



HAL
open science

La dénaturation de l'ADN : une transition de phase en présence de désordre

Martin Retaux

► **To cite this version:**

Martin Retaux. La dénaturation de l'ADN : une transition de phase en présence de désordre. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université Paris sciences et lettres, 2016. Français. NNT : 2016PSLEE038 . tel-01739700

HAL Id: tel-01739700

<https://theses.hal.science/tel-01739700>

Submitted on 21 Mar 2018

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

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

THÈSE DE DOCTORAT

de l'Université de recherche Paris Sciences et Lettres
PSL Research University

Préparée au laboratoire de physique statistique
de l'École normale supérieure

DNA Denaturation: a phase transition with disorder

La dénaturation de l'ADN : une transition de phase en présence de désordre

Ecole doctorale n°564

Physique en Île-de-France

Spécialité PHYSIQUE STATISTIQUE

COMPOSITION DU JURY :

M. KUNZ Hervé
Ecole polytechnique fédérale de
Lausanne, Rapporteur

M. TONINELLI Fabio
Université Lyon 1, Rapporteur

Mme. MONTHUS Cécile
CEA Saclay, Examinatrice

M. HU Yueyun
Université Paris 13, Examineur

M. LECOMTE Vivien
Université Paris 7, Examineur

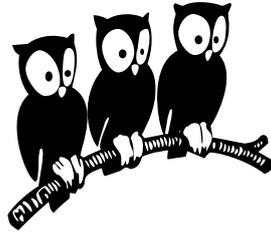
Soutenue par **Martin RETAUX**
le 20 Octobre 2016

Dirigée par **Bernard DERRIDA**



Département de physique

Laboratoire de physique statistique



THÈSE de DOCTORAT de l'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE

Spécialité : Physique Statistique

présentée par

Martin RETAUX

pour obtenir le grade de DOCTEUR de l'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE

**La dénaturation de l'ADN :
une transition de phase en présence de désordre.**

Thèse soutenue le **20 Octobre 2016**
devant le jury composé de :

M. Bernard DERRIDA
M. Hervé KUNZ
M. Fabio TONINELLI
M. Yeyun HU
Mme. Cécile MONTHUS
M. Vivien LECOMTE

Directeur
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examinatrice
Examineur

Remerciements

Je me suis consacré à ce travail de thèse entre 2012 et 2016 au laboratoire de physique statistique de l'ENS. Si l'accueil que je reçus fut chaleureux et mon intégration rendue si facile, c'est en grande partie grâce à Eric Pérez, son directeur en poste à mon arrivée. Cette reconnaissance n'est pas exclusive et s'adresse aussi bien à son successeur, Jorge Kurchan, qui fut constamment à l'écoute de nos besoins lors des divers déménagements provoqués par les travaux, ainsi qu'à tous les autres membres du laboratoire.

Naturellement, je souhaite adresser tous mes remerciements à Bernard Derrida, mon directeur de thèse. Sa disponibilité, sa pédagogie et sa patience font de lui un encadrant idéal. De plus, sa capacité à extraire les notions essentielles des problèmes rencontrés rendent la physique à ses côtés toujours passionnante. Je me considère comme privilégié d'avoir entretenu avec lui cette relation scientifique et je conserverai précieusement ses nombreux enseignements dans ma vie professionnelle.

Je souhaite remercier MM. Kunz et Toninelli de m'avoir fait l'honneur d'être les rapporteurs de cette thèse, ainsi que les autres membres du jury, Mme. Monthus et MM. Hu et Lecomte pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail.

Tout au long de mon séjour au laboratoire, j'ai pu bénéficier de l'efficacité de Marie Gefflot (maintenant retraitée), d'Annie Ribaudeau et de Nora Sadaoui pour régler les questions administratives. L'ensemble du laboratoire leur doit l'organisation hebdomadaire du thé du jeudi, moment essentiel de convivialité. Si la recherche scientifique en ce lieu est fructueuse, c'est aussi grâce à leurs compétences et leur bonne humeur. Je tiens également à remercier Zaïre Dissi pour m'avoir sauvé de plusieurs ennuis informatiques.

