} [(q_{i+1} - q_i)^2 - (q_i - q_{i-1})^2]$. On applique des conditions aux limites périodiques. Plus précisément, $E_k = \frac{1}{2} [\dot{q}_k^2 + \omega_k^2 \hat{p}_k^2]$ avec $\omega_k = 2 \sin \frac{k\pi}{2L}$. Initialement, on excite uniquement le premier mode de Fourier en imposant $q_i(0) = L \sin \frac{i\pi}{L}$ et $\dot{q}_i(0) = 0$. Au début, l'énergie semble diffuser entre les différents modes normaux mais, après un certain temps, quasiment toute l'énergie retourne finalement dans le premier mode. C'est le phénomène super-réurrence qui a rendu ce modèle célèbre.

avec des conditions aux limites périodiques $x_{L+1} = x_1$. Pour $\beta = 0$, ce système est intégrable et sa chaoticité augmente au fur et à mesure qu'on augmente β et H [108, 109]. Dans cette section, nous considérons le cas $\beta = 0,1$ et $H = L$.

4.2.2 Implémentation numérique

On utilise le même intégrateur symplectique [102] que pour le double puits. En revanche, il faut faire attention pour le choix du bruit. En effet, comme la chaoticité de la chaîne FPU dépend de son énergie totale, il est important d'empêcher le système de diminuer sa chaoticité en diminuant son énergie totale ou en utilisant toute son énergie pour créer une rotation uniforme de tous les oscillateurs. C'est pourquoi on veut un bruit qui conserve à la fois l'énergie totale et l'impulsion, ce qui peut être fait en imposant une rotation aléatoire de l'impulsion.

Pour cela, on tire uniformément un vecteur aléatoire $\boldsymbol{\eta}$ sur l'hypersphère de dimension N et de rayon $\sqrt{2\varepsilon dt}$. On s'assure ensuite que ce bruit ne va pas modifier l'impulsion totale, en remplaçant η_i par $\eta_i - \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \eta_j$. Pour finir, on ajoute $\boldsymbol{\eta}$ à \mathbf{p} , puis on renormalise \mathbf{p} pour maintenir sa norme constante. Ce bruit conserve exactement l'énergie et l'impulsion, et on peut montrer qu'il est équivalent au premier ordre en \sqrt{dt} à un bruit, beaucoup plus compliqué à mettre en œuvre numériquement car multiplicatif, qui impose une mesure uniforme sur la surface d'énergie (mesure microcanonique, voir l'annexe de [88] pour plus de détails).

4.2.3 Solitons et modes de respiration chaotiques

Deux types de structures jouent un rôle crucial dans la dynamique de ce système. D'une part, on observe la présence de solitons, qui sont des structures qui se déplacent à vitesse constante dans

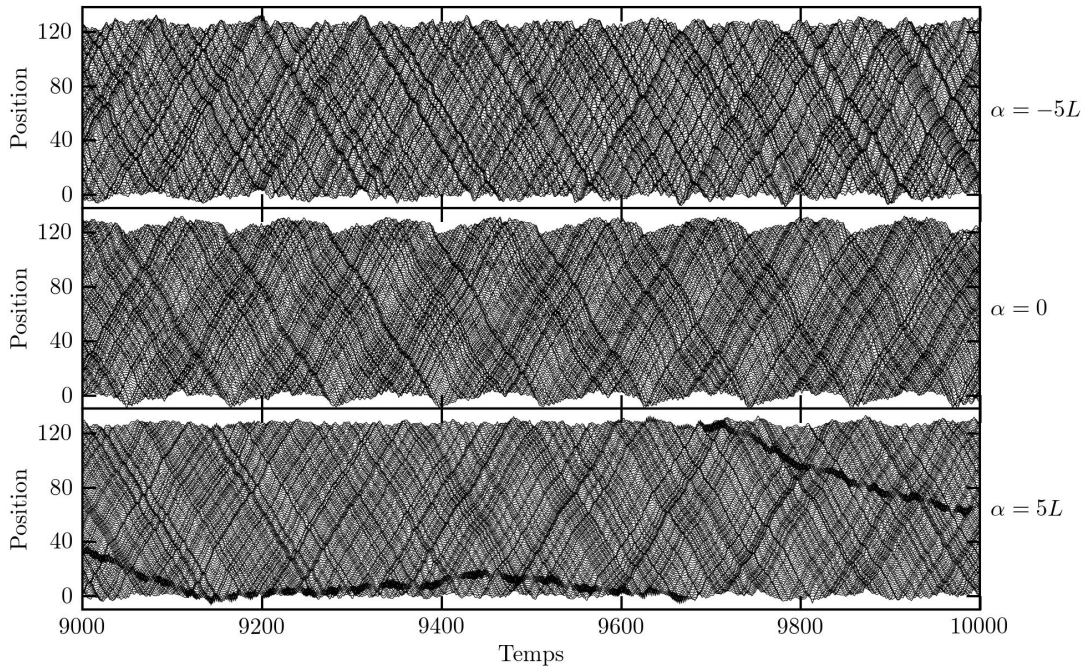


Figure 4.4 – Configuration d'un des $N_c = 200$ clones de la LWD pour la chaîne FPU avec $L = 128$, $dt = 10^{-2}$ et $\varepsilon = 10^{-3}$. **Haut** : Gaz de solitons. **Milieu** : Système à l'équilibre. **Bas** : Mode de respiration chaotique. L'impression de disparition du mode de respiration chaotique par moment est due à un transfert d'énergie entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle.

le système sans se déformer. De temps en temps, ils reviennent donc à leur position initiale, ce qui explique le phénomène de récurrence observé dans ce système [110]. D'autre part, si on excite les modes de haute fréquence, on observe l'apparition de structures très localisées qui contiennent la majeure partie de l'énergie et suivent un mouvement erratique. Ce sont les modes de respiration chaotiques [3, 111, 112], qui jouent un rôle fondamental dans le transfert de l'énergie des modes de haute fréquence vers les modes de basse fréquence. Ils ont tendance à fusionner, jusqu'à ce qu'il n'en reste plus qu'un, qui finit par disparaître quand le système atteint l'équipartition.

À l'équilibre, la configuration typique est une superposition de fluctuations thermiques (phonons), de solitons et de modes de respiration chaotiques. La LWD permet d'isoler ces différentes structures [47, 89]. En effet, en utilisant la LWD avec $\alpha_1 < 0$ on isole un gaz de solitons alors qu'imposer $\alpha_1 > 0$ stabilise un mode de respiration chaotique, qui se déplace alors à travers tout le système (voir la figure 4.4). La LWD permet donc de décomposer une dynamique à priori complexe en ses structures sous-jacentes, et ainsi de mieux comprendre le comportement du système.

Les simulations de la figure 4.4 ont été réalisées avec du bruit et du clonage. On peut donc se demander si les trajectoires obtenues ne diffèrent pas complètement de celles du modèle initial. Ce n'est pas le cas. En effet, en utilisant les positions et les moments d'un clone donné comme condition initiale pour une simulation numérique sans clonage ni bruit, on obtient des évolutions temporelles très similaires. Les solitons et les modes de respiration chaotiques sont donc bien de vraies solutions de la chaîne FPU. Le clonage permet juste d'isoler les conditions appropriées à leur stabilisation.

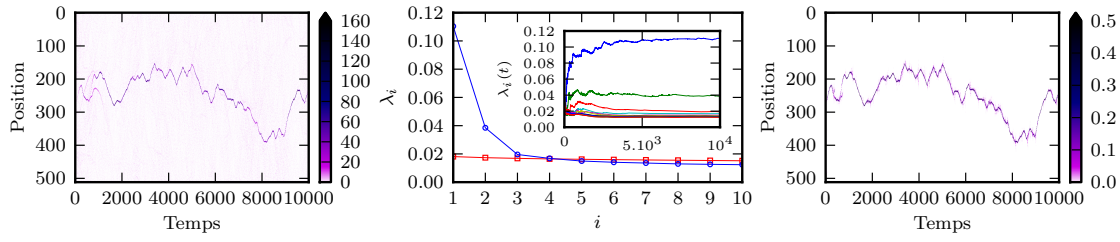


Figure 4.5 – Simulation de la chaîne FPU avec la LWD pour les paramètres $L = 512$, $\alpha_1 = 5L$, $N_c = 200$ clones, $dt = 10^{-2}$ et $\varepsilon = 10^{-3}$. **Gauche** : Énergie en chaque site pour un clone en fonction du temps. **Milieu** : λ_i pour $i \in \llbracket 1, 10 \rrbracket$ à $t = 10^4$ pour la dynamique biaisée (en bleu) et non biaisée (en rouge). Les deux premiers exposants de Lyapunov sont clairement plus grands en présence d'un mode de respiration chaotique. L'encart montre $\lambda_i(t)$ pour $t \leq 10^4$ pour $i \in \llbracket 1, 10 \rrbracket$. **Droite** : $v_{q_i}^2 + v_{p_i}^2$ en fonction du temps et du site i pour le premier vecteur tangent, qui apparaît être localisé sur le mode de respiration chaotique.

Comme les clones sont en permanence tués ou copiés, on peut s'étonner de ne pas voir clairement d'évènement de clonage dans les simulations, comme par exemple un mode de respiration chaotique qui disparaît à un endroit puis réapparaît immédiatement à plusieurs dizaines de sites d'écart. Bien que possibles ces évènements sont rares, parce qu'une fois qu'un mode de respiration chaotique a été trouvé, tous les clones de la population (qui est petite dans ces simulations) tendent à être quasiment identiques. Cette dégénérescence de la population de clones, qui échantillonnent le voisinage d'une seule trajectoire intéressante alors que plusieurs existent, est une des raisons pour lesquelles il faut des populations bien plus grandes pour mesurer avec précision la fonction de partition dynamique ou l'énergie libre dynamique, qui font intervenir des moyennes.

4.2.4 Plusieurs modes de respiration chaotiques

Que se passe-t-il quand on biaise par le $k^{\text{ème}}$ exposant de Lyapunov? Les cas où l'on force le système à avoir des exposants de Lyapunov anormalement grands ou anormalement petits sont radicalement différents. En effet, quand on force le plus grand exposant de Lyapunov à être anormalement petit (en prenant $\alpha_1 < 0$), on impose automatiquement à tous les exposants de Lyapunov d'être anormalement petits du fait de la relation d'ordre entre eux. On observe alors un nombre plus élevé que la normale de solitons, et la disparition des modes de respiration chaotique. Inversement, quand on force le plus grand exposant de Lyapunov à être anormalement grand, on ne perturbe pas ou peu les autres exposants de Lyapunov (voir la figure 4.5). On stabilise alors fortement un mode de respiration chaotique, qui correspond à une excitation localisée de quelques sites, et le reste du système ne semble pas affecté. C'est quand on va imposer au $k^{\text{ème}}$ exposant de Lyapunov d'être anormalement grand qu'on va automatiquement forcer les $k - 1$ premiers à l'être également, et on peut alors se demander comment le reste du système réagit.

À priori, deux scénarios semblent assez naturels si l'on force le système à avoir un deuxième exposant de Lyapunov anormalement grand. La première hypothèse est qu'il se passe sensiblement la même chose que dans le cas où l'on impose $\alpha_1 > 0$, c'est-à-dire qu'on ne voit la présence que d'un mode de respiration chaotique. En effet, les modes de respiration chaotique ont tendance à fusionner [3] et il est hautement improbable de trouver une configuration avec plusieurs modes de respiration chaotiques stables dans le temps. De plus, les premiers vecteurs tangents sont localisés sur le mode de respiration quand il est présent. On peut donc imaginer qu'imposer $\alpha_2 > 0$ va juste

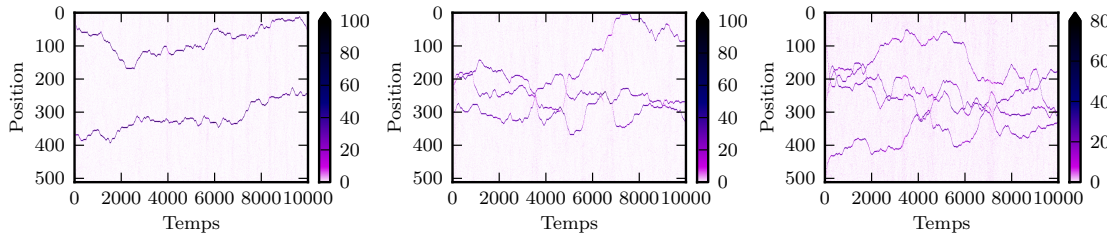


Figure 4.6 – Solutions de la chaîne FPU où plusieurs modes de respiration coexistent. Ces trajectoires ont été obtenues en utilisant la LWD avec $L = 512$, $N_c = 200$ clones, $dt = 10^{-2}$ et $\varepsilon = 10^{-2}$. Le code couleur représente l'énergie en chaque site pour un clone. **Gauche** : $\alpha_2 = 5L$ et $\alpha_{i \neq 2} = 0$ donne deux modes de respiration. **Moyenne** : $\alpha_3 = 5L$ et $\alpha_{i \neq 3} = 0$ donne trois modes de respiration. **Droite** : $\alpha_4 = 5L$ et $\alpha_{i \neq 4} = 0$ donne quatre modes de respiration.

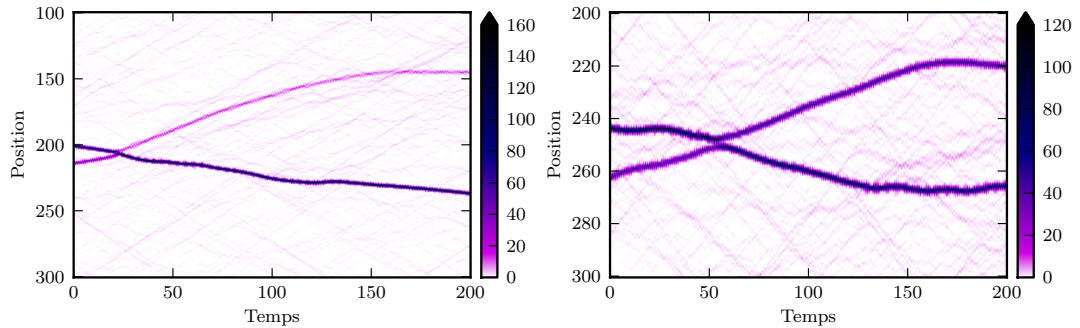


Figure 4.7 – Gros plan sur deux types d'interactions entre modes de respiration : collision à gauche et répulsion à droite. On a utilisé les positions et les impulsions d'un clone donné comme condition initiale pour une simulation purement hamiltonienne.

exciter certains degrés de liberté internes du mode de respiration, ce qui va conduire plusieurs exposants de Lyapunov à être anormalement grands. La deuxième hypothèse est que le système, pour avoir deux exposants de Lyapunov anormalement grands, va développer deux modes de respiration chaotiques, correspondant chacun à un exposant de Lyapunov anormalement élevé. Les deux hypothèses s'avèrent correctes, mais la deuxième induit un accroissement du deuxième exposant de Lyapunov plus important. Il faut donc choisir judicieusement les paramètres de la simulation, tout particulièrement l'amplitude du bruit, pour réussir à isoler des trajectoires avec plusieurs modes de respiration chaotiques (voir la figure 4.6).

Pour vérifier que les solutions avec plusieurs modes de respiration n'étaient pas des artefacts dus au clonage ou au bruit, on a réalisé des simulations purement hamiltoniennes en prenant l'état d'un clone donné comme condition initiale. On a alors constaté que les trajectoires avec plusieurs modes de respiration chaotiques étaient bien des solutions (méta)stables des équations du mouvement, même après collision entre eux. Les modes de respiration ayant une durée de vie finie, ils finissent par disparaître quand le système atteint l'équipartition. On a observé différents types d'interactions entre modes de respiration, comme on peut le voir sur la figure 4.7. En plus de la fusion décrite dans [3], l'interaction entre modes de respiration peut aussi être répulsive, les modes de respiration faisant demi-tour juste avant de se croiser, ou ils peuvent simplement se croiser sans nécessairement que l'un absorbe l'autre (il y a alors juste un échange d'énergie).

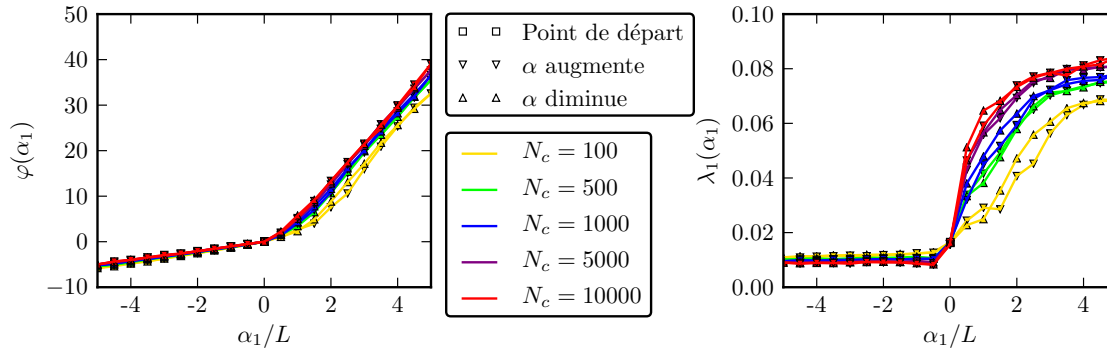


Figure 4.8 – Énergie libre dynamique et exposant de Lyapunov typique en fonction de α_1 dans la chaîne FPU, mesurés en utilisant la LWD avec $L = 100$, $dt = 10^{-2}$, $\varepsilon = 10^{-3}$ et $t = 5000$, moyennés sur 10 simulations. On a fait varier le nombre de clones N_c pour regarder la convergence avec N_c . La première simulation a été faite en partant de $\alpha_1 = 0$, puis α_1 a été augmenté de $0,5L$ en $0,5L$ jusqu'à atteindre la valeur de $5L$. À chaque fois, la condition initiale de la simulation n correspondant à $\alpha_1 = 0,5nL$ était la condition finale de la simulation $n - 1$. On a ensuite réalisé la même chose en partant cette fois-ci de $5L$ et en allant vers 0, pour réaliser un cycle d'hystérésis. L'écart entre la montée et la descente en α_1 est faible, et semble pouvoir être facilement éliminé en prenant une discrétisation en α_1 plus fine et en moyennant sur plus de simulations. On a appliqué le même procédé pour $\alpha_1 < 0$.

Ces observations suggèrent d'étudier les interactions effectives dans les états α , comme cela a été fait dans d'autres modèles biaisés par la densité, le courant ou l'activité [63, 65, 113]. C'est une de nos pistes de réflexion pour le futur.

Les solutions avec plusieurs modes de respiration chaotiques existent donc bien et n'avaient pas été détectées précédemment à cause de la difficulté pour trouver les conditions initiales appropriées. Cela n'est pas nécessaire ici grâce à la dynamique biaisée qui localise automatiquement ces trajectoires très atypiques.

4.2.5 Énergie libre dynamique

La LWD permet aussi de mesurer l'énergie libre dynamique $\varphi(\alpha_1)$ et sa dérivée, l'exposant de Lyapunov typique $\lambda_1(\alpha_1) \equiv \lambda_{1,\alpha_1}^* = \varphi'(\alpha_1)$, qui joue alors le rôle d'un paramètre d'ordre. Ces quantités permettent d'utiliser le langage et les outils des transitions de phase pour étudier les systèmes dynamiques [8, 28]. Jusqu'à présent, l'énergie libre dynamique associée aux exposants de Lyapunov a seulement été mesurée dans des systèmes de basse dimension, comme des applications de l'intervalle [114–116], avec deux exceptions notables : le gaz de Lorentz sur réseau [117] et des chaînes d'applications, pour lesquelles seule l'approximation gaussienne de l'énergie libre a été calculée [118, 119].

La figure 4.8 représente une mesure de ces quantités dans la chaîne FPU, ce qui n'avait jamais été fait auparavant. Ces résultats ouvrent la voie à une étude systématique de la dépendance avec la taille du système de $\varphi(\alpha_1)$ et de $\lambda_1(\alpha_1)$, ce qui devrait permettre de discuter de l'existence d'une transition de phase dynamique séparant des lois d'échelle différentes avec la taille du système pour les fluctuations de l'exposant de Lyapunov. Mais la convergence en taille de l'exposant de Lyapunov dans FPU est très lente [120], ce qui rend cette étude longue et difficile.

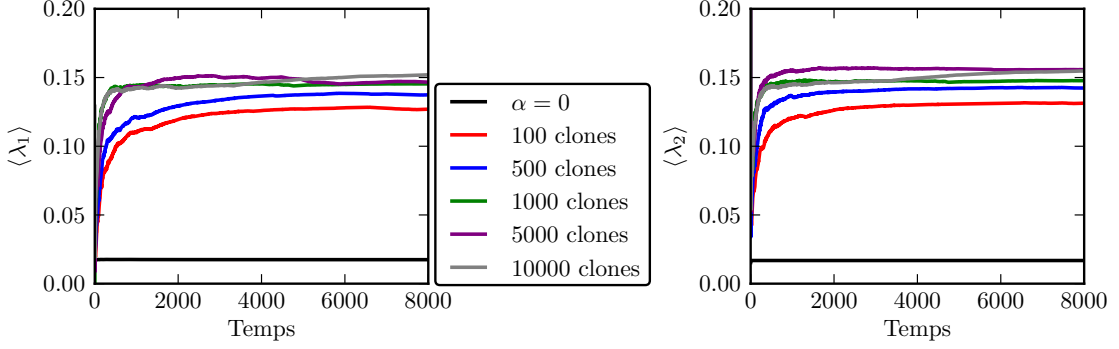


Figure 4.9 – Valeurs des deux plus grands exposants de Lyapunov moyennées sur tous les clones et sur 5 simulations, mesurées avec la LWD avec $L = 200$, $dt = 10^{-2}$, $\varepsilon = 10^{-2}$, $\alpha_{i \neq 2} = 0$ et $\alpha_2 = 5L$. Elles semblent converger quand le temps et le nombre de clones N_c augmentent. On observe une inversion dans l'ordre des exposants de Lyapunov (le deuxième devient plus grand que le premier), qui est due à la définition des exposants de Lyapunov basée sur l'accroissement des normes des vecteurs tangents et non sur les valeurs propres d'une matrice liée à l'opérateur d'évolution, comme discuté à la section 1.2.3. Ce phénomène est rare et peu dérangentant quand on s'intéresse aux trajectoires atypiques mais il empêche de mesurer l'énergie libre dynamique quand on biaise par plusieurs exposants de Lyapunov. Il faudra donc améliorer l'algorithme dans le futur pour empêcher cette inversion.

Plus généralement, les exposants de Lyapunov typiques semblent converger avec le temps et le nombre de clones même quand on biaise par le deuxième exposant de Lyapunov (voir la figure 4.9). Une mesure de l'énergie libre $\varphi(\alpha_1, \alpha_2)$ associée à deux températures apparaît donc envisageable, à condition de régler le problème de l'inversion de l'ordre des exposants de Lyapunov (mentionné à la section 1.2.3 et présent sur la figure 4.9).

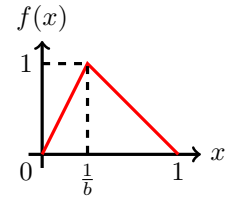
Pour illustrer les capacités de la LWD à mesurer l'énergie libre dynamique, on l'a appliquée à un autre système étendu, dans lequel la convergence des exposants de Lyapunov avec la taille est plus rapide : une chaîne d'applications en forme de tente couplées [121].

4.3 Chaîne d'applications en forme de tente couplées

4.3.1 Présentation du modèle

L'application en forme de tente $x(t+1) = f(x(t))$ est définie par

$$f(x) = \begin{cases} bx & \text{si } x \leq \frac{1}{b} \\ \frac{1-x}{x-\frac{1}{b}} & \text{sinon} \end{cases}$$



On considère une chaîne de L applications en forme de tente qu'on couple via un terme de diffusion [121], dont on peut régler l'intensité via une constante de diffusion D . Le système est

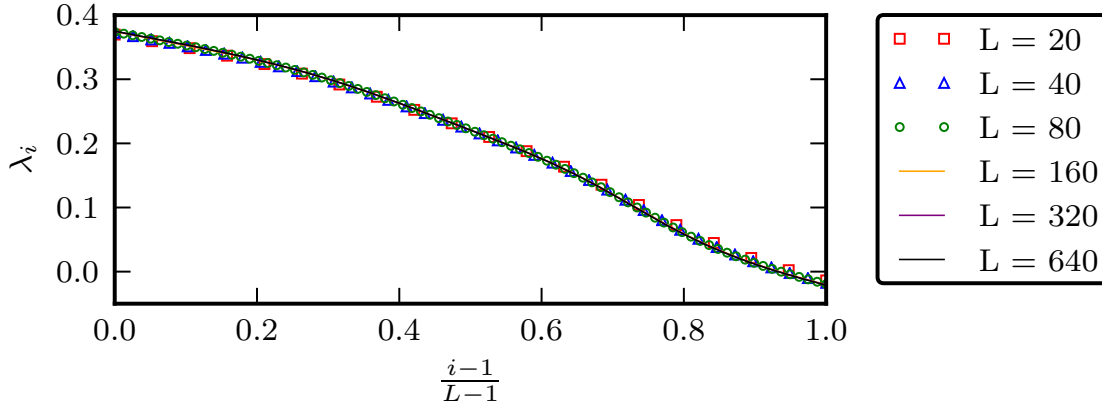


Figure 4.10 – Spectre de Lyapunov pour différentes tailles L . Les exposants sont moyennés sur un grand nombre de simulations, allant de 5 000 simulations pour $L = 640$ à 500 000 simulations pour $L = 20$. Dans la suite, on considérera que le spectre a convergé pour $L \geq 40$.

alors décrit par L variables $x_i \in [0,1]$, dont la dynamique (en temps discret) est donnée par

$$x_i(t+1) = f(x_i(t)) + D [f(x_{i+1}(t)) - 2f(x_i(t)) + f(x_{i-1}(t))]. \quad (4.6)$$

Quand $D = 0$, les applications ne sont pas couplées et sont complètement chaotiques. La mesure stationnaire est alors uniforme et tous les exposants de Lyapunov sont égaux à [27]

$$\lambda = \int_0^1 \ln \|f'(x)\| dx = \frac{1}{b} \ln b + \left(1 - \frac{1}{b}\right) \ln \frac{b}{b-1}. \quad (4.7)$$

Quand D augmente, les applications deviennent localement couplées, et les termes de diffusion rendent la dynamique plus régulière. Les exposants de Lyapunov diminuent donc. Dans la suite, on prendra $D = 0,1$ et $b = 4$. Ce système est un bon système de test pour la LWD car sa dynamique est beaucoup plus facile à simuler que les dynamiques en temps continu et son spectre de Lyapunov converge assez rapidement quand L augmente (voir la figure 4.10), contrairement à des systèmes plus compliqués comme la chaîne FPU de la section précédente. De plus, c'est un bon modèle pour vérifier que la LWD permet d'aller au-delà de ce qui a été fait pour les fluctuations d'exposants de Lyapunov dans les chaînes d'applications couplées, qui se limite pour l'instant à l'étude du régime gaussien [118, 119].

4.3.2 Ajout du bruit

Pour utiliser la LWD, il faut rendre la dynamique (4.6) stochastique. Pour cela, on utilise le décalage

$$\tilde{x}_i(t) = x_i(t) + U \frac{\varepsilon}{2} \min[x_i(t), 1 - x_i(t)] \quad (4.8)$$

avec U un nombre aléatoire tiré uniformément dans $[-1,1]$ à chaque temps et pour chaque site. La fonction min est là pour s'assurer que \tilde{x}_i reste dans $[0,1]$ tant que l'amplitude du bruit $\varepsilon < 2$. Il faut maintenant s'assurer que les fluctuations d'exposants de Lyapunov ne dépendent pas de l'intensité du bruit.

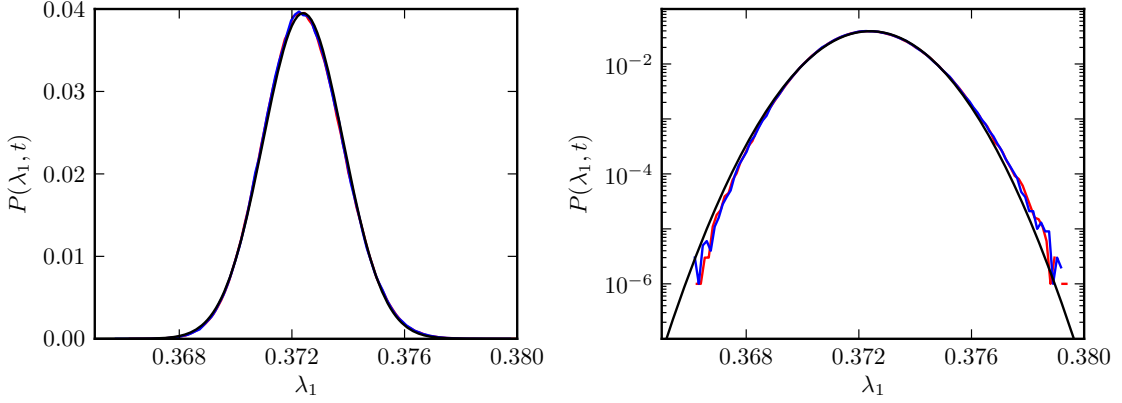


Figure 4.11 – Gauche : $P(\lambda_1, t)$ construit à partir des fréquences observées sur 10^6 simulations (force brute) pour $L = 40$ et $\varepsilon = 10^{-2}$ (rouge) ou $\varepsilon = 10^{-4}$ (bleu). La courbe noire représente l'approximation gaussienne $P_G(\lambda_1, t)$. **Droite :** Mêmes données en échelle logarithmique. On observe une petite déviation au régime gaussien pour $P(\lambda_1, t) < 10^{-4}$.

4.3.3 Approximation gaussienne

Pour vérifier cela, on a effectué des simulations de force brute avec $L = 40$ pour estimer les fluctuations gaussiennes de λ_1 et vérifier que changer l'intensité du bruit ne les modifie pas. Après 500 pas de temps pour laisser le temps au système d'atteindre le régime stationnaire, les exposants de Lyapunov sont mesurés sur les $t = 10^4$ itérations suivantes de l'application. Pour $N = 10^6$ simulations, la figure 4.11 montre que la distribution de probabilité de λ_1 est bien approximée par la gaussienne $P_G(\lambda_1, t)$:

$$P(\lambda_1, t) \simeq P_G(\lambda_1, t) \equiv \sqrt{\frac{t}{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-t\frac{(\lambda_1 - \langle\lambda_1\rangle)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (4.9)$$

avec $\langle\lambda_1\rangle \simeq 0,372$ et $\sigma^2 \simeq 2,03 \times 10^{-2}$.

On peut remarquer que l'écart-type de λ_1 est $\tilde{\sigma} = \sigma/\sqrt{t} \simeq 4 \times 10^{-3}\langle\lambda_1\rangle$. Les simulations force brute ne permettent donc pas d'échantillonner très loin de la moyenne. Néanmoins, la figure 4.11 montre le début du régime de grandes déviations : on observe une déviation asymétrique, petite mais systématique, au régime gaussien quand $P(\lambda_1, t) < 10^{-4}$. Les simulations pour les niveaux de bruit $\varepsilon = 10^{-2}$ et $\varepsilon = 10^{-4}$ ne montrent aucune différence dans $P(\lambda_1, t)$, donc on utilisera $\varepsilon = 10^{-2}$ dans la suite. Une étude plus systématique de la façon dont nos résultats dépendent du niveau de bruit sera présentée un peu plus tard dans cette section (voir la figure 4.14).

On peut calculer une approximation quadratique de $\varphi(\alpha)$ à partir de l'approximation gaussienne :

$$\varphi^G(\alpha_1) = \frac{1}{t} \ln \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\alpha_1 \lambda_1 t} P_G(\lambda_1, t) d\lambda_1 \right] = \langle\lambda_1\rangle \alpha_1 + \sigma^2 \frac{\alpha_1^2}{2} \quad (4.10)$$

De même, la valeur typique du plus grand exposant de Lyapunov $\lambda_1(\alpha_1) \equiv \lambda_{1,\alpha_1}^* = \langle\lambda_1\rangle_{\alpha_1}$ qui domine la mesure canonique pour α peut être approximée par

$$\lambda_1^G(\alpha_1) = \frac{\langle\lambda_1 e^{\alpha_1 \lambda_1 t}\rangle^G}{\langle e^{\alpha_1 \lambda_1 t}\rangle^G} = \frac{\partial}{\partial \alpha_1} \varphi^G(\alpha_1) = \langle\lambda_1\rangle + \sigma^2 \alpha_1 \quad (4.11)$$

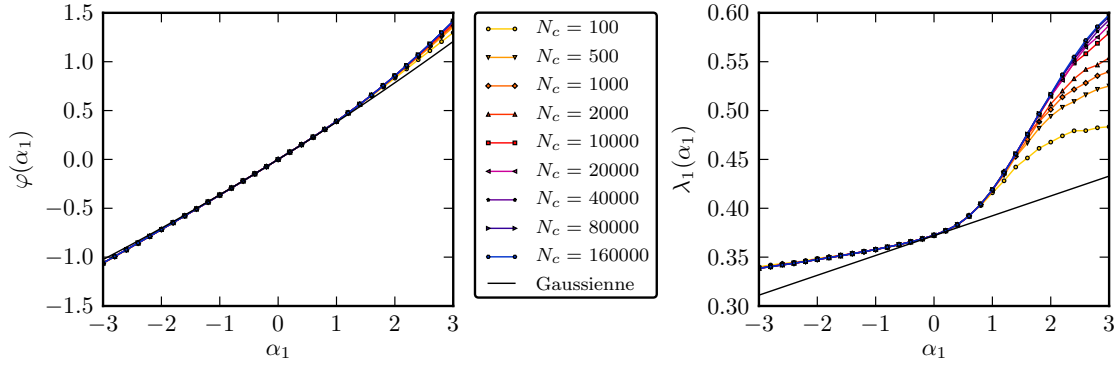


Figure 4.12 – $\varphi(\alpha_1)$ (gauche) et $\lambda_1(\alpha_1)$ (droite) pour $L = 40$ mesurés avec la LWD en utilisant N_c clones, avec N_c allant de 100 à 160 000. Les symboles viennent des simulations de clonage. Les lignes noires représentent les approximations gaussiennes, valides au voisinage de $\alpha_1 = 0$.

4.3.4 Mesure de l'énergie libre avec la LWD

On peut maintenant comparer cette approximation gaussienne avec $\varphi(\alpha_1)$ et $\lambda_1(\alpha_1)$ mesurés avec la LWD. Les simulations de la figure 4.12 ont été obtenues pour un nombre de clones N_c allant de 100 à 160 000. Pour chaque valeur de α_1 et de N_c , on a effectué 10 simulations de $t = 10^4$ pas de temps (après avoir laissé tourner la simulation pendant 10^3 itérations sans rien mesurer pour laisser le système atteindre son régime stationnaire) pendant lesquels on a mesuré $\lambda_1(\alpha_1, t)$ et $\varphi(\alpha_1, t)$. On a ensuite moyenné ces 10 simulations pour obtenir $\overline{\lambda_1}(\alpha_1, t)$ et $\overline{\varphi}(\alpha_1, t)$.

Ces fonctions ont beau être moyennées, leur valeur fluctue toujours à temps fini autour de leur valeur stationnaire $\lambda_1(\alpha_1)$ et $\varphi(\alpha_1)$. Pour réduire l'influence de ces fluctuations, on prend les données de $\overline{g}(\alpha_1, t)$, où $g = \lambda_1$ ou φ , et on mesure la fonction de corrélation

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{g}(t') \overline{g}(t' + t) dt' \quad (4.12)$$

pour $t > 5000$. Au lieu de la mesurer directement, il est plus simple de passer dans l'espace de Fourier puis de calculer sa transformée de Fourier $\hat{C}(\omega)$ à l'aide du théorème de Wiener-Khintchine

$$\hat{C}(\omega) = \sqrt{2\pi} |\hat{g}(\omega)|^2. \quad (4.13)$$

avant de repasser dans l'espace réel. On déduit ensuite de cette fonction de corrélation le temps de corrélation τ de \overline{g} , que l'on choisit tel que

$$\forall t > \tau, C(t) < \frac{C(0)}{10}. \quad (4.14)$$

On moyenne alors $\overline{g}(\alpha_1, t)$ en considérant que si les points sont séparés de τ , ils sont indépendants. On obtient alors une estimation de la valeur stationnaire de \overline{g}

$$g(\alpha_1) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \overline{g}(\alpha_1, t) \simeq \frac{1}{\lfloor 5000/\tau \rfloor + 1} \sum_{n=0}^{\lfloor 5000/\tau \rfloor} \overline{g}(\alpha_1, 5000 + n\tau) \quad (4.15)$$

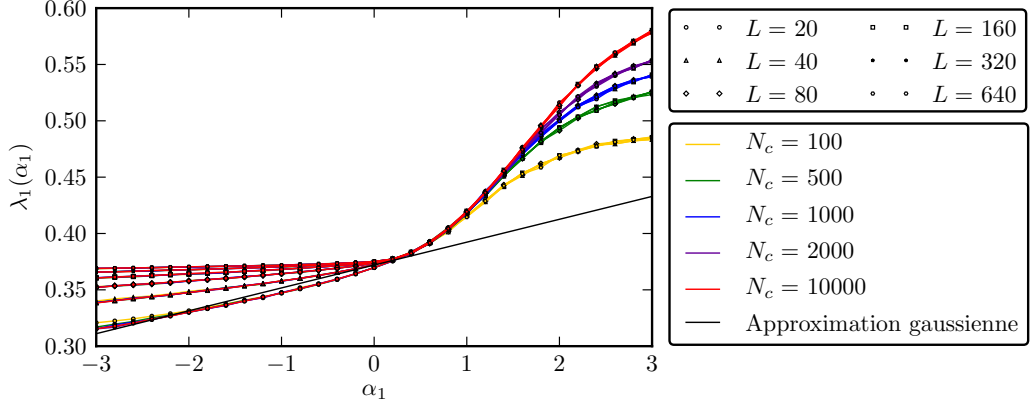


Figure 4.13 – Exposant de Lyapunov typique $\lambda_1(\alpha_1)$ mesuré avec la LWD pour différentes taille L (représentées par différents symboles) et pour différents nombres de clones N_c (représentés par différentes couleurs). La ligne noire représente l’approximation gaussienne, valide au voisinage de $\alpha_1 = 0$. On remarque que, pour $\alpha_1 < 0$, les courbes à L fixé se recouvrent pour tous les N_c alors que, pour $\alpha_1 > 0$, les courbes à N_c fixé se recouvrent pour tous les L .

Cette méthode est proche du *data bunching* (voir la section 1.3.5. de [84]), qui est plus difficile à mettre en œuvre et à automatiser, mais qui illustre bien l’idée derrière ce type d’approches.

Pour $\alpha < 0$, la convergence avec le nombre de clones est très rapide : la différence pour $\lambda_1(\alpha_1)$ entre $N_c = 100$ et $N_c = 160\,000$ en $\alpha = -3$ est inférieure à 5%. Cela est dû au fait que le comportement d’échelle des fluctuations est différent pour $\alpha_1 > 0$ et pour $\alpha_1 < 0$, comme on peut le voir sur la figure 4.13. Augmenter L pour $\alpha_1 < 0$ revient donc à faire tendre α_1 vers 0, et on s’attend donc à ce que, pour $L \rightarrow +\infty$, on récupère un plateau de valeur $\lambda_1(0)$. En effet, si la distribution de λ_1 avec L se comporte comme

$$P(\lambda_1, t) \underset{L, t \rightarrow \infty}{\approx} e^{-tL^\xi I(\lambda_1)} \quad (4.16)$$

alors les poids canoniques sont maintenant

$$P_{\alpha_1}(\lambda_1, t, L) = \frac{1}{Z(\alpha_1, t, L)} P(\lambda_1, t, L) e^{\alpha_1 \lambda_1 t} \underset{L, t \rightarrow \infty}{\approx} e^{tL^\xi \left(\frac{\alpha_1}{L^\xi} \lambda_1 - I(\lambda_1) - \varphi(\alpha_1) \right)}. \quad (4.17)$$

L’exposant de Lyapunov typique $\lambda_1(\alpha_1)$ est alors donné par

$$\left. \frac{dI}{d\lambda_1} \right|_{\lambda_1(\alpha_1)} = \frac{\alpha_1}{L^\xi} \xrightarrow{L \rightarrow \pm\infty} 0 \quad \implies \quad \lambda_1(\alpha_1) \xrightarrow{L \rightarrow \pm\infty} \lambda_1(0) = \lambda_1^* \quad (4.18)$$

On a donc besoin de trouver le bon comportement d’échelle ξ des fluctuations des exposants de Lyapunov pour pouvoir étudier quantitativement la transition de phase dynamique, en faisant varier α_1 de valeur de l’ordre de L^ξ . Le fait que $\lambda_1(\alpha_1)$ ne se comporte pas de la même façon quand L varie pour $\alpha_1 < 0$ que pour $\alpha_1 > 0$ est assez facile à comprendre. En effet, imposer $\alpha_1 > 0$ force le système à augmenter son plus grand exposant de Lyapunov, ce qui n’a à priori pas de raison de dépendre de L vu qu’il suffit d’exciter un seul degré de liberté pour que λ_1 augmente. En revanche, imposer $\alpha_1 < 0$ force le système à diminuer tous ses exposants de Lyapunov du fait de la relation d’ordre entre eux. Il est donc normal que cela dépende de la

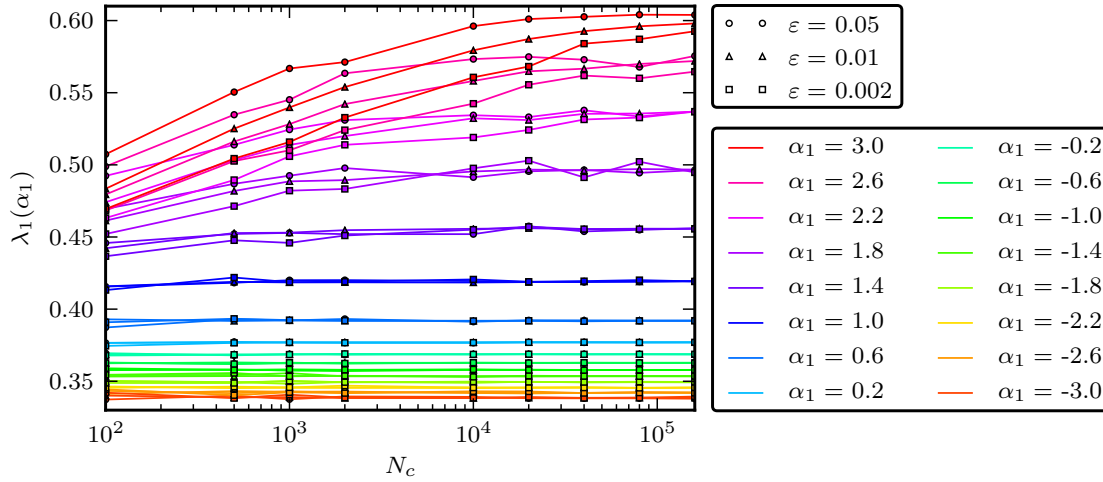


Figure 4.14 – Convergence de $\lambda_1(\alpha_1)$ en fonction du nombre de clones N_c pour trois niveaux de bruit ε . Une couleur donnée correspond à une valeur donnée de α_1 , tandis que les différents symboles correspondent aux différents niveaux de bruit.

taille du système. On retrouve le même phénomène quand on s'intéresse aux valeurs propres de produits de matrices aléatoires appartenant à un certain ensemble [122]. L'énergie libre associée se comporte différemment avec la taille des matrices de part et d'autre de la température nulle, et on observe une transition de phase du troisième ordre due à la relation d'ordre entre les valeurs propres. Contrairement à la chaîne FPU où l'on observe clairement un comportement dynamique différent suivant le signe de α_1 , on n'a pas observé de changement de comportement évident dans ce système en fonction du signe de α_1 . La non-analyticité observé en $\alpha_1 = 0$ est donc peut-être de la même nature que pour les produits de matrices aléatoires de [122]. Cela mériterait une étude plus approfondie, notamment du comportement d'échelle des fluctuations de l'exposant de Lyapunov pour $\alpha_1 < 0$, et c'est une de nos directions de recherche pour la suite.