Beaucoup de personnes ont partagé le bureau dans lequel j'ai travaillé. Chronologiquement : Antoine, Marc, Jonathan, Anne-Laure, Joran, Guilhem, Léo, Mingyuan, Anirudh, Tomaso, Gaïa, Quentin, Volker, Tomaso et beaucoup d'autres qui ont su entretenir une très bonne ambiance au bureau. Je suis heureux d'avoir pu nouer des amitiés précieuses ici, ainsi que d'avoir partagé des débats passionnants à l'heure du déjeuner.

Enfin, à toutes les personnes qui liront une partie ou l'intégralité de ce manuscrit, merci de vous intéresser à ce travail, de près comme de loin.

Table des matières

La dénaturation de l'ADN : une transition de phase en présence de désordre	1
L'étude des polymères en physique	3
0.1 Différents modèles de polymères en milieu aléatoire	3
0.1.1 La dénaturation de l'ADN	4
0.1.2 Accrochage d'un polymère sur une ligne de défaut	5
0.1.3 D'autres modèles	6
0.1.4 Du point de vue expérimental : de la dénaturation au séquençage à gros grains	9
0.2 Problématiques sur le phénomène de dépiégeage en milieu aléatoire	11
0.2.1 Les points communs des modèles de dépiégeage	11
0.2.2 Problématiques et influence du désordre	11
0.2.3 Le plan du manuscrit de thèse	13
1 Quelques résultats sur l'effet du désordre dans les modèles d'accrochage	17
1.1 Le cas homogène du modèle de Poland-Scheraga	17
1.1.1 L'énergie libre du système	17
1.1.2 Résolution du modèle pur	19
1.1.3 Propriétés de la transition	20
1.1.4 Critère de Harris	21
1.2 Le cas désordonné du modèle d'accrochage	22
1.2.1 Énergies libres gelée et recuite	22
1.2.2 Une transition plus lisse	25
1.2.3 Un désordre non pertinent	26
1.2.4 Un désordre pertinent	27
1.2.5 Un désordre marginal	28
2 La version hiérarchique des modèles de dénaturation	31
2.1 Construction du modèle hiérarchique	31
2.2 Le cas pur	33
2.3 Le cas désordonné	34
2.3.1 Définitions des énergies libres	35
2.3.2 Comparaison des cas recuit et gelé	37
3 Un nouveau modèle simplifié : le <i>Toy-model</i>	41
3.1 Définition et diagramme de phase	41
3.1.1 La nouvelle itération	41
3.1.2 Existence de l'énergie libre	43
3.2 Un critère de transition pour le système fini	44
3.3 Premières observations numériques	45
3.3.1 Illustration du diagramme de phase	45
3.3.2 Conjecture sur l'ordre de la transition de phase	47

4	Les résultats numériques en faveur d'une transition d'ordre infini	51
4.1	Observation d'une transition d'ordre infini dans le cas du <i>Toy-model</i>	51
4.1.1	Convergence des bornes vers la valeur critique	51
4.1.2	Variation de λ_c en fonction de a	52
4.1.3	Une singularité essentielle	53
4.2	Sur la surface critique	56
4.2.1	Une décroissance en $1/n^2$	56
4.2.2	Des points fixe artificiels	58
4.3	Une transition d'ordre infini pour le modèle hiérarchique	59
4.3.1	Avec un désordre pertinent	60
4.3.2	Avec un désordre non pertinent	61
5	Arguments analytiques en faveur d'une transition d'ordre infini	65
5.1	Introduction de la fonction génératrice	65
5.2	Les points fixes de l'itération	67
5.2.1	Le cas $a = 1$	67
5.2.2	Le cas $a > 1$	68
5.3	Une approche perturbative	70
5.3.1	Les équations de renormalisation	70
5.3.2	Dans la phase délocalisée	71
5.3.3	Sur la surface critique	72
5.3.4	Dans la phase localisée	72
5.4	À un ordre correctif	73
5.5	Les points fixes de l'itération tronquée	75
6	Une généralisation : renormalisation de lois de Lévy modulées	79
6.1	Reformulation du problème	79
6.1.1	Introduction d'une formule générale de renormalisation	79
6.1.2	Un cas particulier	80
6.1.3	La loi de Lévy modulée	81
6.1.4	Propriété sur une intégrale impliquant une loi de Lévy	83
6.2	Comportement de la distribution dans les trois régions	84
6.2.1	Pour $x \sim \varepsilon$	84
6.2.2	Pour $x \sim 1$	85
6.2.3	Pour $x \sim 1/u$	85
6.2.4	Remarques	87
	Conclusion et perspectives	89
	Bibliographie de la première partie	93
	Correction de taille finie à la fonction de grandes déviations de densité du processus d'exclusion symétrique.	101
7	Le Processus Simple d'Exclusion Symétrique : introduction et présentation de nos résultats	103
7.1	Définition du processus simple d'exclusion symétrique	103
7.2	Les fonctions de grandes déviations	105

7.2.1	Définitions	105
7.2.2	Lien avec l'énergie libre et propriétés élémentaires	106
7.2.3	La fonction génératrice	107
7.3	Comparaison des fonctionnelles de densité pour les cas à l'équilibre et hors- d'équilibre	108
7.3.1	À l'ordre dominant : l'extensivité	108
7.3.2	La correction de taille finie	109
7.4	La dérivation du résultat	111
Bibliographie de la seconde partie		114
Finite Size Corrections to the Large Deviation Function of the Density in the One Dimensional Symmetric Simple Exclusion Process		116

LA DÉNATURATION DE L'ADN :
UNE TRANSITION DE PHASE EN PRÉSENCE DE DÉSORDRE.

L'étude des polymères en physique

Les polymères sont des matériaux composés de macromolécules linéaires, ramifiées ou réticulées, formées par une succession de monomères reliés entre eux par des liaisons covalentes. Par leur taille et leur structure, ils constituent des objets complexes.

À l'échelle microscopique, les monomères sont soumis à plusieurs types d'interactions : celles qui les lient entre voisins proches et d'autres qui les relient à des monomères éloignés sur la chaîne (liaison hydrogène, pont sulfuré, etc...). Le milieu dans le lequel se trouve un polymère influence également l'état et les propriétés de la molécule. Dans certaines cas, un polymère peut gonfler en absorbant une très grande quantité de molécules de solvant alors que dans d'autres situations, il pourrait se contracter pour minimiser les contacts. Les polymères font par conséquent l'objet d'études scientifiques très diverses : en chimie, en physique, et plus récemment en mathématiques.

Chez les physiciens, le sujet a soulevé depuis longtemps de nombreuses questions [30, 37, 44]. La modélisation par une marche aléatoire auto-évitante a souvent été utilisée pour décrire un polymère [39]. Il s'agit de représenter les configurations du système par des trajectoires aléatoires dans un solvant en considérant que les monomères ont un volume propre qui n'autorise pas la chaîne à repasser deux fois au même endroit. Cette contrainte de non intersection a son importance sur le volume total occupé par la molécule et sur son degré d'enchevêtrement.

D'autres représentations ont également été imaginées. L'une d'entre elle, assez répandue, consiste à modéliser les polymères comme de longues molécules étirées. On parle alors de polymères dirigés. Plus précisément, le polymère s'étend sans pouvoir revenir en arrière dans l'une des directions de l'espace (la direction longitudinale) et il est libre d'évoluer dans toutes les directions transverses. Par construction, il ne peut donc pas y avoir d'auto-intersection. L'objectif est d'étudier comment les propriétés du polymère sont affectées lorsque celui-ci est plongé dans un milieu possédant des impuretés (appelées *défauts*). Les interactions entre les monomères et ces impuretés peuvent changer la nature des configurations prises par le polymère. L'état du système dépend alors de la température du milieu, de la répartition spatiale des défauts et de l'intensité des interactions qu'ils peuvent établir avec le polymère. Nous verrons dans cette introduction plusieurs situations physiques qui se rapportent à cette situation.