Pour $\alpha_1 > 0$, la convergence avec N_c est plus lente au fur et à mesure que α_1 augmente. Pour estimer la vitesse de convergence, on peut regarder pour quelle valeur de α la différence entre les estimations de $\lambda_1(\alpha_1)$ pour N_c et pour 160 000 dépassent 5%. On obtient

N_c	100	500	1 000	2 000
α	1,4	2,0	2,2	2,4

Les estimations pour $N_c = 10\,000, 20\,000, 40\,000$ et $80\,000$ ont toujours respectivement, au plus, 3,5%, 2%, 1% et 0,5% d'écart avec les valeurs obtenues pour 160 000 clones. On a réalisé les mêmes simulations avec d'autres intensités pour le bruit ($\varepsilon = 10^{-3}$ ou $\varepsilon = 5 \times 10^{-2}$) et elles conduisent aux mêmes valeurs asymptotiques pour $\lambda_1(\alpha_1)$ et pour $\varphi(\alpha_1)$ quand $N_c \rightarrow +\infty$, bien que la convergence soit plus lente pour un bruit plus faible (voir la figure 4.14)

On constate que la LWD permet d'échantillonner des trajectoires très éloignées du régime gaussien : les valeurs de $\lambda_1(\alpha_1)$ varient sur un intervalle d'amplitude supérieur à $\langle \lambda_1 \rangle$, tandis que $\tilde{\sigma}$ est inférieure à 1% de $\langle \lambda_1 \rangle$. On peut aussi remarquer que les déviations par rapport à la gaussienne sont plus faciles à voir sur $\lambda_1(\alpha_1)$ que sur $\varphi(\alpha_1)$, ce qui est normal vu que cette dernière n'est rien d'autre que l'intégrale de la première. Comme $\lambda_1(\alpha_1)$ est assez petit ($\simeq 0.5$ ici), on doit l'intégrer sur un grand intervalle en α_1 pour que l'erreur sur $\lambda_1(\alpha_1)$ ait un impact.

Pour finir, comme il n'y a aucun résultat, que ce soit numérique ou analytique, auquel on puisse comparer nos mesure de $\varphi(\alpha_1)$ et de $\lambda_1(\alpha_1)$, on a comparé les résultats obtenus en utilisant deux types d'algorithmes de clonage : la LWD et le rééchantillonnage global de la section 3.2.4. Les deux méthodes donnent des résultats similaires, mais la LWD s'est révélée plus rapide que le rééchantillonnage, pour les raisons exposées dans la section 3.2.4. Par ailleurs, il est assez rassurant que nos simulations soient en accord avec le régime gaussien quand $\alpha_1 \simeq 0$.

4.4 Conclusion LWD

Dans ce chapitre, on a présenté différentes applications de la LWD. Les deux premiers exemples, à savoir le double puits et la chaîne FPU, illustrent bien la capacité de cet algorithme à trouver des trajectoires de chaoticité atypique, et à les stabiliser dans le temps. On a alors utilisé cette propriété pour trouver des trajectoires qui n'avaient jamais été observées dans la chaîne FPU et dont l'existence était à priori hautement improbable, du fait de la tendance des modes de respiration chaotiques à fusionner [3] : des trajectoires contenant plusieurs modes de respiration chaotiques, qui se croisent ou évoluent à quelques sites d'écart.

On a ensuite montré que cet algorithme pouvait être utilisé pour mesurer l'énergie libre dynamique dans des systèmes étendus, que ce soit des systèmes en temps discret comme la chaîne d'applications en forme de tente couplées ou des systèmes en temps continu comme la chaîne FPU. Ces résultats indiquent qu'une étude de la transition de phase dynamique dans ces deux systèmes est réalisable.

Chapitre 5

Fluctuations de l'exposant de Lyapunov maximal dans les systèmes diffusifs

Nous avons présenté dans les deux chapitres précédents une mise en œuvre numérique du formalisme thermodynamique dans des systèmes déterministes, ce qui nous a permis de trouver des trajectoires rares de chaoticité atypique et de mesurer l'énergie libre dynamique. Nous allons maintenant appliquer ce formalisme analytiquement pour calculer l'énergie libre dynamique dans une classe de systèmes étendus stochastiques : les systèmes diffusifs dans la limite macroscopique. Pour cela, nous allons nous appuyer sur l'hydrodynamique fluctuante, qui est une description continue des modèles diffusifs sur réseaux dans la limite de grande taille, et sur les méthodes de théorie des champs, notamment l'intégrale de chemin et la méthode du col.

5.1 Contexte

La physique statistique vise à expliquer les phénomènes macroscopiques (ou collectifs) à partir des propriétés microscopiques (ou individuelles) de chacun des composants du système, si possible avec un ensemble minimal de règles générales. On ne cherche donc pas à décrire chaque occurrence d'un phénomène indépendamment, mais à mettre au jour les ingrédients indispensables à l'apparition et à la caractérisation de ce phénomène. Par exemple, on n'est pas intéressé par trouver un modèle ad hoc rendant compte de toutes les propriétés de l'ébullition de l'eau à une pression donnée, mais ne fonctionnant pas pour une autre pression ou pour un autre liquide. La plupart des phénomènes qui nous entourent sont très complexes, et tout l'art du physicien est de réussir à en extraire leurs ingrédients essentiels. Cela explique le succès de modèles à priori simplistes, comme par exemple le modèle d'Ising [123, 124] pour décrire la transition de phase paramagnétique-ferromagnétique : avec très peu de règles, on peut rendre compte des phénomènes critiques (transition de phase du second ordre) et des brisures spontanées de symétrie.

Par ailleurs, de nombreux systèmes présentent une séparation d'échelles temporelles (modes rapides versus modes lents) ou spatiales. Deux possibilités s'offrent alors à nous : tenir compte de toutes les échelles, ce qui demande généralement une puissance de calcul gigantesque, ou ne tenir compte que de l'échelle qui nous intéresse et moyenniser le comportement sur les autres échelles, ce qui conduit souvent à l'introduction d'un bruit. Par exemple, si on étudie une suspension colloïdale, les colloïdes sont plus grands et se déplacent beaucoup plus lentement que les particules du solvant. On peut donc tenir compte de l'action du solvant (les chocs des molécules de solvant sur les particules colloïdales) en ajoutant un bruit à la force qui s'exerce sur chaque colloïde. C'est pourquoi beaucoup de systèmes peuvent être décrits par des modèles stochastiques.

Ces deux considérations ont assuré le succès des systèmes diffusifs. Il s'agit de modèles stochastiques, soumis à des règles d'évolution simples et qui présentent un mode conservé dont la dynamique moyenne est équivalente à une diffusion, avec ou sans dérive. Ils regroupent aussi bien des modèles de particules sur réseau [125–129] que des particules colloïdales en interaction [130], et permettent de modéliser des phénomènes allant du transport dans les milieux biologiques [131, 132] à la conduction thermique [133], en passant par les flux de piétons [134]. De par leur simplicité et le nombre de situations qu'ils peuvent modéliser, ce sont des modèles de choix pour illustrer les idées de la physique statistique hors d'équilibre. Leur étude peut être relativement simple tant qu'ils sont à l'équilibre, mais elle s'avère extrêmement compliquée dès qu'on les plonge hors d'équilibre en leur imposant une dérive, par exemple en forçant un flux à travers le système en le mettant en contact de réservoirs différents à ses extrémités.

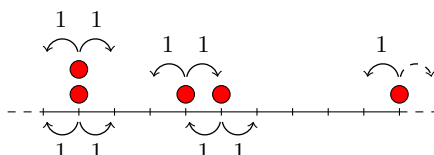
À notre connaissance, les premiers à avoir eu l'idée d'utiliser des opérateurs biaisés pour étudier ce type de systèmes et à avoir fait le lien avec le formalisme thermodynamique sont Derrida et Lebowitz en 1998 [135]. Ils ne biaisaient alors non pas par l'exposant de Lyapunov, mais par le courant. Cette approche a été réutilisée dans la foulée par Kurchan [136], Maes [137], Lebowitz et Spohn [138] pour étendre le théorème de Gallavotti-Cohen [139, 140] au cas des processus markoviens. Le formalisme thermodynamique s'est alors répandu dans la communauté, et est depuis très souvent utilisé pour étudier les systèmes diffusifs, en prenant comme observable le courant [97, 127–129, 141–143], l'activité [93, 144–146] ou l'entropie de Kolmogorov-Sinai [147]. Il n'a cependant jamais été utilisé pour calculer les fluctuations d'exposants de Lyapunov dans ces modèles.

C'est l'objet de ce chapitre, pour une classe de systèmes diffusifs : ceux dont le comportement à l'échelle macroscopique peut être décrit par l'hydrodynamique fluctuante [9, 125, 129, 141, 148, 149]. Ce formalisme rend compte de l'évolution du mode conservé à l'aide d'une équation de continuité et d'un courant stochastique. Couplé aux méthodes de théorie des champs, il s'est révélé très utile pour étudier les fluctuations de diverses observables [145, 150–155]. Nous allons nous placer dans le cas le plus simple, c'est-à-dire sans dérive, et regarder plus précisément trois modèles : les particules libres, le processus d'exclusion simple symétrique (SSEP : *Symmetric Simple Exclusion Process*) et le modèle de conduction thermique de Kipnis-Marchioro-Presutti (KMP). Nous avons choisi ces modèles pour des raisons différentes. Le premier est le modèle le plus simple vu qu'il n'y a aucune interaction entre les particules. Nous pouvions donc espérer que le calcul soit plus facile, ce qui s'est révélé inexact. Le deuxième contient un certain nombre d'ingrédients des suspensions colloïdales (diffusion et exclusion), ce qui est une première étape dans la direction des systèmes vitreux. Enfin, le dernier a des degrés de liberté continus et permet donc de mesurer plus facilement les exposants de Lyapunov dans une simulation numérique. Il sera donc très utile pour vérifier que l'exposant de Lyapunov (et ses fluctuations) calculé à l'aide de l'hydrodynamique fluctuante est cohérent avec son analogue défini dans les modèles microscopiques et mesuré numériquement (voir le chapitre 6).

5.2 Modèles étudiés

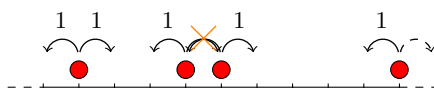
Commençons par présenter les trois modèles que nous allons étudier. Dans ce chapitre et le suivant, on considère des conditions aux limites périodiques (CLP).

5.2.1 Particules libres



On considère N particules effectuant une marche aléatoire symétrique sur une chaîne de longueur L . Chaque site peut contenir plusieurs particules et les particules sautent sur un site voisin avec un taux unité, c'est-à-dire qu'une particule a une probabilité dt de sauter sur un site voisin donné pendant le temps dt .

5.2.2 Processus d'exclusion simple symétrique



Ce sont des particules libres avec de l'exclusion, c'est-à-dire qu'un site est occupé par au plus une particule. Chaque particule peut donc sauter sur un site voisin inoccupé avec un taux unité. Le processus d'exclusion simple symétrique (SSEP) est à la physique statistique hors d'équilibre ce que le modèle d'Ising est aux transitions de phase : il est à la fois suffisamment simple pour qu'on puisse effectuer les calculs dans certains cas et suffisamment riche pour contenir des phénomènes intéressants. Ses variantes (asymétrique, avec exclusion partielle, etc.) servent à illustrer de nombreuses idées de la physique statistique hors d'équilibre.

5.2.3 Modèle de Kipnis-Marchioro-Presutti

Le modèle de Kipnis-Marchioro-Presutti (KMP) a été introduit initialement comme un modèle de conduction thermique dans lequel la loi de Fourier pouvait être démontrée analytiquement [133]. Il s'agit d'une chaîne d'oscillateurs dans laquelle l'énergie est redistribuée selon une loi de probabilité uniforme entre plus proches voisins. On considère une chaîne de L sites, et on attache à chaque site i un degré de liberté continu ε_i qui représente l'énergie de ce site et peut varier dans $[0, +\infty[$. Chaque lien $(j, j+1)$ s'active avec un taux 2 , et redistribue alors l'énergie entre les sites j et $j+1$ uniformément :

$$(\varepsilon_j, \varepsilon_{j+1}) \xrightarrow{\text{taux } 2} (p[\varepsilon_j + \varepsilon_{j+1}], (1-p)[\varepsilon_j + \varepsilon_{j+1}]) \quad (5.1)$$

où p est échantillonné selon une loi uniforme dans $[0, 1]$. Cette évolution conserve l'énergie localement : l'énergie totale est conservée et il ne peut y avoir de transfert d'énergie qu'entre plus proches voisins.

5.3 Hydrodynamique fluctuante

Quand on étudie des phénomènes collectifs, comme la turbulence ou la transition vitreuse, on ne s'intéresse pas au comportement individuel de chaque particule mais au comportement émergent du système. En d'autres termes, on est davantage intéressé par les modes collectifs que par les degrés de liberté microscopiques de notre système. On peut donc adopter une description hydrodynamique, qui rend compte de l'évolution du mode collectif conservé quand la taille du système est grande devant la distance typique entre les particules. Les trois modèles précédents en ont justement une commune, l'hydrodynamique fluctuante. Pour les particules libres et le SSEP, le mode conservé est le nombre de particules alors que dans KMP c'est l'énergie. On note n_i la quantité conservée localement par la dynamique.

On mesure alors les longueurs en unités de la taille du système L et les temps en unités du temps nécessaire à la diffusion pour lisser une fluctuation macroscopique L^2 , ce qui conduit à l'introduction des variables $x = i/L \in [0,1]$ pour décrire la position et $\tau = t/L^2$ pour décrire le temps. La quantité conservée $n_i(t)$ peut alors être remplacée par un champ variant continûment $\rho(x, \tau)$, qui évolue selon une équation de continuité

$$\partial_\tau \rho(x, \tau) + \partial_x j(x, \tau) = 0. \quad (5.2)$$

Le courant $j(x, \tau)$ contient une partie déterministe qui correspond à la loi de Fick et une partie stochastique qui rend compte des fluctuations autour du comportement typique (la diffusion) et qui s'amenuise à mesure que le système devient macroscopique :

$$j(x, \tau) = \underbrace{-D(\rho) \partial_x \rho}_{\text{loi de Fick}} - \underbrace{\sqrt{\frac{\sigma(\rho)}{L}} \xi(x, \tau)}_{\text{fluctuations}} \quad (5.3)$$

avec $\xi(x, \tau)$ un bruit blanc gaussien de variance unité $\langle \xi(x, \tau) \xi(x', \tau') \rangle = \delta(x - x') \delta(\tau - \tau')$. L'équation (5.3) montre l'avantage de remplacer les variables microscopiques par un champ stochastique : le bruit s'annule dans la limite macroscopique ($L \rightarrow +\infty$).

Les fonctions $D(\rho)$ et $\sigma(\rho)$ qui apparaissent dans le courant dépendent du modèle et sont positives.

	Particules libres	SSEP	KMP
$D(\rho)$	1	1	1
$\sigma(\rho)$	2ρ	$2\rho(1 - \rho)$	$2\rho^2$

Elles sont reliés à la distribution d'équilibre par la relation d'Einstein [156, 157]. En effet, si la distribution d'équilibre pour la probabilité d'observer une configuration de densité ρ est $P_{\text{eq}}[\rho] \propto e^{-L\beta f[\rho]}$, où $f[\rho]$ est la fonctionnelle d'énergie libre volumique, alors

$$\frac{2D(\rho)}{\sigma(\rho)} = \beta \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{\delta f}{\delta \rho}. \quad (5.4)$$

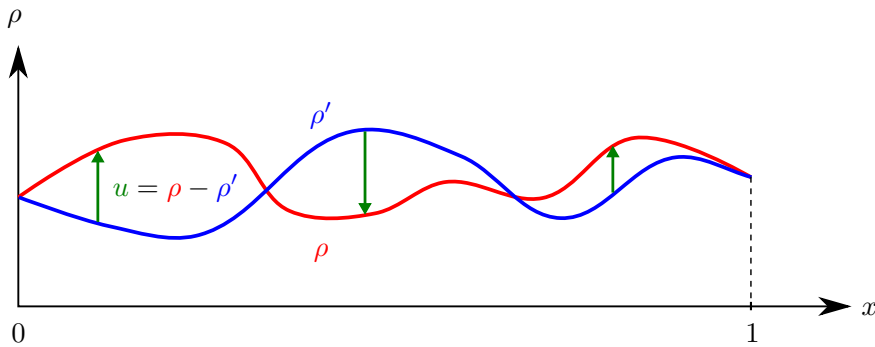
La densité totale étant conservée ici, l'énergie libre volumique n'a qu'une contribution entropique.

Les équations (5.2) et (5.3) sont des équations d'Itô. Mais, du fait de la variance du bruit en $1/L$, la différence entre les discrétisations d'Itô et de Stratonovich est un terme d'ordre $1/L$,

négligeable dans la limite $L \rightarrow +\infty$. On les considérera donc tantôt comme des équations d'Itô (notamment dans la section 5.6 pour appliquer le formalisme de Martin-Siggia-Rose-Janssen-De Dominicis [158–161]), tantôt comme des équations de Stratonovich (notamment dans la section suivante où l'on appliquera les règles usuelles du calcul différentiel et non le lemme d'Itô) de façon un peu cavalière mais correcte à l'ordre qui nous intéresse dans la taille du système.

5.4 Exposant de Lyapunov

On va maintenant calculer le plus grand exposant de Lyapunov associé à la densité. Pour cela, on prend deux profils de densité ρ et ρ' initialement proches et de même densité totale $\rho_0 = \int_0^1 \rho(x, \tau) dx$. On regarde alors comment la différence u entre les deux profils évolue.



Deux choix se présentent alors à nous : appliquer le même bruit aux deux copies du système ou au contraire leur appliquer deux bruits indépendants. Les deux approches ont été utilisées pour définir les exposants de Lyapunov dans les systèmes stochastiques [162–167], mais elles ne sont pas équivalentes. Il faut choisir la plus appropriée en fonction du contexte. Ici, le plus naturel semble de prendre le même bruit pour les deux copies. En effet, on veut décrire avec précision l'espace des phases. La deuxième copie n'est donc pas une copie indépendante mais une petite perturbation de la première, présente dans le but d'explorer l'espace tangent, et il semble donc normal de lui appliquer le même bruit (vu qu'il s'agit du même système). De plus, à terme, on aimerait appliquer cette approche à des systèmes plus réalistes, comme par exemple des suspensions colloïdales. Le bruit est alors dû à l'environnement, et deux copies d'un système devrait avoir le même environnement, donc le même bruit.

Les deux copies ayant le même bruit, la dynamique de la différence u est donnée par la linéarisation de l'équation de continuité (5.2)

$$\partial_\tau u(x, \tau) = A u(x, \tau) \quad (5.5)$$

où A est un opérateur qui s'applique à sa droite et contient une contribution déterministe A_{det} et une contribution stochastique A_{sto}

$$A = \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2} D(\rho)}_{A_{\text{det}}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \frac{\sigma'(\rho)}{2\sqrt{L\sigma(\rho)}}}_{A_{\text{sto}}} \xi \quad (5.6)$$

Le bruit ξ dans cet opérateur est le même que celui dans (5.3) et les opérateurs différentiels $\frac{\partial}{\partial x}$ s'appliquent sur tout ce qui vient à leur droite, donc aussi à u dans l'équation (5.5). La linéarisation est valide quelque soit la nature (Itô ou Stratonovich) de l'équation différentielle stochastique (5.2), et l'équation obtenue (5.5) est régie par la même prescription.

L'exposant de Lyapunov est alors défini, par analogie avec le cas déterministe, comme

$$\lambda(\tau) \equiv \frac{1}{\tau} \ln \frac{\|u(\tau)\|}{\|u(0)\|} \quad \text{avec} \quad \|u(\tau)\|^2 \equiv \int_0^1 u^2(x, \tau) dx. \quad (5.7)$$

Il ne va pas de soi que l'exposant de Lyapunov ainsi défini ait un sens pour le modèle microscopique sous-jacent. En effet, ce n'est pas parce que la densité du système ρ satisfait l'hydrodynamique fluctuante que la différence u entre deux copies du système fait de même. Il pourrait y avoir des subtilités dans le passage à la limite hydrodynamique qui feraient que le passage à la dynamique tangente ne commuterait pas avec le passage à la description hydrodynamique. Cette question sera abordée plus en détail dans le chapitre 6, et nous nous concentrerons sur l'exposant de Lyapunov défini par l'équation (5.7) pour l'instant.

Il nous faut déterminer $\|u(\tau)\|$. On peut déduire son équation d'évolution de (5.5)

$$\partial_\tau \|u(\tau)\| = \|u(\tau)\| \int_0^1 v(y, \tau) A v(y, \tau) dy \quad (5.8)$$

où l'on a introduit le vecteur tangent normalisé $v(x, \tau) = u(x, \tau) / \|u(\tau)\|$, dont l'équation d'évolution est donnée par

$$\partial_\tau v(x, \tau) = A v(x, \tau) - v(x, \tau) \int_0^1 v(y, \tau) A v(y, \tau) dy. \quad (5.9)$$

L'équation (5.8) nous permet d'exprimer l'exposant de Lyapunov comme

$$\lambda(\tau) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx v(x, \tau') A v(x, \tau'). \quad (5.10)$$

Cette formule est l'analogie stochastique de l'équation (3.16), et permet de calculer l'exposant de Lyapunov à partir de l'évolution du vecteur tangent normalisé. L'opérateur A dans cette formule comporte deux contributions, A_{det} déterministe et A_{sto} stochastique. L'exposant de Lyapunov peut donc varier pour deux raisons : l'une, déterministe, due à la dépendance dans les conditions initiales comme dans les systèmes dynamiques, et l'autre, stochastique, provenant du terme de bruit.

5.5 Fonction de partition dynamique

Pour caractériser ces fluctuations, il est pratique d'introduire la fonction génératrice des moments, qui n'est autre que la fonction de partition

$$Z(\alpha, L, \tau) \equiv \langle e^{\alpha L \tau \lambda(\tau)} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} P(\lambda, L, \tau) e^{\alpha L \tau \lambda(\tau)} d\lambda \quad (5.11)$$

et la fonction génératrice des cumulants, qui correspond à l'énergie libre (à temps fini)

$$\varphi(\alpha, L, \tau) \equiv \frac{1}{L\tau} \ln Z(\alpha, L, \tau). \quad (5.12)$$

5.6 Action associée à la fonction de partition

Pour déterminer Z , on va utiliser le formalisme de Martin-Siggia-Rose-Janssen-De Dominicis [158–161] pour l'exprimer sous forme d'une intégrale de chemin, ce qui nous permettra d'utiliser les outils de la théorie des champs pour l'évaluer. La moyenne dans la définition de Z peut se réexprimer comme une moyenne sur les différentes réalisations du bruit

$$Z(\alpha, L, \tau) = \int \mathcal{D}\xi \mathbb{P}[\xi] e^{\alpha L T \lambda[\xi]} \text{ avec } \mathbb{P}[\xi] = \exp \left[- \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \frac{\xi(x, \tau')^2}{2} \right] \quad (5.13)$$

où $\lambda[\xi]$ désigne l'exposant de Lyapunov pour une réalisation donnée du bruit ξ et $\mathbb{P}[\xi]$ est la probabilité gaussienne d'obtenir cette réalisation du bruit. On peut remplacer $\lambda[\xi]$ par l'expression (5.10), à condition de s'assurer que ρ et v dans cette expression évoluent bien avec la bonne équation (et le bon bruit). Ceci peut être fait en incluant leur évolution dans l'intégrale à l'aide d'une distribution de Dirac

$$Z(\alpha, L, \tau) = \int \mathcal{D}[\rho, v, \xi] \mathbb{P}[\xi] e^{\alpha L T \lambda[\xi]} \delta \left[\partial_\tau \rho(x, \tau) + \partial_x j(x, \tau) \right] \\ \times \delta \left[\partial_\tau v(x, \tau) - A v(x, \tau) + v(x, \tau) \int_0^1 v(y, \tau) A v(y, \tau) dy \right]. \quad (5.14)$$

Étant en discrétisation d'Itô, le jacobien associé au changement de variables du bruit vers les trajectoires vaut l'unité (propriété dont la démonstration peut être trouvée dans [159–161]). En utilisant la représentation fonctionnelle de la distribution de Dirac

$$\delta[f] = \int \mathcal{D}\bar{f} \exp \left[\int du \bar{f}(u) f(u) \right], \quad (5.15)$$

où \bar{f} est imaginaire pur et est appelé un champ de réponse, on peut réexprimer l'équation précédente comme

$$Z(\alpha, L, \tau) = \int \mathcal{D}[\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v}, \xi] e^{-\tilde{S}[\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v}, \xi]} \quad (5.16)$$

avec

$$S[\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v}, \xi] = \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \left[\bar{\rho} \partial_{\tau'} \rho + \bar{v} \partial_{\tau'} v + D \partial_x \rho \partial_x \bar{\rho} \right. \\ \left. + [(I - \alpha L)v - \bar{v}] A v + \sqrt{\frac{\sigma}{L}} \partial_x \bar{\rho} \xi + \frac{\xi^2}{2} \right] \quad (5.17)$$

où l'on a posé

$$I(\tau) = \int_0^1 v(x, \tau) \bar{v}(x, \tau) dx \quad (5.18)$$

Pour finir, on effectue l'intégrale gaussienne sur le champ ξ puis les changements de variables $\bar{\rho} \rightarrow L\bar{\rho}$ et $\bar{v} \rightarrow L\bar{v}$. On obtient alors

$$Z(\alpha, L, \tau) = \int \mathcal{D}[\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v}] e^{-L S[\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v}]} \quad (5.19)$$

avec

$$S[\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v}] = \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \left[\bar{\rho} \partial_{\tau'} \rho + \bar{v} \partial_{\tau'} v + D \partial_x \rho \partial_x \bar{\rho} \right. \\ \left. + [(I - \alpha)v - \bar{v}] A_{\det} v - \frac{(j_{\text{sp}} + D \partial_x \rho)^2}{2\sigma} \right]. \quad (5.20)$$

Le courant j_{sp} est défini par

$$j_{\text{sp}}(x, \tau) = -D(\rho) \partial_x \rho + \sigma(\rho) \partial_x \bar{\rho} - \frac{1}{2} \sigma'(\rho) v(x, \tau) \partial_x [(I(t) - \alpha) v(x, \tau) - \bar{v}(x, \tau)] \quad (5.21)$$

et prendra une signification claire dans la suite.

5.7 Méthode du col

Lorsque l'on prend la limite macroscopique, c'est-à-dire $L \rightarrow +\infty$, dans l'équation (5.19), on constate que l'intégrale de chemin est dominée par le minimum de l'action. On peut donc appliquer la méthode du col, connue sous le nom de méthode WKB [168–170] en physique quantique (où $-i/\hbar$ joue le rôle de L), et chercher les expressions des champs qui la minimisent.

Il faut cependant faire attention aux contraintes. En effet, on doit imposer différentes contraintes sur nos champs :

- les conditions aux limites périodiques sur les champs et leur dérivée première
- la densité totale : $\int_0^1 \rho(x, \tau) dx = \rho_0$
- le champ tangent a une densité totale nulle : $\int_0^1 v(x, \tau) dx = 0$
- le champ tangent est de norme unité : $\int_0^1 v(x, \tau)^2 dx = 1$

La plupart des contraintes peuvent être appliquées a posteriori aux solutions minimisant l'action, mais certaines doivent être intégrées en amont. En effet, il peut arriver que tous les minima de l'action satisfaisant les contraintes soient également des minima de l'action non contrainte. Dans ce cas, on peut minimiser l'action puis inclure les contraintes après coup, et la solution obtenue est un minimum global de l'action. En revanche, si le minimum sous contrainte n'est pas un minimum de l'action non contrainte, il faut tenir compte des contraintes dans la procédure de minimisation en effectuant une minimisation sous contraintes. On obtient alors un ensemble de champs qui minimisent l'action en respectant les contraintes imposées. Cette solution est le minimum de l'action dans l'ensemble des trajectoires qui satisfont les contraintes, mais n'est pas forcément un minimum (global ni même local) de l'action non contrainte. Quand les contraintes sont des égalités, une manière simple de les prendre en compte est d'ajouter un multiplicateur de Lagrange par contrainte. Ici seule la contrainte sur la densité totale pose problème (il faut faire le calcul sans en tenir compte pour le voir). On va donc ajouter un multiplicateur de Lagrange γ , et minimiser la fonctionnelle

$$\mathcal{S} = S + \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \gamma(\tau') [\rho(x, \tau') - \rho_0]. \quad (5.22)$$

Pour cela, il faut annuler ses dérivées par rapport aux différents champs, qui sont données par

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \bar{\rho}} = \partial_\tau \rho + \partial_x j_{\text{sp}} \quad (5.23)$$

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \bar{v}} = \partial_\tau v - A_{\text{sp}} v + v \int_0^1 v A_{\text{sp}} v \, dy \quad (5.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \rho} = & -\partial_\tau \bar{\rho} - \partial_x (D \partial_x \bar{\rho}) + D' v \partial_x^2 [(I - \alpha)v - \bar{v}] + \frac{\sigma'}{2\sigma^2} (j_{\text{sp}} + D \partial_x \rho)^2 \\ & - \left(\sigma' \partial_x \bar{\rho} - \frac{1}{2} \sigma'' v \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] \right) \frac{j + D \partial_x \rho}{\sigma} + \gamma \end{aligned} \quad (5.25)$$

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta v} = -\partial_\tau \bar{v} + (I - \alpha) A v + \bar{v} \int_0^1 v A v \, dy + \left[D \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\sigma'}{2\sigma} (j_{\text{sp}} + D \partial_x \rho) \right] \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] \quad (5.26)$$

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \gamma} = \int_0^1 \rho(x, \tau) \, dx - \rho_0 \quad (5.27)$$

où l'on a défini

$$\xi_{\text{sp}} = \frac{\sigma'}{2\sqrt{\sigma}} v \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] - \sqrt{\sigma} \partial_x \bar{\rho} \quad (5.28)$$

$$j_{\text{sp}} = -D \partial_x \rho - \sqrt{\sigma} \xi_{\text{sp}} \quad (5.29)$$

$$A_{\text{sp}} = A_{\text{det}} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\sigma'}{2\sqrt{\sigma}} \xi_{\text{sp}} \quad (5.30)$$

pour bien voir la structure commune entre les équations de départ et les équations de col. On annule maintenant ces dérivées et on obtient les équations de col :

$$\partial_\tau \rho = -\partial_x j_{\text{sp}} \quad (5.31)$$

$$\partial_\tau v = A_{\text{sp}} v - v \int_0^1 v A_{\text{sp}} v \, dy \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} \partial_\tau \bar{\rho} = & -\partial_x (D \partial_x \bar{\rho}) + D' v \partial_x^2 [(I - \alpha)v - \bar{v}] + \frac{\sigma'}{2\sigma^2} (j_{\text{sp}} + D \partial_x \rho)^2 \\ & - \left(\sigma' \partial_x \bar{\rho} - \frac{1}{2} \sigma'' v \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] \right) \frac{j + D \partial_x \rho}{\sigma} + \gamma \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\partial_\tau \bar{v} = (I - \alpha) A_{\text{sp}} v + \bar{v} \int_0^1 v A_{\text{sp}} v \, dy + \left[D \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\sigma'}{2\sigma} (j_{\text{sp}} + D \partial_x \rho) \right] \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] \quad (5.34)$$

$$\rho_0 = \int_0^1 \rho(x, \tau) \, dx \quad (5.35)$$

On peut remarquer que les équations (5.29), (5.30), (5.31) et (5.32) ont respectivement la même structure que les équations (5.3), (5.5), (5.2) et (5.9), ce qui était prévisible. En effet, le formalisme de Martin-Siggia-Rose-Janssen-De Dominicis remplace le bruit en introduisant des champs de réponse ($\bar{\rho}$ et \bar{v} ici), qui rendent alors compte de son effet. La méthode du col isole quant à elle les trajectoires typiques, c'est-à-dire les trajectoires qui dominent la mesure de probabilité canonique. Il est donc normal que ces trajectoires obéissent aux équations de départ, où le bruit a été remplacé par une fonction des autres champs (5.28). Résoudre les équations sur les champs de réponse revient donc à trouver les réalisations du bruit qui permettent de réaliser une déviation donnée. Cette approche est équivalente à la *Macroscopic Fluctuation Theory* développée par Bertini, De Sole, Gabrielli, Jona-Lasinio et Landim [129, 141, 148, 149].

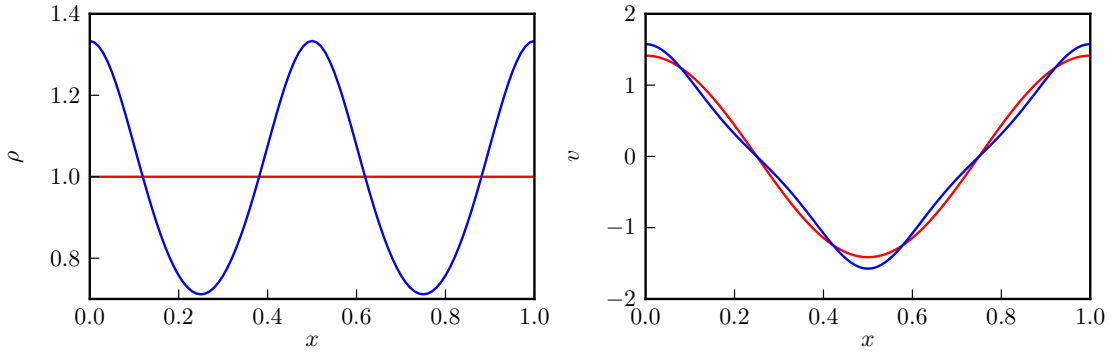


Figure 5.1 – Profil d'énergie $\rho(x)$ et vecteur tangent $v(x)$ du modèle KMP avec $\rho_0 = 1$ pour $\alpha = 0$ (cas typique, en rouge) et pour $\alpha = 0,4$ (exposant de Lyapunov 25% plus grand que dans le cas typique, en bleu, $\rho(x)$ s'éloigne fortement de l'uniformité). Ces profils sont les solutions des équations de col qui minimisent l'action pour les valeurs de α données.

5.8 Résultats

Les équations de col sont des équations différentielles partielles non linéaires et non locales couplées. Pour les résoudre, nous devons donc conjecturer quelques propriétés plausibles de leur solution. En premier lieu, nous avons supposé le col stationnaire. Puis nous avons utilisé la connaissance de la solution de ces équations en $\alpha = 0$ pour les résoudre perturbativement en α . En $\alpha = 0$, c'est-à-dire dans le cas non biaisé, on s'attend à ce que les trajectoires dominantes soient celles associées au terme déterministe, donc celles correspondant à la diffusion. En régime stationnaire, la solution pour ρ en $\alpha = 0$ est donc uniforme. On obtient alors, dans le cas $\alpha \geq 0$ (voir l'annexe E pour le détail de la résolution perturbative)

$$\varphi(\alpha) = -4\pi^2 D(\rho_0) \alpha \left[1 - \frac{\alpha \kappa'(\rho_0)^2}{8 \kappa(\rho_0)} + \mathcal{O}(\alpha^2) \right] \quad (5.36)$$

où $\kappa(\rho) \equiv \frac{\sigma(\rho)}{2D(\rho)}$ est proportionnelle à la compressibilité isotherme $\beta\rho^2\kappa(\rho)$.

De plus, cette approche nous donne accès aux profils typiques des champs conduisant à un exposant de Lyapunov anormalement grand, qui ne sont autres que les champs minimisant l'action pour un α donné (voir la figure 5.1). Plus précisément, l'action (5.20) représente la mesure canonique dans l'espace des trajectoires et peut être utilisée pour exprimer la moyenne par rapport à la mesure canonique d'une fonction de ρ et de v au temps τ sous la forme d'une intégrale de chemin

$$\langle F(\rho, v) \rangle_{\text{can}} = \int \mathcal{D}[\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v}] F(\rho, v) e^{-LS[\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v}]}. \quad (5.37)$$

Les champs ρ et v qui minimisent l'action pour un α donné correspondent donc aux trajectoires qui dominent exponentiellement la mesure canonique pour ce même α , c'est-à-dire aux trajectoires typiques d'exposant de Lyapunov $\lambda(\alpha) = \varphi'(\alpha)$.

La résolution pourrait être poussée à un ordre arbitraire avec une puissance de calcul infinie. On s'est limité à l'ordre 2 dans le cas général, qui prend alors une forme assez simple. On a poussé le calcul jusqu'à l'ordre 5 dans le cas $D(\rho) = 1$, qui correspond aux trois modèles qui

nous intéressent. On obtient alors, toujours pour $\alpha \geq 0$,

$$\begin{aligned} \varphi(\alpha) = & -4\pi^2\alpha + \frac{\pi^2 \sigma'(\rho_0)^2 \alpha^2}{2\sigma(\rho_0)} - \frac{9\pi^2 \sigma'(\rho_0)^4 \alpha^3}{2^6 \sigma(\rho_0)^2 3!} \\ & + \frac{3\pi^2(55\sigma'(\rho_0)^6 - 72\sigma(\rho_0)\sigma'(\rho_0)^4\sigma''(\rho_0) + 8\sigma(\rho_0)^2\sigma'(\rho_0)^2\sigma''(\rho_0)^2 + 32\sigma(\rho_0)^2\sigma'(\rho_0)^3\sigma'''(\rho_0))\alpha^4}{2^{10}\sigma(\rho_0)^3 4!} \\ & - \frac{15\pi^2(309\sigma'(\rho_0)^8 - 512\sigma(\rho_0)\sigma'(\rho_0)^6\sigma''(\rho_0) + 256\sigma(\rho_0)^2\sigma'(\rho_0)^5\sigma'''(\rho_0))\alpha^5}{2^{16}\sigma'(\rho_0)^4 5!} + \mathcal{O}(\alpha^6). \end{aligned} \quad (5.38)$$

Si les trois premiers ordres laissaient espérer l'existence d'une forme générique simple pour les coefficients d'ordre quelconque en α , les ordres 4 et 5 montrent qu'elle n'est peut-être pas si intuitive qu'elle en avait l'air. En effet, les premiers ordres suggèrent que l'énergie libre dynamique peut s'exprimer sous la forme

$$\varphi(\alpha) = -4\pi^2\alpha \mathcal{F}\left(\frac{\sigma'(\rho_0)^2}{\sigma(\rho_0)}\alpha\right) \text{ avec } \mathcal{F}(x) = 1 - \frac{1}{8}x + \frac{9}{256}x^2 + \mathcal{O}_{x \rightarrow 0}(x^3), \quad (5.39)$$

mais l'apparition de $\sigma''(\rho_0)$ et de $\sigma'''(\rho_0)$ dans les ordres supérieurs invalide cette hypothèse.

Dans le cas $\alpha < 0$, on aurait $\varphi(\alpha) = -\pi^2 L^2 \alpha + \mathcal{O}(\alpha^2)$ sur un réseau de pas unité. Lors de ce calcul, on se heurte à l'aspect discret du réseau (voir la section 5.9.2 et l'annexe E pour plus de détails), et l'hydrodynamique fluctuante n'est donc plus valide. Cela semble indiquer que les solutions anormalement stables ne sont pas correctement décrites par l'hydrodynamique fluctuante. En effet, les solutions pour v associées à cette énergie libre sont, à l'ordre le plus bas en α , des sinusoides de fréquence $L/2$, en contradiction dans la limite $L \rightarrow +\infty$ avec un champ variant continûment.

On a donc mis en évidence ici une limitation à l'utilisation de l'hydrodynamique fluctuante pour calculer les exposants de Lyapunov dans les systèmes diffusifs : les trajectoires anormalement stables ne sont pas correctement décrites par cette dernière.

5.9 Cas particulier du SSEP en $\rho_0 = 1/2$

Si l'on regarde l'équation (5.38), on constate que $\sigma'(\rho_0)$ est en préfacteur de toutes les corrections au terme dominant que nous avons calculées. Donc toutes ces corrections s'annulent si $\sigma'(\rho_0) = 0$. C'est notamment le cas pour le SSEP en $\rho_0 = 1/2$. Plus généralement, on peut montrer qu'une solution stationnaire de densité uniforme est solution des équations de col pour un modèle avec $D(\rho) = 1$ et $\sigma'(\rho_0) = 0$. C'est l'objet de cette section.

5.9.1 Col stationnaire et uniforme

On va chercher une solution stationnaire et uniforme ($\forall x, \rho(x) = \rho_0$) aux équations de col pour un modèle avec $D(\rho) = 1$. On notera $\sigma_0 \equiv \sigma(\rho_0)$, $\sigma'_0 \equiv \sigma'(\rho_0)$ et $\sigma''_0 \equiv \sigma''(\rho_0)$. Le col étant stationnaire, l'équation (5.31) impose au courant j_{sp} d'être une constante J . L'équation de col (5.32) peut alors se réécrire

$$\partial_x^2 v - \frac{\sigma'_0}{\sigma_0} \frac{J}{2} \partial_x v + \Omega^2 v = 0 \quad (5.40)$$

avec

$$\Omega^2 = - \int_0^1 dy v(y) A_{\text{sp}} v(y). \quad (5.41)$$

La seule solution acceptable pour cette équation différentielle est une sinusoïde non amortie. En effet, la seule solution non sinusoïdale (somme d'exponentielles ou produit de fonction affine et exponentielle) qui vérifie les conditions aux limites périodiques est la fonction nulle, or la contrainte $\int_0^1 v^2(x) dx = 1$ l'interdit. De plus, la sinusoïde ne peut pas être amortie car il est dans ce cas-là impossible de respecter la condition $\int_0^1 v(x) dx = 0$. Cela impose

$$\frac{\sigma'_0 J}{\sigma_0 2} = 0 \quad (5.42)$$

et

$$v(x) = \sqrt{2} \cos(2\pi n x + \phi) \quad (5.43)$$

où la contrainte de normalisation a fixé le préfacteur $\sqrt{2}$ et les conditions aux limites périodiques ont imposé la pulsation $\Omega = 2\pi n$ avec $n \in \mathbb{Z}^*$.

En intégrant la définition du courant (5.29) pour x allant de 0 à 1, on obtient

$$J = -\frac{\sigma'_0}{2} \int_0^1 v(x) \partial_x [(I - \alpha)v(x) - \bar{v}(x)] dx. \quad (5.44)$$

Cela permet de déduire de (5.42) que $J = 0$. En effet, (5.42) impose $J = 0$ ou $\sigma'_0 = 0$, mais $\sigma'_0 = 0$ implique $J = 0$ d'après (5.44).

En intégrant maintenant (5.33) sur le même domaine, on arrive à

$$\gamma = -\frac{\sigma'_0 J^2}{\sigma_0^2 2} + \left(\sigma'_0 \partial_x \bar{\rho} + \frac{\sigma''_0}{2} v \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] \right) \frac{J}{\sigma_0}, \quad (5.45)$$

qui peut se réécrire

$$\gamma = J^2 \left(\frac{\sigma''(0)}{\sigma'_0} - \frac{\sigma'_0}{2\sigma_0^2} \right) \quad (5.46)$$

en utilisant (5.44) et qui impose donc $\gamma = 0$. On peut alors résoudre (5.33) qui se réduit à $\partial_x^2 \bar{\rho} = 0$ et montrer que $\bar{\rho}$ est uniforme en utilisant les conditions aux limites périodiques. Seule sa dérivée première apparaît dans les équations de col et dans l'action si le col est stationnaire. On n'est donc pas intéressé par $\bar{\rho}$, mais uniquement par sa dérivée, qui est nulle : $\partial_x \bar{\rho} = 0$.

Il nous reste à résoudre (5.34)

$$\partial_x^2 \bar{v} + 4\pi^2 n^2 \bar{v} = -8\pi^2 n^2 (I - \alpha)v. \quad (5.47)$$

Un ansatz de la forme $\bar{v}(x) = k \cos(2\pi n x + \phi')$ est solution si $I = \int_0^1 dx \bar{v}(x) v(x) = \alpha$, ce qui impose $k = \alpha \sqrt{2} / \cos(\phi - \phi')$.

Pour finir, la définition du courant (5.29) impose $\alpha = 0$ ou $\sigma'_0 = 0$. On peut alors vérifier que la condition de quantification de la pulsation $\Omega = 2\pi n$ avec $n \in \mathbb{Z}^*$ est bien compatible avec sa définition (5.41).

5.9.2 Récapitulatif

On vient de montrer que la seule solution pour avoir un col stationnaire et homogène (en espace pour ρ) si $\sigma'_0 \neq 0$ est d'avoir $\alpha = 0$. Dans ce cas-là, la solution des équations de col est :

$$\rho = \rho_0 \quad (5.48)$$

$$v = \sqrt{2} \cos(2\pi n x + \phi) \quad (5.49)$$

$$\partial_x \bar{\rho} = 0 \quad (5.50)$$

$$\bar{v} = 0 \quad (5.51)$$

$$\gamma = 0 \quad (5.52)$$

et la fonction de grande déviation associée vaut trivialement $\varphi(0) = 0$.

Si $\sigma'_0 = 0$, on peut vérifier facilement que les solutions obtenues à la section précédente

$$\rho = \rho_0 \quad (5.53)$$

$$v = \sqrt{2} \cos(2\pi n x + \phi) \quad (5.54)$$

$$\partial_x \bar{\rho} = 0 \quad (5.55)$$

$$\bar{v} = \alpha \sqrt{2} \left[\cos(2\pi n x + \phi) + \tan(\phi - \phi') \sin(2\pi n x + \phi) \right] \quad (5.56)$$

$$\gamma = 0 \quad (5.57)$$

sont bien solutions des équations de col pour tout α . L'action associée vaut alors $S_c = 4\pi^2 n^2 \alpha t$.

Pour $\alpha < 0$, on rencontre le problème mentionné à la fin de la section 5.8 : on peut rendre l'action aussi petite que l'on veut, en faisant tendre n vers l'infini. En réalité, du fait du réseau discret sous-jacent, n ne peut varier que dans $\llbracket -L/2, L/2 \rrbracket$, et la valeur de n qui minimise l'action est $\pm L/2$. On se heurte alors aux détails du réseau et l'hydrodynamique fluctuante, qui suppose une description du système indépendante de ces détails, n'est plus valide. L'énergie libre dynamique associée vaut $\varphi = -\pi^2 L^2 \alpha$, mais n'est pas à priori correcte.

En revanche, pour $\alpha > 0$, la condition de minimisation de l'action impose $n = 1$, et on a alors

$$\sigma'(\rho_0) = 0 \implies \forall \alpha \geq 0, \varphi(\alpha) = -4\pi^2 \alpha \quad (5.58)$$

Ce résultat est indépendant du modèle tant que $D(\rho) = 1$. L'exposant de Lyapunov moyen vaut alors $\langle \lambda \rangle = -4\pi^2$ et ses fluctuations sont nulles (tous les cumulants d'ordre supérieur ou égal à deux sont nuls). En réalité, ses fluctuations ne sont sans doute pas strictement nulles mais d'ordre plus faible en la taille du système L . Pour y accéder, il faudrait calculer les fluctuations autour du col, en effectuant un développement quadratique autour du col et en effectuant l'intégrale gaussienne ainsi obtenue. Nous présentons le principe de ce calcul dans la section suivante.

Ce résultat est généralisable au cas où $D(\rho)$ n'est pas constant à condition que $D'(\rho_0) = 1$. Les champs au col ont alors la même expression et la fonction génératrice des cumulants vérifie

$$\begin{cases} D'(\rho_0) = 1 \\ \sigma'(\rho_0) = 0 \end{cases} \implies \forall \alpha \geq 0, \varphi(\alpha) = -4\pi^2 D(\rho_0) \alpha. \quad (5.59)$$

5.9.3 Fluctuations au voisinage du col

On perturbe les solutions au col $\rho_c, \bar{\rho}_c, v_c, \bar{v}_c$ avec un terme d'ordre $\varepsilon \ll 1$

$$\rho = \rho_c + \varepsilon \rho_p \quad (5.60)$$

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}_c + \varepsilon \bar{\rho}_p \quad (5.61)$$

$$v = v_c + \varepsilon v_p \quad (5.62)$$

$$\bar{v} = \bar{v}_c + \varepsilon \bar{v}_p \quad (5.63)$$

Pour rendre les calculs plus clairs et concis, nous noterons $r = (x, \tau)$, $\psi = (\rho, \bar{\rho}, v, \bar{v})$, $\psi_c = (\rho_c, \bar{\rho}_c, v_c, \bar{v}_c)$ et $\psi_p = (\rho_p, \bar{\rho}_p, v_p, \bar{v}_p)$. On peut exprimer l'action au voisinage du col en utilisant le développement de Taylor

$$S[\psi] = S_c + \varepsilon \int dr S'_c(r) \psi_p(r) + \frac{\varepsilon^2}{2} \iint dr dr' \psi_p(r') S''_c(r, r') \psi_p(r) + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad (5.64)$$

où l'on a posé

$$S_c \equiv S[\psi_c] \quad (5.65)$$

$$S'_c(r) \equiv \left. \frac{\delta S}{\delta \psi(r)} \right|_{\psi_c(r)} \quad (5.66)$$

$$S''_c(r, r') \equiv \left. \frac{\delta^2 S}{\delta \psi(r) \delta \psi'(r')} \right|_{\psi=\psi_c(r), \psi'(r')=\psi'_c(r')} \quad (5.67)$$

pour l'action, son opérateur jacobien et son opérateur hessien évalués au col. Par définition du col, $S'_c = 0$. On peut alors calculer l'intégrale gaussienne

$$Z(\alpha, L, \tau) = \int \mathcal{D}\psi \exp \left[-L \left(S_c + \frac{\varepsilon^2}{2} \iint dr dr' \psi_p(r') S''_c(r, r') \psi_p(r) \right) \right] \quad (5.68)$$

qui conduit à

$$Z(\alpha, L, \tau) \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \exp \left[-LS_c + \frac{1}{2} \ln \det S''_c \right]. \quad (5.69)$$

Les fluctuations de la fonction génératrice des cumulants sont donc données par le déterminant de l'opérateur hessien de l'action au col et sont d'ordre $1/L$. Pour les calculer, il faudrait diagonaliser l'opérateur hessien pour pouvoir exprimer son déterminant, et nous comptons étudier plus en détail ces fluctuations dans le futur.

5.9.4 Perspectives

La situation $D(\rho) = 1$ et $\sigma'(\rho_0) = 0$ est rencontrée dans le SSEP en $\rho_0 = 1/2$, c'est-à-dire pour un système avec autant de particules que de trous. On connaît alors une solution des équations de col pour tout α , et on peut évaluer l'énergie libre dynamique pour tout α négatif. De plus, on a accès aux premiers cumulants de λ au travers de (5.38). Cela évoque le calcul de l'énergie libre dynamique associée au courant dans le SSEP avec deux réservoirs imposant des densités différentes ρ_a et ρ_b aux bords par Derrida, Douçot et Roche [127].

En effet, ils ont montré que l'énergie libre μ (c'est-à-dire la fonction génératrice des cumulants) ne dépendait que d'une combinaison précise des données du problème ω et se mettait donc sous la forme

$$\mu(z) = \frac{1}{N} R(\omega) \quad \text{avec} \quad \omega = \frac{(z-1)(\rho_a z - \rho_b - \rho_a \rho_b (z-1))}{z} \quad (5.70)$$

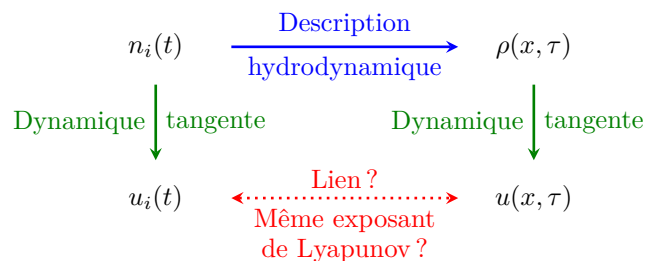
où R était une fonction qu'ils voulaient déterminer. Ils l'ont ensuite calculée à l'ordre 4 en déterminant les 4 premiers cumulants, et ont remarqué qu'en $\rho_a = \rho_b = 1/2$, le quatrième cumulant s'annulait. Ils ont alors conjecturé que tous les cumulants d'ordre supérieur à 4 étaient nuls, et en ont déduit l'expression de la fonction R , donc tous les cumulants pour ρ_a et ρ_b quelconques.

Nous aimerions pouvoir suivre une approche similaire ici, mais nous n'avons pas trouvé le comportement de la fonction génératrice des cumulants avec les différents paramètres du problème, et n'avons donc pas pu identifier l'analogue de ω . Nous pensions que $\frac{\sigma'(\rho_0)^2}{\sigma(\rho_0)}\alpha$ était un bon candidat en regardant les premiers cumulants, mais les cumulants suivants ont invalidé cette hypothèse.

Chapitre 6

Applications aux modèles microscopiques

Dans le chapitre précédent, nous avons calculé les premiers cumulants du plus grand exposant de Lyapunov, au travers de la fonction génératrice des cumulants, pour une certaine classe de modèles. Pour cela, nous avons utilisé une description hydrodynamique de ces modèles en nous plaçant à une échelle macroscopique. Or cette description a été développée pour décrire l'évolution de la densité (de particules ou d'énergie) dans ces modèles. Il n'est donc pas assuré qu'elle décrive correctement la dynamique tangente, et donc à fortiori l'exposant de Lyapunov.



De plus, nous avons émis un certain nombre d'hypothèses au cours de notre calcul (loi d'échelle des champs de réponse, col stationnaire, etc.) et nous n'avons décrit qu'un pan de l'énergie libre dynamique ($\alpha \geq 0$). Il faut donc maintenant faire le lien avec les modèles microscopiques et vérifier que les résultats obtenus à l'échelle macroscopique sont bien en accord avec les quantités mesurées à l'échelle microscopique. C'est l'objet de ce chapitre.

Nous commencerons par donner une définition du plus grand exposant de Lyapunov dans les modèles sur réseau, qui évoquera la propagation de défauts. Puis nous montrerons que les fluctuations associées à cette définition sont en accord avec celles calculées à l'échelle macroscopique en utilisant l'hydrodynamique fluctuante dans le modèle de conduction thermique de KMP. Pour finir, nous verrons comment ces résultats appliqués au SSEP permettent d'obtenir de nouvelles

prédictions sur le processus de réaction-diffusion d'annihilation de paires en taille finie, à l'aide d'une équivalence qui semble facilement généralisable à tous les processus de particules sur réseau. Nous confirmerons ces prédictions avec une simulation numérique. Dans tout ce chapitre, nous considérons des conditions aux limites périodiques.

6.1 Exposant de Lyapunov dans les processus sur réseau

Avant de pouvoir comparer les résultats obtenus en utilisant l'hydrodynamique fluctuante aux fluctuations des exposants de Lyapunov dans les modèles microscopiques, il faut définir les exposants de Lyapunov dans ces derniers. Or il n'existe pas, à notre connaissance, de définition des exposants de Lyapunov dans les systèmes sur réseau définis par une équation maîtresse. Nous allons maintenant en proposer une, par analogie avec la définition utilisée dans l'hydrodynamique fluctuante.

6.1.1 Problème de la définition de la dynamique jointe

Considérons un modèle décrit par l'équation maîtresse

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', t) - r(\mathcal{C}) P(\mathcal{C}, t) \quad (6.1)$$

où $P(\mathcal{C}, t)$ représente la probabilité d'observer la configuration \mathcal{C} à l'instant t , $W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})$ est le taux de transition de l'état \mathcal{C}' à l'état \mathcal{C} et $r(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ est le taux d'échappement de l'état \mathcal{C} .

Pour définir l'exposant de Lyapunov par analogie avec l'hydrodynamique fluctuante, nous allons considérer deux configurations initiales proches, les laisser évoluer avec la même dynamique et mesurer à quelle vitesse ces deux configurations divergent ou au contraire convergent l'une vers l'autre. Mais pour faire cela, il faut définir précisément ce qu'on entend par « la même dynamique ». Les deux copies représentant le même processus, on doit bien évidemment prendre les mêmes taux de transition W , mais cela n'est pas suffisant pour définir de façon univoque la dynamique jointe des deux copies de notre système. Faut-il utiliser la même séquence de nombres aléatoires pour les deux copies ? Doit-on au contraire leur appliquer des sources de hasard complètement indépendantes ? Ou un mélange des deux ?

Plus généralement, ce problème de la définition de la dynamique jointe est omniprésent dès qu'on s'intéresse aux exposants de Lyapunov dans les systèmes stochastiques [163, 164], et dans le chapitre précédent nous avons fait le choix d'appliquer le même bruit aux deux copies de notre système pour des raisons physiques. Il convient donc de faire la même chose ici, en appliquant la même source de hasard à nos deux systèmes. La façon de le faire n'est pas unique, et il faut discuter au cas par cas de ce que l'on entend par « le même bruit ». Alors que la réponse sera assez évidente dans le cas de KMP (section 6.2), cette discussion prendra tout son sens lors de l'étude du SSEP dans la section 6.3.

Au-delà du choix entre appliquer le même bruit ou des bruits indépendants, la difficulté de définir ce qu'on appelle « le même bruit » peut s'illustrer sur un exemple simple : une particule brownienne soumise à un bruit de variance $2D$. Cet exemple est développé en détail dans l'annexe F, et la présentation sera plus rapide ici.

La façon la plus simple de décrire cette situation est de considérer que le bruit est intrinsèque à la particule. On peut alors décrire le mouvement de cette particule en considérant que sa position $r(t)$ évolue selon

$$\dot{r} = \eta(t) \quad (6.2)$$

avec $\eta(t)$ un bruit blanc gaussien de corrélations $\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2D \delta(t - t')$. Dans ce cas, si on considère que l'exposant de Lyapunov est défini comme précédemment, à savoir en recourant à une même réalisation du bruit dans les deux copies, il est évident que $\lambda = 0$.

Une autre façon de rendre compte de ce mouvement est de considérer que le bruit est dû à l'environnement. On peut par exemple penser à un colloïde dans un solvant. La particule est alors soumise à un champ de bruit $\chi(x, t)$, qui provient des collisions du colloïde avec les particules du solvant, et dont la valeur dépend de la position de l'espace en plus de dépendre du temps. Dans ce cas, on peut modéliser ce système par

$$\dot{r} = \chi(r(t), t) \quad (6.3)$$

avec $\chi(x, t)$ un bruit blanc gaussien de corrélations $\langle \chi(x, t) \chi(x', t') \rangle = 2D C(x - x') \delta(t - t')$. Pour que le déplacement quadratique moyen de la particule soit le même que dans la situation précédente, il faut que $C(0) = 1$. De plus, pour respecter l'isotropie de l'espace, $C(x)$ doit être paire, ce qui implique $C'(0) = 0$ si on suppose C analytique. On s'attend aussi à ce que la fonction de corrélation spatiale $C(x)$ soit maximale en $x = 0$, et décroisse à mesure que $|x|$ augmente, ce qui impose $C''(0) \leq 0$, qu'on écrira sous la forme $C''(0) = -1/\ell^2$. On peut alors montrer (voir l'annexe F pour le détail du calcul) :

$$P(\lambda, t) = \sqrt{\frac{t\ell^2}{4\pi D}} \exp \left[-\frac{t\ell^2}{4D} \left(\lambda + \frac{D}{\ell^2} \right)^2 \right] \quad (6.4)$$

L'exposant de Lyapunov dépend maintenant de la prescription exacte du bruit, au travers de ℓ^2 et n'est plus nul en permanence, ni même en moyenne, vu que $\langle \lambda \rangle = -D/\ell^2$. Ce résultat est cohérent avec le précédent, qui revient à appliquer le même bruit en tout point de l'espace ($\forall x, C(x) = 1$ donc $\ell = +\infty$). En effet, $P(\lambda, t) \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \delta(\lambda)$.

On constate donc que la nature du bruit modifie complètement la dynamique tangente, tout en laissant la dynamique du système inchangée. Un choix qui n'avait aucune influence pour la dynamique d'une seule copie du système se révèle avoir de profondes conséquences physiques quand on s'intéresse à la différence entre deux copies. Il convient donc d'être particulièrement vigilant dans la suite lors de la définition de la dynamique jointe de deux copies d'un système.

6.1.2 Définition de l'exposant de Lyapunov

Le système étant sur réseau, on peut décrire l'état \mathcal{C} du système à l'aide d'une variable n_i par site i : $\mathcal{C} = (n_1, \dots, n_L)$. Par souci de simplicité, nous supposons que les variables n_i sont scalaires.

On considère deux configurations initiales proches $\mathcal{C}^A(0)$ et $\mathcal{C}^B(0)$ de ce système. Pour donner un sens précis à « proches », il nous faut définir la différence \mathbf{u} entre les copies A et B de ce système

$$\mathbf{u}(t) = \mathcal{C}^A(t) - \mathcal{C}^B(t) = \left(n_1^A(t) - n_1^B(t), \dots, n_L^A(t) - n_L^B(t) \right) \quad (6.5)$$

et la distance $\|\mathbf{u}\|$ entre ces deux copies. Sauf mention contraire, nous prendrons la norme 2 pour la norme $\|\cdot\|$

$$\|\mathbf{u}(t)\| = \left(\sum_{i=1}^L u_i^2(t) \right)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^L |n_i^A(t) - n_i^B(t)|^2 \right)^{1/2}. \quad (6.6)$$

On choisit donc nos deux conditions initiales telles que $\|\mathbf{u}(0)\| \ll \|\mathcal{C}^A(0)\|$. On peut alors laisser nos deux conditions initiales, qui correspondent à deux copies d'un même système, évoluer avec le « même bruit » et mesurer comment la distance entre nos deux copies varie. On définit alors l'exposant de Lyapunov $\tilde{\lambda}(t)$ par analogie avec l'hydrodynamique fluctuante comme

$$\tilde{\lambda}(t) = \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{u}(t)\|}{\|\mathbf{u}(0)\|}. \quad (6.7)$$

Il s'agit à priori de la même quantité que celle définie dans l'hydrodynamique fluctuante, à un facteur de normalisation près (dû à la relation entre t et τ).

6.1.3 Lien avec la propagation de défauts

Cette définition évoque la problématique de la propagation de défauts [171–186], appelée *damage spreading* en anglais. En effet, cette dernière étudie l'évolution temporelle d'un défaut spatial, c'est-à-dire d'une petite différence entre deux copies initialement proches du même système, et se demande si cette impureté se répand ou s'évanouit (voir la figure 6.1 pour une illustration sur un modèle de spins). Avec l'exposant de Lyapunov, on quantifie en plus la rapidité à laquelle ce défaut s'estompe ou au contraire modifie complètement l'évolution future. Ce lien entre propagation de défauts et exposant de Lyapunov avait déjà été remarqué pour les automates cellulaires [180], mais n'avait pas été exploré davantage pour les systèmes markoviens.

Au début de ce champ de recherche, les premières études numériques [173, 175–179, 182, 184], qui utilisaient la même suite de nombres aléatoires pour les deux copies, ont obtenu des résultats contradictoires qui dépendaient de l'algorithme exact utilisé. Par exemple, on obtient des résultats différents en utilisant une dynamique de *heat bath* ou de Metropolis dans le modèle d'Ising bidimensionnel [178, 181, 185], alors que ces dynamiques respectent le bilan détaillé pour la mesure canonique et sont donc des dynamiques acceptables pour décrire la dynamique du modèle d'Ising en contact avec un thermostat. Plus généralement, la façon précise de définir et d'implémenter la dynamique jointe (par exemple en utilisant la même suite de nombres aléatoires ou non) des deux copies du système peut jouer un rôle capital sur l'évolution de l'impureté [183, 186]. On retrouve ici le problème mentionné à la section 6.1.1. Ce manque apparent de mesure objective et indépendante du choix de la dynamique jointe a conduit à l'essoufflement de ce domaine de recherche.

6.2 Modèle de Kipnis-Marchioro-Presutti

Nous allons commencer par étudier KMP, où la question de la définition du « même bruit » trouve facilement une réponse, avant de passer au cas du SSEP, où les questions et ambiguïtés que l'on vient de soulever prennent tout leur sens. De plus, les degrés de liberté de KMP sont continus alors que ceux du SSEP sont discrets, et on est donc confrontés au problème de la nature discrète des variables dans ce dernier lorsque l'on cherche à imposer une « petite » différence entre

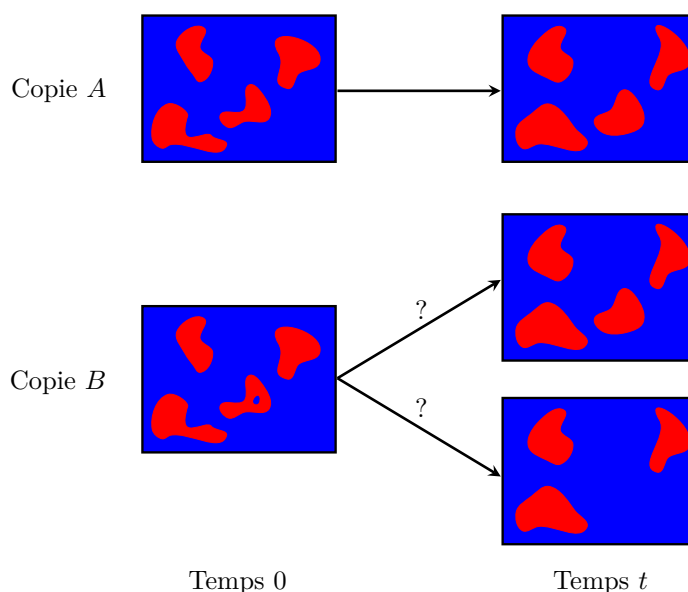


Figure 6.1 – Illustration de la propagation de défauts sur un système bidimensionnel de spins d'Ising (deux états, \uparrow et \downarrow). Les spins \uparrow sont en rouge et les spins \downarrow sont en bleu. On considère un état initial du système (copie A), qu'on laisse évoluer jusqu'au temps t . Sa configuration est alors constituée, comme à l'instant initial, de quatre îlots de spin \uparrow au milieu d'une mer de spins \downarrow . On prend maintenant le même état initial, dans lequel on introduit un petit défaut : on retourne un des spins (copie B). On a alors une imperfection au milieu d'un de nos îlots. La problématique de la propagation de défauts est de déterminer comment cette imperfection va évoluer. Va-t-elle être éliminée par le système (en haut) ou au contraire va-t-elle complètement modifier l'évolution du système et conduire par exemple à la disparition de l'îlot dans lequel elle a été introduite (en bas) ?

deux copies. Ce problème n'est pas présent dans KMP. Par ailleurs, on peut remarquer sur les équations (5.5) et (5.6) que dans l'hydrodynamique fluctuante, l'évolution de u ne dépend pas explicitement de ρ (les deux évolutions sont en réalité liées par le bruit), ce qui simplifie les calculs et permet par exemple une formulation de l'action avec uniquement deux champs (v et \bar{v}). Cela conduit à la non-dépendance en la densité moyenne du système ρ_0 de la fonction génératrice des cumulants (5.36), et donc des cumulants.

6.2.1 Exposant de Lyapunov

Avant de considérer deux copies de KMP, revenons sur l'évolution temporelle d'une seule copie. On considère une chaîne de L sites, à chacun desquels on attache un degré de liberté continu ε_i qui représente l'énergie de ce site et peut varier dans $[0, +\infty[$. Comme précisé au chapitre précédent, chaque lien $(j, j+1)$ s'active avec un taux 2, et redistribue alors l'énergie entre les sites j et $j+1$ uniformément :

$$(\varepsilon_j, \varepsilon_{j+1}) \xrightarrow{\text{taux } 2} (p[\varepsilon_j + \varepsilon_{j+1}], (1-p)[\varepsilon_j + \varepsilon_{j+1}]) \quad (6.8)$$

où p est échantillonné selon une loi uniforme dans $[0, 1]$.

Cela correspond à l'évolution temporelle suivante. On part de $t_0 = 0$. Chaque lien s'activant avec un taux 2, le taux d'activation total est $2L$. On tire donc l'incrément de temps Δt avant le prochain évènement selon une loi exponentielle de paramètre $2L$

$$\mathbb{P}(\Delta t) = 2L e^{-2L\Delta t} \quad (6.9)$$

donc de moyenne $(2L)^{-1}$. Il faut ensuite sélectionner le site qui s'active. Pour cela, on tire un lien k uniformément entre 1 et L . Pour finir, on tire le paramètre de redistribution p uniformément dans $[0, 1]$ et on redistribue l'énergie du lien k selon ce paramètre. On obtient alors la configuration à l'instant $t_1 = t_0 + \Delta t$. On itère alors la même procédure pour déterminer le temps t_2 et sa configuration, et ainsi de suite. Une variante (totalement équivalente) serait d'utiliser une horloge par site.

La dynamique d'une copie étant maintenant claire, nous pouvons passer à deux copies de ce système. On considère deux copies $\{\varepsilon_i\}$ et $\{\varepsilon'_i\}$ de même énergie totale $E = \sum_{i=1}^L \varepsilon_i = \sum_{i=1}^L \varepsilon'_i$ et qui évoluent avec la même dynamique, et plus particulièrement avec le même bruit. Il semble donc naturel de considérer les mêmes redistributions, définies par les paramètres $(\Delta t, k, p)$, dans les deux copies. On peut alors suivre l'évolution temporelle de la différence $u_i = \varepsilon_i - \varepsilon'_i$ entre les deux copies. On montre facilement qu'il s'agit de la même dynamique que celle des ε_i

$$(u_j, u_{j+1}) \xrightarrow[\text{taux } 2]{} (p[u_j + u_{j+1}], (1-p)[u_j + u_{j+1}]) \quad (6.10)$$

et qu'elle ne dépend pas explicitement des ε_i et des ε'_i (à nouveau, elle en dépend implicitement au travers des quantités stochastiques $\Delta t, k$, et p). Les deux copies ayant la même énergie totale, cela impose la condition $\sum_{i=1}^L u_i = 0$ à l'instant initial, qui est ensuite conservée par la dynamique. On peut alors définir l'exposant de Lyapunov (à temps fini) comme

$$\tilde{\lambda}(t) \equiv \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{u}(t)\|}{\|\mathbf{u}(0)\|} \quad \text{avec} \quad \|\mathbf{u}(t)\|^2 \equiv \sum_{i=1}^L u_i^2(t). \quad (6.11)$$

qui nous renseigne sur la façon dont les perturbations sont amplifiées ou au contraire éliminées par la dynamique. Si $\tilde{\lambda}(t) < 0$, les copies du système convergent vers un profil d'énergie identique alors que si $\tilde{\lambda}(t) > 0$, la différence entre les deux copies diverge, et une petite perturbation de l'état initial modifie complètement l'évolution future du système.

Comme nous avons utilisé une description hydrodynamique (fluctuante) pour calculer les fluctuations de l'exposant de Lyapunov, nous voulions vérifier si l'exposant de Lyapunov λ calculé dans ce formalisme était identique à celui microscopique $\tilde{\lambda}$ du modèle sur réseau d'origine. Du fait de l'échelle diffusive pour mesurer les temps dans la description hydrodynamique, on s'attend à ce que l'exposant de Lyapunov « discret » $\tilde{\lambda}(t)$ soit relié à l'exposant de Lyapunov « hydrodynamique fluctuante » $\lambda(\tau)$ par la relation $\tau\lambda(\tau) = t\tilde{\lambda}(t)|_{t=L^2\tau}$, c'est-à-dire

$$\lambda(\tau) = L^2\tilde{\lambda}(t = L^2\tau). \quad (6.12)$$

Si cette relation est correcte, les cumulants de $\tilde{\lambda}$ seraient alors donnés par

$$\langle \tilde{\lambda}^n(t) \rangle_c = L^{1-3n} \tau^{1-n} \varphi^{(n)}(0) \quad \text{avec} \quad \tau = \frac{t}{L^2} \quad (6.13)$$

dans la limite de grande taille et de grand temps.

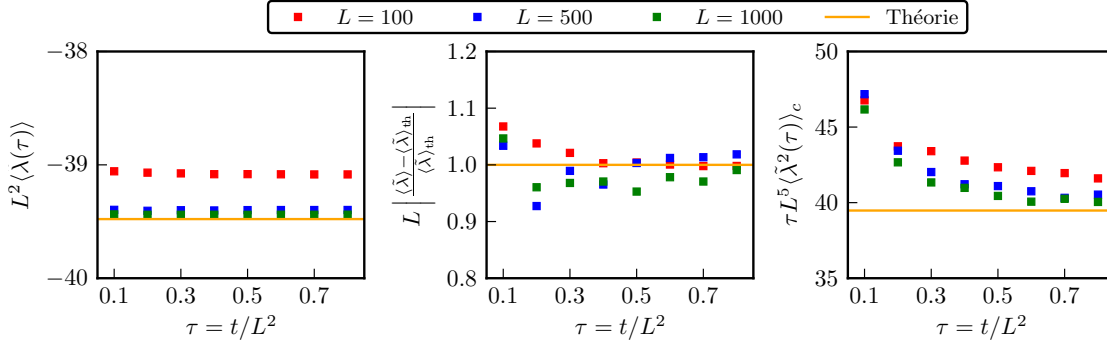


Figure 6.2 – Mesure numérique de la moyenne (gauche) et de la variance (droite) de $\tilde{\lambda}$ dans le modèle de KMP pour différentes tailles et différents temps. On a utilisé 10^6 simulations pour $L = 100, 500$ et 10^5 simulations pour $L = 1000$. Des temps plus longs sont difficiles à atteindre à cause des erreurs d'arrondi numérique. La correction de taille finie en $\mathcal{O}(1/L)$ à $\langle \lambda \rangle$, qui semble être de la forme $\langle \lambda \rangle_L = \langle \lambda \rangle_\infty (1 - \frac{1}{L})$ avec $\langle \lambda \rangle_\infty = \langle \lambda \rangle_{\text{th}} = -4\pi^2/L^2$ d'après le graph du milieu, provient des fluctuations autour du col de l'action (5.20) comme expliqué à la section 5.9.3.

6.2.2 Vérification numérique

Nous avons vérifié numériquement que les prédictions de l'équation (6.13) étaient correctes. Pour cela, nous avons simulé directement l'évolution en temps continue de \mathbf{u} décrite dans la section précédente. Nous avons initialisé chaque u_i avec une distribution gaussienne de moyenne nulle et de variance unité, puis nous avons forcé la somme des u_i à être nulle en soustrayant $\sum_i u_i/N$ à chaque u_i . Avant de commencer à mesurer $\tilde{\lambda}$, nous avons laissé tourner l'algorithme pendant $t_0 = L^2/10$ pour atténuer l'effet des conditions initiales. Cette valeur a été choisie empiriquement, et doit être suffisamment grande pour avoir oublié les conditions initiales. Comme on peut le voir sur la figure 6.2, les deux premiers cumulants (moyenne et variance) sont en bon accord avec cette prédiction. La moyenne atteint sa valeur stationnaire pour $\tau \sim \mathcal{O}(10^{-2})$ alors que la variance nécessite $\tau \sim \mathcal{O}(1)$.

De plus, on constate sur la figure 6.3 que l'approximation gaussienne déduite de notre calcul dans l'hydrodynamique fluctuante semble en bon accord avec la mesure de la distribution de probabilité de $\tilde{\lambda}$ au voisinage de la valeur typique $\tilde{\lambda}^*$, et ce de part et d'autre de $\tilde{\lambda}^*$. Or notre calcul n'était valide que pour $\alpha \geq 0$, c'est-à-dire uniquement pour un exposant de Lyapunov $\tilde{\lambda} \geq \tilde{\lambda}^*$. Les champs associés à $\alpha < 0$, c'est-à-dire correspondant à un exposant de Lyapunov $\tilde{\lambda} < \tilde{\lambda}^*$, semblaient ne pas être correctement décrits par l'hydrodynamique fluctuante, qui prédisait de plus un comportement d'échelle différent avec la taille du système de la distribution de probabilité pour $\tilde{\lambda} < \tilde{\lambda}^*$. Or toutes nos distributions de probabilité ont le même comportement en taille et en temps des deux côtés de la valeur typique. Il semble donc que le comportement d'échelle soit le même pour $\alpha > 0$ que pour $\alpha < 0$. Cela confirme que l'hydrodynamique fluctuante n'est pas valide pour $\alpha < 0$.

Nous n'avons pas pu aller au-delà de la variance pour deux raisons. La première est que les cumulants d'ordre supérieur demandent beaucoup de réalisations pour obtenir une valeur fiable. En effet, du fait du principe de grandes déviations la plupart des événements ont un exposant de Lyapunov proche de la valeur typique, et il faut donc un échantillonnage très important pour observer les déviations à la moyenne et à fortiori à la gaussienne. La seconde raison est plus

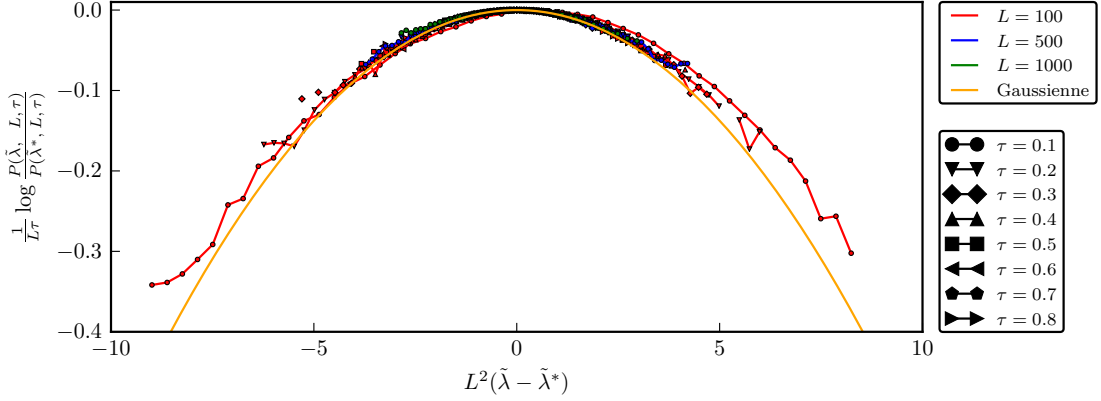


Figure 6.3 – Mesure numérique par échantillonnage direct de la distribution de probabilité de $\tilde{\lambda}$ dans le modèle de KMP pour différentes tailles et différents temps. On a utilisé 10^6 simulations pour $L = 100$ et $L = 500$ et 10^5 simulations pour $L = 1000$. L'exposant de Lyapunov typique (pour lequel la probabilité est maximale) est noté $\tilde{\lambda}^*$ et est utilisé comme origine des abscisses. La ligne orange correspond à l'approximation gaussienne déduite de l'hydrodynamique fluctuante. On remarque qu'elle décrit bien le voisinage de $\tilde{\lambda}^*$. Notre prédiction dans l'hydrodynamique fluctuante n'étant valide que pour $\alpha \geq 0$, c'est-à-dire uniquement pour $\tilde{\lambda} \geq \tilde{\lambda}^*$, on pouvait s'attendre à un comportement d'échelle différent pour $\alpha < 0$, c'est-à-dire pour $\tilde{\lambda} < \tilde{\lambda}^*$, ce qui ne semble pas être le cas.

subtile, et pose déjà problème pour la variance. On s'attend à ce que nos prédictions (6.13) soient valides dans la limite de grande taille et de grand temps. La limite de grande taille demande une puissance de calcul importante (et une grosse quantité de mémoire disponible), mais $L = 1000$ semble déjà en bon accord avec nos prédictions. C'est la limite de grands temps qui est problématique. En effet, au bout d'un temps en général de l'ordre de L^2 (donc pour τ de l'ordre de un), notre distance $\|\mathbf{u}\|$ entre les deux copies, qui décroît exponentiellement, devient de l'ordre des erreurs d'arrondi numérique et l'évolution future n'a plus aucun sens. Par exemple, une fois que cela est arrivé, la conservation de l'énergie est brisée (voir la figure 6.4). Nous ne pouvons donc pas simuler cette dynamique sur des temps très longs. Renormaliser régulièrement \mathbf{u} ne résout pas le problème, les erreurs d'arrondi étant amplifiées lors de la renormalisation (le problème reste donc le même). La solution serait d'accroître la précision de l'algorithme. Nous avons essayé, et doubler la précision (en passant de *float* à *double* dans notre code en C) nous a à peine permis de gagner quelques pourcents de L^2 sur le temps total. La variance ayant déjà à peine convergé pour $\tau \sim \mathcal{O}(1)$, on s'attend à ce que les cumulants d'ordre supérieur nécessitent des temps bien plus longs et donc des simulations avec une très grande précision numérique, beaucoup plus gourmandes en temps CPU et en mémoire.

Notre calcul de l'exposant de Lyapunov dans le régime hydrodynamique semble donc en parfait accord avec l'exposant de Lyapunov défini dans le modèle microscopique, ce qui montre que la *Macroscopic Fluctuation Theory* peut être étendue pour calculer les exposants de Lyapunov dans les systèmes diffusifs macroscopiques. Cela était prévisible pour le modèle de KMP. En effet, dans le modèle microscopique, les u_i obéissent à la même dynamique que les n_i (voir les équations (6.8) et (6.10)). Les champs ρ et u se devaient donc d'avoir la hydrodynamique fluctuante, ce qui est bien ce qu'on obtient en linéarisant l'équation d'évolution de ρ pour déduire celle de u (voir les équations (5.2), (5.3), (5.5) et (5.6)).

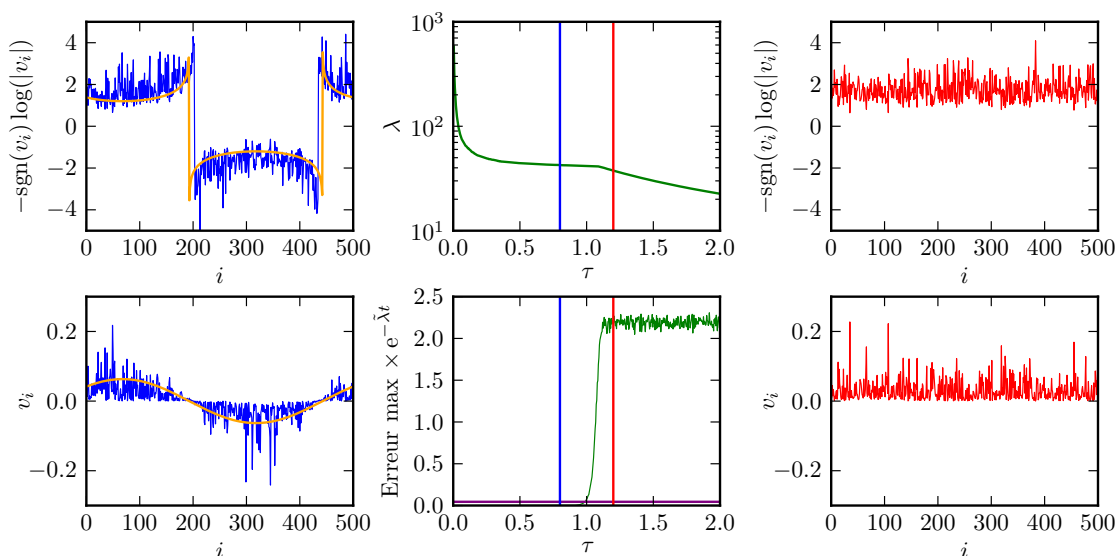
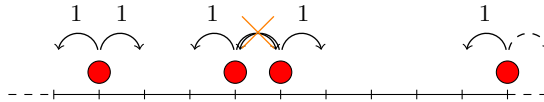


Figure 6.4 – Illustration des conséquences des erreurs d'arrondi dans les simulations de KMP sur une chaîne de $L = 500$ sites. **Gauche** : Composantes du vecteur tangent normalisé $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|}$ sur les différents sites i pour $\tau = \frac{t}{L^2} = 0,8$ (en bleu). Cette simulation correspond à un échantillonnage direct (force brute), c'est-à-dire à une situation non biaisée ($\alpha = 0$). On s'attend donc à ce que \mathbf{v} soit correctement décrit par le profil calculé au col de l'action en $\alpha = 0$, à savoir $\mathbf{v}_{\text{col}}(x) = \sqrt{2} \cos(2\pi x + \phi)$ avec $x = \frac{i}{L}$. En tenant compte du fait que v doit être normalisé, cela correspond à $v_i = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(\frac{2\pi}{L}i + \phi)$, tracé en orange sur ce graph (en prenant $\phi = 0,85$), ce qui est cohérent avec notre simulation (le profil est très bruité car L est petit). **Milieu haut** : Exposant de Lyapunov macroscopique $\lambda = L^2 \tilde{\lambda}$ en fonction du temps diffusif τ . Pour $\tau < 1$, il converge vers la valeur $-4\pi^2$ attendue théoriquement. Il cesse d'être correct pour τ de l'ordre de 1 à cause des erreurs numériques. La ligne bleue indique de $\tau = 0,8$ (graphs de droite) et la ligne rouge indique $\tau = 1,2$ (graphs de gauche). **Milieu bas** : On a mesuré l'erreur maximale sur la conservation de l'énergie réalisée sur la simulation en comparant l'énergie totale du lien actif avant et après la redistribution de l'énergie. La perturbation totale de l'énergie a initialement une norme de un, ce qui correspond à $|u_i| \sim \frac{1}{\sqrt{L}}$. Au bout d'un temps t , elle est atténuée d'un facteur $e^{\tilde{\lambda}t}$, ce qui est équivalent à considérer que la valeur typique de la perturbation est inchangée (en mesurant \mathbf{v} à la place de \mathbf{u}) mais que l'erreur est amplifiée d'un facteur $e^{-\tilde{\lambda}t}$. Quand l'erreur amplifiée devient de l'ordre des v_i , c'est-à-dire de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{L}}$ (tracé en violet), on s'attend à ce que la conservation de l'énergie soit brisée et que la simulation ne soit plus correcte. Cela survient pour $\tau \lesssim 1$. **Droite** : Composantes du vecteur tangent normalisé $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|}$ sur les différents sites i pour $\tau = \frac{t}{L^2} = 1,2$. Toutes les composantes de \mathbf{v} sont positives, donc la conservation de l'énergie $\|\mathbf{v}\| = 0$ est clairement brisée et la simulation n'est plus correcte.

6.3 Processus d'exclusion simple symétrique

Le modèle de KMP nous a permis de constater que les fluctuations de l'exposant de Lyapunov calculées à l'aide de l'hydrodynamique fluctuante étaient en accord avec celles mesurées dans les modèles microscopiques. Mais le modèle de KMP était le candidat idéal pour cette vérification, l'hydrodynamique fluctuante étant a priori correcte pour décrire à la fois ρ et u . Ce n'est pas aussi évident pour le SSEP, où la définition du même bruit pour la dynamique jointe est plus compliquée. De plus, nous verrons qu'une construction naïve de l'hydrodynamique fluctuante de u à partir de la dynamique jointe du modèle microscopique aboutit à des contradictions. Pour finir, nous verrons que les résultats du chapitre précédent appliqués au SSEP permettent d'obtenir de nouvelles prédictions pour la décroissance du nombre de particules en taille finie dans le processus de réaction-diffusion d'annihilation de paires.

6.3.1 Exposant de Lyapunov



On considère un SSEP de densité ρ_0 sur une chaîne de L sites avec des conditions aux limites périodiques. On a donc $N = \rho_0 L$ particules qui réalisent une marche aléatoire symétrique avec exclusion mutuelle, c'est-à-dire qu'on ne peut avoir qu'une particule au maximum par site.

Pour définir l'exposant de Lyapunov, considérons deux copies A et B initialement proches et de même densité, et laissons les évoluer avec la même dynamique. Il nous faut maintenant définir ce qu'on entend par la même dynamique. Cela dépend de ce qu'on considère être les degrés de liberté pertinents : les positions des particules ou les nombres d'occupation des sites. En effet, on peut décrire l'état du système en spécifiant les positions des particules $x_\mu \in \llbracket 1, L \rrbracket$, avec $\mu \in \llbracket 1, N \rrbracket$, ou en spécifiant les nombres d'occupations des sites $n_j \in \{0, 1\}$, avec $j \in \llbracket 1, L \rrbracket$.

Si on s'intéresse aux positions des particules, alors on peut numéroter les particules et les laisser essayer de sauter sur un site voisin dans les deux copies en fonction de leur numéro (voir la figure 6.5). Dans ce cas, on remarque que deux copies dans lesquelles toutes les particules sont sur les mêmes sites mais avec des numérotations différentes vont évoluer différemment, ce qui n'est pas ce que nous voulons étant donné que les particules sont indiscernables.

Une autre possibilité est de considérer que c'est l'environnement qui pousse les particules, qui contrôle leurs mouvements de saut. Les degrés de liberté sont alors les nombres d'occupation. Plus précisément, si par exemple l'environnement pousse les particules du site k vers la droite, il le fait dans les deux copies ; ce qui se passe dans chaque système dépend ensuite de leurs nombres d'occupations k et $k + 1$ respectifs (voir la figure 6.6). Physiquement, c'est l'image d'un colloïde en solution, dont le mouvement est dû aux collisions avec les particules du solvant. La diminution de la différence entre les deux systèmes est alors locale et les deux systèmes deviennent identiques plus rapidement que dans le cas précédent. De plus, dans ce cas-là la différence entre les deux systèmes ne peut que décroître.