L'objectif de cette thèse est de comprendre une transition de phase : la dénaturation de l'ADN. Lorsqu'une portion d'ADN est chauffée, les deux brins qui constituent la chaîne se séparent sous l'effet des fluctuations thermiques. Nous cherchons à comprendre la nature de la transition à l'aide d'un modèle de polymère dirigé en interaction aléatoire avec le solvant.

0.1 Différents modèles de polymères en milieu aléatoire

Nous expliquons dans cette partie plus en détails la transition de dénaturation, puis nous donnerons un aperçu des différents modèles qui ont pu être proposés et qui s'inscrivent dans la même classe de phénomènes physiques. Enfin, nous exposerons très brièvement les activités de recherche expérimentale les plus récentes réalisées autour de la dénaturation.

0.1.1 La dénaturation de l'ADN

L'ADN est un polymère particulier : il est composé de deux brins réunis formant une structure en double hélice. Chaque brin est une longue séquence de monomères, appelés bases azotées, reliés entre elles par des liaisons covalentes. Les quatre bases azotées que l'on observe sur la chaîne sont désignées par les lettres A, T, C et G. L'ordre dans lequel se succèdent les bases le long d'un brin d'ADN constitue la séquence de ce brin. Elle porte l'information génétique. Les bases azotées d'un brin d'ADN se lient avec les bases azotées d'un autre brin d'ADN par des liaisons hydrogènes, qui déterminent des règles d'appariement entre paires de bases. Les bases A se lient préférentiellement avec les bases T, les bases C avec les G. Pour notre modélisation, l'ADN est donc formé de deux brins, reliés par une succession de liaisons de type A-T ou C-G, qui ont chacune une énergie propre.

Lorsque la température est portée au-delà d'un certain seuil (qui se situe environ à 90°C), certaines des liaisons hydrogènes sont brisées et il apparaît de grandes régions le long de la chaîne où les brins sont décollés l'un de l'autre. Au-delà de la température de transition, les liaisons entre les deux brins deviennent beaucoup plus rares à cause des fluctuations thermiques : chaque brin d'ADN se comporte comme s'il n'interagissait plus avec son complémentaire. On parle alors de phase *délocalisée*, les deux brins sont principalement détachés. À basse température, ce sont au contraire les énergies des liaisons qui dominent, les deux brins sont dans des configurations où le nombre de liaisons entre eux est grand. Cette phase est dite *localisée*, les brins sont accrochés l'un à l'autre.

Les questions principales qui émergent sur la transition de phase sont les suivantes : pouvons-nous prédire avec un modèle la température de transition T_c ? Pouvons-nous savoir comment s'annule la fraction de contact entre les deux brins ? Connaissons-nous l'ordre de la transition de phase ?

L'un des modèles parmi les plus étudiés sur la dénaturation est celui introduit par Poland et Scheraga [79], raffiné par Fisher [41] (voir aussi [82] pour une formulation plus récente). Dans leur description, les auteurs supposent que l'ADN ne présente pas d'enchevêtrement et que les interactions sont à courte portée. Cela signifie qu'un contact n'est possible qu'entre une base azotée et sa complémentaire située sur l'autre brin et qu'il ne peut pas y avoir de décalage entre les chaînes. Nous associons alors une énergie à chacune des liaisons formées entre les deux brins.

À température non nulle, certaines bases peuvent être détachées de leur complémentaire, il existe donc des régions plus ou moins grandes où les deux brins s'éloignent l'un de l'autre et forment ce que nous appelons des boucles. Ces régions où les brins ne sont plus en vis-à-vis présentent un grand nombre de configurations de même énergie, il faut donc leur attribuer à chacune un facteur d'entropie. L'énergie libre totale du système sera donnée par l'énergie des régions liées, mise en concurrence avec l'entropie des boucles, et déterminera quelle est la phase stable de l'ADN.