Le premier cas correspond à une source de hasard intrinsèque aux particules. Cela pourrait être utile pour décrire des particules actives par exemple, mais ne semblent pas être la description

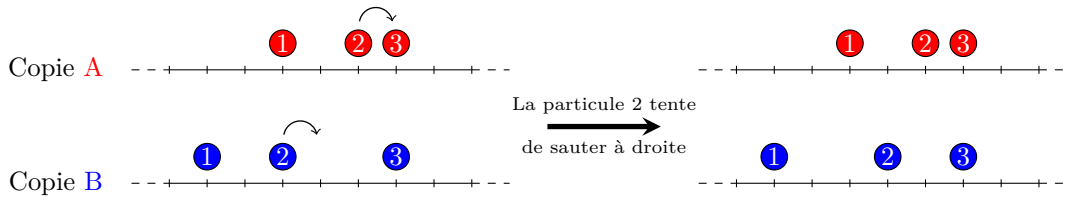


Figure 6.5 – Bruit sur les particules.

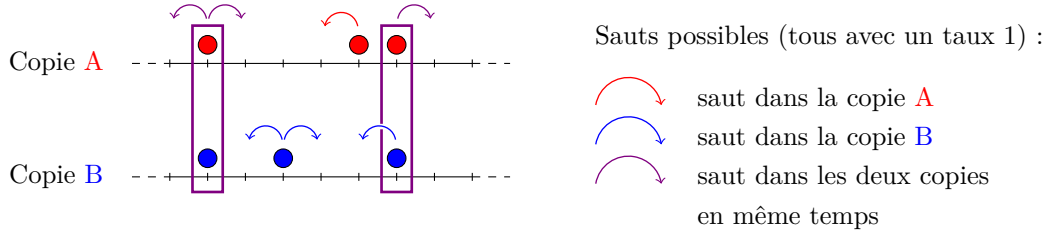


Figure 6.6 – Bruit sur les sites.

adéquate pour rendre compte des suspensions colloïdales, dans lesquelles les colloïdes sont passifs et soumis à une source de hasard due à l'environnement, aux collisions avec les particules du solvant. Or c'est cette situation qui nous intéresse, et on va donc considérer que le bruit est dû à l'environnement. La dynamique de nos deux copies est donc donnée par la figure 6.6.

On va noter \mathbf{n} et \mathbf{n}' les taux d'occupation dans les systèmes A et B respectivement. Les deux systèmes ayant la même densité, on doit avoir $\sum_{i=1}^L n_i = \sum_{i=1}^L n'_i = N$. On peut alors définir la différence entre les deux copies $\mathbf{u} = \mathbf{n} - \mathbf{n}'$, puis l'exposant de Lyapunov à temps fini

$$\tilde{\lambda}(t) \equiv \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{u}(t)\|}{\|\mathbf{u}(0)\|} \quad \text{avec} \quad \|\mathbf{u}(t)\| \equiv \sum_{i=1}^L |u_i(t)|. \quad (6.14)$$

On a utilisé la norme 1 car les normes p avec $p > 1$ sont problématiques. En effet, comme $u_i \in \{-1, 0, 1\}$, on a $|u_i|^p = |u_i|$, ce qui implique $\|\mathbf{u}\|_p = \|\mathbf{u}\|_1^{1/p}$. Passer de la norme 1 à la norme p revient donc à diviser l'exposant de Lyapunov par p , or on s'attend à ce que sa valeur dans la limite $t \rightarrow +\infty$ soit indépendante de la norme choisie. Ce problème est dû à la nature binaire des variables $n_i \in \{0, 1\}$, qui rend les fonctions puissances équivalentes à l'identité sur cet ensemble car $n_i^p = n_i$. La norme infini $\|\mathbf{u}\|_\infty = \max_i |u_i|$ n'apporte quant à elle que peu d'information sur les deux copies du système vu qu'elle vaut un tant que les deux systèmes ne sont pas identiques et zéro quand ils le deviennent. Elle ne donne aucune information sur le degré de différence entre les deux copies de notre système, et permet uniquement de détecter si les copies sont identiques. La norme 1 apparaît donc la seule norme usuelle ne faisant pas appel aux fonctions puissances et permettant d'avoir une information pertinente sur la distance entre nos deux copies.

6.3.2 Construction d'une hydrodynamique fluctuante pour u

Dans cette section, nous allons essayer de construire l'hydrodynamique fluctuante pour ρ et u correspondant à la dynamique jointe que l'on vient de décrire. Pour cela, nous allons suivre l'approche de Tailleur, Kurchan et Lecomte [9], basée sur la représentation de l'équation maîtresse

à l'aide d'opérateurs de spins puis sur l'utilisation d'états cohérents pertinents [187, 188] pour construire l'intégrale de chemin. Cette intégrale de chemin nous permettra ensuite d'identifier les équations de Langevin auxquelles obéissent ρ et u . Une alternative serait d'utiliser des opérateurs bosoniques à la Doi-Peliti [189–192] et de tenir compte de l'exclusion, comme cela a été fait par exemple par van Wijland [193].

On représente l'état de chaque site i dans la copie X ($X = A$ ou B) à l'aide d'un vecteur à deux dimensions $|n_i^X\rangle$. Une base orthonormée de l'ensemble des états de ce site est $(|0\rangle, |1\rangle)$, où :

- $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ représente le site vide
- $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ représente le site occupé

On peut alors représenter l'état du système $|P\rangle$ par un vecteur de l'espace produit tensoriel sur l'ensemble des sites

$$|P\rangle = \sum_{\{n_i^A\}} \sum_{\{n_i^B\}} \left[p(\{n_i^A\}, \{n_i^B\}) \bigotimes_{i=1}^N (|n_i^A\rangle \otimes |n_i^B\rangle) \right] \quad (6.15)$$

où $p(\{n_i^A\}, \{n_i^B\})$ est la probabilité d'observer les nombres d'occupation $\{n_1^A, n_2^A, \dots, n_L^A\}$ dans la copie A et $\{n_1^B, n_2^B, \dots, n_L^B\}$ dans la copie B. L'équation maîtresse se met alors sous la forme

$$\frac{d|P\rangle}{dt} = \hat{W}|P\rangle \quad (6.16)$$

où \hat{W} est l'opérateur d'évolution, qui va nous permettre de déduire l'action associée à cette équation maîtresse. Pour exprimer \hat{W} sous une forme simple, on va utiliser les matrices de Pauli

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

pour construire les opérateurs :

- nombre de particule : $\hat{n} = \frac{1}{2}(\hat{1} - \hat{\sigma}_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
- annihilation d'une particule : $\hat{\sigma}^- = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
- création d'une particule : $\hat{\sigma}^+ = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

L'opérateur d'évolution peut alors s'écrire

$$\begin{aligned} \hat{W} = \sum_{i=1}^L \sum_{s=\pm 1} \left(& [\hat{\sigma}_{i+s}^{+A} \hat{\sigma}_i^{-A} - \hat{n}_i^A (\hat{1} - \hat{n}_{i+s}^A)] [\hat{1} - \hat{n}_i^B (\hat{1} - \hat{n}_{i+s}^B)] \right. \\ & + [\hat{\sigma}_{i+s}^{+B} \hat{\sigma}_i^{-B} - \hat{n}_i^B (\hat{1} - \hat{n}_{i+s}^B)] [\hat{1} - \hat{n}_i^A (\hat{1} - \hat{n}_{i+s}^A)] \\ & \left. + \hat{\sigma}_{i+s}^{+A} \hat{\sigma}_{i+s}^{+B} \hat{\sigma}_i^{-A} \hat{\sigma}_i^{-B} - \hat{n}_i^A (\hat{1} - \hat{n}_{i+s}^A) \hat{n}_i^B (\hat{1} - \hat{n}_{i+s}^B) \right) \end{aligned} \quad (6.18)$$

où la première ligne correspond à un saut d'une particule du site i au site $i+s$ dans la copie A uniquement, la deuxième ligne au même saut mais dans la copie B uniquement et la dernière ligne au même saut dans les deux copies en même temps.

Cet opérateur d'évolution est associé à l'action

$$S[\rho^A, \rho^B, \bar{\rho}^A, \bar{\rho}^B] = \int_0^t dt' \left(\sum_i [\bar{\rho}_i^A \partial_{t'} \rho_i^A + \bar{\rho}_i^B \partial_{t'} \rho_i^B] - \mathcal{W}(\rho^A, \rho^B, \bar{\rho}^A, \bar{\rho}^B) \right) \quad (6.19)$$

où \mathcal{W} est déduit de \hat{W} en utilisant les états cohérents de l'article de Tailleur, Kurchan et Le-comte [9]. La construction de l'action associée à un opérateur d'évolution à l'aide d'états cohérents est détaillée dans l'annexe G sur le cas des particules libres. En résumé, \mathcal{W} est équivalent à \hat{W} dans lequel on a remplacé :

- $\hat{1}$ par 1
- $\hat{\sigma}_i^{+X}$ par $(1 - \rho_i^X) e^{\bar{\rho}_i^X}$
- $\hat{\sigma}_i^{-X}$ par $\rho_i^X e^{-\bar{\rho}_i^X}$
- \hat{n}_i^X par ρ_i^X

Les variables ρ^A et ρ^B , une fois remise à la bonne échelle, représenteront les densités de particules dans les copies A et B respectivement. Pour cela, on prend la limite hydrodynamique $L \rightarrow +\infty$ et on effectue les substitutions et les changements de variables suivants :

- $x = \frac{i}{L} \in [0, 1]$
- $\tau = \frac{t}{L^2}$
- $\rho_i^X(t) = \rho_X(x, \tau)$
- $\bar{\rho}_i^X(t) = \bar{\rho}_X(x, \tau)$
- $\rho_{i+1}^X(t) = \rho_X(x, \tau) + \frac{1}{L} \partial_x \rho_X(x, \tau) + \mathcal{O}(\frac{1}{L^2})$
- $\bar{\rho}_{i+1}^X(t) = \bar{\rho}_X(x, \tau) + \frac{1}{L} \partial_x \bar{\rho}_X(x, \tau) + \mathcal{O}(\frac{1}{L^2})$
- $\sum_i \rightarrow L \int_0^1 dt$

On ne garde que l'ordre dominant en L , ce qui conduit à

$$\begin{aligned} S[\rho_A, \rho_B, \bar{\rho}_A, \bar{\rho}_B] = L \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx & \left[\bar{\rho}_A \partial_{\tau'} \rho_A + \partial_x \rho_A \partial_x \bar{\rho}_A - \frac{\sigma(\rho_A)}{2} (\partial_x \bar{\rho}_A)^2 \right. \\ & + \bar{\rho}_B \partial_{\tau'} \rho_B + \partial_x \rho_B \partial_x \bar{\rho}_B - \frac{\sigma(\rho_B)}{2} (\partial_x \bar{\rho}_B)^2 \\ & \left. - \frac{\sigma(\rho_A)\sigma(\rho_B)}{2} \partial_x \bar{\rho}_A \partial_x \bar{\rho}_B \right] \end{aligned} \quad (6.20)$$

où on a utilisé $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$. Cette action sert à exprimer les moyennes au temps $t = \tau L^2$ d'observables des densités de particules ρ_A et ρ_B sous forme d'intégrale de chemin :

$$\langle F(\rho_A, \rho_B) \rangle = \int \mathcal{D}[\rho_A, \rho_B, \bar{\rho}_A, \bar{\rho}_B] F(\rho_A, \rho_B) e^{-S[\rho_A, \rho_B, \bar{\rho}_A, \bar{\rho}_B]}. \quad (6.21)$$

Pour identifier les équations de Langevin correspondant à la dynamique de ρ_A et de ρ_B , il faut transformer les termes quadratiques en $\bar{\rho}$ en termes linéaires. Pour cela, on réécrit cette intégrale de chemin sous la forme

$$\begin{aligned} \langle F(\rho_A, \rho_B) \rangle &= \int \mathcal{D}[\rho_A, \rho_B, \bar{\rho}_A, \bar{\rho}_B] F(\rho_A, \rho_B) \\ &\times \exp \left[-L \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \left(\bar{\rho}_A \partial_{\tau'} \rho_A + \partial_x \rho_A \partial_x \bar{\rho}_A + \bar{\rho}_B \partial_{\tau'} \rho_B + \partial_x \rho_B \partial_x \bar{\rho}_B \right) \right] \\ &\times \exp \left[\int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \left(\frac{1}{2} B^\top \Sigma B \right) \right] \end{aligned} \quad (6.22)$$

$$\text{avec } B = \begin{pmatrix} \sqrt{L}\partial_x\bar{\rho}_A \\ \sqrt{L}\partial_x\bar{\rho}_B \end{pmatrix} \text{ et } \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma(\rho_A) & \frac{1}{2}\sigma(\rho_A)\sigma(\rho_B) \\ \frac{1}{2}\sigma(\rho_A)\sigma(\rho_B) & \sigma(\rho_B) \end{pmatrix}.$$

Puis on utilise la transformation de Hubbard-Stratonovich

$$\exp\left[\int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \left(\frac{1}{2}B^\top \Sigma B\right)\right] = \int \mathcal{D}[\xi_A, \xi_B] \exp\left[\int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \left(-\frac{1}{2}\zeta^\top \Sigma^{-1} \zeta + B^\top \zeta\right)\right] \quad (6.23)$$

avec $\zeta = \begin{pmatrix} \xi_A \\ \xi_B \end{pmatrix}$, ce qui nous permet d'exprimer la moyenne de F comme

$$\begin{aligned} \langle F(\rho_A, \rho_B) \rangle &= \int \mathcal{D}[\rho_A, \rho_B, \bar{\rho}_A, \bar{\rho}_B, \xi_A, \xi_B] F(\rho_A, \rho_B) \mathbb{P}(\xi_A, \xi_B) \\ &\quad \times \exp\left[-L \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \bar{\rho}_A \left(\partial_{\tau'} \rho_A - \partial_x^2 \rho_A + \frac{1}{\sqrt{L}} \partial_x \xi_A\right)\right] \\ &\quad \times \exp\left[-L \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \bar{\rho}_B \left(\partial_{\tau'} \rho_B - \partial_x^2 \rho_B + \frac{1}{\sqrt{L}} \partial_x \xi_B\right)\right] \end{aligned} \quad (6.24)$$

où $\mathbb{P}(\xi_A, \xi_B) = \exp\left[-\frac{1}{2} \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \left(\zeta^\top \Sigma^{-1} \zeta\right)\right]$. On effectue les intégrales sur les champs de réponse $\bar{\rho}_A$ et $\bar{\rho}_B$, ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \langle F(\rho_A, \rho_B) \rangle &= \int \mathcal{D}[\rho_A, \rho_B, \xi_A, \xi_B] F(\rho_A, \rho_B) \mathbb{P}(\xi_A, \xi_B) \\ &\quad \times \delta\left(\partial_{\tau'} \rho_A - \partial_x^2 \rho_A + \frac{1}{\sqrt{L}} \partial_x \xi_A\right) \\ &\quad \times \delta\left(\partial_{\tau'} \rho_B - \partial_x^2 \rho_B + \frac{1}{\sqrt{L}} \partial_x \xi_B\right). \end{aligned} \quad (6.25)$$

On peut alors lire les équations d'évolution de ρ_A et de ρ_B dans les distributions de Dirac fonctionnelles. La distribution des bruits ξ_A et ξ_B est donnée par $\mathbb{P}(\xi_A, \xi_B)$, qui correspond à une distribution gaussienne de moyenne nulle et de matrice de covariance Σ . Les champs de densité ρ_A et ρ_B évoluent donc selon

$$\partial_\tau \rho_A + \partial_x j_A = 0 \quad \text{avec} \quad j_A(x, \tau) = -\partial_x \rho_A(x, \tau) + \frac{1}{\sqrt{L}} \xi_A(x, \tau) \quad (6.26)$$

$$\partial_\tau \rho_B + \partial_x j_B = 0 \quad \text{avec} \quad j_B(x, \tau) = -\partial_x \rho_B(x, \tau) + \frac{1}{\sqrt{L}} \xi_B(x, \tau) \quad (6.27)$$

où ξ_A et ξ_B sont des bruits blancs gaussiens de moyenne nulle et de corrélations

$$\langle \xi_A(x, \tau) \xi_A(x', \tau') \rangle = \sigma(\rho_A) \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.28)$$

$$\langle \xi_B(x, \tau) \xi_B(x', \tau') \rangle = \sigma(\rho_B) \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.29)$$

$$\langle \xi_A(x, \tau) \xi_B(x', \tau') \rangle = \frac{1}{2} \sigma(\rho_A) \sigma(\rho_B) \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.30)$$

Pour finir, on définit la différence entre les deux densités $u = \rho_B - \rho_A$ et on note $\rho \equiv \rho_A$. L'évolution de ces champs est gouvernée par

$$\partial_t \rho + \partial_x j = 0 \quad \text{avec} \quad j(x, \tau) = -\partial_x \rho(x, \tau) + \frac{1}{\sqrt{L}} \xi(x, \tau) \quad (6.31)$$

$$\partial_t u + \partial_x j_u = 0 \quad \text{avec} \quad j_u(x, \tau) = -\partial_x u(x, \tau) + \frac{1}{\sqrt{L}} \xi_u(x, \tau) \quad (6.32)$$

où $\xi = \xi_A$ et $\xi_u = \xi_B - \xi_A$ sont des bruits blancs gaussiens de moyenne nulle et de corrélations :

$$\langle \xi(x, \tau) \xi(x', \tau') \rangle = \sigma(\rho) \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.33)$$

$$\langle \xi_u(x, \tau) \xi_u(x', \tau') \rangle = \left[\sigma(\rho_A) + \sigma(\rho_B) - \sigma(\rho_A)\sigma(\rho_B) \right] \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.34)$$

$$= \left(\sigma(\rho) + [1 - \sigma(\rho)] [\sigma(\rho) + u \sigma'(\rho) - 2u^2] \right) \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.35)$$

$$\langle \xi(x, \tau) \xi_u(x', \tau') \rangle = \left[\frac{1}{2} \sigma(\rho_A)\sigma(\rho_B) - \sigma(\rho_A) \right] \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.36)$$

$$= -\sigma(\rho) \left(1 - \frac{1}{2} [\sigma(\rho) + u \sigma'(\rho) - 2u^2] \right) \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.37)$$

Les corrélations (6.33) sont bien celles de l'hydrodynamique fluctuante pour ρ , mais les corrélations (6.35) et (6.37) n'ont en revanche aucun rapport avec celles que l'on obtient en linéarisant directement l'hydrodynamique fluctuante pour ρ , même en se limitant à l'ordre dominant en u . En réalité, en regardant plus en détail (6.35), on constate que si $u = 0$, la variance du bruit de l'équation d'évolution de u (6.32) est non nulle, ce qui est en contradiction avec la dynamique microscopique. En effet, notre dynamique jointe garantit qu'à partir du moment où les deux copies deviennent identiques, elles le restent pour toujours. Dit autrement, $u = 0$ est un état absorbant. Notre hydrodynamique fluctuante pour u , construite directement à partir de la dynamique jointe microscopique, est donc incorrecte.

On pouvait détecter le problème dès l'équation (6.30), qui donne dans le cas $\rho_A = \rho_B = \rho$

$$\langle \xi_A(x, \tau) \xi_B(x', \tau') \rangle = \frac{1}{2} \sigma(\rho)^2 \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.38)$$

alors qu'on s'attendrait à $\xi_A = \xi_B$, ce qui conduirait à

$$\langle \xi_A(x, \tau) \xi_B(x', \tau') \rangle = \langle \xi_A(x, \tau) \xi_A(x', \tau') \rangle = \langle \xi_B(x, \tau) \xi_B(x', \tau') \rangle = \sigma(\rho) \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \quad (6.39)$$

Ce problème est sans doute dû au fait que l'opérateur \hat{n}_i , utilisé dans \hat{W} pour tester la présence ou l'absence de particule, est nilpotent. En effet, $\hat{n}_i^k = \hat{n}_i$ pour tout $k \in \mathbb{N}^*$. On peut donc rajouter une puissance k quelconque à chaque \hat{n}_i dans \hat{W} sans changer la dynamique jointe microscopique, ce qui aurait pour conséquence de remplacer ρ par ρ^k dans certains termes de l'action. Or la densité $\rho \in [0, 1]$ n'est pas nilpotente, et la remplacer par ρ^k change radicalement l'action et les équations de Langevin déduites de cette dernière. Il s'agit du même problème que celui mentionné à la fin de la section précédente à propos des normes p .

Comme nous pouvons le voir sur l'équation (6.33), cette approche permet bien de construire l'hydrodynamique fluctuante d'un SSEP, qui fut démontrée rigoureusement par Spohn [125] puis par Bertini, De Sole, Gabrielli, Jona-Lasinio et Landim [149]. Elle n'est en revanche pas utilisable pour construire celle de deux SSEPs couplés comme nous venons de le montrer. Dans l'article [9], Tailleur, Kurchan et Lecomte ne s'intéressaient pas uniquement au SSEP, mais également aux processus d'exclusion partielle où il peut y avoir $2j$ particules par sites, $j \in \mathbb{N}/2$ (j est le spin de la représentation de $SU(2)$ associée au modèle [194]), le SSEP correspondant à $j = 1/2$. Alors qu'ils avaient remarqué que le cas $j = 1/2$ donnait bien l'hydrodynamique fluctuante du SSEP, ils ont montré que la façon rigoureuse de l'établir avec leur approche était de voir l'hydrodynamique fluctuante du SSEP comme la limite $j \rightarrow +\infty$ d'un processus d'exclusion partielle de spin j . On peut faire la même chose ici, ce qui résoudra le problème de la nilpotence de \hat{n}_i . Pour cela, on doit définir la dynamique jointe du processus d'exclusion partielle de la même façon que pour les particules libres dans la section suivante (voir la figure 6.9 pour un résumé), puis écrire

l'opérateur d'évolution à l'aide des matrices de spin j . On est alors obligé d'introduire le nombre minimal de particules à un site dans les deux copies, qu'on ne sait pas exprimer à l'aide des opérateurs de spins, ce qui nous empêche donc de construire l'action à l'aide des états cohérents associés à ces matrices.

Ne pouvant pas démontrer analytiquement que l'hydrodynamique fluctuante de u déduite de celle de ρ en la linéarisant est la même que celle construite directement à partir de la dynamique jointe, nous allons vérifier que l'exposant de Lyapunov calculé dans l'hydrodynamique fluctuante est cohérent avec celui défini à l'aide de la dynamique jointe.

6.3.3 Équivalence avec $A + B \rightarrow \emptyset$

Pour déterminer l'exposant de Lyapunov, seule la dynamique de \mathbf{u} nous intéresse. Vu la nature du bruit, une fois qu'un site est occupé dans les deux copies les particules qui s'y trouvent restent à la même position tout au long de l'évolution temporelle, sauf si l'une d'entre elles se retrouve bloquée par l'exclusion et pas l'autre. On peut alors décrire la dynamique de \mathbf{u} en utilisant un seul réseau et trois types de particules : des particules A , qui représentent les sites occupés uniquement dans la copie A et correspondent à $u_i = 1$, des particules B , qui représentent les sites occupés uniquement dans la copie B et correspondent à $u_i = -1$, et des particules C , qui représentent les sites occupés dans les deux copies et correspondent à $u_i = 0$. Les particules A s'excluent mutuellement, les particules B s'excluent mutuellement et quand une particule A et une particule B se rencontrent, elles se transforment en une particule C . Les interactions des particules C avec les particules A et B sont plus compliquées et méritent d'être détaillées, ce qu'on fera dans le paragraphe suivant. En réalité, on se rend compte que les particules C , une fois formées, ne contribuent plus à la dynamique de \mathbf{u} (tout se passe comme si elles étaient absentes), et peuvent être supprimées du système.

Pour le montrer, on a représenté dans la colonne de gauche du tableau de la figure 6.7 toutes les situations possibles lorsqu'un site pousse une particule vers la droite (à une inversion copie $A \leftrightarrow$ copie B près). Dans la colonne de droite, on a représenté la dynamique effective des particules A (en rouge) et B (en bleu) correspondantes. Les particules C (qui correspondent aux rectangles violets à gauche) ne contribuant pas à $\|\mathbf{u}\|$, elles ne sont pas représentées à droite.

On remarque alors qu'on peut rendre compte de la dynamique effective de \mathbf{u} avec uniquement deux types de particules, A et B , l'une correspondant à $u_i = -1$ et l'autre à $u_i = +1$. Chacune de ces particules effectue une marche aléatoire symétrique avec un taux de saut unité, et on observe de l'exclusion mutuelle entre particules de même type. Quand deux particules de type différent se rencontrent, elles s'annihilent immédiatement. On reconnaît le processus de réaction-diffusion $A + B \rightarrow \emptyset$, introduit en 1983 par Toussaint et Wilczek [195] suite aux travaux de Ovchinnikov, Zeldovich et Khlopov [196, 197] en 1978 sur le rôle des fluctuations initiales de densité dans les réactions chimiques et dans la décroissance de la concentration en monopole magnétique dans l'univers.

La dynamique de $\mathbf{u}(t)$ est donc équivalente au processus de réaction-diffusion $A + B \rightarrow \emptyset$, avec exclusion mutuelle entre les particules de même espèce et taux d'annihilation infini entre les particules d'espèces différentes (voir la figure 6.8). Cette équivalence entre la dynamique du vecteur tangent \mathbf{u} et les processus de réaction-diffusion avec état absorbant semblent se généraliser à tous les systèmes de particules sur réseau quand le bruit est sur les sites.

Par exemple, la dynamique de \mathbf{u} pour les particules libres est équivalente au processus de réaction-diffusion $A + B \rightarrow \emptyset$, toujours avec taux d'annihilation infini mais sans exclusion entre les par-

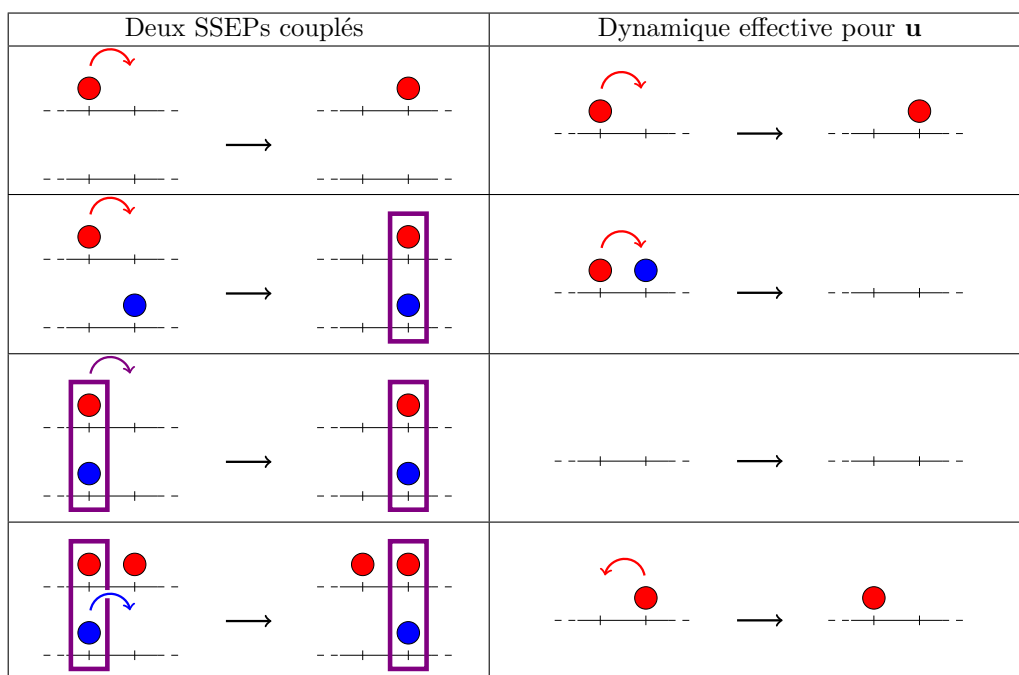


Figure 6.7 – Dynamique effective pour la différence entre deux copies du SSEP.

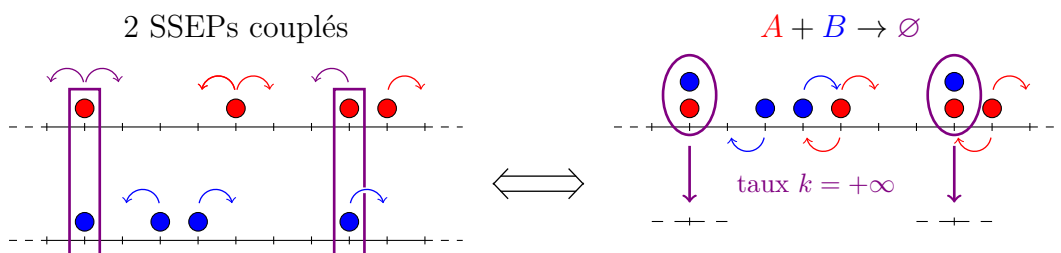


Figure 6.8 – Résumé de l'équivalence entre la différence \mathbf{u} entre deux SSEPs couplés et le processus de réaction-diffusion $A + B \rightarrow \emptyset$. Les particules rouges correspondent à $u_i = +1$ et les particules bleues à $u_i = -1$.

ticules. Pour appliquer le même « bruit sur les sites » (voir la figure 6.6) dans les deux copies, on suppose que chaque site i non vide contient R particules, n_i^X particules réelles et $R - n_i^X$ particules fantômes qui ne jouent aucun rôle, avec R plus grand que le nombre maximal de particules sur un même site dans les deux copies du système ($\forall j, R \geq \max(n_j^A, n_j^B)$). Chaque site non vide s'active alors avec un taux $2R$. Si on note m_i le nombre de particules communes au site i dans les deux copies et $M_i = \max(n_i^A, n_i^B) = m_i + |n_i^A - n_i^B|$ le nombre de particules au site i dans la copie qui en contient le plus, alors en cas d'activation du site i (voir la figure 6.9) :

- ① on fait sauter une particule du site i dans les deux copies avec une probabilité m_i/R ;
- ② on fait sauter une particule du site i uniquement dans la copie qui en contient le plus avec une probabilité $(M_i - m_i)/R$;
- ③ on ne change rien avec une probabilité $(R - M_i)/R$.

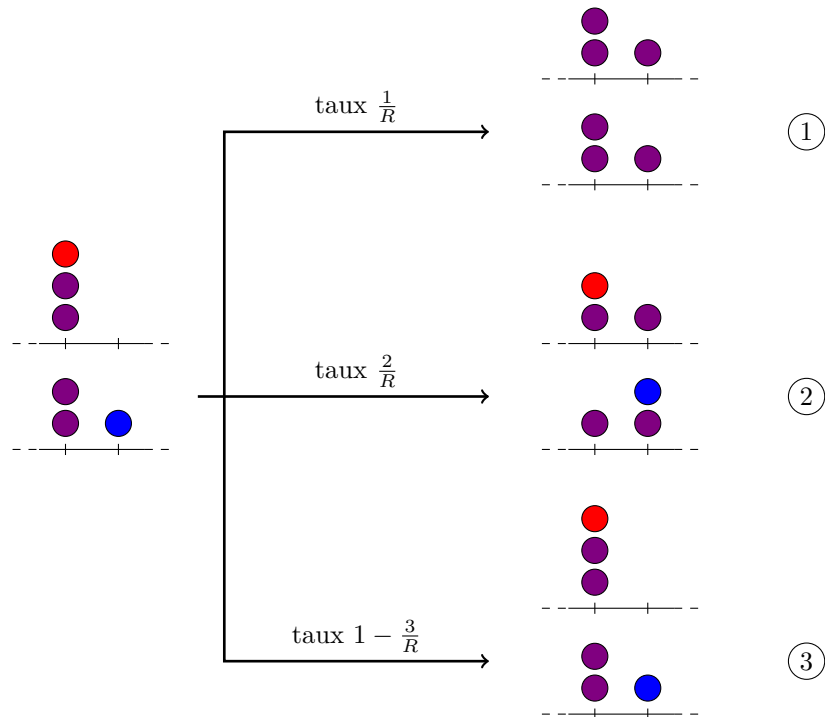
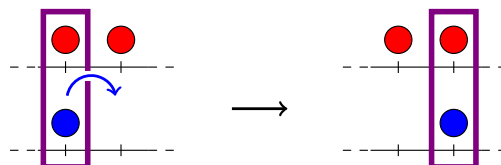


Figure 6.9 – Illustration du « bruit sur les particules » pour les particules libres. Les particules en violet correspondent aux particules présentes dans les deux copies du système, que nous appellerons particules C dans la suite.

Les deux côtés de saut (droite ou gauche) sont équiprobables, et on choisit aléatoirement entre les deux. Le cas ① correspond donc à une particule C (présente dans les deux copies) qui saute, le cas ② à un A ou à un B qui saute (suivant l'occupation du site i) et le cas ③ à un rejet. Avec cette dynamique, une fois que deux particules sont devenues une particule C , elles le restent tout le long de l'évolution et ne jouent plus aucun rôle.

Dans les particules libres et dans le SSEP, les particules de type C ne jouent aucun rôle dans la dynamique de \mathbf{u} , mais ce n'est pas le cas pour tous les modèles, et on observe alors des interactions non triviales entre les particules A/B et les particules C . C'est par exemple le cas dans le TASEP (*Totally Asymmetric Simple Exclusion Process*), qui correspond à un SSEP où les particules ne peuvent sauter que d'un côté, par exemple uniquement vers la droite. On se rend facilement compte que des particules A ou B peuvent par exemple bloquer l'une des deux particules composant une particule C , et on observe alors des inversions $A/B \leftrightarrow C$, par exemple dans la situation suivante :



Dans cet exemple, la particule C se « désintègre » en une particule A et en une particule B , la particule B saute alors que la particule A reste bloquée. La particule B reforme ensuite une particule C avec la particule A qui bloquait le passage. Contrairement au SSEP où ces inversions sont équivalentes à la situation sans particule C , elles apparaissent ici comme des particules A/B qui se déplacent à contre-sens avec des taux imprévisibles si on fait abstraction des particules C . Dans le TASEP, il faut donc tenir compte des particules C pour obtenir une dynamique correcte.

Comme précédemment, une fois qu'une particule C s'est formée par la réaction $A + B \rightarrow C$, elle ne peut plus disparaître, mais uniquement se déplacer, et l'état rempli uniquement de C est à nouveau absorbant. On pourrait imaginer des situations plus complexes où les particules C peuvent se désintégrer (par exemple avec des interactions attractives qui « déchirent » la particule C en deux en attirant le A d'un côté et le B de l'autre), mais il semble commun à tous ces modèles que l'état contenant uniquement des particules C est absorbant. En effet, avec le « bruit sur les sites », une fois les deux configurations identiques, elles le restent. Étudier plus en détail cette équivalence et les conséquences sur la distribution de l'exposant de Lyapunov est une piste de recherche pour le futur.

6.3.4 Processus $A + B \rightarrow \emptyset$ en taille finie

Le processus $A + B \rightarrow \emptyset$ a été étudié en détail par Bramson et Lebowitz [198–200] dans le cas d'un taux de réaction infini et par Lee et Cardy [192, 201, 202] en utilisant la théorie des champs et le groupe de renormalisation dans le cas d'un taux de réaction fini. Nous allons commencer par rappeler la phénoménologie de ce modèle avec des arguments intuitifs. Nous considérons un modèle de constante de diffusion D (dans notre cas, D sera égal à 1). Le système étant très sensible aux fluctuations initiales de densité [195], nous supposons que les concentrations en A et en B sont uniformes et égales à $t = 0$: $c_A(0) = c_B(0) = c_0$.

Décroissance de la densité en taille infinie

À l'instant initial, on observe des fluctuations locales de densité, qui ne vont pas être affectées immédiatement par l'annihilation et qui doivent diffuser avant de pouvoir s'annihiler. Assez rapidement, le système va développer une alternance de zones riches en A et de zones riches en B , et le processus d'annihilation va être limité par la diffusion, qui va faire se rencontrer des particules d'espèces opposées. La distance moyenne parcourue par chaque particule au temps t est $l_D = \sqrt{Dt}$. Au temps t , toutes les $c_0 l_D$ particules de chaque type initialement contenue dans une région de taille l_D ont eu le temps d'interagir. Le nombre de particules restantes est donc de l'ordre de la fluctuation initiale du nombre de particules, c'est-à-dire de l'ordre de $\sqrt{c_0 l_D}$, ce qui correspond à une densité $\sqrt{c_0/l_D} = \sqrt{c_0} (Dt)^{-1/4}$. Cet argument intuitif est dû à Toussaint et Wilczek [195], qui l'ont poussé plus loin et ont montré que la densité d'un type de particules décroissait comme

$$c(t) = \frac{\sqrt{c_0}}{(2\pi)^{3/4} (Dt)^{1/4}}. \quad (6.40)$$

Pour obtenir ce résultat, ils ont supposé que les fluctuations initiales de densité décroissaient selon l'équation de la diffusion (ils ont négligé le bruit dû à la nature stochastique des sauts), puis ils ont moyenné sur toutes les distributions de densité initiale possibles. Ils ont ensuite confirmé ce résultat à l'aide de simulations numériques. La décroissance en $t^{-1/4}$ a depuis été établie rigoureusement par Bramson et Lebowitz [200] et le préfacteur a fait l'objet de vérifications numériques plus précises [203]. Lee indique dans sa thèse [201] (page 125), en se basant sur un

calcul de groupe de renormalisation exact en dimension $d > 2$ mais nécessitant une hypothèse sur l'ordre (dans le paramètre de couplage) de certains diagrammes en dimension un, que ce coefficient est sans doute correct. En revanche, aucun résultat en taille finie n'est disponible à notre connaissance.

Évaluation naïve de la décroissance de la densité en taille finie

En réutilisant l'approche de Toussaint et Wilczek, on peut obtenir une idée du comportement en taille finie de la densité. On note u_n la fluctuation de densité au site n , c'est-à-dire que u_n vaut 1 si le site n est occupé par une particule A , 0 s'il est vide et -1 s'il est occupé par une particule B . On va faire la même hypothèse que Toussaint et Wilczek, à savoir que les fluctuations de densité décroissent suivant l'équation de la diffusion (« initial density fluctuations decay according to the diffusion equation » [195])

$$\partial_t u_n = D \Delta_d u_n = D(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \quad (6.41)$$

ce qui peut se réécrire

$$\partial_t \mathbf{u} = U \mathbf{u} \quad (6.42)$$

avec

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_L \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad U = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 0 & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & & & & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (6.43)$$

Le système étant sur un réseau discret avec des CLP, on peut utiliser les séries de Fourier discrètes pour décrire \mathbf{u} . Au vecteur \mathbf{u} de dimension L , on associe le vecteur $\hat{\mathbf{u}}$ de même dimension, dont les composantes sont données par

$$\hat{u}_k = \sum_{n=1}^L e^{-i \frac{2\pi}{L} kn} u_n = \sum_{n=1}^L \omega^{-kn} u_n \quad (6.44)$$

où $\omega = e^{i \frac{2\pi}{L}}$ est une première racine $L^{\text{ème}}$ de l'unité. En introduisant la matrice carrée F de taille L , dont les éléments sont donnés par $(F)_{k,n} = \omega^{-kn}$, on peut réécrire $\hat{\mathbf{u}}$ sous la forme

$$\hat{\mathbf{u}} = F \mathbf{u}. \quad (6.45)$$

La matrice F étant inversible, d'inverse $(F^{-1})_{k,n} = \frac{\omega^{kn}}{L}$, on peut exprimer \mathbf{u} à partir de $\hat{\mathbf{u}}$

$$\mathbf{u} = F^{-1} \hat{\mathbf{u}}. \quad (6.46)$$

On peut utiliser cette relation pour déduire de (6.42) l'équation d'évolution de $\hat{\mathbf{u}}$

$$\partial_t \hat{\mathbf{u}} = F U F^{-1} \hat{\mathbf{u}} \quad (6.47)$$

où $F U F^{-1}$ est une matrice diagonale d'éléments $(F U F^{-1})_{n,m} = -\delta_{n,m} 4D \sin^2(\frac{\pi}{L} m)$. On peut alors facilement résoudre l'équation d'évolution de $\hat{\mathbf{u}}$

$$\forall k \in \llbracket 1, L \rrbracket, \hat{u}_k(t) = \hat{u}_k(0) e^{-4D \sin^2(\frac{\pi}{L} k) t}. \quad (6.48)$$

Or le système contient autant de A que de B , ce qui impose $\hat{u}_0 = \sum_{n=1}^L u_n = 0$. On peut maintenant inverser la transformation de Fourier à l'aide de F^{-1} , ce qui nous donne l'évolution de \mathbf{u}

$$\forall n \in \llbracket 1, L \rrbracket, u_n(t) = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \omega^{kn} \hat{u}_k(0) e^{-4D \sin^2(\frac{\pi}{L}k)t}. \quad (6.49)$$

La densité $c(t)$ en particules A au temps t est la moitié de la norme 1 de \mathbf{u} ($\|\mathbf{u}\|_1$ est égale au nombre total de particules dans le système), et varie donc comme

$$c(t) = \frac{1}{2L} \sum_{n=1}^L \left| \sum_{k=1}^L \omega^{kn} \hat{u}_k(0) e^{-4D \sin^2(\frac{\pi}{L}k)t} \right| \quad (6.50)$$

Aux temps longs, la somme intérieure est dominée par l'exponentielle avec le plus grand argument

$$c(t) \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{1}{2} |\hat{u}_1(0)| e^{-4D \sin^2(\frac{\pi}{L})t} \underset{t \rightarrow +\infty}{\approx} e^{-4D \sin^2(\frac{\pi}{L})t} \quad (6.51)$$

si $|\hat{u}_1(0)| \neq 0$, ce qui est a priori le cas vu que $\mathbf{u}(0)$ est aléatoire. Dans la limite de grande taille, on peut développer le sinus dans l'exponentielle, et on obtient

$$c(t) \underset{\substack{t \rightarrow +\infty \\ L \rightarrow +\infty}}{\approx} e^{-\frac{4D\pi^2}{L^2}t} \quad (6.52)$$

Ce calcul repose sur une hypothèse assez grossière, mais il permet d'avoir une idée du comportement en taille finie de la décroissance du nombre de particules. L'équation (6.50) montre que les fluctuations initiales de densité, qui fixent $\hat{\mathbf{u}}(0)$, semblent jouer un rôle important dans la décroissance du nombre de particules. En effet, la valeur relative des différents \hat{u}_k va influencer le temps au bout duquel le terme dominant à temps long sera prépondérant. On s'attend donc à ce que les fluctuations initiales de densité jouent un rôle sur les fluctuations du taux de décroissance en taille finie. On démontrera une généralisation de ce résultat grâce l'équivalence de la section précédente entre le processus $A + B \rightarrow \emptyset$ et les deux SSEPs couplés à la fin de cette section.

Distance interdomaines

Assez rapidement, les zones légèrement plus denses en A vont avoir éliminé toutes les particules B et inversement. On va alors observer de grands domaines de taille de l'ordre \sqrt{t} , composés majoritairement d'un type de particules et séparés par une distance L_{AB} . Les réactions d'annihilation auront alors lieu à l'interface entre un domaine A et un domaine B . Comme la taille des domaines croît comme \sqrt{t} , la densité de zone de réaction ρ_{zr} décroît comme $t^{-1/2}$. Dans ces zones de réaction, les particules A et B doivent parcourir une distance de l'ordre de L_{AB} avant de se rencontrer, et les réactions ont donc lieu à un taux τ_{zr} de l'ordre de L_{AB}^2 dans chaque zone. La concentration décroît donc comme

$$\frac{dc}{dt} \simeq -\frac{\rho_{zr}}{\tau_{zr}} \approx -\frac{t^{-1/2}}{L_{AB}^2} \quad (6.53)$$

or $\frac{dc}{dt}$ varie en $t^{-5/4}$, ce qui implique que L_{AB} varie en $t^{3/8}$. Cet argument est dû à Leyvraz et Redner [204].

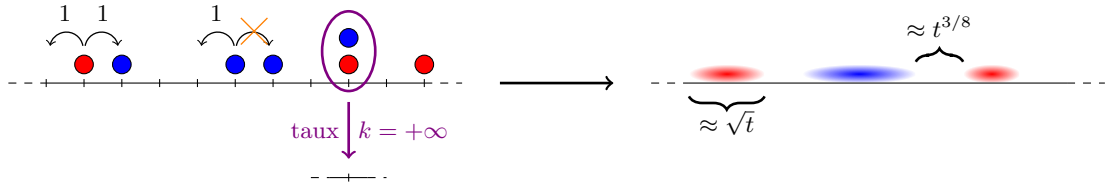


Figure 6.10 – Évolution typique du processus $A + B \rightarrow \emptyset$ en taille infinie. À gauche, les domaines rouges représentent des régions riches en particules A et les domaines bleus des régions riches en particules B .

Évolution temporelle

Le comportement typique de ce système en taille infini est résumé sur la figure 6.10, et permet de déterminer l'instant où les effets de taille finie font commencer à se faire sentir. Initialement, les particules A et B sont réparties uniformément, et on va donc observer un grand nombre d'annihilations aux temps courts. Le système ne va pas sentir la taille finie de la chaîne, et le nombre de particules va décroître selon une loi de puissance

$$c(t) \approx t^{-1/4}. \quad (6.54)$$

On va observer la formation de domaines de taille de l'ordre de $t^{1/2}$ composés majoritairement de A ou de B , séparés par des distances de l'ordre de $t^{3/8}$. Les réactions d'annihilation n'auront alors plus lieu qu'à l'interface entre ces domaines. Les domaines les plus petits vont être éliminés par des domaines plus grands et le nombre de domaines dans le système va décroître, jusqu'à ce qu'il n'en reste plus que deux : un très riche en A et l'autre très riche en B . Lorsque le nombre de domaines va devenir fini, la taille du système va commencer à se faire sentir et les effets de taille finie vont commencer à dominer. Cela correspond au temps où les domaines auront une taille de l'ordre de celle du système, donc à un temps qui varie avec la taille du système en L^2 . La bonne échelle de temps pour regarder les effets de taille finie est donc t/L^2 , ce qui est cohérent avec (6.52).

Décroissance de la densité en taille finie

L'existence d'un régime exponentiel dû aux effets de taille finie est bien connue [203, 205–208] mais il n'existe, à notre connaissance, aucune prédiction analytique pour le taux de décroissance du nombre de particules dans ce processus en taille finie. Nous allons maintenant en établir une en nous basant sur l'équivalence avec les 2 SSEPs couplés. Grâce à cette équivalence, on constate que le vecteur \mathbf{u} qui représente les fluctuations de densité dans le processus $A + B \rightarrow \emptyset$ avec $D = 1$ est le même que le vecteur \mathbf{u} défini dans les 2 SSEPs couplés sous-jacents, où il représente la différence entre les 2 copies du SSEP. Or, si les résultats obtenus en utilisant l'hydrodynamique fluctuante sont valides pour le SSEP microscopique, on s'attend à

$$\|\mathbf{u}(t)\| \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \|\mathbf{u}(0)\| e^{\tilde{\lambda}t} \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \|\mathbf{u}(0)\| e^{\lambda \frac{t}{L^2}}. \quad (6.55)$$

La moyenne et les fluctuations de λ se déduisent de la fonction génératrice des cumulants (5.38)

$$\langle \lambda \rangle = -4\pi^2 \quad (6.56)$$

$$\langle \lambda^2 \rangle_c = \frac{\pi^2(1 - 2\rho_0)^2}{L\tau\rho_0(1 - \rho_0)} \quad (6.57)$$

$$\langle \lambda^3 \rangle_c = -\frac{9\pi^2(1-2\rho_0)^4}{(L\tau\rho_0(1-\rho_0))^2} \quad (6.58)$$

$$\langle \lambda^4 \rangle_c = \frac{3\pi^2(1-2\rho_0)^2(55-8\rho_0(1-\rho_0)(37-42\rho_0(1-\rho_0)))}{2^7(L\tau\rho_0(1-\rho_0))^3} \quad (6.59)$$

$$\langle \lambda^5 \rangle_c = -\frac{45\pi^2(1-2\rho_0)^6(309-212\rho_0(1-\rho_0))}{2^{12}(L\tau\rho_0(1-\rho_0))^4} \quad (6.60)$$

où $\rho_0 = N/L$ est la densité totale des SSEPs et $\tau = t/L^2$. Il nous faut relier ρ_0 à une quantité du processus de réaction-diffusion pour pouvoir transposer ces résultats à ce dernier. On suppose que les deux copies du SSEP sont initialement remplies uniformément avec $N = \rho_0 L$ particules. Une fois l'équivalence avec le processus d'annihilation effectuée, on constate que concentration en particules A à l'instant initial vaut $c_0 = \rho_0(1-\rho_0)$. En effet, pour avoir une particule A sur un site donné, il faut qu'il y ait une particule sur ce site dans la copie A du SSEP, ce qui a une probabilité ρ_0 , et qu'il n'y ait pas de particule B sur ce même site, ce qui est associé à la probabilité $(1-\rho_0)$. Ces deux événements étant indépendants, la probabilité jointe est juste le produit des probabilités. Comme $c(t) = \|\mathbf{u}\|/2$, on obtient alors

$$c(t) \underset{\substack{t \rightarrow +\infty \\ L \rightarrow +\infty}}{\approx} e^{\lambda \frac{t}{L^2}} \quad (6.61)$$

avec

$$\langle \lambda \rangle = -4\pi^2 \quad (6.62)$$

$$\langle \lambda^2 \rangle_c = \frac{\pi^2(1-4c_0)}{L\tau c_0} \quad (6.63)$$

$$\langle \lambda^3 \rangle_c = -\frac{9\pi^2(1-4c_0)^2}{(L\tau c_0)^2} \quad (6.64)$$

$$\langle \lambda^4 \rangle_c = \frac{3\pi^2(1-4c_0)(55-8c_0(37-42c_0))}{2^7(L\tau c_0)^3} \quad (6.65)$$

$$\langle \lambda^5 \rangle_c = -\frac{45\pi^2(1-4c_0)^3(309-212c_0)}{2^{12}(L\tau c_0)^4} \quad (6.66)$$

Cette prédiction pour la décroissance du nombre de particules dans le processus $A + B \rightarrow \emptyset$ en taille finie est la première à notre connaissance. À l'ordre dominant en t et en L , on retrouve notamment que la décroissance typique du nombre de particule A s'exprime

$$\langle c(t) \rangle \underset{\substack{L \rightarrow +\infty \\ t \rightarrow +\infty}}{\sim} c_0 \exp\left(-\frac{4\pi^2}{L^2}t\right) \quad (6.67)$$

ce qui est cohérent avec notre résultat (6.52) basé sur l'approximation de Toussaint et Wilczek .

6.3.5 Vérification numérique

Cette prédiction repose sur une hypothèse : la validité de notre approche hydrodynamique pour décrire le processus microscopique sous-jacent. Alors que KMP a confirmé que cette approche était bien valide pour ce modèle, il pourrait en être autrement pour le SSEP, pour lequel nous avons rencontré des difficultés supplémentaires (choix de la norme pour définir l'exposant de

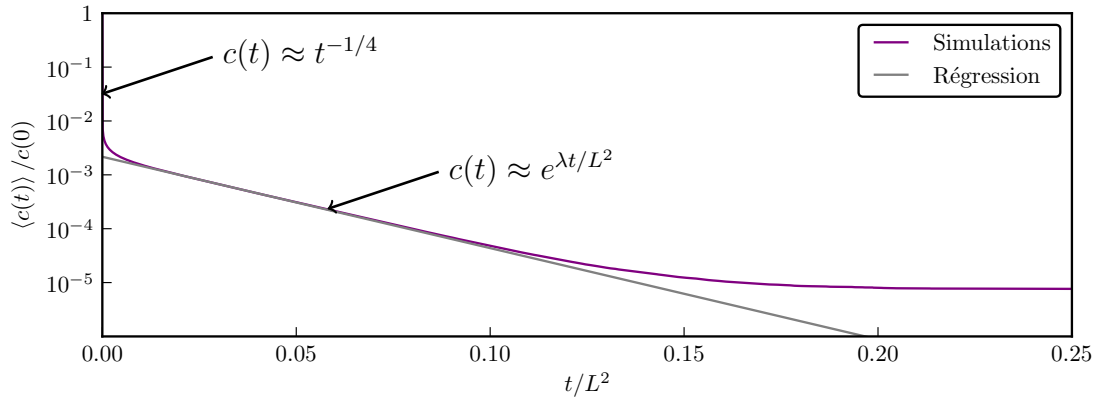


Figure 6.11 – Simulations de $A + B \rightarrow \emptyset$ avec l’algorithme RRC. L’état initial est composé de $c_0 L$ particules de chaque type réparties uniformément sur le réseau de taille L . La taille du système est $L = 2^{20}$, la densité initiale de chaque espèce est $c_0 = 1/8$ et la moyenne est réalisée sur la distribution stationnaire extraite de 1 000 simulations, en ne prenant en compte que celles qui n’ont pas encore atteint l’état absorbant (vide). Après une décroissance en loi de puissance d’exposant $-1/4$ prédit pour un système infini, on observe l’apparition d’une décroissance exponentielle due à la taille finie du système. Le taux de décroissance (en unité de τ) mesuré numériquement est $\lambda = -39$, ce qui est à quelques pourcents près la valeur $\lambda = -4\pi^2$ prédite par notre équivalence avec les deux SSEPs couplés.

Lyapunov, échec de la construction naïve de l’hydrodynamique fluctuante). Pour vérifier cette prédiction, nous avons donc réalisé une simulation numérique de $A + B \rightarrow \emptyset$.

Comme expliqué précédemment, une fois les premiers instants passés, on se retrouve avec une succession de domaines contenant majoritairement un seul type de particules et les réactions d’annihilation se font alors dans les zones interdomaines. Les particules rencontrent donc majoritairement des particules de leur type et on observe donc peu d’évènements d’annihilation par rapport au nombre total d’évènements (saut et annihilation). Lors d’une simulation naïve de l’équation maîtresse associée à ce processus, beaucoup de temps de calcul est gaspillé aux temps longs pour simuler des marches aléatoires de particules qui n’interagissent quasiment jamais. Or la durée au bout de laquelle les effets de taille finie se font ressentir varie comme L^2 . C’est pourquoi il est en général très difficile d’observer numériquement le régime de taille finie pour des grands systèmes en simulant naïvement le processus. Des méthodes ont été développées pour contourner ce problème, notamment la *Renormalized Reaction-Cell method* (RRC) par ben-Avraham [209–212]. Son principe est de renormaliser le réseau en groupant les sites deux par deux pour former un nouveau site dès que le nombre total de particules est divisé par deux. L’espacement entre les nouveaux sites ainsi formés est donc deux fois plus important qu’avant. Pour que l’échelle de temps de la diffusion demeure inchangée, il faut alors diviser le taux de saut par 4. Cela revient à effectuer un changement d’échelle au fur et à mesure que le système se vide. Le principe de la RRC et l’implémentation utilisée ici, qui repose sur un algorithme sans rejet, sont présentés en détail dans l’annexe H.

Les simulations réalisées en utilisant cet algorithme confirment notre prédiction (6.67) pour la décroissance du nombre moyen de particules (voir la figure 6.11). En revanche, assez rapidement on se retrouve avec très peu de particules dans le système (moins d’une dizaine) qui ne se

rencontrent (quasiment) jamais et le nombre de particules cesse de décroître exponentiellement. Le régime exponentiel a donc une durée de vie assez courte (de l'ordre de $L^2/10$), ce qui n'est pas suffisant pour mesurer précisément la variance de λ , qui dépend à la fois de L et de τ , et donc à fortiori les cumulants d'ordre supérieur. La solution serait de pouvoir reremplir le système (ce qui reviendrait à renormaliser \mathbf{u}) mais, à cause de la nature discrète des particules et de l'exclusion entre les particules, nous n'avons pas trouvé de moyen simple de le faire sans modifier complètement la dynamique. C'est un des points qui mériterait d'être approfondi dans le futur.

6.4 Conclusion

Dans le chapitre précédent, nous avons calculé les fluctuations (par l'intermédiaire des cinq premiers cumulants) de l'exposant de Lyapunov pour un ensemble de systèmes : les systèmes diffusifs décrits par l'hydrodynamique fluctuante. Ce calcul supposait la validité de l'hydrodynamique fluctuante pour décrire la dynamique tangente (et l'exposant de Lyapunov) et il reposait sur un certain nombre d'hypothèses : col stationnaire, comportement d'échelle des champs de réponse, etc. L'exposant de Lyapunov « hydrodynamique » pouvait donc à priori être différent de celui des modèles microscopiques sous-jacents.

Dans ce chapitre, nous avons défini l'exposant de Lyapunov pour des modèles sur réseaux décrits par une équation maîtresse. Cette définition rappelle la propagation de défauts et se heurte aux mêmes problèmes. Nous avons ensuite vérifié que l'exposant de Lyapunov calculé dans le modèle original (microscopique) de KMP était cohérent avec celui calculé dans l'hydrodynamique fluctuante, ce qui renforce notre confiance en les résultats du chapitre précédent. Puis nous avons présenté une équivalence entre la dynamique du vecteur tangent dans les systèmes de particules sur réseau et les processus de réaction-diffusion avec état absorbant. En utilisant cette équivalence, nous avons relié l'exposant de Lyapunov du SSEP à la décroissance du nombre de particules dans le processus de réaction-diffusion $A + B \rightarrow \emptyset$, ce qui nous a permis d'obtenir de nouveaux résultats sur ce dernier en taille finie.

Conclusion et perspectives

Le fil conducteur de cette thèse est la mesure des fluctuations de chaotité dans les systèmes étendus. Pour les quantifier, nous avons utilisé une observable centrale de la théorie des systèmes dynamiques, le spectre de Lyapunov, qui mesure la sensibilité aux conditions initiales d'une trajectoire et fournit une connaissance approfondie de l'espace des phases. Après avoir motivé cette étude dans l'introduction et dans le début du chapitre 1, nous avons introduit le spectre de Lyapunov et présenté ses propriétés dans la suite de ce chapitre, avant de montrer qu'il était très difficile d'accéder à ses fluctuations parce qu'il vérifiait un principe de grandes déviations dans la limite de temps long.

Pour contourner ce problème, et plus généralement pour accéder aux fluctuations des observables vérifiant un principe de grandes déviations, le formalisme thermodynamique a été développé par analogie avec l'ensemble canonique en thermodynamique statistique. Il permet d'accéder aux trajectoires de chaotité atypique en déformant la mesure de probabilité au travers d'un paramètre α , qui est conjugué au spectre de Lyapunov et joue le rôle d'une température pour la chaotité. Nous avons présenté ce formalisme et son lien avec la thermodynamique statistique dans le chapitre 2. Même si la température α qui apparaît dans cette approche n'a pas de sens physique clair, elle se révèle être un outil fécond à la disposition du théoricien pour aller sonder des trajectoires anormalement stables ou chaotiques.

De plus, il est possible de fixer ce paramètre dans une simulation numérique en échantillonnant les trajectoires de manière contrôlée. C'est l'objet du chapitre 3, qui présente un algorithme Monte-Carlo de dynamique des populations permettant de réaliser la mesure biaisée du chapitre précédent : la dynamique biaisée par les Lyapunov. Cet algorithme a été élaboré avant cette thèse, mais nous avons amélioré son implémentation pour qu'il gagne en efficacité. D'autres approches existent pour exploiter ce formalisme numériquement, et il serait intéressant de comparer tous ces algorithmes entre eux.

Lors de la mise au point de l'algorithme, Tailleux [47] avait décrit sa généralisation au $k^{\text{ème}}$ exposant de Lyapunov, mais ne l'avait jamais mise en pratique. Nous l'avons fait dans le chapitre 4, pour illustrer sa faculté à isoler les variétés stables et instables émergeant d'un point col. Cette généralisation nous a aussi permis d'isoler des trajectoires avec plusieurs modes de respiration chaotiques stables dans la chaîne FPU, alors que ce type de trajectoire est hautement improbable [3]. Par ailleurs, grâce aux améliorations apportées à l'implémentation de l'algorithme, nous avons pu mesurer l'énergie libre dynamique dans la chaîne FPU et dans une chaîne d'applications en forme de tente couplées. Il resterait à étudier le comportement d'échelle en taille finie pour pouvoir discuter de la nature des transitions de phase dynamique dans ces systèmes.

Dans le chapitre 5, nous avons appliqué ce formalisme à un ensemble de modèles qui servent de banc d'essai à de nombreuses idées en physique statistique : les modèles diffusifs avec un mode conservé. En utilisant une description hydrodynamique (stochastique) de ces systèmes et les méthodes de théorie des champs telles que l'intégrale de chemin et la méthode du col, nous avons alors pu calculer les premiers ordres en α de l'énergie libre dynamique, qui n'est autre que la fonction génératrice des cumulants. Nous avons ainsi eu accès aux premiers cumulants du plus grand exposant de Lyapunov pour cette classe de modèles. Dans le cas particulier du SSEP, nous avons remarqué que tous les cumulants au-delà de la moyenne s'annulaient à l'ordre dominant en la taille du système pour un SSEP comportant autant de particules que de trous, ce qui pose la question des fluctuations autour du col et de la dépendance de ces cumulants avec la taille du système. Par ailleurs, de nombreuses autres questions restent en suspens. Que ce passe-t-il pour $\alpha < 0$, c'est-à-dire pour des trajectoires anormalement stables ? Existe-t-il une forme générique pour les cumulants de l'exposant de Lyapunov ? Quel est le lien entre l'exposant de Lyapunov calculé dans ce régime et la description microscopique des modèles correspondants ?

Le but du chapitre 6 était de répondre à cette dernière question. Pour cela, nous avons introduit une définition de l'exposant de Lyapunov dans les modèles sur réseaux définis par une équation maîtresse (c'est-à-dire par des taux de transition entre états). Nous avons alors remarqué que cette définition renvoyait à la question de la propagation de défauts, et que nous devions faire face aux mêmes ambiguïtés : des détails de la dynamique, comme la nature du bruit, qui n'avaient aucune influence sur l'évolution du système se révèlent cruciaux pour étudier sa tolérance aux perturbations. Nous avons ensuite comparé numériquement la moyenne et la variance de l'exposant de Lyapunov défini dans le modèle de KMP avec son analogue hydrodynamique, et avons montré que les deux définitions sont cohérentes. Les autres cumulants sont hors d'atteinte pour l'instant du fait des erreurs numériques. Nous avons ensuite étudié l'exposant de Lyapunov dans le SSEP, où le problème de la définition de la dynamique jointe, et plus particulièrement du bruit, se manifeste avec acuité. En prenant conscience que l'exposant de Lyapunov dans le SSEP était relié à la décroissance du nombre de particules dans le processus de réaction-diffusion $A + B \rightarrow \emptyset$, nous avons pu obtenir de nouveaux résultats sur le comportement de cette dernière en taille finie. Ces résultats reposent sur une distribution de probabilité, et nous avons vérifié numériquement que la prédiction pour la moyenne était correcte. Nous n'avons en revanche pas pu accéder aux cumulants d'ordre supérieur dans les simulations numériques pour l'instant.

Pour approfondir ces travaux, il serait intéressant d'étudier plus en détail ce qui se passe pour α négatif dans les systèmes diffusifs à l'aide de la LWD (en utilisant l'approche de Lecomte et Tailleur [94] pour adapter l'algorithme de clonage à des processus définis par une équation maîtresse). On pourrait alors accéder aux profils associés à un exposant de Lyapunov anormalement faible, et essayer de comprendre pourquoi l'hydrodynamique fluctuante est mise en défaut dans ce régime.

Par ailleurs, Mendl et Spohn [213–215] ont récemment introduit une hydrodynamique fluctuante pour décrire la chaîne FPU. On peut donc espérer pouvoir accéder aux fluctuations du plus grand exposant de Lyapunov dans ce système en utilisant l'approche du chapitre 5, et dériver analytiquement l'expression de l'énergie libre dynamique. Si cette approche est fructueuse, on aurait par la même occasion accès aux trajectoires typiques pour différentes valeurs de α , ce qui permettrait sans doute de montrer que les trajectoires typiques pour $\alpha > 0$ sont des modes de respiration chaotiques tandis que les trajectoires typiques pour $\alpha < 0$ sont des solitons.

Annexe A

Produit extérieur

Les principales définitions et propriétés sur le produit extérieur utiles pour la lecture de cette thèse sont résumées ici.

A.1 Produit extérieur

A.1.1 Définition

Le produit extérieur est une opération associative, bilinéaire et antisymétrique pouvant porter sur les vecteurs de tout espace vectoriel. On la note \wedge . Le résultat du produit extérieur de deux vecteurs a et b est une nouvelle entité $a \wedge b$, appelée un bivecteur, qui peut être interprétée comme un parallélogramme orienté. On peut alors itérer l'opération k fois, pour former des k -vecteurs $a_1 \wedge \dots \wedge a_k$. Les k -vecteurs sont aussi appelés hypervecteurs de grade k .

A.1.2 Illustration des propriétés du produit extérieur

Soit E un \mathbb{K} -espace vectoriel.

Associativité

$$\forall (a, b, c) \in E^3, \quad (a \wedge b) \wedge c = a \wedge (b \wedge c) \quad (\text{A.1})$$

Antisymétrie

$$\forall (a, b) \in E^2, \quad a \wedge b = -b \wedge a \quad (\text{A.2})$$

Conséquence

$$\forall a \in E, \quad a \wedge a = 0 \quad (\text{A.3})$$

Bilinéarité

$$\forall (a, b) \in E^2, \forall \alpha \in \mathbb{K}, \quad (\alpha a) \wedge b = a \wedge (\alpha b) = \alpha (a \wedge b) \quad (\text{A.4})$$

$$\forall (a, b, c) \in E^3, \quad a \wedge (b + c) = (a \wedge b) + (a \wedge c) \quad (\text{A.5})$$

$$\forall (a, b, c) \in E^3, \quad (a + b) \wedge c = (a \wedge c) + (b \wedge c) \quad (\text{A.6})$$

A.2 Puissance extérieure

Soit E un \mathbb{K} -espace vectoriel de dimension n . On appelle $k^{\text{ème}}$ puissance extérieure $\Lambda^k(E)$ l'ensemble des k -vecteurs construits à partir des vecteurs de E :

$$\Lambda^k(E) = \{a_1 \wedge \cdots \wedge a_k \mid (a_1, \dots, a_k) \in E^k\} \quad (\text{A.7})$$

Par convention :

$$\Lambda^0(E) = \mathbb{K} \quad (\text{A.8})$$

$$\Lambda^1(E) = E \quad (\text{A.9})$$

De par l'antisymétrie du produit extérieur :

$$\forall n > k, \Lambda^k(E) = \{0_E\} \quad (\text{A.10})$$

Si (e_1, \dots, e_n) est une base de E , alors $\{e_{i_1} \wedge \cdots \wedge e_{i_k} \mid 1 \leq i_1 < \cdots < i_k \leq n\}$ est une base de $\Lambda^k(E)$. On a donc $\dim \Lambda^k(E) = \binom{n}{k}$.

A.3 Algèbre extérieure

L'algèbre extérieure $\Lambda(E)$ est la somme directe des puissances extérieures successives :

$$\Lambda(E) = \bigoplus_{k=0}^n \Lambda^k(E) \quad (\text{A.11})$$

Elle contient l'ensemble des hypervecteurs et a une structure d'algèbre dont la loi additive est celle de E et la loi multiplicative est le produit extérieur. C'est une algèbre graduée car le produit d'un k -vecteur et d'un p -vecteur est un $(k+p)$ -vecteur. Sa dimension est $\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} = 2^n$.

A.4 Produit scalaire

On peut définir un produit scalaire sur la $k^{\text{ème}}$ puissance extérieure :

$$\langle a_1 \wedge \cdots \wedge a_k \mid b_1 \wedge \cdots \wedge b_k \rangle \equiv \det M \text{ avec } M_{ij} = \langle a_i \mid b_j \rangle \quad (\text{A.12})$$

A.5 Lien avec les volumes des parallélépipèdes

Le volume \mathcal{V}_k du parallélépipède de dimension k construit sur les vecteurs (a_1, \dots, a_k) peut être exprimé comme la norme du k -vecteur $V_k = a_1 \wedge \dots \wedge a_k$:

$$\mathcal{V}_k = \|V_k\| = \langle \mathbf{u}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k | \mathbf{u}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k \rangle^{1/2} \quad (\text{A.13})$$

Démonstration :

Le cas d'un parallélépipède aplati est trivial, l'égalité précédente nous donnant $0 = 0$.

Regardons maintenant l'autre cas, où les vecteurs (a_1, \dots, a_k) forment une famille libre. On appelle $E' = \text{Vect}(a_1, \dots, a_k)$ le sous-espace vectoriel de dimension k engendré par ces vecteurs. Soit $\mathcal{B}' = (e'_1, \dots, e'_k)$ une base orthonormée de E' . On peut décomposer chaque vecteur a_j sur cette base :

$$a_j = \sum_{i=1}^k \alpha_{i,j} e'_i \quad (\text{A.14})$$

Le volume \mathcal{V}_k est alors donné par

$$\mathcal{V}_k = \left| \det_{\mathcal{B}'}(a_1, \dots, a_k) \right| = \left| \det \alpha \right| \quad (\text{A.15})$$

Le k -vecteur V_k est lui donné par :

$$V_k = \sum_{i_1=1}^k \dots \sum_{i_k=1}^k \left(\prod_{j=1}^k \alpha_{i_j, j} \right) e_{i_1} \wedge \dots \wedge e_{i_k} \quad (\text{A.16})$$

Le produit extérieur étant antisymétrique, les e_{i_j} doivent être deux à deux distincts, et donc (i_1, \dots, i_k) doit être une permutation de $(1, \dots, k)$. On introduit alors l'ensemble des permutations de k éléments \mathfrak{S}_k , et on obtient :

$$V_k = \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_k} \left(\prod_{j=1}^k \alpha_{\sigma(j), j} \right) e_{\sigma(1)} \wedge \dots \wedge e_{\sigma(k)} \quad (\text{A.17})$$

On peut simplifier cette somme en introduisant la permutation $\varepsilon(\sigma)$ d'une permutation σ . La signature d'une permutation σ vaut $+1$ si σ est composée d'un nombre pair d'inversions et -1 si σ est composée d'un nombre impair d'inversions. On a alors :

$$V_k = \left[\sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_k} \varepsilon(\sigma) \left(\prod_{j=1}^k \alpha_{\sigma(j), j} \right) \right] e_1 \wedge \dots \wedge e_k \quad (\text{A.18})$$

Comme $\langle e_1 \wedge \dots \wedge e_k | e_1 \wedge \dots \wedge e_k \rangle = 1$, la norme de ce k -vecteur est donc donné par

$$|V_k| = \left| \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_k} \varepsilon(\sigma) \left(\prod_{j=1}^k \alpha_{\sigma(j), j} \right) \right| = \left| \det \alpha \right| \quad (\text{A.19})$$

où on a reconnu le développement de la formule de Leibniz pour le déterminant de α .

On a donc bien

$$\mathcal{V}_k = |V_k| = |\det \alpha| \quad (\text{A.20})$$


Annexe B

Principe de grandes déviations

La définition et les principaux résultats sur le principe de grandes déviations utiles pour la lecture de cette thèse sont résumés ici. Pour une présentation plus générale et complète, voir [41].

B.1 Pile ou face

Commençons par un exemple simple. On prend une pièce équilibrée et on la lance N fois. On note X_i la variable aléatoire associée au résultat du $i^{\text{ème}}$ lancer :


$$X_i = \begin{cases} 0 & \text{si c'est pile} \\ 1 & \text{si c'est face} \end{cases} \quad \text{avec} \quad \mathbb{P}(0) = \mathbb{P}(1) = \frac{1}{2}. \quad (\text{B.1})$$

On s'intéresse à la moyenne d'ensemble sur les N lancers

$$S_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \quad (\text{B.2})$$

dans la limite où N est grand. Comme les X_i sont des variables indépendantes identiquement distribuées, la moyenne μ de S_N est donnée par $\mu \equiv \langle S_N \rangle = \langle X_i \rangle = 1/2$ et sa variance σ^2 est donnée par $\sigma^2 \equiv \text{Var}(S_N) = \text{Var}(X_i)/N = 1/4N$. De plus, comme les X_i sont de variance finie, on peut leur appliquer la loi des grands nombres et le théorème central limite.

La loi des grands nombres nous dit que, dans la limite $N \rightarrow +\infty$, la moyenne d'ensemble S_N converge vers sa moyenne :

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} S_N = \mu = \frac{1}{2}. \quad (\text{B.3})$$

Autrement dit, si on lance la pièce un grand nombre de fois, on obtiendra le même nombre de piles que de faces.

Plus précisément, d'après le théorème central limite, S_N converge vers une gaussienne de moyenne μ et de variance σ^2 au voisinage de μ (c'est-à-dire pour $|s - \mu| \lesssim \frac{1}{\sqrt{N}}$) :

$$P(S_N = s) \underset[N \rightarrow +\infty]{s \rightarrow \mu} \sim \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{s - \mu}{\sigma}\right)^2\right] = N\sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left[-N2\left(s - \frac{1}{2}\right)^2\right]. \quad (\text{B.4})$$

On remarque que notre distribution de probabilité se pique de plus en plus quand on augmente N , jusqu'à converger vers une distribution de Dirac. Les fluctuations autour de la moyenne sont donc de plus en plus faibles au fur et à mesure que N augmente, et l'approximation gaussienne décrit de mieux en mieux la distribution entière.

Regardons ce qu'on peut dire des fluctuations autour de la gaussienne, toujours dans la limite $N \rightarrow +\infty$. Pour avoir $S_N = s$, il faut avoir eu sN faces et $(1 - s)N$ piles. Soit F_N la variable aléatoire

$$F_N = \sum_{i=1}^N X_i \quad (\text{B.5})$$

qui compte le nombre de faces obtenues sur N lancers. Le résultat du lancer de N pièces indépendantes est donné par une loi binomiale de paramètre $1/2$:

$$\mathbb{P}(F_N = f) = \binom{N}{f} \frac{1}{2^N} = \frac{N!}{2^N f!(N - f)!} \quad (\text{B.6})$$

Lorsque $N \rightarrow +\infty$, on s'attend à ce que le nombre de faces effectivement observé, ainsi que le nombre de piles effectivement observé, soient grand, de telle façon qu'on peut considérer que f et $N - f$ tendent eux aussi vers l'infini. On peut alors utiliser la formule de Stirling

$$N! \underset[N \rightarrow \infty]{} \sim \sqrt{2\pi N} N^N e^{-N} \quad (\text{B.7})$$

pour développer le coefficient binomial. On en déduit

$$\mathbb{P}(F_N = f) \underset[N \rightarrow +\infty]{f \rightarrow +\infty} \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi f(1 - \frac{f}{N})}} \exp\left[N \ln \frac{N}{2} - f \ln f - (N - f) \ln (N - f)\right]. \quad (\text{B.8})$$

On effectue alors le changement de variable $S = F/N$

$$P(S_N = s) = \mathbb{P}(F_N = sN) \frac{df}{ds} = N \mathbb{P}(F_N = sN), \quad (\text{B.9})$$

qui conduit à

$$P(S_N = s) \underset[N \rightarrow +\infty]{} \sim \sqrt{\frac{N}{2\pi s(1 - s)}} \exp\left[-N I(s)\right] \quad (\text{B.10})$$

avec $I(s) \equiv \ln 2 + s \ln s + (1 - s) \ln (1 - s)$. C'est le terme exponentiel qui domine le produit, le préfacteur étant surtout un facteur de normalisation. On remarque que, quand N augmente, $P(s)$ se pique exponentiellement autour de sa valeur la plus probable s^* , donnée par $I'(s^*) = 0$, qui vaut μ . On dit que S_N suit un principe de grandes déviations, et $I(s)$ est la fonction de taux associée. Cette équation est une généralisation de l'équation (B.4), que l'on peut retrouver en faisant un développement limité de l'équation (B.10) en $s = 1/2$. L'écart entre l'approximation gaussienne (théorème central limite) et le principe de grandes déviations est illustré sur la figure B.1.

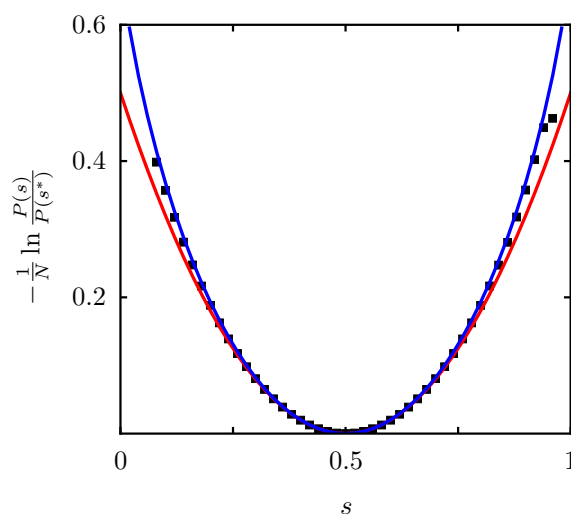


Figure B.1 – Théorème central limite versus principe de grandes déviations. Les points noirs représentent une mesure numérique de S_{50} sur 10^{11} simulations. L'approximation gaussienne $2(s - 1/2)^2$ est en rouge et la fonction de taux $I(s) = \ln 2 + s \ln s + (1 - s) \ln(1 - s)$ du principe de grandes déviations est en bleu. On remarque que, comme attendu, l'approximation gaussienne décrit bien le voisinage de $s^* = 0,5$ alors que le principe de grandes déviations décrit bien toute la distribution de probabilité.

B.2 Principe de grandes déviations

Soit (A_n) une suite de variables aléatoires indexées par un entier n et soit $P(a, n)$ la probabilité que $A_n \in [a, a + da]$. On dit que $P(a, n)$ satisfait un principe de grandes déviations si la limite

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} -\frac{1}{n} \ln P(a, n) = I(a) \quad (\text{B.11})$$

existe. La fonction I est appelée la fonction de taux. On écrit alors

$$P(a, n) \underset{n \rightarrow +\infty}{\approx} e^{-nI(a)} \quad (\text{B.12})$$

où \approx peut être interprété comme une égalité sur une échelle logarithmique. Plus précisément, quand nous écrivons $a_n \underset{n \rightarrow +\infty}{\approx} b_n$, cela signifie

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln a_n = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln b_n. \quad (\text{B.13})$$

L'équation (B.12) nous dit que, quand $n \rightarrow +\infty$, la distribution de probabilité $P(a, n)$ est dominée par le minimum de $I(a)$, et qu'elle se pique de plus en plus autour de ce minimum au fur et à mesure que n augmente. L'expression exacte de la fonction de taux nous renseigne sur les fluctuations autour de la moyenne.

B.3 Propriétés

B.3.1 Fonctions génératrices

On définit la fonction génératrice des moments $Z_n(k)$ par

$$Z_n(k) \equiv \langle e^{nkA_n} \rangle = \int e^{nka} P(a,n) da. \quad (\text{B.14})$$

Le $i^{\text{ème}}$ moment de A_n est alors donné par

$$\langle A_n^i \rangle = \frac{1}{n^i} \left. \frac{d^i Z_n}{dk^i} \right|_{k=0} = \frac{Z^{(i)}(0)}{n^i}. \quad (\text{B.15})$$

La fonction génératrice des cumulants $\varphi_n(k)$ est définie par

$$\varphi_n(k) \equiv \frac{1}{n} \ln Z_n(k). \quad (\text{B.16})$$

Le $i^{\text{ème}}$ cumulant de A_n est alors donné par

$$\langle A_n^i \rangle_c = \frac{1}{n^{i-1}} \left. \frac{d^i \varphi_n}{dk^i} \right|_{k=0} = \frac{\varphi^{(i)}(0)}{n^{i-1}}. \quad (\text{B.17})$$

Si φ_n a une limite finie φ , on peut écrire

$$Z_n(k) \underset{n \rightarrow +\infty}{\approx} e^{n\varphi(k)} \quad (\text{B.18})$$

On appelle alors φ l'énergie libre par analogie avec la thermodynamique; Z peut en effet être vue comme la fonction de partition.

B.3.2 Théorème de Gärtner-Ellis

Si φ existe et est différentiable, alors A_n vérifie un principe de grandes déviations dont la fonction de taux I est la transformée de Legendre-Fenchel de φ :

$$I(a) = \sup_k [ka - \varphi(k)] \quad (\text{B.19})$$

Les fonctions de taux I obtenues par ce théorème sont toujours strictement convexes, c'est-à-dire convexes sans partie linéaire.

B.3.3 Théorème de Varadhan

Énoncé

Si f est une fonction continue et si A_n satisfait un principe de grandes déviations avec la fonction de taux I , alors

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln \langle e^{nf(A_n)} \rangle = \sup_a [f(a) - I(a)]. \quad (\text{B.20})$$

Cas particulier

Si A_n satisfait un principe de grandes déviations avec la fonction de taux I , alors son énergie libre φ est la transformée de Legendre-Fenchel de I :

$$\varphi(k) = \sup_a [ka - I(a)]. \quad (\text{B.21})$$

B.3.4 Propriétés de l'énergie libre

- φ est toujours convexe, donc φ ne peut être non-différentiable qu'en des points isolés.
- Si I est strictement convexe, alors φ est différentiable.
- Si I n'est pas convexe ou a au moins un domaine linéaire, alors φ est non-différentiable en au moins un point.
- Si I est convexe, alors I est la transformée de Legendre-Fenchel de φ . Si I est linéaire de pente k sur l'intervalle $[a, b]$, alors φ n'est pas différentiable en k . Plus précisément, $\varphi'(k^-) = a$ et $\varphi'(k^+) = b$, sous réserve que a et b soient les bornes extrêmes de la partie où I est linéaire.

Annexe C

Dynamique des vecteurs tangents orthogonaux

Dans cette annexe, nous allons démontrer la formule (3.8) par récurrence.

C.1 Notations

On considère k vecteurs tangents $\delta\mathbf{x}_i$ libres, dont l'évolution temporelle est donnée par l'équation

$$\forall i \in \llbracket 1, k \rrbracket, \quad \delta\dot{\mathbf{x}}_i(t) = A \delta\mathbf{x}_i(t). \quad (\text{C.1})$$

À partir de ces vecteurs, on en construit k nouveaux à l'aide du procédé de Gram-Schmidt

$$\forall i \in \llbracket 1, k \rrbracket, \quad \mathbf{u}_i = \delta\mathbf{x}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta\mathbf{x}_i}{\|\mathbf{u}_j\|^2}. \quad (\text{C.2})$$

Les vecteurs \mathbf{u}_i ainsi obtenus forment une famille libre orthogonale.

Soit $\mathcal{P}(n)$ la proposition

$$\forall i \leq n, \quad \dot{\mathbf{u}}_i = A \mathbf{u}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j + \mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i}{\|\mathbf{u}_j\|^2}. \quad (\text{C.3})$$

On veut prouver par récurrence que $\mathcal{P}(n)$ est vraie pour $n = k$.

C.2 Initialisation

Comme $\mathbf{u}_1 = \delta\mathbf{x}_1$, $\mathcal{P}(1)$ est vraie d'après (C.1).

C.3 Hérédité

Soit n un entier fixé, tel que $1 \leq n < k$. On suppose $\mathcal{P}(n)$ vraie (hypothèse de récurrence). Regardons si cela implique que $\mathcal{P}(n+1)$ l'est aussi.

En dérivant par rapport au temps la définition de \mathbf{u}_{i+1} donnée par (C.2), on obtient

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \delta \dot{\mathbf{x}}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \dot{\mathbf{u}}_j \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} - \sum_{j=1}^n \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|^2} (\dot{\mathbf{u}}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}) \\ - \sum_{j=1}^n \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|^2} (\mathbf{u}_j \cdot \delta \dot{\mathbf{x}}_{n+1}) + 2 \sum_{j=1}^n \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|^4} (\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}) (\mathbf{u}_j \cdot \dot{\mathbf{u}}_j) \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

qui, en utilisant l'équation d'évolution (C.1), l'hypothèse de récurrence (C.3) et l'orthogonalité des \mathbf{u}_i , conduit à

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = A \delta \mathbf{x}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \left(A \mathbf{u}_j - \sum_{i=1}^{j-1} \mathbf{u}_i \frac{\mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_i\|^2} \right) \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \\ - \sum_{j=1}^n \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \left(\left[A \mathbf{u}_j - \sum_{i=1}^{j-1} \mathbf{u}_i \frac{\mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_i\|^2} \right] \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1} \right) \\ - \sum_{j=1}^n \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|^2} (\mathbf{u}_j \cdot A \delta \mathbf{x}_{n+1}) + 2 \sum_{j=1}^n \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|^4} (\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}) (\mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_j). \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

On peut développer et réorganiser cette équation de la façon suivante

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = A \left(\delta \mathbf{x}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \right) - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\delta \mathbf{x}_{n+1} \cdot A \mathbf{u}_j + \mathbf{u}_j \cdot A \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \\ + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^j \frac{\mathbf{u}_i}{\|\mathbf{u}_i\|^2} \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} (\mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j) \\ + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{j-1} \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \frac{\mathbf{u}_i \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_i\|^2} (\mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j). \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

En effectuant une inversion des deux sommes dans le dernier terme et un changement d'indice, on montre que

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{j-1} \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \frac{\mathbf{u}_i \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_i\|^2} (\mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j) = \\ \sum_{j=1}^n \sum_{i=j+1}^n \frac{\mathbf{u}_i}{\|\mathbf{u}_i\|^2} \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} (\mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j). \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

On peut alors réécrire l'équation (C.6) comme

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = A \left(\delta \mathbf{x}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \right) - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\delta \mathbf{x}_{n+1} \cdot A \mathbf{u}_j + \mathbf{u}_j \cdot A \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \\ + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{u}_i}{\|\mathbf{u}_i\|^2} \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} (\mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j) \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

ou encore

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = A \left(\delta \mathbf{x}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \right) \\ - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\left(\delta \mathbf{x}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \right) \cdot A \mathbf{u}_j + \mathbf{u}_j \cdot A \left(\delta \mathbf{x}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_j \cdot \delta \mathbf{x}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \right)}{\|\mathbf{u}_j\|^2}. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Les termes entre parenthèses correspondent à la définition de \mathbf{u}_{n+1} , et on obtient finalement

$$\dot{\mathbf{u}}_{n+1} = A \mathbf{u}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_{n+1} \cdot A \mathbf{u}_j + \mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_{n+1}}{\|\mathbf{u}_j\|^2} \quad (\text{C.10})$$

qui était l'égalité supplémentaire contenue dans $\mathcal{P}(n+1)$ par rapport à $\mathcal{P}(n)$. On a montré que $\mathcal{P}(n+1)$ était vraie si $\mathcal{P}(n)$ l'était. La proposition $\mathcal{P}(n)$ est donc héréditaire (tant que $n \leq k$).

C.4 Conclusion

La proposition $\mathcal{P}(n)$ est vraie pour $n = 1$ et est héréditaire tant que $n \leq k$. Elle est donc vraie pour tout $n \leq k$ et en particulier pour $n = k$:

$$\forall i \leq k, \quad \dot{\mathbf{u}}_i = A \mathbf{u}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j + \mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i}{\|\mathbf{u}_j\|^2}. \quad (\text{C.11})$$

On a donc bien démontré la formule (3.8).

Annexe D

Intégrateur symplectique de Yoshida

Dans cette annexe, nous présentons l'intégrateur symplectique d'ordre 6 mis au point par Yoshida [102] et utilisé dans cette thèse.

D.1 Intégrateur symplectique

Considérons un système hamiltonien de dimension $2N$ associé au hamiltonien $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. L'évolution temporelle de ce système est donnée par les équations de Hamilton :

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \tag{D.1}$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \tag{D.2}$$

Ces équations conservent la forme symplectique $d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q} = \sum_{i=1}^N dq_i \wedge dp_i$, ce qui implique notamment le théorème de Liouville, c'est-à-dire que l'évolution hamiltonienne conserve le volume dans l'espace des phases. De plus, si le hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps (ce que nous supposons dans la suite), ces équations conservent l'énergie, c'est-à-dire que la valeur du hamiltonien H est constante.

Un intégrateur numérique est un procédé pour calculer numériquement la solution d'une équation différentielle de manière approchée. Dans le cas d'un système hamiltonien, un intégrateur numérique servira donc à déterminer l'évolution temporelle du système. Un intégrateur est dit symplectique s'il conserve exactement la forme symplectique $d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q}$.

La dynamique calculée par les intégrateurs symplectiques peut être vue comme une projection en temps discret d'une véritable dynamique hamiltonienne en temps continu pour un hamiltonien \tilde{H} légèrement perturbé par rapport à celui du système H . Cet hamiltonien perturbé est donc

une quantité conservée des intégrateurs symplectiques. Cette propriété impose que l'énergie du système ne change quasiment pas au cours de l'évolution (aux erreurs d'arrondi numérique près) et l'erreur sur l'énergie totale est fixée par l'intégrateur utilisé via la valeur du hamiltonien perturbé. C'est pour cela que les intégrateurs symplectiques sont utilisés pour simuler les systèmes hamiltoniens, dans lesquels l'énergie est censée être conservée exactement. Les intégrateurs numériques classiques, comme la méthode d'Euler ou la méthode de Runge-Kutta, ne sont pas symplectiques et induisent une erreur sur l'énergie totale qui croît avec le temps.

Pour quantifier la qualité d'un intégrateur symplectique, on définit son ordre. On note Δt le pas de l'intégrateur, c'est-à-dire l'incrément de temps entre deux points de la trajectoire calculés par l'intégrateur. Si l'erreur entre l'énergie de la trajectoire calculée \tilde{H} et l'énergie de la trajectoire réelle H est d'ordre $(\Delta t)^n$, c'est-à-dire si

$$\tilde{H} = H + \mathcal{O}((\Delta t)^n) \quad (\text{D.3})$$

alors l'intégrateur sera dit d'ordre n . La plupart des intégrateurs numériques (symplectiques ou non) reposent sur la troncation d'un développement limité en Δt à un ordre donné. Un problème récurrent est donc le choix de Δt : un pas de temps petit diminue l'erreur faite mais demande un temps de calcul plus important, et il faut trouver un compromis raisonnable entre fidélité de la solution et temps de calcul. Un intégrateur symplectique d'ordre élevé permet d'utiliser un Δt plus grand qu'un intégrateur symplectique d'ordre faible et peut donc permettre de gagner en temps de calcul (même si généralement les intégrateurs d'ordre élevé sont plus complexes que ceux d'ordre faible). Par exemple, si on veut réduire l'erreur faite sur l'énergie d'un facteur 64 avec un intégrateur d'ordre 1, il faudra diviser le pas de temps par 64 alors qu'avec un intégrateur d'ordre 6 il suffira de diviser Δt par 2.

D.2 Construction d'intégrateurs symplectiques par la méthode de séparation

Dans la suite, pour rendre les notations plus concises, nous nous limiterons au cas unidimensionnel ($N = 1$), mais tout ce qui suit se généralise immédiatement en dimension arbitraire. Nous considérons le cas particulier où l'hamiltonien est séparable en un terme d'énergie cinétique T et un terme d'énergie potentielle V :

$$H(q, p) = T(p) + V(q). \quad (\text{D.4})$$

En utilisant la notation $z = (q, p)$, on peut réécrire les équations de Hamilton sous la forme compacte

$$\dot{z} = \{z, H(z)\} \quad (\text{D.5})$$

où $\{.,.\}$ désigne le crochet de Poisson

$$\{F, G\} = \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial G}{\partial q}. \quad (\text{D.6})$$

En définissant l'opérateur différentiel D_F par $D_F G \equiv \{G, F\}$, on peut réécrire l'équation (D.5)

$$\dot{z} = D_H z \quad (\text{D.7})$$

dont la solution est

$$z(t) = \exp \left[t D_H \right] z(0). \quad (\text{D.8})$$

Si le hamiltonien est séparable (D.4), alors $D_H = D_T + D_V$ et on a

$$z(t) = \exp \left[t(D_T + D_V) \right] z(0) \quad (\text{D.9})$$

ou encore

$$z(t + \Delta t) = \exp \left[\Delta t(D_T + D_V) \right] z(t). \quad (\text{D.10})$$

Calculer l'évolution sous l'action de l'hamiltonien complet est en général compliqué, et on ne chercherait pas à la simuler si on savait la calculer. En revanche, l'évolution sous l'action du terme d'énergie cinétique uniquement ou sous l'action du terme d'énergie potentielle uniquement sont beaucoup plus simples. C'est sur cette constatation que repose la méthode de séparation : on veut remplacer l'opérateur d'évolution complet par un produit d'opérateurs plus simples, à savoir $\exp[D_T]$ et $\exp[D_V]$. Mais comme ces opérateurs ne commutent à priori pas, on ne peut pas simplement séparer l'exponentielle en deux. Du coup, on cherche un ensemble de nombres réels (c_i, d_i) ($i = 1, \dots, k$) tels que

$$\exp \left[\Delta t(D_T + D_V) + \mathcal{O}((\Delta t)^{n+1}) \right] = \prod_{i=1}^k \exp \left[c_i \Delta t D_T \right] \exp \left[d_i \Delta t D_V \right]. \quad (\text{D.11})$$

On peut identifier ces coefficients (c_i, d_i) par plusieurs méthodes (notamment en utilisant la formule de Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) qui relie le produit d'exponentielles de deux opérateurs à l'exponentielle de la somme de ces opérateurs et de leurs commutateurs). Une fois cela fait, on obtient un intégrateur symplectique d'ordre n en appliquant l'opération

$$\tilde{z}(t + \Delta t) = \left(\prod_{i=1}^k \exp \left[c_i \Delta t D_T \right] \exp \left[d_i \Delta t D_V \right] \right) \tilde{z}(t) \quad (\text{D.12})$$

pour calculer la position à $t + \Delta t$ à partir de celle à t . Le tilde est là pour signaler qu'il s'agit de la dynamique sous l'action de l'intégrateur symplectique, qui correspond à un hamiltonien perturbé $\tilde{H} = H + \mathcal{O}((\Delta t)^n)$. En effet, on peut réécrire (D.12) sous la forme

$$\tilde{z}(t + \Delta t) = \exp \left[\Delta t D_{\tilde{H}} \right] \tilde{z}(t) \quad (\text{D.13})$$

avec $D_{\tilde{H}} = D_H + \mathcal{O}((\Delta t)^n)$, ce qui montre que l'intégrateur est d'ordre n . De plus, il s'agit bien d'un intégrateur symplectique vu qu'il est constitué de l'application successive de transformations symplectiques : $\exp[D_T]$ correspond à l'évolution d'une particule libre tandis que $\exp[D_V]$ correspond à l'évolution d'une particule de masse infinie soumise au potentiel V .

Alors que les opérations effectuées dans cette section sont principalement formelles et peu utiles pour calculer la trajectoire $z(t)$ en pratique, la formule (D.12) a une interprétation simple. En effet, l'opérateur $\exp \left[c_i \Delta t D_T \right]$ correspond à la transformation

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} q + \Delta t c_i \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_p \\ p \end{pmatrix} \quad (\text{D.14})$$

tandis que l'opérateur $\exp \left[d_i \Delta t D_V \right]$ a pour action

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} q \\ p - \Delta t d_i \left. \frac{\partial V}{\partial q} \right|_q \end{pmatrix}. \quad (\text{D.15})$$

Pour calculer $\tilde{z}(t + \Delta t)$ à partir de $\tilde{z}(t)$, il faut appliquer donc les opérations suivantes :

$$\tilde{q}_0 = q(t) \quad (\text{D.16})$$

$$\tilde{p}_0 = p(t) \quad (\text{D.17})$$

$$\forall i \in \llbracket 1, k \rrbracket, \quad \tilde{p}_i = \tilde{p}_{i-1} - \Delta t d_{k+1-i} \left. \frac{\partial V}{\partial q} \right|_{\tilde{q}_{i-1}} \quad (\text{D.18})$$

$$\forall i \in \llbracket 1, k \rrbracket, \quad \tilde{q}_i = \tilde{q}_{i-1} + \Delta t c_{k+1-i} \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_{\tilde{p}_i} \quad (\text{D.19})$$

On obtient alors $q(t + \Delta t) = \tilde{q}_k$ et $p(t + \Delta t) = \tilde{p}_k$. Dans la section suivante, on va donner des exemples d'intégrateurs symplectiques.

D.3 Intégrateurs symplectiques à coefficients exacts

D.3.1 Ordre 1 : méthode d'Euler symplectique

À l'ordre 1, la solution la plus simple de (D.11) est $k = 1$ et $c_1 = d_1 = 1$, ce qui donne :

$$\tilde{p}(t + \Delta t) = \tilde{p}(t) - \Delta t \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{\tilde{q}(t)} \quad (\text{D.20})$$

$$\tilde{q}(t + \Delta t) = \tilde{q}(t) + \Delta t \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_{\tilde{p}(t+\Delta t)} \quad (\text{D.21})$$

La différence avec la méthode d'Euler standard est que la position à $t + \Delta t$ est calculée en utilisant l'impulsion à $t + \Delta t$ et non pas à t .

D.3.2 Ordre 2 : intégrateur *Leapfrog*

À l'ordre 2, la solution la plus simple est $k = 2$, $c_1 = c_2 = 1/2$, $d_1 = 1$ et $d_2 = 0$, ce qui se traduit par :

$$\tilde{q}(t + \frac{\Delta t}{2}) = \tilde{q}(t) + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_{\tilde{p}(t)} \quad (\text{D.22})$$

$$\tilde{p}(t + \Delta t) = \tilde{p}(t) - \Delta t \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{\tilde{q}(t+\Delta t/2)} \quad (\text{D.23})$$

$$\tilde{q}(t + \Delta t) = \tilde{q}(t + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_{\tilde{p}(t+\Delta t)} \quad (\text{D.24})$$

Dans la suite, on notera cet intégrateur

$$S_2(\Delta t) \equiv \exp \left[\frac{\Delta t}{2} D_T \right] \exp \left[\Delta t D_V \right] \exp \left[\frac{\Delta t}{2} D_T \right]. \quad (\text{D.25})$$

D.3.3 Ordres supérieurs

Yoshida explique dans [102] comment construire des intégrateurs symplectiques à coefficients exacts (ayant une expression analytique) d'ordre pair arbitraire $2n$ par combinaison symétrique de trois intégrateurs d'ordre $2(n-1)$. De manière générale, on peut obtenir un intégrateur symplectique S_{2n+2} d'ordre $2n+2$ à partir d'un intégrateur S_{2n} d'ordre $2n$ en utilisant la combinaison

$$S_{2n+2}(\Delta t) = S_{2n}(z_1 \Delta t) S_{2n}(z_0 \Delta t) S_{2n}(z_1 \Delta t) \quad (\text{D.26})$$

avec

$$\begin{cases} z_0 = -\frac{2^{1/(2n+1)}}{2-2^{1/(2n+1)}} \\ z_1 = \frac{1}{2-2^{1/(2n+1)}} \end{cases} \quad (\text{D.27})$$

La combinaison doit être symétrique pour préserver la réversibilité temporelle de la dynamique hamiltonienne qui se traduit par la propriété :

$$S(\Delta t)S(-\Delta t) = S(\Delta t)S(-\Delta t) = I_2. \quad (\text{D.28})$$

Cette construction permet de construire des intégrateurs d'ordre $2n$ qui consistent en 3^{n-1} applications de l'intégrateur *Leapfrog* d'ordre 2, donc à $k = 3^{n-1} + 1$ pas. En effet, l'intégrateur d'ordre 2 est constitué de $k = 2$ pas, mais il est possible lors de l'application successive de cet intégrateur de regrouper en un seul pas le premier et le dernier terme en $\exp\left[\frac{\Delta t}{2} D_T\right]$ (voir la section D.5). Le nombre de pas croît rapidement avec n , donc ces intégrateurs deviennent difficiles à utiliser quand n est grand.

D.4 Intégrateurs symplectiques à coefficients numériques

Yoshida présente aussi une méthode alternative qui permet de construire des intégrateurs symplectiques plus simples (avec moins de pas), mais dont les coefficients n'ont pas d'expression analytique. Les coefficients sont alors donnés sous forme décimale, ce qui n'est pas un problème pour une mise en œuvre numérique comme les ordinateurs travaillent de toute façon avec des nombres décimaux (et une précision donnée).

Pour cela, il cherche un intégrateur symplectique d'ordre $2n$ sous la forme de $2m+1$ applications de l'intégrateur d'ordre 2 :

$$S_{2n}^{(m)}(\Delta t) = S_2(w_m \Delta t) \times \cdots \times S_2(w_1 \Delta t) S_2(w_0 \Delta t) S_2(w_1 \Delta t) \times \cdots \times S_2(w_m \Delta t). \quad (\text{D.29})$$

Trois solutions pour $n = 3$, donc pour un intégrateur d'ordre 6, sont données et correspondent à $m = 3$, donc à sept applications de l'intégrateur d'ordre 2, ce qui est deux de moins que l'intégrateur à coefficients exacts de la section précédente. Pour $n = 4$, donc pour un intégrateur d'ordre 8, cinq solutions sont données et correspondent à $m = 7$, donc à quinze applications de l'intégrateur d'ordre 2, ce qui représente douze applications de moins qu'en utilisant l'intégrateur à coefficients exacts.

Dans cette thèse, nous avons utilisé l'intégrateur d'ordre 6 avec $m = 3$ dont les coefficients sont :

$$w_3 = 0.78451361047755726382 \quad (\text{D.30})$$

$$w_2 = 0.23557321335935813368 \quad (\text{D.31})$$

$$w_1 = -1.17767998417887100695 \quad (\text{D.32})$$

$$w_0 = 1 - 2 \sum_{j=1}^m w_j \quad (\text{D.33})$$

Cette solution était présente dans l'article original de Yoshida [102], mais avec moins de décimales. Les décimales supplémentaires proviennent de McLachlan [216].

D.5 Réduction du nombre d'opérations en pratique

Lorsqu'on applique successivement l'opérateur d'ordre 2

$$S_2(w_j \Delta t) S_2(w_{j\pm 1} \Delta t) = \exp \left[w_j \frac{\Delta t}{2} D_T \right] \exp \left[w_j \Delta t D_V \right] \exp \left[w_j \frac{\Delta t}{2} D_T \right] \\ \exp \left[w_{j\pm 1} \frac{\Delta t}{2} D_T \right] \exp \left[w_{j\pm 1} \Delta t D_V \right] \exp \left[w_{j\pm 1} \frac{\Delta t}{2} D_T \right], \quad (\text{D.34})$$

il est possible de réunir la dernière opération de $S_2(w_{j\pm 1} \Delta t)$ avec la première opération de $S_2(w_j \Delta t)$, ce qui donne

$$S_2(w_j \Delta t) S_2(w_{j\pm 1} \Delta t) = \exp \left[w_j \frac{\Delta t}{2} D_T \right] \exp \left[w_j \Delta t D_V \right] \exp \left[(w_j + w_{j\pm 1}) \frac{\Delta t}{2} D_T \right] \\ \exp \left[w_{j\pm 1} \Delta t D_V \right] \exp \left[w_{j\pm 1} \frac{\Delta t}{2} D_T \right]. \quad (\text{D.35})$$

Cela permet de réduire le nombre d'opérations de $m - 1$ par application du produit de m intégrateurs d'ordre 2. Cette optimisation n'a pas été utilisée dans cette thèse, mais le sera dans les simulations futures.

Annexe E

Résolution perturbative des équations de col

Dans cette annexe, nous allons présenter le principe de la résolution perturbative des équations de col (5.31)-(5.35). Nous commencerons par le cas $\alpha = 0$, puis nous détaillerons la résolution à l'ordre un en α , qui se généralise ensuite à tout ordre.

E.1 Rappel des équations de col

Nous cherchons à résoudre les équations

$$\partial_\tau \rho = -\partial_x j_{\text{sp}} \tag{E.1}$$

$$\partial_\tau v = A_{\text{sp}} v - v \int_0^1 v A_{\text{sp}} v \, dy \tag{E.2}$$

$$\begin{aligned} \partial_\tau \bar{\rho} = & -\partial_x (D \partial_x \bar{\rho}) + D' v \partial_x^2 [(I - \alpha)v - \bar{v}] + \frac{\sigma'}{2\sigma^2} (j_{\text{sp}} + D \partial_x \rho)^2 \\ & - \left(\sigma' \partial_x \bar{\rho} - \frac{1}{2} \sigma'' v \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] \right) \frac{j + D \partial_x \rho}{\sigma} + \gamma \end{aligned} \tag{E.3}$$

$$\partial_\tau \bar{v} = (I - \alpha) A_{\text{sp}} v + \bar{v} \int_0^1 v A_{\text{sp}} v \, dy + \left[D \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\sigma'}{2\sigma} (j_{\text{sp}} + D \partial_x \rho) \right] \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] \tag{E.4}$$

$$\rho_0 = \int_0^1 \rho(x, \tau) \, dx \tag{E.5}$$

$$0 = \int_0^1 v(x, \tau) \, dx \tag{E.6}$$

$$1 = \int_0^1 v(x, \tau)^2 \, dx \tag{E.7}$$

où

$$\xi_{\text{sp}} = \frac{\sigma'}{2\sqrt{\sigma}} v \partial_x [(I - \alpha)v - \bar{v}] - \sqrt{\sigma} \partial_x \bar{\rho} \quad (\text{E.8})$$

$$j_{\text{sp}} = -D \partial_x \rho - \sqrt{\sigma} \xi_{\text{sp}} \quad (\text{E.9})$$

$$A_{\text{sp}} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} D(\rho) + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\sigma'}{2\sqrt{\sigma}} \xi_{\text{sp}} \quad (\text{E.10})$$

avec des conditions aux limites périodiques (CLP) sur les champs et leur dérivée première. Nous allons chercher un col stationnaire, ce qui simplifie les quatre premières équations de col en annulant les dérivées temporelles.

On va développer les différents champs en série de α , et résoudre les équations de (E.1) à (E.7) ordre par ordre. On pose

$$\rho(x) = \sum_{i=0}^{\infty} r_i(x) \alpha^i \quad (\text{E.11})$$

$$\bar{\rho}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{r}_i(x) \alpha^i \quad (\text{E.12})$$

$$v(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \nu_i(x) \alpha^i \quad (\text{E.13})$$

$$\bar{v}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{\nu}_i(x) \alpha^i \quad (\text{E.14})$$

$$\gamma = \sum_{i=0}^{\infty} g_i \alpha^i \quad (\text{E.15})$$

E.2 Ordre zéro en α

Le cas $\alpha = 0$ correspond à la situation non biaisée, donc au cas typique. La dynamique de notre système est dominée par la diffusion, qui tend à rendre le profil de densité uniforme. On s'attend donc à ce qu'en régime stationnaire la situation typique corresponde à un profil uniforme $r_0(x) = \rho_0$. On a déjà résolu les équations de col pour un profil stationnaire dans le cas $D(\rho) = 1$ dans la section 5.9, et on a montré qu'elles avaient une solution uniquement si $\alpha = 0$ ou si $\sigma'(\rho_0) = 0$. On est dans le premier cas ici, et les champs

$$r_0(x) = \rho_0 \quad (\text{E.16})$$

$$\nu_0(x) = \sqrt{2} \cos(2\pi n x + \phi) \text{ avec } n \in \mathbb{Z}^* \quad (\text{E.17})$$

$$\bar{r}_0(x) = \bar{\rho}_0 \quad (\text{E.18})$$

$$\bar{\nu}_0(x) = 0 \quad (\text{E.19})$$

$$g_0 = 0 \quad (\text{E.20})$$

obtenus dans le cas $D(\rho) = 1$ restent solutions des équations de col en $\alpha = 0$ pour D arbitraire. Seules les dérivées du champs $\bar{\rho}$ apparaissent dans les équations de col et dans l'action pour un col stationnaire. La constante $\bar{\rho}_0$ n'a donc aucune influence ici : on la prend nulle. De même,

on peut fixer la phase ϕ à zéro en choisissant correctement l'origine spatiale. Pour finir, si nous gardons n indéterminé à cet ordre, nous trouverons à l'ordre suivant que l'action au col vaut $S_c = 4\pi^2 n^2 D(\rho_0) \alpha \tau + \mathcal{O}(\alpha^2)$. Or nous cherchons un minimum de l'action. Pour $\alpha \geq 0$, il faut donc prendre $n = 1$. Le cas $\alpha < 0$ est problématique, car on peut rendre l'action aussi petite que l'on veut, et nous ne savons pas comment le traiter pour l'instant. Il est discuté dans la section 5.8. Finalement, les solutions à l'ordre zéro que nous considérons sont

$$r_0(x) = \rho_0 \quad (\text{E.21})$$

$$\nu_0(x) = \sqrt{2} \cos(2\pi x) \quad (\text{E.22})$$

$$\bar{r}_0(x) = 0 \quad (\text{E.23})$$

$$\bar{\nu}_0(x) = 0 \quad (\text{E.24})$$

$$g_0 = 0 \quad (\text{E.25})$$

et nous nous limiterons au cas $\alpha \geq 0$ dans la suite.

E.3 Ordre un en α

E.3.1 Champ $\bar{\nu}_1$

Nous pouvons maintenant résoudre l'ordre un en α . Pour cela, on réinjecte les développements en séries des différents champs dans les équations (E.1) à (E.7) et on obtient un nouveau système d'équations sur les coefficients d'ordre un de nos champs. On constate que l'équation correspondant à l'équation de col (E.4) ne dépend que de $\bar{\nu}_1$:

$$\bar{\nu}_1''(x) + 4\pi^2 \bar{\nu}_1(x) = 8\sqrt{2}\pi^2(1 - I_4) \cos(2\pi x) \quad (\text{E.26})$$

avec $I_4 = \sqrt{2} \int_0^1 \cos(2\pi z) \bar{\nu}_1(z) dz$. On peut alors résoudre cette équation en supposant que I_4 est une constante, puis la fixer grâce à sa définition. Les CLP sont déjà vérifiées par la solution, mais il faut fixer une des deux constantes d'intégration pour satisfaire celles sur la dérivée de la solution. On obtient alors

$$\bar{\nu}_1(x) = Q_4 \sin(2\pi x) + \sqrt{2} \cos(2\pi x) \quad (\text{E.27})$$

où Q_4 est une constante d'intégration qui sera fixée dans la suite.

E.3.2 Champ \bar{r}_1 et multiplicateur de Lagrange g_1

Une fois $\bar{\nu}_1$ déterminé, l'équation correspondant à (E.3) ne dépend plus que de \bar{r}_1 :

$$\bar{r}_1''(x) = g_1 + 4\pi^2 \cos(2\pi x) \frac{D'(\rho_0)}{D(\rho_0)} \left[\sqrt{2} Q_4 \sin(2\pi x) + 2 \cos(2\pi x) \right]. \quad (\text{E.28})$$

On peut intégrer cette équation, puis fixer une des deux constantes d'intégration en imposant les CLP sur le champ \bar{r}_1 et l'autre constante d'intégration à 0 car elle correspond à un terme constant (qui n'a donc aucune importance). Pour finir, imposer les CLP à la dérivée du champ fixe $g_1 = -4\pi^2 D'(\rho_0)$, et le champ \bar{r}_1 prend la forme

$$\bar{r}_1(x) = -\frac{1}{8} \frac{D'(\rho_0)}{D(\rho_0)} \left[\sqrt{2} Q_4 \sin(4\pi x) + 2 \cos(4\pi x) \right]. \quad (\text{E.29})$$

E.3.3 Champ r_1

L'équation correspond à (E.1) ne dépend maintenant plus que de r_1 :

$$r_1''(x) = 4\pi^2 \frac{\sigma(\rho_0) D'(\rho_0) - \sigma'(\rho_0) D(\rho_0)}{D(\rho_0)^2} \left[\cos(4\pi x) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \sin(4\pi x) \right]. \quad (\text{E.30})$$

On voit apparaître la dérivée de la fonction $\kappa(\rho) \equiv \frac{\sigma(\rho)}{2D(\rho)}$ qui intervient dans l'énergie libre dynamique (5.36). En effet, on peut réécrire l'équation précédente sous la forme

$$r_1''(x) = -8\pi^2 \kappa'(\rho_0) \left[\cos(4\pi x) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \sin(4\pi x) \right]. \quad (\text{E.31})$$

On prend alors la primitive de cette équation, puis on impose les CLP sur le champ r_1 , ce qui fixe une des constantes d'intégration, et on utilise l'équation (E.5) pour fixer la deuxième. On obtient alors

$$r_1(x) = \frac{\kappa'(\rho_0)}{2} \left[\cos(4\pi x) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \sin(4\pi x) \right] \quad (\text{E.32})$$

dont la dérivée vérifie les CLP sans qu'on ait à les imposer.

E.3.4 Champ ν_1

Il ne nous reste plus qu'à déterminer ν_1 en utilisant l'équation (E.2), qui devient

$$\begin{aligned} \nu_1''(x) + 4\pi^2 \nu_1(x) = & -\frac{\pi^2 \sigma(\rho_0) D'(\rho_0)^2}{\sqrt{2} D(\rho_0)^3} \left(\cos(2\pi x) + 9 \cos(6\pi x) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \left[\sin(2\pi x) + 9 \sin(6\pi x) \right] \right) \\ & + \frac{\sqrt{2} \pi^2 \sigma'(\rho_0) D'(\rho_0)}{D(\rho_0)^2} \left(\cos(2\pi x) + 6 \cos(6\pi x) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \left[\sin(2\pi x) + 6 \sin(6\pi x) \right] \right) \\ & + \frac{\sqrt{2}}{\sigma(\rho_0) D(\rho_0)} \cos(2\pi x) \left[\sigma(\rho_0) I_2 + \pi^2 \sigma'(\rho_0)^2 \left(1 - 3 \left[\cos(4\pi x) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \sin(4\pi x) \right] \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{E.33})$$

avec

$$\begin{aligned} I_2 = & \int_0^1 \cos(2\pi y) \left[\pi^2 \frac{D'(\rho_0)}{D(\rho_0)} \left(\cos(2\pi y) + 9 \cos(6\pi y) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \left[\sin(2\pi y) + 9 \sin(6\pi y) \right] \right) \right. \\ & - 2\pi^2 \sigma'(\rho_0) \frac{D'(\rho_0)}{D(\rho_0)} \left(\cos(2\pi y) + 6 \cos(6\pi y) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \left[\sin(2\pi y) + 6 \sin(6\pi y) \right] \right) \\ & \left. - 2\pi^2 \frac{\sigma'(\rho_0)^2}{\sigma(\rho_0)} \cos(2\pi y) \left(1 - 3 \left[\cos(4\pi y) + \frac{Q_4}{\sqrt{2}} \sin(4\pi y) \right] \right) \right. \\ & \left. + \sqrt{2} D(\rho_0) \left(\nu_1''(x) - 4\pi^2 \nu_1(x) \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.34})$$

On résout cette équation en supposant I_2 constant, puis on fixe I_2 , une constante d'intégration et Q_4 à l'aide de la définition de I_2 et des CLP sur ν_1 et sa dérivée. La constante Q_4 , qui intervenait dans les champs précédents, est alors fixée à zéro. On obtient

$$\nu_1(x) = Q_2 \sin(2\pi x) + \frac{3}{32\sqrt{2}} \kappa'(\rho_0) \left[\frac{\sigma'(\rho_0)}{\sigma(\rho_0)} - 3 \frac{D'(\rho_0)}{D(\rho_0)} \right] \cos(6\pi x) \quad (\text{E.35})$$

qui vérifie déjà les contraintes (E.6) et (E.7). La constante d'intégration Q_2 est indéterminée.

E.3.5 Récapitulatif

$$r_1(x) = \frac{1}{2} \kappa'(\rho_0) \cos(4\pi x) \quad (\text{E.36})$$

$$\nu_1(x) = K_1 \sin(2\pi x) + \frac{3}{32\sqrt{2}} \kappa'(\rho_0) \left[\frac{\sigma'(\rho_0)}{\sigma(\rho_0)} - 3 \frac{D'(\rho_0)}{D(\rho_0)} \right] \cos(6\pi x) \quad (\text{E.37})$$

$$\bar{r}_1(x) = -\frac{1}{4} \frac{D'(\rho_0)}{D(\rho_0)} \cos(4\pi x) \quad (\text{E.38})$$

$$\bar{\nu}_1(x) = \sqrt{2} \cos(2\pi x) \quad (\text{E.39})$$

$$g_1 = -4\pi^2 D'(\rho_0) \quad (\text{E.40})$$

Comme mentionné à l'ordre précédent, l'action associée vaut $S_c = 4\pi^2 n^2 D(\rho_0) \alpha \tau + \mathcal{O}(\alpha^2)$. La constante d'intégration $K_1 \equiv Q_2$, qui est indéterminée, n'a aucune influence sur cette valeur, ni sur les ordres supérieurs.

E.4 Ordre arbitraire en α

On peut appliquer la même procédure pour résoudre tous les ordres en α successivement. Les équations de col se résolvent toujours dans le même ordre : (E.4) qui ne dépend que de $\bar{\nu}_n$ en premier, puis (E.3) qui dépend de $\bar{\nu}_n$ et \bar{r}_n , suivie de (E.1) qui dépend de $\bar{\nu}_n$, \bar{r}_n et r_n et, pour finir, (E.2) qui dépend de $\bar{\nu}_n$, \bar{r}_n , r_n et ν_n . On peut appliquer les contraintes (E.5), (E.6) et (E.7) au fur et à mesure ou une fois les quatre premières équations résolues. De même pour les CLP. Avec une puissance de calcul infinie, on pourrait obtenir un ordre arbitraire en α . À chaque nouvel ordre n , une constante d'intégration K_n provenant de la résolution de l'équation (E.2) reste indéterminée. Toutes ces constantes n'ont aucune influence sur la valeur de l'action au col. Modifier leur valeur semble traduire les profils de ρ et v . Elles proviennent donc sans doute de l'invariance par translation du problème (du fait des CLP), et on peut espérer qu'elles ne donnent qu'une seule et même constante une fois les séries (E.11) à (E.15) resommées.

Annexe F

Exposant de Lyapunov d'une particule brownienne

Dans cette annexe, nous allons calculer l'exposant de Lyapunov d'une particule brownienne soumise à un bruit blanc gaussien de variance $2D$. Nous verrons que, suivant la nature du bruit, l'exposant de Lyapunov est complètement différent. Par souci de simplicité, nous considérons un système unidimensionnel.

F.1 Bruit intrinsèque à la particule

Une façon de décrire le mouvement de cette particule est de considérer que le bruit est intrinsèque à la particule. Sa position $r(t)$ évolue alors selon l'équation

$$\dot{r} = \eta(t) \tag{F.1}$$

avec $\eta(t)$ un bruit blanc gaussien de moyenne nulle et de corrélations $\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2D \delta(t - t')$. L'équation de Fokker-Planck équivalente est

$$\partial_t P(x, t) = D \partial_x^2 P(x, t) \tag{F.2}$$

ce qui justifie le choix de la notation pour la variance. Si l'on songe à un colloïde en suspension dans un solvant, D est alors proportionnelle à T .

Si on utilise la même définition de l'exposant de Lyapunov que dans le chapitre 5, c'est-à-dire si on considère que les deux copies de notre système évoluent avec la même réalisation du bruit, alors le vecteur tangent u , qui représente la différence entre la position de la particule dans chaque copie, évolue selon l'équation :

$$\dot{u} = 0 \tag{F.3}$$

La différence entre les positions de la particule dans les deux copies reste donc constante, et $\lambda = 0$.

F.2 Bruit dû à l'environnement

F.2.1 Définition du bruit

Une autre façon de rendre compte de ce mouvement est de considérer que le bruit est dû à l'environnement. Les fluctuations de la position de la particule sont alors dues à des interactions (collisions par exemple) avec des éléments extérieurs. Dans ce cas, on peut rendre compte du mouvement de la particule avec l'équation d'évolution

$$\dot{r} = \chi(r(t), t) \quad (\text{F.4})$$

où $\chi(x, t)$ est un champ de bruit, dont la valeur dépend du point de l'espace x et du temps t . On le choisit gaussien de moyenne nulle et de corrélations $\langle \chi(x, t) \chi(x', t') \rangle = 2DC(x - x') \delta(t - t')$. La fonction C représente ses corrélations spatiales, et on la choisit paire pour respecter l'isotropie de l'espace. Pour ne pas avoir à se soucier des problèmes de régularité, on la choisit de plus analytique. La parité implique donc entre autre $C'(0) = 0$.

F.2.2 Discrétisation de l'équation de Langevin

Avant de continuer, il faut préciser la discrétisation de l'équation de Langevin (F.4), que l'on peut réécrire

$$\dot{r} = \int \delta(y - r(t)) \chi(y, t) dy \quad (\text{F.5})$$

pour la manipuler plus facilement. On va supposer que cette équation est en discrétisation ε , c'est-à-dire que si t varie de $\Delta t \ll 1$, alors r varie de

$$\Delta r = \int_t^{t+\Delta t} dt' \int dy \delta(y - r(t + \varepsilon \Delta t)) \chi(y, t') \quad (\text{F.6})$$

$$\simeq \int_t^{t+\Delta t} dt' \int dy \delta(y - r(t) - \varepsilon \Delta r) \chi(y, t') \quad (\text{F.7})$$

qui est une équation autocohérente sur Δr . Comme $\Delta r \ll 1$, on peut faire un développement limite de la distribution de Dirac dans l'intégrale

$$\Delta r \simeq \int_t^{t+\Delta t} dt' \int dy \left[\delta(y - r(t)) \chi(y, t') - \varepsilon \Delta r \chi(y, t') \partial_y \delta(y - r(t)) + \dots \right] \quad (\text{F.8})$$

puis l'utiliser pour calculer le premier taux de moment en la réinjectant dans elle-même

$$\frac{\langle \Delta r \rangle}{\Delta t} = -\frac{\varepsilon}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \int dy \int dy' \partial_y \delta(y - r(t)) \langle \chi(y, t') \chi(y', t'') \rangle + \mathcal{O}_{\Delta t \rightarrow 0}(\Delta t) \quad (\text{F.9})$$

$$= -\frac{2D\varepsilon}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' \int dy \int dy' \partial_y \delta(y - r(t)) \delta(y' - r(t)) C(y - y') \delta(t' - t'') \quad (\text{F.10})$$

$$+ \mathcal{O}_{\Delta t \rightarrow 0}(\Delta t)$$

$$= 2D\varepsilon \int dy \int dy' \delta(y - r(t)) \delta(y' - r(t)) C'(y - y') + \mathcal{O}_{\Delta t \rightarrow 0}(\Delta t) \quad (\text{F.11})$$

$$= 2D\varepsilon C'(0) + \mathcal{O}_{\Delta t \rightarrow 0}(\Delta t) \quad (\text{F.12})$$

Donc la limite du taux de moment quand Δt tend vers 0 est

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta r \rangle}{\Delta t} = 2D\varepsilon C'(0). \quad (\text{F.13})$$

Or $C'(0) = 0$, donc la limite du premier taux de moment, qui est aussi le premier coefficient du développement de Kramers-Moyal, est nulle indépendamment de la discrétisation de l'équation de départ. Toutes les discrétisation $\varepsilon \in [0, 1]$ sont donc équivalente. Dans la suite, on choisit la discrétisation de Stratonovich, $\varepsilon = 1/2$, pour pouvoir appliquer les règles usuelles du calcul différentiel.

F.2.3 Propriétés de la fonction de corrélation spatiale C

On veut que, pour la particule, le champ de bruit χ soit équivalent au bruit η . On va donc déterminer les conditions sur C pour que les équations (F.1) et (F.4) soient équivalentes. Une équation de Langevin est complètement définie par les deux premiers coefficients du développement de Kramers-Moyal et par sa discrétisation. Les équations (F.1) et (F.4) ont toutes les deux leur premier coefficient de Kramers-Moyal nul. Elles sont donc indépendantes de la discrétisation choisie. Il reste à comparer le deuxième coefficient, qui vaut :

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta r^2 \rangle}{\Delta t} = \begin{cases} 2D & \text{pour la particule évoluant selon (F.1)} \\ 2D C(0) & \text{pour la particule évoluant selon (F.4)} \end{cases} \quad (\text{F.14})$$

On choisit donc C telle que $C(0) = 1$.

De plus, on s'attend à ce que la corrélation spatiale soit maximale en $x = 0$, et décroisse quand $|x|$ augmente au voisinage de ce maximum. Cela impose donc $C''(0) \leq 0$, que l'on notera $C'''(0) \equiv -1/\ell^2$. Cette hypothèse est essentielle pour que, dans la suite, la variance de l'exposant de Lyapunov (F.20) soit bien positive et non négative.

Pour récapituler, on fait les hypothèses suivantes sur la fonction de corrélation spatiale :

- $C(0) = 1$
- C analytique
- C paire ce qui impose $C'(0) = 0$
- $C'''(0) \equiv -\frac{1}{\ell^2} \leq 0$

F.2.4 Calcul de l'exposant de Lyapunov

On considère maintenant deux conditions initiales proches de ce système, $r_1(0)$ et $r_2(0)$ telles que $|r_1(0) - r_2(0)| \ll 1$, qui évoluent avec la même réalisation du bruit. On regarde comment la différence $u(t) = r_1(t) - r_2(t)$ évolue

$$\dot{u} = -u(t) \int dy \chi(y, t) \partial_y \delta(y - r(t)). \quad (\text{F.15})$$

L'exposant de Lyapunov est donc donné par

$$\lambda(t) = -\frac{1}{t} \int_0^t dt' \int dy \chi(y, t) \partial_y \delta(y - r(t)). \quad (\text{F.16})$$

C'est une quantité fluctuante. Pour déterminer sa distribution de probabilité, nous allons déterminer l'équation de Fokker-Planck qui régit son évolution. En réalité, il est plus facile de passer par le coefficient d'expansion total $\Lambda(t) = t\lambda(t)$. Pour trouver l'équation de Fokker-Planck associée à son évolution, nous devons calculer les coefficients du développement de Kramers-Moyal d'ordre un et deux. Comme nous avons choisi une discrétisation de Stratonovich, nous avons

$$\Delta r = \int_t^{t+\Delta t} dt' \int dy \delta(y - r(t) - \frac{1}{2}\Delta r) \chi(y, t') \quad (\text{F.17})$$

$$\Delta \Lambda = - \int_t^{t+\Delta t} dt' \int dy \partial_y \delta(y - r(t) - \frac{1}{2}\Delta r) \chi(y, t') \quad (\text{F.18})$$

ce qui permet de calculer

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta \Lambda \rangle}{\Delta t} = DC''(0) = -\frac{D}{\ell^2} \quad (\text{F.19})$$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta \Lambda^2 \rangle}{\Delta t} = -2DC''(0) = 2\frac{D}{\ell^2} \quad (\text{F.20})$$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta \Lambda \Delta r \rangle}{\Delta t} = 2DC'(0) = 0 \quad (\text{F.21})$$

La corrélation entre $\Delta \Lambda$ et Δr étant nulle ici, on n'est pas obligé de considérer la probabilité jointe $P(r, \Lambda, t)$ et on peut établir une équation de Fokker-Planck pour $P(\Lambda, t)$ uniquement

$$\partial_t P(\Lambda, t) = \frac{D}{\ell^2} (\partial_\Lambda + \partial_\Lambda^2) P(\Lambda, t). \quad (\text{F.22})$$

On reconnaît l'équation de Fokker-Planck d'une particule brownienne de position Λ soumise à une force constante. Dans le référentiel se déplaçant à la bonne vitesse, la solution est une gaussienne dont la variance augmente avec le temps. Pour le montrer mathématiquement, on considère la fonction génératrice

$$\hat{P}(\alpha, t) \equiv \langle e^{\alpha \Lambda} \rangle = \int d\Lambda e^{\alpha \Lambda} P(\Lambda, t) \quad (\text{F.23})$$

dont on déduit l'évolution de l'équation (F.22)

$$\partial_t \hat{P}(\alpha, t) = \frac{D}{\ell^2} (\alpha^2 - \alpha) \hat{P}(\alpha, t). \quad (\text{F.24})$$

ce qui conduit à

$$\hat{P}(\alpha, t) = \hat{P}(\alpha, 0) \exp \left[\frac{D}{\ell^2} (\alpha^2 - \alpha) t \right] \quad (\text{F.25})$$

or $P(\Lambda, 0) = \delta(\Lambda)$ donc $\hat{P}(\alpha, 0) = 1$. Finalement

$$\hat{P}(\alpha, t) = \exp \left[-\frac{Dt}{\ell^2} \alpha + \frac{2Dt}{\ell^2} \frac{\alpha^2}{2} \right]. \quad (\text{F.26})$$

La fonction génératrice des moments $\hat{P}(\alpha, t)$ est gaussienne, ce qui signifie que $P(\Lambda, t)$ est aussi gaussienne. De plus, d'après l'équation (F.26), $\langle \Lambda \rangle = -\frac{Dt}{\ell^2}$ et $\text{Var } \Lambda = \frac{2Dt}{\ell^2}$, d'où

$$P(\Lambda, t) = \frac{\ell}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left[-\frac{\ell^2 \left(\Lambda + \frac{Dt}{\ell^2} \right)^2}{4Dt} \right]. \quad (\text{F.27})$$

En utilisant le changement de variable $\Lambda = t\lambda$ sur les distributions de probabilité

$$P(\lambda, t) = \left| \frac{d\Lambda}{d\lambda} \right| P(\Lambda, t) \quad (\text{F.28})$$

on déduit

$$P(\lambda, t) = \sqrt{\frac{t\ell^2}{4\pi D}} \exp \left[-\frac{t\ell^2}{4D} \left(\lambda + \frac{D}{\ell^2} \right)^2 \right]. \quad (\text{F.29})$$

La distribution de probabilité de l'exposant de Lyapunov dépend maintenant de la corrélation du bruit à courte distance. En revanche, elle ne dépend pas de toute la fonction de corrélation spatiale (elle ne dépend que de ℓ , donc que de $C''(0)$). L'exposant de Lyapunov n'est plus nul en permanence, ni même en moyenne, vu que $\langle \lambda \rangle = -D/\ell^2 < 0$. Le bruit intrinsèque à la particule revient à appliquer le même bruit en tout point de l'espace, ce qui est équivalent à $C(x) = 1$ pour tout x et implique donc $\ell = +\infty$. Réduire les corrélations spatiales du bruit permet aux deux particules initialement proches de ne plus suivre la même trajectoire (à une translation près), et il est donc naturel que prendre ℓ finie induisent des fluctuations de λ . Il était par contre plus difficile de prédire que réduire ℓ allait rendre le système plus stable : le bruit aurait très bien pu faire s'éloigner les deux particules en moyenne. Pour finir, ce résultat est cohérent avec celui de la section F.1 car

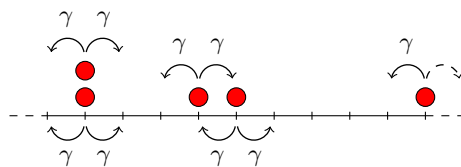
$$P(\lambda, t) \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \delta(\lambda). \quad (\text{F.30})$$

On constate donc que la nature du bruit modifie complètement la dynamique tangente, tout en laissant la dynamique du système inchangée. Une prescription qui était purement philosophique pour la dynamique d'une copie du système seule se révèle avoir de profondes conséquences physiques quand on s'intéresse à la stabilité/chaoticité du système.

Annexe G

Construction de l'hydrodynamique fluctuante pour les particules libres

Dans cette annexe, nous présentons la construction de l'hydrodynamique fluctuante à l'aide des états cohérents associés aux opérateurs bosoniques à la Doi-Peliti [189–192]. On considère des particules sautant sur une chaîne de L sites avec un taux γ .



G.1 États nombres et opérateurs bosoniques

Pour chaque site i , on définit une base $\{|n_i\rangle\}_{n_i \in \mathbb{N}}$ où n_i représente le nombre de particules sur le site considéré. On choisit cette base orthonormée :

$$\langle n_i | m_i \rangle = \delta_{n_i, m_i} \quad (\text{G.1})$$

$$\sum_{n_i=0}^{+\infty} |n_i\rangle \langle n_i| = \hat{1} \quad (\text{G.2})$$

La donnée de cette base définit un espace de Hilbert décrivant l'ensemble des états du site considéré. L'espace produit tensoriel sur l'ensemble des sites forme un espace de Hilbert qui

permet de décrire l'ensemble des états du système entier. Toute distribution de probabilité des nombres d'occupation peut alors être représentée par un vecteur $|P\rangle$ de cet espace

$$|P\rangle = \sum_{n_1=0}^{+\infty} \sum_{n_2=0}^{+\infty} \dots \sum_{n_L=0}^{+\infty} \left(p_{\{n_i\}} \bigotimes_{i=1}^L |n_i\rangle \right) \quad (\text{G.3})$$

où $p_{\{n_i\}}$ est la probabilité d'observer les nombres d'occupation $\{n_1, n_2, \dots, n_L\}$.

Sur chaque site, on définit un opérateur de création et d'annihilation de la façon suivante :

$$\hat{a} |n\rangle = n |n-1\rangle \quad \text{si } n \geq 1 \quad (\text{G.4})$$

$$\hat{a} |0\rangle = 0 \quad (\text{G.5})$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle \quad (\text{G.6})$$

On peut alors montrer :

$$(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = |n\rangle \quad (\text{G.7})$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1} \quad (\text{G.8})$$

Enfin, en utilisant la relation d'orthogonalité (G.1), on montre :

$$\langle n | \hat{a} = (n+1) \langle n+1 | \quad (\text{G.9})$$

$$\langle 0 | \hat{a}^\dagger = 0 \quad (\text{G.10})$$

$$\langle n | \hat{a}^\dagger = \langle n-1 | \quad \text{si } n \geq 1 \quad (\text{G.11})$$

$$\langle 0 | \hat{a}^n = n! \langle n | \quad (\text{G.12})$$

Ce formalisme est légèrement différent de celui utilisé la mécanique quantique. En effet, dans cette base, \hat{a}^\dagger n'est pas le conjugué hermitique de \hat{a} .

G.2 Opérateur densité et conjugué

On définit l'opérateur densité et son conjugué canonique par

$$\begin{cases} \hat{\rho} &= \hat{a}^\dagger \hat{a} \\ \hat{\rho}^\dagger &= \ln \hat{a}^\dagger \end{cases} \quad (\text{G.13})$$

ce qui est équivalent à :

$$\begin{cases} \hat{a} &= e^{-\hat{\rho}^\dagger} \hat{\rho} \\ \hat{a}^\dagger &= e^{\hat{\rho}^\dagger} \end{cases} \quad (\text{G.14})$$

On peut vérifier que $\hat{\rho}$ et $\hat{\rho}^\dagger$ sont bien conjugués canoniquement

$$[\hat{\rho}, \hat{\rho}^\dagger] = \hat{1}. \quad (\text{G.15})$$

Ces opérateurs permettront de donner un sens plus concret à la transformation de Cole-Hopf utilisée dans la suite.

G.3 Équation maîtresse et observables

Si l'état du système est représenté par un vecteur $|P\rangle$ de la forme (G.3), l'équation maîtresse peut se mettre sous la forme

$$\frac{d|P\rangle}{dt} = \hat{W}|P\rangle \quad (\text{G.16})$$

où \hat{W} est un opérateur d'évolution relié aux taux de transitions entre les différents états du système. On a alors

$$|P(t)\rangle = e^{\hat{W}t}|P(0)\rangle. \quad (\text{G.17})$$

Une observable \mathcal{F} est représentée par un opérateur diagonal \hat{F} dont les valeurs propres sont la valeur de l'observable dans l'état $|\{n_i\}\rangle \equiv \bigotimes_{i=1}^L |n_i\rangle$:

$$\hat{F}|\{n_i\}\rangle = F_{\{n_i\}}|\{n_i\}\rangle. \quad (\text{G.18})$$

La valeur moyenne de \mathcal{F} est alors donnée par

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_{\{n_i\}} p_{\{n_i\}} F_{\{n_i\}} = \langle \mathcal{O} | \hat{F} | P \rangle \quad (\text{G.19})$$

où $\langle \mathcal{O} |$ est l'état de projection défini par

$$\langle \mathcal{O} | = \sum_{\{n_i\}} \langle \{n_i\} |. \quad (\text{G.20})$$

La normalisation de la probabilité se traduit

$$\langle \mathcal{O} | P \rangle = 1. \quad (\text{G.21})$$

Pour les particules libres, l'opérateur d'évolution est

$$\hat{W} = \gamma \sum_{i=1}^L \hat{a}_i^\dagger \Delta_d \hat{a}_i \quad (\text{G.22})$$

où Δ_d est le laplacien discret défini par

$$\Delta_d \hat{a}_i = \hat{a}_{i+1} - 2\hat{a}_i + \hat{a}_{i-1}. \quad (\text{G.23})$$

G.4 États cohérents

On définit les états cohérents associés au couple $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ par :

$$\forall z \in \mathbb{C}, |z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{z^n}{n!} |n\rangle \quad (\text{G.24})$$

$$\forall z \in \mathbb{C}, \langle z| = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{+\infty} z^{*n} \langle n| \quad (\text{G.25})$$

Ces états cohérents sont vecteurs propres à droite de \hat{a} , vecteurs propres à gauche de \hat{a}^\dagger et ils forment une base surcomplète (famille génératrice non libre) :

$$\hat{a} |z\rangle = z |z\rangle \quad (\text{G.26})$$

$$\langle z | \hat{a}^\dagger = z^* \langle z | \quad (\text{G.27})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\text{Re}(z) d\text{Im}(z)}{\pi} |z\rangle \langle z| = \hat{1} \quad (\text{G.28})$$

Dans la suite, $\iint d\text{Re}(z) d\text{Im}(z)$ sera noté $\int d^2z$.

Les relations suivantes, facilement démontrables, nous seront utiles pour construire l'intégrale de chemin :

$$\langle z | z \rangle = 1 \quad (\text{G.29})$$

$$\langle w | z \rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|w|^2 + w^* z} \quad (\text{G.30})$$

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2 + z\hat{a}^\dagger} |0\rangle \quad (\text{G.31})$$

$$\langle z | = \langle 0 | e^{-\frac{1}{2}|z|^2 + z^*\hat{a}} \quad (\text{G.32})$$

Les états cohérents sont liés à la distribution de Poisson. En effet, si on considère un site dont le nombre d'occupation est donné par une loi de Poisson de paramètre ν ($p_n = e^{-\nu} \frac{\nu^n}{n!}$), alors

$$|P\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\nu} \frac{\nu^n}{n!} |n\rangle = e^{-\nu + \frac{1}{2}\nu^2} |\nu\rangle. \quad (\text{G.33})$$

G.5 Condition initiale

Initialement, on répartit aléatoirement N particules sur les L sites, chaque site ayant un poids r_i tel que $\sum_{i=1}^L r_i = 1$. La probabilité d'avoir k particules sur le site i est alors donnée par

$$\mathbb{P}_i(k) = \binom{N}{k} \left(\frac{r_i}{L}\right)^k \left(1 - \frac{r_i}{L}\right)^{N-k}. \quad (\text{G.34})$$

Dans la limite $L \rightarrow +\infty$, k est a priori petit devant N , et on peut effectuer les approximations suivantes :

$$\binom{N}{k} = \frac{N!}{k!(N-k)!} \simeq \frac{N^k}{k!} \quad (\text{G.35})$$

$$\left(1 - \frac{r_i}{L}\right)^{N-k} \simeq e^{-(N-k)\ln \frac{r_i}{L}} \simeq e^{-r_i \frac{N}{L}} \quad (\text{G.36})$$

ce qui conduit à

$$\mathbb{P}_i(k) \simeq \frac{n_{0i}^k}{k!} e^{-n_{0i}} \quad (\text{G.37})$$

où $n_{0i} = r_i \frac{N}{L}$ est le nombre moyen de particules au site i . La distribution initiale des particules est donc donnée par une distribution de Poisson, dont la moyenne dépend du poids du site considéré :

$$|P(0)\rangle = \bigotimes_{i=1}^L \left(e^{-n_{0i} + \frac{1}{2}n_{0i}^2} |n_{0i}\rangle \right) \quad (\text{G.38})$$

où $|n_{0i}\rangle$ est l'état cohérent de valeur propre n_{0i} (et non l'état nombre associé à n_{0i}).

G.6 Forme normale d'un opérateur

Grâce à la relation de commutation (G.8), il est possible de passer tous les \hat{a}^\dagger à gauche et tous les \hat{a} à droite. On peut donc associer à tout opérateur \hat{F} sa forme normale $\tilde{F}(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ définie par :

$$\hat{F} = \sum_{n,m} F_{n,m} \hat{a}^{\dagger n} \hat{a}^m \equiv \tilde{F}(\hat{a}^\dagger, \hat{a}). \quad (\text{G.39})$$

Cette forme est particulièrement utile lorsqu'on utilise les états cohérents ou l'état de projection. En effet, vu que $\langle \mathcal{O} | \hat{a}^\dagger = \langle \mathcal{O} |$, on a :

$$\langle w | \hat{F} | z \rangle = \tilde{F}(w^*, z) \quad (\text{G.40})$$

$$\langle \mathcal{O} | \hat{F} | z \rangle = \tilde{F}(\hat{1}, z) \langle \mathcal{O} | z \rangle \quad (\text{G.41})$$

Dans la suite, on notera $\tilde{F}(\hat{1}, z) \equiv \tilde{F}(z)$.

G.7 Passage à une théorie des champs

On va utiliser les états cohérents pour passer à une théorie des champs. Pour cela, on va réexprimer la valeur moyenne d'une observable comme une intégrale fonctionnelle avec un poids donné par une action. La valeur moyenne au temps t d'une observable \mathcal{F} est donnée par :

$$\langle \hat{F} \rangle_t = \langle \mathcal{O} | \hat{F} | P(t) \rangle = \langle \mathcal{O} | \hat{F} e^{t\hat{W}} | P(0) \rangle \quad (\text{G.42})$$

On sépare l'exponentielle en S morceaux, et on insère entre chaque la relation de fermeture (G.28) en utilisant les états cohérents pour l'ensemble du système (qui sont un produit tensoriel des états cohérents sur un site). En notant $|\phi_s\rangle = \bigotimes_{i=1}^L |\phi_{i,s}\rangle$ les états cohérents insérés et $\delta t = \frac{t}{S}$, on obtient

$$\langle \hat{F} \rangle_T = \int \left(\prod_{s=0}^S \frac{d^2\phi_s}{\pi} \right) \langle \mathcal{O} | \hat{F} | \phi_S \rangle \left(\prod_{s=1}^S \langle \phi_s | e^{\hat{W}\delta t} | \phi_{s-1} \rangle \right) \langle \phi_0 | P(0) \rangle. \quad (\text{G.43})$$

En prenant pour $|P(0)\rangle$ la distribution donnée par l'équation (G.38), on montre

$$\langle \phi_0 | P(0) \rangle = \exp \left[\sum_{i=1}^L -\frac{1}{2} |\phi_{i,0}|^2 - (1 - \phi_{i,0}^*) n_{0i} \right]. \quad (\text{G.44})$$

En supposant que, pour tout i , $\phi_{i,s} - \phi_{i,s-1} = \mathcal{O}(\delta t)$, c'est-à-dire que le champ est continu temporellement, on obtient

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle_T &= \int \left(\prod_{s=0}^S \frac{d^2\phi_s}{\pi} \right) \langle \mathcal{O} | \hat{F} | \phi_S \rangle \left(\prod_{i=1}^L \prod_{s=1}^S \langle \phi_{i,s} | \phi_{i,s-1} \rangle \right) \exp \left[\delta t \sum_{s=1}^S \frac{\langle \phi_s | \hat{W} | \phi_{s-1} \rangle}{\langle \phi_s | \phi_{s-1} \rangle} \right] \langle \phi_0 | P(0) \rangle \\ &= \int \left(\prod_{s=0}^S \frac{d^2\phi_s}{\pi} \right) \tilde{F}(\phi_S) \\ &\quad e^{\left[-\sum_{i=1}^L \sum_{s=1}^S (\phi_{i,s}^* (\phi_{i,s} - \phi_{i,s-1}) - \delta t \gamma \phi_{i,s}^* \Delta_d \phi_{i,s-1}) - \phi_{i,S} + |\phi_{i,0}|^2 + (1 - \phi_{i,0}^*) n_{0i} \right]}. \end{aligned} \quad (\text{G.45})$$

On prend la limite du temps continu ($\delta t \rightarrow 0$), ainsi que la limite de l'espace continu (on mesure les distances en échelle de la taille du réseau et on fait tendre L vers l'infini). Cela revient à faire les remplacements suivants :

$$i \rightarrow x_j = \frac{i}{L} \quad (\text{G.46})$$

$$s \rightarrow t' \quad (\text{G.47})$$

$$S \rightarrow t \quad (\text{G.48})$$

$$\phi_{i,s} \rightarrow \psi(x,t) \quad (\text{G.49})$$

$$\phi_{i,s}^* \rightarrow \bar{\psi}(x,t) \quad (\text{G.50})$$

$$n_{0i} \rightarrow \rho_0(x) \quad (\text{G.51})$$

$$(\phi_{i,s} - \phi_{i,s-1}) \rightarrow \partial_t \psi(x,t) \quad (\text{G.52})$$

$$\Delta_d \rightarrow \left(\frac{1}{L}\right)^2 \Delta \quad (\text{G.53})$$

$$\sum_i \rightarrow L \int_0^1 dx \quad (\text{G.54})$$

$$\delta t \sum_s \rightarrow \int_0^t dt' \quad (\text{G.55})$$

De plus, on définit le temps diffusif $\tau = \frac{t}{L^2}$ et la constante de diffusion $D = \gamma$. On obtient alors

$$\langle \hat{F} \rangle_t = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \tilde{F}[\psi(t)] e^{-S[\psi, \bar{\psi}]} \quad (\text{G.56})$$

avec

$$S[\psi, \bar{\psi}] = L \int_0^1 dx \left(\int_0^\tau d\tau' [\bar{\psi}(x, \tau') (\partial_{\tau'} - D\Delta) \psi(x, \tau')] - \psi(x, \tau) + \psi(x, 0) \bar{\psi}(x, 0) - \rho_0(x) \bar{\psi}(x, 0) \right) \quad (\text{G.57})$$

G.8 Dérivation de l'hydrodynamique fluctuante

Dans la suite, nous n'indiquerons plus les termes de bords, qui demandent de conserver l'action sous forme discrétisée pour être traités correctement. À titre d'indication, les termes de bords devraient donner la condition initiale sur le champ de densité, à savoir $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$.

On effectue le changement de variables

$$\begin{cases} \psi &= \rho e^{-\bar{\rho}} \\ \bar{\psi} &= e^{\bar{\rho}} \end{cases} \quad (\text{G.58})$$

dans l'intégrale fonctionnelle. Cela correspond au passage de $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ à $(\hat{\rho}, \hat{\rho}^\dagger)$ au niveau de l'opérateur d'évolution. On vérifie facilement que le module du jacobien associé est 1. Alors que ce changement de variable a un sens précis au niveau des opérateurs ($\hat{\rho}$ est l'opérateur nombre de particules), il n'est pas évident qu'il le conserve au niveau des champs. En effet, contrairement aux champs, les opérateurs ne commutent pas. Faire le changement de variables au niveau des

opérateurs ou au niveau des champs peut donc donner des résultats différents, comme montré par Lefèvre et Biroli [217]. La façon rigoureuse de définir le champs de densité ρ serait d'introduire des états nombres ayant pour opérateurs d'échelle $\hat{\rho}$ et $\hat{\rho}^\dagger$ puis de reconstruire l'intégrale de chemin à partir de ces états et de ces opérateurs. Alors que cette construction est parfois nécessaire, elle redonne ici le même résultat que l'approche naïve qui consiste à appliquer la transformation de Cole-Hopf (G.58) directement dans l'intégrale de chemin.

L'action, en fonction de ces nouveaux champs, s'exprime alors

$$S[\rho, \bar{\rho}] = L \int_0^1 dx \int_0^\tau d\tau' \left[\bar{\rho}(\partial_{\tau'} - D\Delta) \rho - D\rho(\partial_x \bar{\rho})^2 \right]. \quad (\text{G.59})$$

On introduit un nouveau champ, gaussien, avec une transformation d'Hubbard-Stratonovitch, pour linéariser le terme quadratique en $\bar{\rho}$:

$$e^{LD\rho(\partial_x \bar{\rho})^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \mathbb{P}(\xi) e^{-\sqrt{2DL\rho} \partial_x \bar{\rho} \xi} \quad \text{à chaque } \tau \text{ et à chaque } x \quad (\text{G.60})$$

avec

$$\mathbb{P}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (\text{G.61})$$

Le champ gaussien introduit est donc un bruit blanc de variance 1. L'action s'exprime alors

$$S[\rho, \bar{\rho}, \xi] = L \int_0^1 dx \int_0^\tau d\tau' \bar{\rho} \left[\partial_{\tau'} \rho - D\Delta\rho - \partial_x \left(\sqrt{\frac{2D\rho}{L}} \xi \right) \right]. \quad (\text{G.62})$$

Finalement, en utilisant la relation

$$\int dz e^{za} = 2\pi i \delta(a) \quad (\text{G.63})$$

en chaque point x et à chaque temps τ' , on obtient que la moyenne de \mathcal{F} est donnée par

$$\langle \hat{F} \rangle_t = \int \mathcal{D}[\rho, \xi] \tilde{F}[\rho(t)] e^{-\int_0^1 dx \int_0^{t/L^2} d\tau' \frac{\xi^2}{2}} \delta \left[\partial_{\tau'} \rho(x, \tau) - D\Delta\rho(x, \tau) - \partial_x \left(\sqrt{\frac{2D\rho}{L}} \xi(x, \tau) \right) \right]. \quad (\text{G.64})$$

La distribution de Dirac fonctionnelle dans l'intégrale de chemin nous permet de lire l'équation d'évolution du champ de densité ρ , qui correspond à l'équation de l'hydrodynamique fluctuante pour les particules libres :

$$\partial_{\tau'} \rho(x, \tau) = D\Delta\rho(x, \tau) + \partial_x \left(\sqrt{\frac{2D\rho}{L}} \xi(x, \tau) \right) \quad (\text{G.65})$$

où ξ un bruit blanc gaussien de corrélations $\langle \xi(x, \tau) \xi(x', \tau') \rangle = \delta(x - x') \delta(\tau - \tau')$, comme indiqué par le terme exponentiel dans (G.64). La règle de lecture est celle d'Itô. Il faut garder la discrétisation jusqu'à la fin du calcul pour le montrer. Comme annoncé à la section 5.3, on obtient $\sigma(\rho) = 2\rho$ si on prend $D = 1$ (donc $\gamma = 1$).

Annexe H

Simulation numérique du processus $A + B \rightarrow \emptyset$

Dans cette annexe, nous présentons l'algorithme *Renormalized Reaction-Cell method* (RRC) développé par ben-Avraham en 1988 [209–212] pour simuler les processus de réaction-diffusion. Nous prendrons l'exemple du processus $A + B \rightarrow \emptyset$ et présenterons dans la section H.3 notre adaptation sans rejet de cet algorithme.

H.1 Simulation directe

Une façon de simuler ce processus est d'implémenter directement la dynamique décrite par l'équation maîtresse. On considère un système de N particules, chacune pouvant sauter sur un site voisin avec un taux γ . On itère alors la procédure suivante en partant de $t = 0$:

- 1 On tire l'incrément de temps Δt suivant une loi exponentielle de paramètre $2N\gamma$

$$\mathbb{P}(\Delta t) = 2N\gamma e^{-2N\gamma\Delta t} \tag{H.1}$$

et on met à jour le temps : $t \leftarrow t + \Delta t$.

- 2 On choisit aléatoirement une des N particules (un des sites occupés) et un saut (gauche ou droite).
- 3 S'il y a de l'exclusion, ou une règle de saut particulière, on vérifie que le saut est bien permis.
 - S'il l'est, on effectue le saut.
 - S'il ne l'est pas, on rejette le saut et on ne change rien.
- 4 On effectue les réactions le cas échéant.
- 5 On itère : retour à l'étape 1.

Cette méthode a été utilisée abondamment pour simuler les processus de réaction-diffusion [218–223], avec de légères adaptations. Par exemple, du fait de la faible puissance des ordinateurs de l'époque, il était courant d'utiliser $\Delta t = \frac{1}{2N\gamma}$ au lieu de tirer Δt selon une loi exponentielle. On évitait ainsi de tirer un nombre aléatoire, ce qui est une opération complexe et coûteuse en temps de calcul. Il est aussi possible d'éviter les opérations de rejet en adaptant le taux de saut total pour ne garder que les sauts autorisés, mais cela demande de garder une liste à jour des sauts réellement possibles (voir la section H.3).

Le problème de cette méthode quand on l'applique aux processus d'annihilation est que, rapidement, il ne reste que peu de particules, très espacées les unes des autres. L'algorithme passe donc beaucoup de temps de calcul à simuler des particules réalisant une diffusion libre, ce qui n'a pas un grand intérêt quand on est intéressé par la décroissance du nombre de particules. C'est pour résoudre ce problème que ben-Avraham a développé la RRC.

H.2 Renormalized Reaction-Cell method (RRC)

H.2.1 Principe

La RRC est une simulation directe avec une renormalisation de la taille des sites pour maintenir en moyenne un nombre de particules par site constant. Dès que le nombre de particules a diminué de moitié, on fusionne les sites deux à deux pour créer un nouveau réseau avec deux fois moins de sites. Il faut modifier le taux de saut en conséquence pour que la dynamique reste la même. Nous allons d'abord présenter cet algorithme pour le processus $A + B \rightarrow \emptyset$ sans exclusion (on peut donc avoir autant de particules de même type par site), et nous traiterons le cas de l'exclusion dans la section suivante.

On note $N_A(t)$ le nombre de particules A au temps t et $N_B(t)$ celui de particules B . Par souci de simplicité, on considère le cas où l'on a autant de particules de chaque type. On note alors $N(t) \equiv N_A(t) = N_B(t)$. Chaque particule saute sur un site voisin avec un taux γ . On commence avec $N_A(0) = N_B(0) = N_0$ particules de chaque type réparties aléatoirement sur le réseau, et on itère la procédure suivante en partant de $t = 0$ et $N_c = N_0/2$:

- 1 Le taux de saut total étant $r = 2\gamma N$, on incrémente le temps de $\Delta t = \frac{1}{r}$.
- 2 On sélectionne le site et le saut en utilisant le *tower sampling* [84]. On numérote les k sites contenant des particules et on note n_i le nombre de particules qu'ils contiennent avec $i \in \llbracket 1, k \rrbracket$. On construit la fonction cumulative C de façon récurrente en posant $C(0) = 0$ et $C(j \geq 1) = C(j-1) + 2n_j$. On tire ensuite un nombre aléatoire dans l'intervalle $[0, 2N[$, qui va nous permettre de choisir le saut. Si le nombre aléatoire tombe dans l'intervalle $[C(j-1), C(j)[$, alors le saut part du site j . La direction du saut est donnée par la parité de la partie entière du nombre aléatoire : s'il est pair, la particule saute vers la droite et s'il est impair, elle saute vers la gauche. On effectue alors le saut.
- 3 On vérifie s'il y a une réaction d'annihilation, et on la réalise le cas échéant, en n'oubliant pas de mettre à jour $N(t)$.
- 4 Si $N(t) \leq N_c$, on renormalise le réseau, en fusionnant les sites deux à deux :
 - Pour $j \in \llbracket 1, L/2 \rrbracket$, on fusionne les sites $2j$ et $2j+1$ ensemble en un nouveau site j qui contient $n_j + n_{j+1}$ particules et on effectue les réactions d'annihilation le cas échéant. La taille du réseau est donc divisée par deux : $L \leftarrow L/2$.

- On renormalise le taux de saut pour ne pas modifier la dynamique : $\gamma \leftarrow \gamma/4$.
- On calcule le nouveau seuil : $N_c \leftarrow N_c/2$.

5 On itère : retour à l'étape 1.

Une alternative pour éviter le *tower sampling* de l'étape 2 est utilisée dans l'implémentation originale de ben-Avraham [209] et est décrite en détail dans [224]. Elle nécessite de connaître en permanence $n_{\max} = \max_i n_i$ et de considérer que chaque site occupé contient en réalité n_{\max} particules. À l'étape 1, on doit donc remplacer r par $r' = 2\gamma n_{\max} N_{\text{occ}} > r$, où N_{occ} est le nombre de sites non vides. De plus, tous les sites non vides ont le même taux d'activation. On choisit alors un site uniformément en tirant un nombre aléatoire p dans $[1, N_{\text{occ}} + 1[$ et en prenant sa partie entière. Le site dont une particule saute est ainsi donné par $k = \lfloor p \rfloor$. On tire ensuite un nombre aléatoire p' dans $[0, n_k[$ pour déterminer si une particule saute ou non. Si $p' < n_k$, une particule saute effectivement alors que si $p' \geq n_k$, aucune particule ne saute. L'avantage de cette méthode est qu'elle remplace le *tower sampling*, qui demande de rechercher dans quel intervalle tombe le nombre aléatoire et correspond donc $\mathcal{O}(N_{\text{occ}})$ opérations, par un nombre fini d'opérations. En revanche, elle nécessite de tirer un nombre aléatoire de plus et introduit du rejet dans l'algorithme. En effet, comme $r' > r$, on tire des incréments de temps beaucoup plus petits, dont un certain nombre ne conduisent pas à une modification de l'état du système.

Pour que l'algorithme réalise une évolution temporelle plus proche du processus markovien réel, il est possible, dans l'étape 1, de remplacer l'incrément de temps en $1/r$ par une distribution exponentielle, qui est la vraie distribution des temps du processus :

$$\mathbb{P}(\Delta t) = r e^{-r\Delta t}. \quad (\text{H.2})$$

Nous avons essayé les deux, et n'avons pas noté d'écart notable pour la décroissance moyenne du nombre de particules. Nous avons donc utilisé la distribution des temps simplifiée en $1/r$ pour gagner en efficacité. Implémenter la distribution exponentielle est important pour les quantités sensibles à la distribution des temps de saut, ce qui est peut-être le cas des fluctuations du taux de décroissance de la densité.

H.2.2 Exclusion

Le cas avec exclusion est détaillé dans la section 2 de [211]. Avant la première renormalisation, on peut tenir compte de l'exclusion comme dans la méthode directe (étape 3) : si le site sur lequel une particule tente de sauter est déjà occupé par une particule du même type, le saut est rejeté. Tout se passe bien tant qu'on n'a pas eu de renormalisation du réseau. Une fois qu'on a divisé le nombre de sites par deux en les fusionnant deux à deux, on peut se retrouver avec deux particules par site, ce qui semble en contradiction avec l'exclusion. De plus, on est tenté de penser que les sites avec plus de particules ont plus de chance de voir une particule sauter. Ce n'est pas le cas, et en réalité les seules modifications qu'il faut introduire dans l'algorithme précédent pour qu'il soit correct sont :

- Interdire les sauts d'une particule de type donné vers un site contenant déjà une ou plusieurs particules du même type, ce qui revient à ajouter un test entre les étapes 2 et 3 et à rejeter le saut si besoin.
- Dans l'étape 1, remplacer r par $r_{\text{excl}} = 2\gamma N_{\text{occ}}$, où N_{occ} est le nombre de sites occupés. Cela peut sembler contre-intuitif vu que c'est équivalent à donner la même probabilité de départ à tous les sites occupés, indépendamment du nombre de particules qu'ils contiennent.

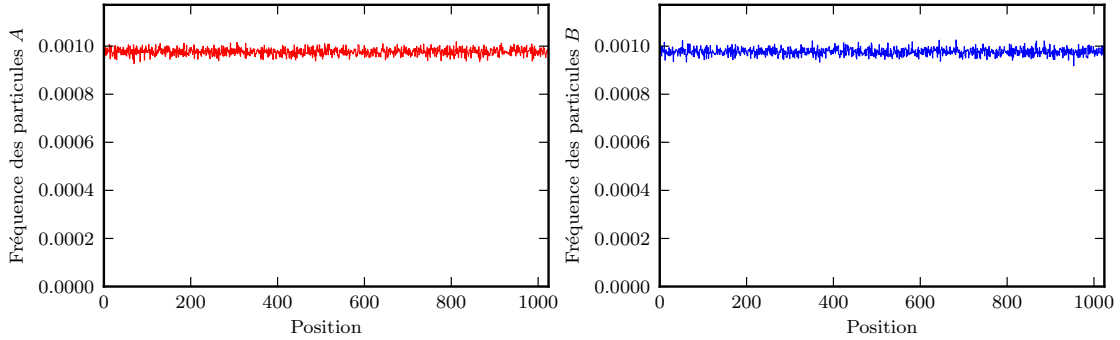


Figure H.1 – Fréquence d’occupation des particules A et B à l’issue de l’initiation du réseau. Ces histogrammes ont été tracés en initialisant 20 000 fois une chaîne de taille $L = 2^{10}$ avec $N_0 = 2^8$ particules de chaque type. On constate que la répartition est bien uniforme en A et en B , sans effet de bords.

En réalité, du fait de l’exclusion, si un site contient plusieurs particules, on peut supposer que seule la particule la plus à droite peut sauter vers la droite et que seule la particule la plus à gauche peut sauter vers la gauche. Les autres particules sont empêchées de sortir du site par ces deux particules qui en bloquent les bords. On a donc bien finalement que deux sauts possibles pour chaque site occupé, un vers la droite avec un taux γ et un vers la gauche avec un taux γ , et le taux de saut total est bien $r_{\text{excl}} = 2\gamma N_{\text{occ}}$.

H.3 RRC sans rejet

Dans cette thèse, on a adapté la RRC pour obtenir un algorithme sans rejet et ainsi gagner en efficacité algorithmique. On considère le processus $A + B \rightarrow \emptyset$ avec exclusion mutuelle entre les particules de même espèce, taux de réaction infini et taux de saut γ .

H.3.1 Algorithme

On débute avec $N_A(0) = N_B(0) = N_0$ particules de chaque type sur une chaîne de taille L avec conditions aux limites périodiques. Les indices de sites varient de 0 à $L-1$. Du fait des conditions aux bords, le site L est identifié avec le site 0 et le site -1 est identifié avec le site $L-1$. On commence par initialiser le système :

- (a) On répartit les N_0 particules de chaque type uniformément sur le réseau, en tenant compte de l’exclusion. Pour cela, on utilise l’algorithme 6.2 de la page 271 du livre de Krauth [84]. On tire $2N_0$ nombres aléatoires dans $\llbracket 0, L - 2N_0 \rrbracket$, qui correspondent aux positions des particules dans l’espace réellement disponible. On ordonne ces nombres aléatoires, qu’on note l_i , tels que $l_1 \leq \dots \leq l_{2N_0}$. Les positions x_i de nos $2N_0$ particules (i variant de 0 à $2N_0 - 1$) sont alors $x_i = i + l_i$. Pour éviter les effets de bords, on ajoute en plus un décalage aléatoire global choisi uniformément dans $\llbracket 0, L - 1 \rrbracket$. Pour finir, on choisit aléatoirement N_0 particules parmi ces $2N_0$ particules qui seront de type A ; les autres seront de type B . Voir la figure H.1 pour une vérification que l’initialisation est bien uniforme.

- (b) On fixe $t = 0$, le nombre de particules d'un type $N = N_0$ et le seuil en-dessous duquel on devra renormaliser le réseau $N_c = N_0/2$.
- (c) On stocke dans des tableaux séparés les sites non vides :
 - dont aucun plus proche voisin ne contient des particules du même type. Le tableau s'appelle X_{0v} et il contient N_{0v} sites.
 - dont un seul des deux plus proches voisins contient des particules du même type. Le tableau s'appelle X_{1v} et il contient N_{1v} sites.

On itère ensuite :

- 1 On calcule le taux de saut total $r = \gamma(2N_{0v} + N_{1v})$ et on incrémente le temps de $\Delta t = 1/r$.
- 2 On choisit le saut qui a lieu grâce au *tower sampling*. Les candidats sont les N_{0v} éléments du tableau X_{0v} avec un poids 2 (ils peuvent sauter à droite ou à gauche, et la parité permettra de déterminer la direction du saut) et les N_{1v} éléments du tableau X_{1v} .
- 3 On effectue le saut.
- 4 On vérifie s'il y a une réaction d'annihilation, et on l'exécute le cas échéant.
- 5 On met à jour les tableaux X_{0v} et X_{1v} . On actualise aussi N_{0v} , N_{1v} et N .
- 4 Si $N \leq N_c$, on renormalise le réseau, en fusionnant les sites deux à deux :
 - Pour $j \in \llbracket 1, L/2 \rrbracket$, on fusionne les sites $2j$ et $2j + 1$ ensemble en un nouveau site j qui contient $n_j + n_{j+1}$ particules et on effectue les réaction d'annihilation le cas échéant. La taille du réseau est donc divisée par deux : $L \leftarrow L/2$. On doit mettre à jour au passage les tableaux X_{0v} et X_{1v} ainsi que les nombres N_{0v} , N_{1v} et N .
 - On renormalise le taux de saut pour ne pas modifier la dynamique : $\gamma \leftarrow \gamma/4$.
 - On calcule le nouveau seuil : $N_c \leftarrow N_c/2$.
- 5 On itère : retour à l'étape 1.

Pour améliorer la fidélité de l'algorithme, il est possible de remplacer l'étape 1 par :

- 1' On calcule le taux de saut total $r = \gamma(2N_{0v} + N_{1v})$ et on tire l'incrément de temps Δt suivant une loi exponentielle de paramètre r

$$\mathbb{P}(\Delta t) = r e^{-r\Delta t}. \quad (\text{H.3})$$

On incrémente ensuite le temps de Δt .

H.3.2 Application : prédiction de Toussaint et Wilczek

Aux temps courts, on s'attend à ce que le système ne ressente pas les effets de taille finie et donc à observer une décroissance du nombre de particules c en

$$c(t) = \frac{\sqrt{c_0}}{(2\pi)^{3/4}(\gamma t)^{1/4}} \quad (\text{H.4})$$

prédite par Toussaint et Wilczek [195].

Pour vérifier que les approximations utilisées par la RRC ne perturbaient pas de manière évidente l'évolution du nombre de particules du processus $A + B \rightarrow \emptyset$ et que notre implémentation était correcte, nous avons regardé si nous observions bien cette décroissance (avec les bons facteurs numériques) aux temps courts. Comme on peut le voir sur la figure H.2, c'est bien le cas.

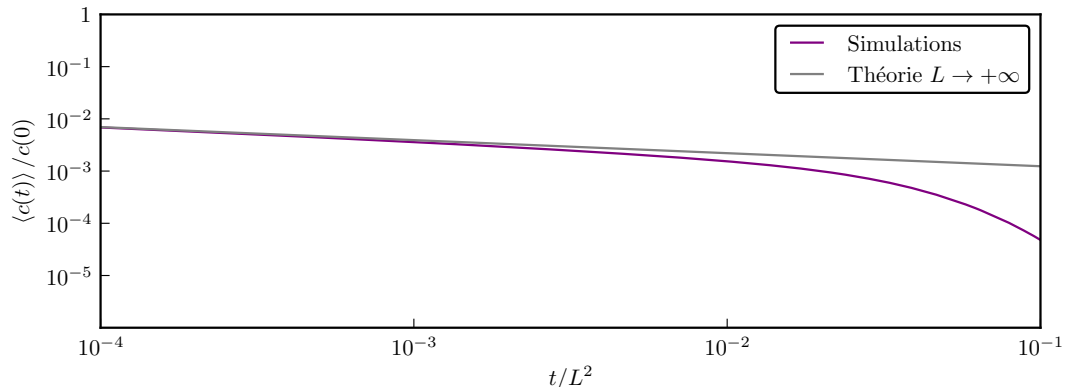


Figure H.2 – Simulations de $A + B \rightarrow \emptyset$ avec l'algorithme RRC. L'état initial est composé de $c_0 L$ particules de chaque type réparties uniformément sur le réseau de taille L . Le taux de saut est $\gamma = 1$, la taille du système est $L = 2^{20}$, la densité initiale de chaque espèce est $c_0 = 1/8$ et la moyenne est réalisée sur la distribution stationnaire extraite de 1000 simulations, en ne prenant en compte que celles qui n'ont pas encore atteint l'état absorbant (vide). La prédiction théorique en taille infinie utilisée est (H.4). Dès $t/L^2 = 10^{-4}$, le nombre de particules a été divisé par plus de 100, donc le réseau a été renormalisé au moins six fois. La prédiction théorique en taille infinie décrit bien la décroissance du nombre de particules jusqu'à $t/L^2 \sim 10^{-3}$, après quoi les effets de taille finie commencent à devenir prépondérants.

Bibliographie

- [1] A. Trombettoni & A. Smerzi, “Discrete Solitons and Breathers with Dilute Bose-Einstein Condensates”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2353 (2001), doi:10.1103/PhysRevLett.86.2353.
- [2] M. Peyrard, T. Dauxois, H. Hoyet & C. Willis, “Biomolecular dynamics of DNA: statistical mechanics and dynamical models”, *Physica D* **68**, 104 (1993), doi:10.1016/0167-2789(93)90035-Y.
- [3] T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo & A. Torcini, “Localization and equipartition of energy in the β -FPU chain: Chaotic breathers”, *Physica D* **121**, 109 (1998), doi:10.1016/S0167-2789(98)00107-9.
- [4] R. Bowen, *Equilibrium States and the Ergodic Theory of Anosov Diffeomorphisms*, tome 470 de *Lecture Notes in Mathematics*, Springer Berlin Heidelberg (1975), doi:10.1007/978-3-540-77695-6.
- [5] R. Bowen & D. Ruelle, “The ergodic theory of Axiom A flows”, *Invent. Math.* **29**, 181 (1975), doi:10.1007/BF01389848.
- [6] Y. G. Sinai, “Gibbs measures in ergodic theory”, *Russ. Math. Surv.* **27**, 21 (1972), doi:10.1070/RM1972v027n04ABEH001383.
- [7] D. Ruelle, “Formalisme thermodynamique”, dans *Séminaire Bourbaki vol. 1975/76 Exposés 471–488*, tome 567 de *Lecture Notes in Mathematics*, pages 154–166, Springer Berlin Heidelberg (1977), doi:10.1007/BFb0096067.
- [8] D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism: The Mathematical Structure of Equilibrium Statistical Mechanics*, Addison-Wesley (1978), doi:10.1017/CBO9780511617546.
- [9] J. Tailleur, J. Kurchan & V. Lecomte, “Mapping out-of-equilibrium into equilibrium in one-dimensional transport models”, *J. Phys. A: Math. Theor.* **41**, 505001 (2008), doi:10.1088/1751-8113/41/50/505001.
- [10] M. V. Dyke, *An Album of Fluid Motion*, The Parabolic Press (1982).
- [11] O. Reynolds, “On the dynamical theory of turbulent incompressible viscous fluids and the determination of the criterion”, *Phil. Trans. R. Soc. London A* **186**, 123 (1894), doi:10.1098/rsta.1895.0004.
- [12] G. T. Chapman & M. Tobak, “Observations, Theoretical Ideas, and Modeling of Turbulent Flows—Past, Present, and Future”, dans *Theoretical Approaches to Turbulence*, édité par D. L. Dwyer, M. Y. Hussaini & R. G. Voigt, tome 58 de *Applied Mathematical Sciences*, pages 19–49, Springer New York (1985), doi:10.1007/978-1-4612-1092-4_2.

- [13] A. N. Kolmogorov, “The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers”, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **30**, 299 (1941), doi:10.1007/978-94-011-3030-1_45.
- [14] G. Falkovich, I. Kolokolov, V. Lebedev & A. Migdal, “Instantons and intermittency”, *Phys. Rev. E* **54**, 4896 (1996), doi:10.1103/PhysRevE.54.4896.
- [15] U. Frisch, A. Mazzino & M. Vergassola, “Intermittency in Passive Scalar Advection”, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5532 (1998), doi:10.1103/PhysRevLett.80.5532.
- [16] E. D. Zanotto, “Do cathedral glasses flow?”, *American Journal of Physics* **66**, 392 (1998), doi:10.1119/1.19026.
- [17] L. Berthier, G. Biroli, J. Bouchaud & R. L. Jack, “Overview of different characterizations of dynamic heterogeneity”, dans *Dynamical Heterogeneities in Glasses, Colloids, and Granular Media*, édité par L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, L. Cipelletti & W. van Saarloos, Oxford University Press (2011), doi:10.1093/acprof:oso/9780199691470.003.0003.
- [18] A. S. Keys, A. R. Abate, S. C. Glotzer & D. J. Durian, “Measurement of growing dynamical length scales and prediction of the jamming transition in a granular material”, *Nat. Phys.* **3**, 260 (2007), doi:10.1038/nphys572.
- [19] E. R. Weeks, J. C. Crocker, A. C. Levitt, A. Schofield & D. A. Weitz, “Three-Dimensional Direct Imaging of Structural Relaxation Near the Colloidal Glass Transition”, *Science* **287**, 627 (2000), doi:10.1126/science.287.5453.627.
- [20] A. Widmer-Cooper, H. Perry, P. Harrowell & D. R. Reichman, “Irreversible reorganization in a supercooled liquid originates from localized soft modes”, *Nat. Phys.* **4**, 711 (2008), doi:10.1038/nphys1025.
- [21] T. S. Grigera, A. Cavagna, I. Giardina & G. Parisi, “Geometric Approach to the Dynamic Glass Transition”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 055502 (2002), doi:10.1103/PhysRevLett.88.055502.
- [22] D. Coslovich & G. Pastore, “Are there localized saddles behind the heterogeneous dynamics of supercooled liquids?”, *Europhys. Lett.* **75**, 784 (2006), doi:10.1209/epl/i2006-10175-8.
- [23] M. Merolle, J. P. Garrahan & D. Chandler, “Space-time thermodynamics of the glass transition”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **102**, 10837 (2005), doi:10.1073/pnas.0504820102.
- [24] L. O. Hedges, R. L. Jack, J. P. Garrahan & D. Chandler, “Dynamic Order-Disorder in Atomistic Models of Structural Glass Formers”, *Science* **323**, 1309 (2009), doi:10.1126/science.1166665.
- [25] E. Pitard, V. Lecomte & F. van Wijland, “Dynamic transition in an atomic glass former: A molecular-dynamics evidence”, *Europhys. Lett.* **96**, 56002 (2011), doi:10.1209/0295-5075/96/56002.
- [26] V. I. Oseledets, “A multiplicative ergodic theorem. Characteristic Ljapunov exponents of dynamical systems”, *Tr. Mosk. Mat. Obs.* **19**, 179 (1968).
- [27] E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems*, Cambridge University Press (1993), doi:10.1017/CBO9780511803260.
- [28] C. Beck & F. Schögl, *Thermodynamics of Chaotic Systems: An Introduction*, Cambridge University Press (1993), doi:10.1017/CBO9780511524585.
- [29] V. Oseledets, “Oseledets theorem”, *Scholarpedia* **3**, 1846 (2008), doi:10.4249/scholarpedia.1846.
- [30] G. Benettin, L. Galgani & J.-M. Strelcyn, “Kolmogorov entropy and numerical experiments”, *Phys. Rev. A* **14**, 2338 (1976), doi:10.1103/PhysRevA.14.2338.

- [31] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli & J.-M. Strelcyn, “Tous les nombres caractéristiques de Lyapounov sont effectivement calculables”, *C. R. Acad. Sc. Paris, Sér. A* **A 286**, 431 (1978).
- [32] I. Shimada & T. Nagashima, “A Numerical Approach to Ergodic Problem of Dissipative Dynamical Systems”, *Prog. Theor. Phys.* **61**, 1605 (1979), doi:10.1143/PTP.61.1605.
- [33] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli & J.-M. Strelcyn, “Lyapunov Characteristic Exponents for smooth dynamical systems and for hamiltonian systems; a method for computing all of them. Part 1: Theory”, *Meccanica* **15**, 9 (1980), doi:10.1007/BF02128236.
- [34] C. E. Shannon, “A Mathematical Theory of Communication”, *Bell Syst. Tech. J.* **27**, 379 (1948).
- [35] B. Hasselblatt & Y. Pesin, “Pesin entropy formula”, *Scholarpedia* **3**, 3733 (2008), doi:10.4249/scholarpedia.3733.
- [36] D. Andrieux, P. Gaspard, S. Ciliberto, N. Garnier, S. Joubaud & A. Petrosyan, “Entropy Production and Time Asymmetry in Nonequilibrium Fluctuations”, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 150601 (2007), doi:10.1103/PhysRevLett.98.150601.
- [37] D. Andrieux, P. Gaspard, S. Ciliberto, N. Garnier, S. Joubaud & A. Petrosyan, “Thermodynamic time asymmetry in non-equilibrium fluctuations”, *J. Stat. Mech.* **2008**, P01002 (2008), doi:10.1088/1742-5468/2008/01/P01002.
- [38] A. Politi, “Lyapunov exponent”, *Scholarpedia* **8**, 2722 (2013), doi:10.4249/scholarpedia.2722.
- [39] S. Tanase-Nicola & J. Kurchan, “Statistical-mechanical formulation of Lyapunov exponents”, *J. Phys. A* **36**, 10299 (2003), doi:10.1088/0305-4470/36/41/004.
- [40] U. Dressler, “Symmetry property of the Lyapunov spectra of a class of dissipative dynamical systems with viscous damping”, *Phys. Rev. A* **38**, 2103 (1988), doi:10.1103/PhysRevA.38.2103.
- [41] H. Touchette, “The large deviation approach to statistical mechanics”, *Phys. Rep.* **478**, 1 (2009), doi:10.1016/j.physrep.2009.05.002.
- [42] S. R. S. Varadhan, “Asymptotic probabilities and differential equations”, *Comm. Pure Appl. Math.* **19**, 261 (1966), doi:10.1002/cpa.3160190303.
- [43] P. Szépfalusy, T. Tél, A. Csordás & Z. Kovács, “Phase transitions associated with dynamical properties of chaotic systems”, *Phys. Rev. A* **36**, 3525 (1987), doi:10.1103/PhysRevA.36.3525.
- [44] J. Bene, P. Szépfalusy & A. Fülöp, “Generic dynamical phase transition in chaotic Hamiltonian systems”, *Phys. Rev. A* **40**, 6719 (1989), doi:10.1103/PhysRevA.40.6719.
- [45] Z. Kaufmann & P. Szépfalusy, “Properties of the entropies at weak intermittent states of Lorenz-type systems”, *Phys. Rev. A* **40**, 2615 (1989), doi:10.1103/PhysRevA.40.2615.
- [46] P. Szépfalusy, T. Tél & G. Vattay, “Thermodynamics of Lorenz-type maps”, *Phys. Rev. A* **43**, 681 (1991), doi:10.1103/PhysRevA.43.681.
- [47] J. Tailleur & J. Kurchan, “Probing rare physical trajectories with Lyapunov weighted dynamics”, *Nat. Phys.* **3**, 203 (2007), doi:10.1038/nphys515.
- [48] M. Kalos, “Energy of a simple triton model”, *Nucl. Phys. A* **126**, 609 (1969), doi:10.1016/0375-9474(69)90850-1.
- [49] J. B. Anderson, “A random-walk simulation of the Schrödinger equation: H_3^+ ”, *J. Chem. Phys.* **63**, 1499 (1975), doi:10.1063/1.431514.

- [50] K. Binder (rédacteur), *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Springer-Verlag (1979).
- [51] M. P. Nightingale & H. W. J. Blöte, “Gap of the linear spin-1 Heisenberg antiferromagnet: A Monte Carlo calculation”, *Phys. Rev. B* **33**, 659 (1986), doi:10.1103/PhysRevB.33.659.
- [52] M. P. Nightingale & 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), doi:10.1103/PhysRevLett.60.1562.
- [53] E. M. Gelbard, “Present status and future prospects of neutronics Monte Carlo”, *Prog. Nucl. Energy* **24**, 1 (1990), doi:10.1016/0149-1970(90)90017-Y, monte Carlo Methods for Neutrons and Photon Transport Calculations.
- [54] N. Cerf & O. C. Martin, “Finite population-size effects in projection Monte Carlo methods”, *Phys. Rev. E* **51**, 3679 (1995), doi:10.1103/PhysRevE.51.3679.
- [55] P. Grassberger, “Go with the winners: A general Monte Carlo strategy”, *Comput. Phys. Commun.* **147**, 64 (2002), doi:10.1016/S0010-4655(02)00205-9.
- [56] C. Dellago, P. G. Bolhuis, F. S. Csajka & D. Chandler, “Transition path sampling and the calculation of rate constants”, *J. Chem. Phys.* **108**, 1964 (1998), doi:10.1063/1.475562.
- [57] P. G. Bolhuis, C. Dellago & D. Chandler, “Sampling ensembles of deterministic transition pathways”, *Faraday Discuss.* **110**, 421 (1998), doi:10.1039/A801266K.
- [58] C. Dellago, P. G. Bolhuis & D. Chandler, “Efficient transition path sampling: Application to Lennard-Jones cluster rearrangements”, *J. Chem. Phys.* **108**, 9236 (1998), doi:10.1063/1.476378.
- [59] C. Dellago, P. G. Bolhuis & D. Chandler, “On the calculation of reaction rate constants in the transition path ensemble”, *J. Chem. Phys.* **110**, 6617 (1999), doi:10.1063/1.478569.
- [60] C. Dellago, P. G. Bolhuis & P. L. Geissler, “Transition Path Sampling”, dans *Advances in Chemical Physics*, édité par I. Prigogine & S. A. Rice, tome 123, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA (2002), doi:10.1002/0471231509.ch1.
- [61] P. G. Bolhuis, D. Chandler, C. Dellago & P. L. Geissler, “Transition Path Sampling: Throwing Ropes Over Rough Mountain Passes, in the Dark”, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **53**, 291 (2002), doi:10.1146/annurev.physchem.53.082301.113146, pMID: 11972010.
- [62] Y. S. Elmatad, R. L. Jack, D. Chandler & J. P. Garrahan, “Finite-temperature critical point of a glass transition”, *PNAS* **107**, 12793 (2010), doi:10.1073/pnas.1006306107.
- [63] R. L. Jack, L. O. Hedges, J. P. Garrahan & D. Chandler, “Preparation and Relaxation of Very Stable Glassy States of a Simulated Liquid”, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 275702 (2011), doi:10.1103/PhysRevLett.107.275702.
- [64] R. L. Jack & P. Sollich, “Large deviations of the dynamical activity in the East model: analysing structure in biased trajectories”, *J. Phys. A: Math. Theor.* **47**, 015003 (2014), doi:10.1088/1751-8113/47/1/015003.
- [65] R. L. Jack, I. R. Thompson & P. Sollich, “Hyperuniformity and phase separation in biased ensembles of trajectories for diffusive systems”, *arXiv preprint arXiv:1409.3986* (2014).
- [66] P. Geiger & C. Dellago, “Identifying rare chaotic and regular trajectories in dynamical systems with Lyapunov weighted path sampling”, *Chem. Phys.* **375**, 309 (2010), doi:10.1016/j.chemphys.2010.04.024, stochastic processes in Physics and Chemistry (in honor of Peter Hänggi).
- [67] Y. Iba, N. Saito & A. Kitajima, “Multicanonical MCMC for sampling rare events: an illustrative review”, *Ann. Inst. Stat. Math.* **66**, 1 (2014), doi:10.1007/s10463-014-0460-2.

- [68] A. Kitajima & Y. Iba, “Multicanonical sampling of rare trajectories in chaotic dynamical systems”, *Comput. Phys. Commun.* **182**, 251 (2011), doi:10.1016/j.cpc.2010.07.044, computer Physics Communications Special Edition for Conference on Computational Physics Kaohsiung, Taiwan, Dec 15-19, 2009.
- [69] T. S. van Erp, D. Moroni & P. G. Bolhuis, “A novel path sampling method for the calculation of rate constants”, *J. Chem. Phys.* **118**, 7762 (2003), doi:10.1063/1.1562614.
- [70] T. S. van Erp & P. G. Bolhuis, “Elaborating transition interface sampling methods”, *Journal of Computational Physics* **205**, 157 (2005), doi:10.1016/j.jcp.2004.11.003.
- [71] T. Nemoto & S.-i. Sasa, “Computation of Large Deviation Statistics via Iterative Measurement-and-Feedback Procedure”, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 090602 (2014), doi:10.1103/PhysRevLett.112.090602.
- [72] R. J. Allen, P. B. Warren & P. R. ten Wolde, “Sampling Rare Switching Events in Biochemical Networks”, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 018104 (2005), doi:10.1103/PhysRevLett.94.018104.
- [73] R. J. Allen, D. Frenkel & P. R. ten Wolde, “Simulating rare events in equilibrium or nonequilibrium stochastic systems”, *J. Chem. Phys.* **124**, 024102 (2006), doi:10.1063/1.2140273.
- [74] R. J. Allen, C. Valeriani & P. R. ten Wolde, “Forward flux sampling for rare event simulations”, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 463102 (2009), doi:10.1088/0953-8984/21/46/463102.
- [75] W. E, W. Ren & E. Vanden-Eijnden, “Minimum action method for the study of rare events”, *Comm. Pure Appl. Math.* **57**, 637 (2004), doi:10.1002/cpa.20005.
- [76] M. Heymann & E. Vanden-Eijnden, “The geometric minimum action method: A least action principle on the space of curves”, *Comm. Pure Appl. Math.* **61**, 1052 (2008), doi:10.1002/cpa.20238.
- [77] E. Vanden-Eijnden & M. Heymann, “The geometric minimum action method for computing minimum energy paths”, *J. Chem. Phys.* **128**, 061103 (2008), doi:10.1063/1.2833040.
- [78] X. Zhou, W. Ren & W. E, “Adaptive minimum action method for the study of rare events”, *J. Chem. Phys.* **128**, 104111 (2008), doi:10.1063/1.2830717.
- [79] X. Wan, “An adaptive high-order minimum action method”, *Journal of Computational Physics* **230**, 8669 (2011), doi:10.1016/j.jcp.2011.08.006.
- [80] F. Bouchet, J. Laurie & O. Zaboronski, “Control and instanton trajectories for random transitions in turbulent flows”, *J. Phys: Conf. Ser.* **318**, 022041 (2011), doi:10.1088/1742-6596/318/2/022041.
- [81] J. Laurie & F. Bouchet, “Computation of rare transitions in the barotropic quasi-geostrophic equations”, *arXiv preprint arXiv:1409.3219* (2014).
- [82] Y. G. Sinai, “Kolmogorov’s Work on Ergodic Theory”, *Ann. Probab.* **17**, 833 (1989), doi:10.1214/aop/1176991249.
- [83] W. Cowieson & L.-S. Young, “SRB measures as zero-noise limits”, *Ergod. Th. & Dynam. Sys.* **25**, 1115 (2005), doi:10.1017/S0143385704000604.
- [84] W. Krauth, *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*, Oxford University Press (2006).
- [85] P. Del Moral, A. Doucet & A. Jasra, “On adaptive resampling strategies for sequential Monte Carlo methods”, *Bernoulli* **18**, 252 (2012), doi:10.3150/10-BEJ335.
- [86] W. E. Wiesel, “Continuous time algorithm for Lyapunov exponents. I”, *Phys. Rev. E* **47**, 3686 (1993), doi:10.1103/PhysRevE.47.3686.

- [87] J. G. Kirkwood, “Statistical Mechanics of Fluid Mixtures”, *J. Chem. Phys.* **3**, 300 (1935), doi:10.1063/1.1749657.
- [88] T. Laffargue, K.-D. Nguyen Thu Lam, J. Kurchan & J. Tailleur, “Large deviations of Lyapunov exponents”, *J. Phys. A* **46**, 254002 (2013), doi:10.1088/1751-8113/46/25/254002.
- [89] C. Giardinà, J. Kurchan, V. Lecomte & J. Tailleur, “Simulating rare events in dynamical processes”, *J. Stat. Phys.* **145**, 787 (2011), doi:10.1007/s10955-011-0350-4.
- [90] S. Tanase-Nicola & J. Kurchan, “Topological Methods for Searching Barriers and Reaction Paths”, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 188302 (2003), doi:10.1103/PhysRevLett.91.188302.
- [91] S. Tanase-Nicola & J. Kurchan, “Metastable states, transitions, basins and borders at finite temperatures”, *J. Stat. Phys.* **116**, 1201 (2004), doi:10.1023/B:JOSS.0000041739.53068.6a.
- [92] C. Giardinà, J. Kurchan & L. Peliti, “Direct Evaluation of Large-Deviation Functions”, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 120603 (2006), doi:10.1103/PhysRevLett.96.120603.
- [93] J. P. Garrahan, R. L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk & F. van Wijland, “Dynamical First-Order Phase Transition in Kinetically Constrained Models of Glasses”, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 195702 (2007), doi:10.1103/PhysRevLett.98.195702.
- [94] V. Lecomte & J. Tailleur, “A numerical approach to large deviations in continuous time”, *J. Stat. Mech.* **2007**, P03004 (2007), doi:10.1088/1742-5468/2007/03/P03004.
- [95] P. I. Hurtado & P. L. Garrido, “Test of the Additivity Principle for Current Fluctuations in a Model of Heat Conduction”, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 250601 (2009), doi:10.1103/PhysRevLett.102.250601.
- [96] P. I. Hurtado & P. L. Garrido, “Current fluctuations and statistics during a large deviation event in an exactly solvable transport model”, *J. Stat. Mech.* **2009**, P02032 (2009), doi:10.1088/1742-5468/2009/02/P02032.
- [97] P. I. Hurtado & P. L. Garrido, “Spontaneous Symmetry Breaking at the Fluctuating Level”, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 180601 (2011), doi:10.1103/PhysRevLett.107.180601.
- [98] T. Laffargue & J. Tailleur, “Locating a regular needle in a chaotic haystack, and conversely, using Lyapunov Weighted Dynamics”, dans *Comptes-rendus de la 17ème Rencontre du Non-Linéaire*, pages 75–80, Non-Linéaire Publications, Saint-Étienne du Rouvray (2014).
- [99] J. Tailleur, *Grandes déviations, physique statistique et systèmes dynamiques*, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (2007).
- [100] S. Wiggins, L. Wiesenfeld, C. Jaffé & T. Uzer, “Impenetrable barriers in phase-space”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5478 (2001), doi:10.1103/PhysRevLett.86.5478.
- [101] J. Tailleur, S. Tanase-Nicola & J. Kurchan, “Kramers Equation and Supersymmetry”, *J. Stat. Phys.* **122**, 557 (2006), doi:10.1007/s10955-005-8059-x.
- [102] H. Yoshida, “Construction of higher order symplectic integrators”, *Phys. Lett. A* **150**, 262 (1990), doi:10.1016/0375-9601(90)90092-3.
- [103] E. Fermi, J. Pasta & S. Ulam, “Studies of nonlinear problems. I”, Rapport technique LA-1940, Los Alamos scientific laboratory of the University of California (1955).
- [104] T. Dauxois & S. Ruffo, “Fermi-Pasta-Ulam nonlinear lattice oscillations”, *Scholarpedia* **3**, 5538 (2008), doi:10.4249/scholarpedia.5538.
- [105] B. Rink, “Fermi Pasta Ulam systems (FPU): mathematical aspects”, *Scholarpedia* **4**, 9217 (2009), doi:10.4249/scholarpedia.9217.
- [106] G. P. Tsironis, M. Ibañes & J. M. Sancho, “Transport of localized vibrational energy in biopolymer models with rigidity”, *Europhys. Lett.* **57**, 697 (2002), doi:10.1209/epl/i2002-00519-4.

- [107] M. Ibañes, J. M. Sancho & G. P. Tsironis, “Dynamical properties of discrete breathers in curved chains with first and second neighbor interactions”, *Phys. Rev. E* **65**, 041902 (2002), doi:10.1103/PhysRevE.65.041902.
- [108] L. Casetti, R. Livi & M. Pettini, “Gaussian Model for Chaotic Instability of Hamiltonian Flows”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 375 (1995), doi:10.1103/PhysRevLett.74.375.
- [109] T. Dauxois, S. Ruffo & A. Torcini, “Modulational estimate for the maximal Lyapunov exponent in Fermi-Pasta-Ulam chains”, *Phys. Rev. E* **56**, 6229 (1997), doi:10.1103/PhysRevE.56.R6229.
- [110] N. J. Zabusky & M. D. Kruskal, “Interaction of "Solitons" in a Collisionless Plasma and the Recurrence of Initial States”, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 240 (1965), doi:10.1103/PhysRevLett.15.240.
- [111] R. Livi, M. Spicci & R. S. MacKay, “Breathers on a diatomic FPU chain”, *Nonlinearity* **10**, 1421 (1997), doi:10.1088/0951-7715/10/6/003.
- [112] T. Cretegny, R. Livi & M. Spicci, “Breather dynamics in diatomic FPU chains”, *Physica D* **119**, 88 (1998), doi:10.1016/S0167-2789(98)00080-3, localization in Nonlinear Lattices.
- [113] T. Bodineau, B. Derrida, V. Lecomte & F. van Wijland, “Long Range Correlations and Phase Transitions in Non-equilibrium Diffusive Systems”, *J. Stat. Phys.* **133**, 1013 (2008), doi:10.1007/s10955-008-9647-3.
- [114] H. Fujisaka, “Statistical Dynamics Generated by Fluctuations of Local Lyapunov Exponents”, *Prog. Theor. Phys.* **70**, 1264 (1983), doi:10.1143/PTP.70.1264.
- [115] T. Bohr & D. Rand, “The entropy function for characteristic exponents”, *Physica D* **25**, 387 (1987), doi:10.1016/0167-2789(87)90112-6.
- [116] P. Grassberger, R. Badii & A. Politi, “Scaling laws for invariant measures on hyperbolic and nonhyperbolic attractors”, *J. Stat. Phys.* **51**, 135 (1988), doi:10.1007/BF01015324.
- [117] C. Appert, H. van Beijeren, M. Ernst & J. Dorfman, “Thermodynamic formalism and localization in Lorentz gases and hopping models”, *J. Stat. Phys.* **87**, 1253 (1997), doi:10.1007/BF02181283.
- [118] P. V. Kuptsov & A. Politi, “Large-Deviation Approach to Space-Time Chaos”, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 114101 (2011), doi:10.1103/PhysRevLett.107.114101.
- [119] D. Pazó, J. M. López & A. Politi, “Universal scaling of Lyapunov-exponent fluctuations in space-time chaos”, *Phys. Rev. E* **87**, 062909 (2013), doi:10.1103/PhysRevE.87.062909.
- [120] D. J. Searles, D. J. Evans & D. J. Isbister, “The number dependence of the maximum Lyapunov exponent”, *Physica A* **240**, 96 (1997), doi:10.1016/S0378-4371(97)00133-7, proceedings of the Euroconference on the microscopic approach to complexity in non-equilibrium molecular simulations.
- [121] F. Ginelli, P. Poggi, A. Turchi, H. Chaté, R. Livi & A. Politi, “Characterizing Dynamics with Covariant Lyapunov Vectors”, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 130601 (2007), doi:10.1103/PhysRevLett.99.130601.
- [122] S. N. Majumdar & G. Schehr, “Top eigenvalue of a random matrix: large deviations and third order phase transition”, *J. Stat. Mech.* **2014**, P01012 (2014), doi:10.1088/1742-5468/2014/01/P01012.
- [123] W. Lenz, “Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern”, *Z. Phys.* **21**, 613 (1920).
- [124] E. Ising, “Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus”, *Z. Angew. Phys.* **31**, 253 (1925), doi:10.1007/BF02980577.

- [125] H. Spohn, “Long range correlations for stochastic lattice gases in a non-equilibrium steady state”, *J. Phys. A* **16**, 4275 (1983), doi:10.1088/0305-4470/16/18/029.
- [126] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim & V. Pasquier, “Exact solution of a 1D asymmetric exclusion model using a matrix formulation”, *J. Phys. A* **26**, 1493 (1999), doi:10.1088/0305-4470/26/7/011.
- [127] B. Derrida, B. Douçot & P. E. Roche, “Current fluctuations in the one-dimensional symmetric exclusion process with open boundaries”, *J. Stat. Phys.* **115**, 717 (2004), doi:10.1023/B:JOSS.0000022379.95508.b2.
- [128] T. Bodineau & B. Derrida, “Current Fluctuations in Nonequilibrium Diffusive Systems: An Additivity Principle”, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 180601 (2004), doi:10.1103/PhysRevLett.92.180601.
- [129] L. Bertini, D. Gabrielli & J. L. Lebowitz, “Large Deviations for a Stochastic Model of Heat Flow”, *J. Stat. Phys.* **121**, 843 (2005), doi:10.1007/s10955-005-5527-2.
- [130] D. Dean, “Langevin equation for the density of a system of interacting Langevin processes”, *J. Phys. A* **29**, L613 (1996), doi:10.1088/0305-4470/29/24/001.
- [131] C. T. MacDonald & J. H. Gibbs, “Concerning the kinetics of polypeptide synthesis on polyribosomes”, *Biopolymers* **7**, 707 (1969), doi:10.1002/bip.1969.360070508.
- [132] J. Tailleur, M. R. Evans & Y. Kafri, “Nonequilibrium Phase Transitions in the Extraction of Membrane Tubes by Molecular Motors”, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 118109 (2009), doi:10.1103/PhysRevLett.102.118109.
- [133] C. Kipnis, C. Marchioro & E. Presutti, “Heat flow in an exactly solvable model”, *J. Stat. Phys.* **27**, 65 (1982), doi:10.1007/BF01011740.
- [134] H. J. Hilhorst & C. Appert-Rolland, “A multi-lane TASEP model for crossing pedestrian traffic flows”, *J. Stat. Mech.* **2012**, P06009 (2012), doi:10.1088/1742-5468/2012/06/P06009.
- [135] B. Derrida & J. L. Lebowitz, “Exact Large Deviation Function in the Asymmetric Exclusion Process”, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 209 (1998), doi:10.1103/PhysRevLett.80.209.
- [136] J. Kurchan, “Fluctuation theorem for stochastic dynamics”, *J. Phys. A* **31**, 3719 (1998), doi:10.1088/0305-4470/31/16/003.
- [137] C. Maes, “The Fluctuation Theorem as a Gibbs Property”, *J. Stat. Phys.* **95**, 367 (1999), doi:10.1023/A:1004541830999.
- [138] J. L. Lebowitz & H. Spohn, “A Gallavotti–Cohen-Type Symmetry in the Large Deviation Functional for Stochastic Dynamics”, *J. Stat. Phys.* **95**, 333 (1999), doi:10.1023/A:1004589714161.
- [139] G. Gallavotti & E. G. D. Cohen, “Dynamical Ensembles in Nonequilibrium Statistical Mechanics”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2694 (1995), doi:10.1103/PhysRevLett.74.2694.
- [140] J. Kurchan, “Gallavotti–Cohen Theorem, Chaotic Hypothesis and the Zero-Noise Limit”, *J. Stat. Phys.* **128**, 1307 (2007), doi:10.1007/s10955-007-9368-z.
- [141] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio & C. Landim, “Current Fluctuations in Stochastic Lattice Gases”, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 030601 (2005), doi:10.1103/PhysRevLett.94.030601.
- [142] B. Derrida & A. Gerschenfeld, “Current Fluctuations of the One Dimensional Symmetric Simple Exclusion Process with Step Initial Condition”, *J. Stat. Phys.* **136**, 1 (2009), doi:10.1007/s10955-009-9772-7.

- [143] E. Brunet, B. Derrida & A. Gerschenfeld, “Fluctuations of the heat flux of a one-dimensional hard particle gas”, *Europhys. Lett.* **90**, 20004 (2010), doi:10.1209/0295-5075/90/20004.
- [144] F. Turci & E. Pitard, “Large deviations and heterogeneities in a driven kinetically constrained model”, *Europhys. Lett.* **94**, 10003 (2011), doi:10.1209/0295-5075/94/10003.
- [145] V. Lecomte, J. P. Garrahan & F. van Wijland, “Inactive dynamical phase of a symmetric exclusion process on a ring”, *J. Phys. A* **45**, 175001 (2012), doi:10.1088/1751-8113/45/17/175001.
- [146] T. Speck & D. Chandler, “Constrained dynamics of localized excitations causes a non-equilibrium phase transition in an atomistic model of glass formers”, *J. Chem. Phys.* **136**, 184509 (2012), doi:10.1063/1.4712026.
- [147] V. Lecomte, C. Appert-Rolland & F. van Wijland, “Chaotic Properties of Systems with Markov Dynamics”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 010601 (2005), doi:10.1103/PhysRevLett.95.010601.
- [148] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio & C. Landim, “Fluctuations in Stationary Nonequilibrium States of Irreversible Processes”, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 040601 (2001), doi:10.1103/PhysRevLett.87.040601.
- [149] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio & C. Landim, “Macroscopic Fluctuation Theory for Stationary Non-Equilibrium States”, *J. Stat. Phys.* **107**, 635 (2002), doi:10.1023/A:1014525911391.
- [150] C. Appert-Rolland, B. Derrida, V. Lecomte & F. van Wijland, “Universal cumulants of the current in diffusive systems on a ring”, *Phys. Rev. E* **78**, 021122 (2008), doi:10.1103/PhysRevE.78.021122.
- [151] A. Imparato, V. Lecomte & F. van Wijland, “Equilibriumlike fluctuations in some boundary-driven open diffusive systems”, *Phys. Rev. E* **80**, 011131 (2009), doi:10.1103/PhysRevE.80.011131.
- [152] B. Derrida & A. Gerschenfeld, “Current Fluctuations in One Dimensional Diffusive Systems with a Step Initial Density Profile”, *J. Stat. Phys.* **137**, 978 (2009), doi:10.1007/s10955-009-9830-1.
- [153] V. Lecomte, A. Imparato & F. van Wijland, “Current Fluctuations in Systems with Diffusive Dynamics, in and out of Equilibrium”, *Progr. Theoret. Phys. Suppl.* **184**, 276 (2010), doi:10.1143/PTPS.184.276.
- [154] B. Meerson & P. V. Sasorov, “Extreme current fluctuations in lattice gases: Beyond nonequilibrium steady states”, *Phys. Rev. E* **89**, 010101 (2014), doi:10.1103/PhysRevE.89.010101.
- [155] F. Bouchet, J. Laurie & O. Zaboronski, “Langevin dynamics, large deviations and instantons for the quasi-geostrophic model and two-dimensional Euler equations”, *arXiv preprint arXiv:1403.0216* (2014).
- [156] R. Kubo, M. Toda & N. Hashitsume, *Statistical Physics II - Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Springer Series in Solid-State Sciences, Springer Berlin Heidelberg (1985), doi:10.1007/978-3-642-96701-6.
- [157] H. Spohn, *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*, Texts and Monographs in Physics, Springer Berlin Heidelberg (1991), doi:10.1007/978-3-642-84371-6.
- [158] P. C. Martin, E. D. Siggia & H. A. Rose, “Statistical Dynamics of Classical Systems”, *Phys. Rev. A* **8**, 423 (1973), doi:10.1103/PhysRevA.8.423.

- [159] H.-K. Janssen, “On a Lagrangean for classical field dynamics and renormalization group calculations of dynamical critical properties”, *Z. Phys. B* **23**, 377 (1976), doi:10.1007/BF01316547.
- [160] C. De Dominicis, “Techniques de renormalisation de la théorie des champs et dynamique des phénomènes critiques”, *J. Phys. Colloques* **37**, C1 (1976), doi:10.1051/jphyscol:1976138.
- [161] H. K. Janssen, “On the renormalized field theory of nonlinear critical relaxation”, dans *From Phase Transitions to Chaos*, édité par G. Györgyi, I. Kondor, L. Sasvári & T. Tél, World Scientific Publishing (1992), doi:10.1142/1633.
- [162] R. Benzi, G. Paladin, G. Parisi & A. Vulpiani, “On the multifractal nature of fully developed turbulence and chaotic systems”, *J. Phys. A* **17**, 3521 (1984), doi:10.1088/0305-4470/17/18/021.
- [163] L. Arnold, W. Kliemann & E. Oeljeklaus, “Lyapunov exponents of linear stochastic systems”, dans *Lyapunov Exponents*, édité par L. Arnold & V. Wihstutz, tome 1186 de *Lecture Notes in Mathematics*, pages 85–125, Springer Berlin Heidelberg (1986), doi:10.1007/BFb0076835.
- [164] L. Arnold, “Lyapunov Exponents of Nonlinear Stochastic Systems”, dans *Nonlinear Stochastic Dynamic Engineering Systems*, édité par F. Ziegler & G. Schuëller, IUTAM Symposium, pages 181–201, Springer Berlin Heidelberg (1988), doi:10.1007/978-3-642-83334-2_13.
- [165] R. Graham, “Lyapunov exponents and supersymmetry of stochastic dynamical systems”, *Europhys. Lett.* **5**, 101 (1988), doi:10.1209/0295-5075/5/2/002.
- [166] G. Paladin, M. Serva & A. Vulpiani, “Complexity in Dynamical Systems with Noise”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 66 (1995), doi:10.1103/PhysRevLett.74.66.
- [167] V. Loreto, G. Paladin & A. Vulpiani, “Concept of complexity in random dynamical systems”, *Phys. Rev. E* **53**, 2087 (1996), doi:10.1103/PhysRevE.53.2087.
- [168] G. Wentzel, “Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik”, *Z. Angew. Phys.* **38**, 518 (1926), doi:10.1007/BF01397171.
- [169] H. Kramers, “Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung”, *Z. Angew. Phys.* **39**, 828 (1926), doi:10.1007/BF01451751.
- [170] L. Brillouin, “La mécanique ondulatoire de Schrödinger: une méthode générale de résolution par approximations successives”, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences* **183**, 24 (1926).
- [171] S. A. Kauffman, “Metabolic stability and epigenesis in randomly constructed genetic nets”, *J. Theor. Biol.* **22**, 437 (1969), doi:10.1016/0022-5193(69)90015-0.
- [172] M. Creutz, “Deterministic ising dynamics”, *Annals of Physics* **167**, 62 (1986), doi:10.1016/S0003-4916(86)80006-9.
- [173] H. E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertész & H. J. Herrmann, “Dynamics of spreading phenomena in two-dimensional Ising models”, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2326 (1987), doi:10.1103/PhysRevLett.59.2326.
- [174] B. Derrida, “Dynamical phase transition in nonsymmetric spin glasses”, *J. Phys. A* **20**, L721 (1987), doi:10.1088/0305-4470/20/11/009.
- [175] B. Derrida & G. Weisbuch, “Dynamical Phase Transitions in 3-Dimensional Spin Glasses”, *Europhys. Lett.* **4**, 657 (1987), doi:10.1209/0295-5075/4/6/004.
- [176] A. Coniglio, L. de Arcangelis, H. J. Herrmann & N. Jan, “Exact relations between damage spreading and thermodynamical properties”, *Europhys. Lett.* **8**, 315 (1989), doi:10.1209/0295-5075/8/4/003.

- [177] L. de Arcangelis, A. Coniglio & H. J. Herrmann, “Damage Spreading in Spin Glasses”, *Europhys. Lett.* **9**, 749 (1989), doi:10.1209/0295-5075/9/8/002.
- [178] A. M. Mariz, H. J. Herrmann & L. de Arcangelis, “Comparative study of damage spreading in the Ising model using heat-bath, glauber, and metropolis dynamics”, *J. Stat. Phys.* **59**, 1043 (1990), doi:10.1007/BF01025861.
- [179] S. C. Glotzer & N. Jan, “Damage spreading in the Kawasaki Ising model”, *Physica A* **173**, 325 (1991), doi:10.1016/0378-4371(91)90367-L.
- [180] F. Bagnoli, R. Rechtman & S. Ruffo, “Damage spreading and Lyapunov exponents in cellular automata”, *Phys. Lett. A* **172**, 34 (1992), doi:10.1016/0375-9601(92)90185-O.
- [181] N. Jan & L. de Arcangelis, “Computational aspects of damage spreading”, dans *Annual Reviews of Computational Physics I*, édité par D. Stauffer, chapitre 1, pages 1–16, World Scientific, Singapore (1994), doi:10.1142/9789812831682_0001.
- [182] P. Grassberger, “Damage spreading and critical exponents for “model A” Ising dynamics”, *Physica A* **214**, 547 (1995), doi:10.1016/0378-4371(94)00285-2.
- [183] P. Grassberger, “Are damage spreading transitions generically in the universality class of directed percolation?”, *J. Stat. Phys.* **79**, 13 (1995), doi:10.1007/BF02179381.
- [184] P. Grassberger, “Damage spreading in the Ising model with Glauber dynamics”, *J. Phys. A* **28**, L67 (1995), doi:10.1088/0305-4470/28/3/002.
- [185] T. Vojta, “Damage spreading and dynamic stability of kinetic Ising models”, *J. Phys. A* **30**, L7 (1997), doi:10.1088/0305-4470/30/1/002.
- [186] H. Hinrichsen, J. S. Weitz & E. Domany, “An Algorithm-Independent Definition of Damage Spreading—Application to Directed Percolation”, *J. Stat. Phys.* **88**, 617 (1997), doi:10.1023/B:JOSS.0000015165.83255.b7.
- [187] H. G. Solari, “Semiclassical treatment of spin system by means of coherent states”, *J. Math. Phys.* **28**, 1097 (1987), doi:10.1063/1.527554.
- [188] E. A. Kochetov, “SU(2) coherent-state path integral”, *J. Math. Phys.* **36**, 4667 (1995), doi:10.1063/1.530913.
- [189] M. Doi, “Second quantization representation for classical many-particle system”, *J. Phys. A* **9**, 1465 (1976), doi:10.1088/0305-4470/9/9/008.
- [190] M. Doi, “Stochastic theory of diffusion-controlled reaction”, *J. Phys. A* **9**, 1479 (1976), doi:10.1088/0305-4470/9/9/009.
- [191] L. Peliti, “Path integral approach to birth-death processes on a lattice”, *Journal de Physique* **46**, 1469 (1985), doi:10.1051/jphys:019850046090146900.
- [192] B. P. Lee & J. Cardy, “Renormalization group study of the $A + B \rightarrow \emptyset$ diffusion-limited reaction”, *J. Stat. Phys.* **80**, 971 (1995), doi:10.1007/BF02179861.
- [193] F. van Wijland, “Field theory for reaction-diffusion processes with hard-core particles”, *Phys. Rev. E* **63**, 022101 (2001), doi:10.1103/PhysRevE.63.022101.
- [194] G. Schütz & 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), doi:10.1103/PhysRevE.49.2726.
- [195] D. Toussaint & F. Wilczek, “Particle–antiparticle annihilation in diffusive motion”, *J. Chem. Phys.* **78**, 2642 (1983), doi:10.1063/1.445022.
- [196] A. Ovchinnikov & Y. Zeldovich, “Role of density fluctuations in bimolecular reaction kinetics”, *Chemical Physics* **28**, 215 (1978), doi:10.1016/0301-0104(78)85052-6.

- [197] Y. B. Zeldovich & M. Y. Khlopov, “On the concentration of relic magnetic monopoles in the universe”, *Physics Letters B* **79**, 239 (1978), doi:10.1016/0370-2693(78)90232-0.
- [198] M. Bramson & J. L. Lebowitz, “Asymptotic Behavior of Densities in Diffusion-Dominated Annihilation Reactions”, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2397 (1988), doi:10.1103/PhysRevLett.61.2397.
- [199] M. Bramson & J. L. Lebowitz, “Spatial Structure in Diffusion-Limited Two-Particle Reactions”, *J. Stat. Phys.* **65**, 941 (1991), doi:10.1007/BF01049591.
- [200] M. Bramson & J. L. Lebowitz, “Asymptotic behavior of densities for two-particle annihilating random walks”, *J. Stat. Phys.* **62**, 297 (1991), doi:10.1007/BF01020872.
- [201] B. P. Lee, *Critical Behavior in Nonequilibrium Systems*, Thèse de doctorat, University of California Santa Barbara (1994).
- [202] B. P. Lee & J. Cardy, “Scaling of reaction zones in the $A+B\rightarrow 0$ diffusion-limited reaction”, *Phys. Rev. E* **50**, R3287 (1994), doi:10.1103/PhysRevE.50.R3287.
- [203] H. Simon, “Concentration for one and two-species one-dimensional reaction-diffusion systems”, *J. Phys. A* **28**, 6585 (1995), doi:10.1088/0305-4470/28/23/013.
- [204] F. Leyvraz & S. Redner, “Spatial organization in the two-species annihilation reaction $A+B\rightarrow 0$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2168 (1991), doi:10.1103/PhysRevLett.66.2168.
- [205] K. Lindenberg, P. Argyrakis & R. Kopelman, “Diffusion-Limited Binary Reactions: The Hierarchy of Nonclassical Regimes for Correlated Initial Conditions”, *J. Phys. Chem.* **98**, 3389 (1994), doi:10.1021/j100064a020.
- [206] K. Lindenberg, P. Argyrakis & R. Kopelman, “The Hierarchies of Nonclassical Regimes for Diffusion-Limited Binary Reactions”, dans *Fluctuations and Order: the new synthesis*, édité par M. Millonas, pages 171–203, Springer, New York (1996), doi:10.1007/978-1-4612-3992-5_12.
- [207] J. M. Sancho, A. H. Romero, K. Lindenberg, F. Sagués, R. Reigada & A. M. Lacasta, “ $A + B \rightarrow 0$ Reaction with Different Initial Patterns”, *J. Phys. Chem.* **100**, 19066 (1996), doi:10.1021/jp961661e.
- [208] J. W. Lee, “Finite-size effects of two-particle diffusion-limited reactions”, *Phys. Rev. E* **62**, 2959 (2000), doi:10.1103/PhysRevE.62.2959.
- [209] D. ben Avraham, “Computer simulation methods for diffusion-controlled reactions”, *J. Chem. Phys.* **88**, 941 (1988), doi:10.1063/1.454174.
- [210] R. Dawkins & D. ben Avraham, “Computer simulations of diffusion-limited reactions”, *Comp. Sci. Eng.* **3**, 72 (2001), doi:10.1109/5992.895190.
- [211] Y. Shafrir & D. ben Avraham, “Large scale simulations of two-species annihilation, $A + B \rightarrow 0$, with drift”, *Phys. Lett. A* **278**, 184 (2001), doi:10.1016/S0375-9601(00)00743-X.
- [212] D. Zhong, R. Dawkins & D. ben Avraham, “Large-scale simulations of diffusion-limited n-species annihilation”, *Phys. Rev. E* **67**, 040101 (2003), doi:10.1103/PhysRevE.67.040101.
- [213] C. B. Mendl & H. Spohn, “Dynamic Correlators of Fermi-Pasta-Ulam Chains and Nonlinear Fluctuating Hydrodynamics”, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 230601 (2013), doi:10.1103/PhysRevLett.111.230601.
- [214] H. Spohn, “Nonlinear Fluctuating Hydrodynamics for Anharmonic Chains”, *J. Stat. Phys.* **154**, 1191 (2014), doi:10.1007/s10955-014-0933-y.
- [215] S. G. Das, A. Dhar, K. Saito, C. B. Mendl & H. Spohn, “Numerical test of hydrodynamic fluctuation theory in the Fermi-Pasta-Ulam chain”, *Phys. Rev. E* **90**, 012124 (2014), doi:10.1103/PhysRevE.90.012124.

- [216] R. McLachlan, “On the Numerical Integration of Ordinary Differential Equations by Symmetric Composition Methods”, *SIAM Journal on Scientific Computing* **16**, 151 (1995), doi:10.1137/0916010.
- [217] A. Lefèvre & G. Biroli, “Dynamics of interacting particle systems: stochastic process and field theory”, *J. Stat. Mech.* **2007**, P07024 (2007), doi:10.1088/1742-5468/2007/07/P07024.
- [218] K. Kang & S. Redner, “Scaling Approach for the Kinetics of Recombination Processes”, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 955 (1984), doi:10.1103/PhysRevLett.52.955.
- [219] K. Kang, P. Meakin, J. H. Oh & S. Redner, “Universal behaviour of N-body decay processes”, *J. Phys. A* **17**, L665 (1984), doi:10.1088/0305-4470/17/12/007.
- [220] D. ben Avraham & S. Redner, “Kinetics of n-species annihilation: Mean-field and diffusion-controlled limits”, *Phys. Rev. A* **34**, 501 (1986), doi:10.1103/PhysRevA.34.501.
- [221] F. Leyvraz & S. Redner, “Nonuniversality and Breakdown of Scaling in a Two-Component Coagulation Model”, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 163 (1986), doi:10.1103/PhysRevLett.57.163.
- [222] D. ben Avraham, “Discrete fluctuations and their influence on kinetics of reactions”, *J. Stat. Phys.* **48**, 315 (1987), doi:10.1007/BF01010411.
- [223] I. Webman, D. ben Avraham, A. Cohen & S. Havlin, “Dynamical phase transitions in a random environment”, *Philos. Mag.* **77**, 1401 (1998), doi:10.1080/13642819808205032.
- [224] P. Hanusse & A. Blanché, “A Monte Carlo method for large reaction–diffusion systems”, *J. Chem. Phys.* **74**, 6148 (1981), doi:10.1063/1.441005.

Publications

- P1** T. Laffargue, K. D. Nguyen Thu Lam, J. Kurchan & J. Tailleur,
“Large deviations of Lyapunov exponents”,
J. Phys. A **46**, 254002 (2013).
- P2** T. Laffargue & J. Tailleur,
“Locating a regular needle in a chaotic haystack, and conversely,
using Lyapunov Weighted Dynamics”,
dans Comptes-rendus de la 17^{ème} Rencontre du Non-Linéaire, pages 75–80,
Non-Linéaire Publications (2014).
- P3** T. Laffargue, P. Sollich, J. Tailleur & F. van Wijland,
“Large-scale fluctuations of the largest Lyapunov exponent in diffusive systems”,
Europhys. Lett. (2015).

Principaux résultats

- Amélioration de la mise en œuvre de la dynamique biaisée par les Lyapunov (LWD), qui est un algorithme qui permet de détecter des trajectoires de chaoticité atypique et de mesurer l'énergie libre associée (chapitre 3).
- Implémentation de cet algorithme pour détecter des trajectoires dont le $k^{\text{ème}}$ exposant de Lyapunov prend une valeur atypique (sections 4.1 et 4.2).
- Détection à l'aide de la LWD de trajectoires avec plusieurs modes de respiration chaotiques stables dans la chaîne de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPU), ce qui semblait inobservable d'après des études antérieures (section 4.2.4).
- Mesure de l'énergie libre dynamique dans la chaîne FPU et dans une chaîne d'applications en forme de tente couplées à l'aide de la LWD, ouvrant la voie à l'étude des transitions de phase dynamique dans ces systèmes (sections 4.2.5 et 4.3.4).
- Calcul de la fonction génératrice des cumulants (énergie libre dynamique) pour les systèmes diffusifs décrits par l'hydrodynamique fluctuante en utilisant l'intégrale de chemin et la méthode du col (chapitre 5).
- Définition du plus grand exposant de Lyapunov pour les modèles sur réseau définis par une équation maîtresse. Cette définition rappelle la problématique de la propagation de défauts et pose la question de la nature du bruit (section 6.1).
- Accord pour la moyenne et la variance entre l'exposant de Lyapunov défini dans le modèle microscopique et l'exposant de Lyapunov défini dans l'hydrodynamique fluctuante pour le modèle de conduction thermique de Kipnis-Marchioro-Presutti (section 6.2.2).
- Équivalence entre la différence de deux processus d'exclusion simple symétriques couplés et le processus de réaction-diffusion $A + B \rightarrow \emptyset$. Cette équivalence entre différence de modèles de particules sur réseau et processus de réaction-diffusion avec état absorbant semble se généraliser (section 6.3.3).
- Prédiction et vérification numérique pour la décroissance du nombre de particules en taille finie dans le processus de réaction-diffusion $A + B \rightarrow \emptyset$ à l'aide de l'équivalence précédente (sections 6.3.4 et 6.3.5).

Résumé

Les exposants de Lyapunov sont une observable naturelle pour quantifier la chaoticité d'une trajectoire. Ils peuvent donc être utilisés pour distinguer des régimes dynamiques différents, ce qui peut permettre l'étude de phénomènes tels que l'apparition de la turbulence, qui correspond à l'émergence de trajectoires chaotiques dans un écoulement auparavant régulier, ou la transition vitreuse, qui peut être vue comme le passage d'une dynamique diffusive à un régime gelé.

L'objet de cette thèse est d'appliquer le formalisme thermodynamique de Sinai, Ruelle et Bowen, qui transpose dans l'espace des trajectoires le langage de la physique statistique d'équilibre, aux fluctuations d'exposants de Lyapunov dans les systèmes étendus pour lesquelles peu de résultats sont disponibles.

Dans un premier temps, on présente une méthode numérique pour échantillonner des trajectoires de chaoticité atypique dans un système étendu, révélant ainsi ses différentes structures dynamiques. Cet algorithme permet également de mesurer l'énergie libre dynamique, ouvrant la voie à l'étude des transitions de phase dynamique dues à l'éventuelle coexistence de ces différentes structures. Il est ensuite appliqué notamment à la chaîne d'oscillateurs anharmoniques de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPU).

On montre dans un second temps comment déterminer analytiquement les fluctuations du plus grand exposant de Lyapunov dans des systèmes de particules en interaction dont la dynamique sous-jacente est diffusive. Ce faisant, on établit des liens avec la propagation de défauts et les processus de réaction-diffusion.

Abstract

Lyapunov exponents are natural observables to quantify the chaoticity of a trajectory. They thus appear as good candidates to discriminate between different dynamical regimes, allowing to study phenomena such as the onset of turbulence—which goes hand in hand with the emergence of chaotic trajectories in an otherwise regular flow—or the glass transition—which can be seen as a transition from diffusive dynamics to an arrested, frozen-in, and ergodicity-breaking regime.

The present thesis strives to apply the thermodynamic formalism of Sinai, Ruelle and Bowen—which transposes in trajectory space the language of equilibrium statistical physics—to fluctuations of Lyapunov exponents in spatially extended systems, for which only few results are available.

We begin by presenting a numerical method to sample trajectories of atypical chaoticity in spatially extended systems, hence revealing their various dynamical structures. We also exhibit how this algorithm can be used to measure the dynamical free energy, opening the way for the study of dynamical phase transitions resulting from the possible coexistence of these structures. This method is in particular applied to the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPU) chain of anharmonic oscillators.

Next, we show how fluctuations of the largest Lyapunov exponent in systems of interacting particles with underlying diffusive dynamics can be analytically characterized. Carrying out this program allows us to establish interesting connections with damage spreading and reaction-diffusion processes.