À première vue, chaque liaison réalisée entre les deux brins d'ADN pourrait avoir deux valeurs : soit A-T d'énergie ε_{AT} , soit C-G d'énergie ε_{CG} . Mais dans un système réel, le voisinage d'une paire de bases liées influe sûrement sur la valeur de son énergie de liaison (ainsi que d'autres paramètres, comme la nature du solvant et sa polarité). Une façon de simplifier ce point est de modéliser les énergies de liaison comme des variables aléatoires, identiquement distribuées, et indépendantes. Ces deux dernières hypothèses fréquemment

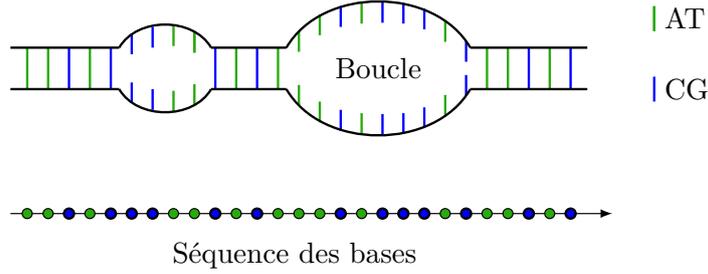


Figure 1: Représentation simplifiée de la dénaturation de l'ADN : les interactions n'ont lieu qu'aux points de contacts, en dehors des boucles.

utilisée dans la littérature indiquent que le tirage d'une n -ième valeur d'énergie ne dépend pas des $n - 1$ tirages précédents. En ce qui concerne l'ADN, cette hypothèse est sûrement très audacieuse, mais les enseignements tirés des résultats obtenus dans ce cas seront utiles pour affiner le modèle, en introduisant par exemple une corrélation sur le choix des énergies.

Pour ce système, les configurations sont donc entièrement décrites par la donnée des positions des points de contacts entre les deux brins $(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_i, \dots)$. Le modèle de Poland-Scheraga consiste à dire que la probabilité d'observer ces points de contacts ne dépend que des distances $\tau_i - \tau_{i-1}$, et de la valeur du potentiel au niveau de ces points. En appelant ε_k l'énergie de liaison sur le k -ième site, nous attribuons le poids statistique à une configuration :

$$P(\tau_1, \tau_2, \dots) \propto \prod_{i \geq 2} \omega(\tau_i - \tau_{i-1}) e^{-\varepsilon_{\tau_i}/k_B T}$$

où par convention $\tau_0 = 0$, T est la température du milieu, k_B est la constante de Boltzmann, et ω est le facteur entropique de boucle. Dans toute la suite nous prendrons $k_B = 1$, ce qui est justifiable par un changement d'échelle des unités. Le facteur de boucle dépend de la distance entre deux contacts successifs, il traduit l'idée que plus une boucle est grande, plus son apport à l'entropie est important. Nous verrons plus loin sous quelle forme asymptotique s'écrit ce facteur de boucle.

0.1.2 Accrochage d'un polymère sur une ligne de défaut

En suivant l'idée de Poland-Scheraga, il est possible proposer une représentation différente (voir [52]). L'un des deux brins est maintenant considéré comme une marche aléatoire, l'autre est fixé sur l'axe des abscisses et est appelée *ligne de défaut*.

Comme les interactions sont toujours supposées à courte portée, nous décidons que les liaisons chimiques ne s'établissent que lorsque la marche aléatoire croise la ligne de défaut. Les configurations sont donc aussi repérées par l'ensemble des points de contact qu'établit la marche aléatoire (ou le *polymère dirigé*) avec l'axe des abscisses.

Comme pour le modèle précédent, si le potentiel d'accrochage est suffisamment attractif et la température suffisamment basse, nous nous attendons à voir le polymère s'accrocher au défaut, dans le cas contraire il s'en détachera.

En ce qui concerne la ligne de défaut, comme les fluctuations thermiques n'influencent pas la séquence des bases azotées, nous considérons que les énergies de cette dernière sont fixées par avance (et nous pouvons décider de la distribution). On parle d'un désordre *gelé* (ou *quenched*). L'énergie d'une configuration, qui ne dépend que de l'ensemble des points de contact du polymère dirigé avec la ligne de défaut, dépendra donc de la réalisation du désordre, ou autrement dit, du tirage des énergies de liaison.

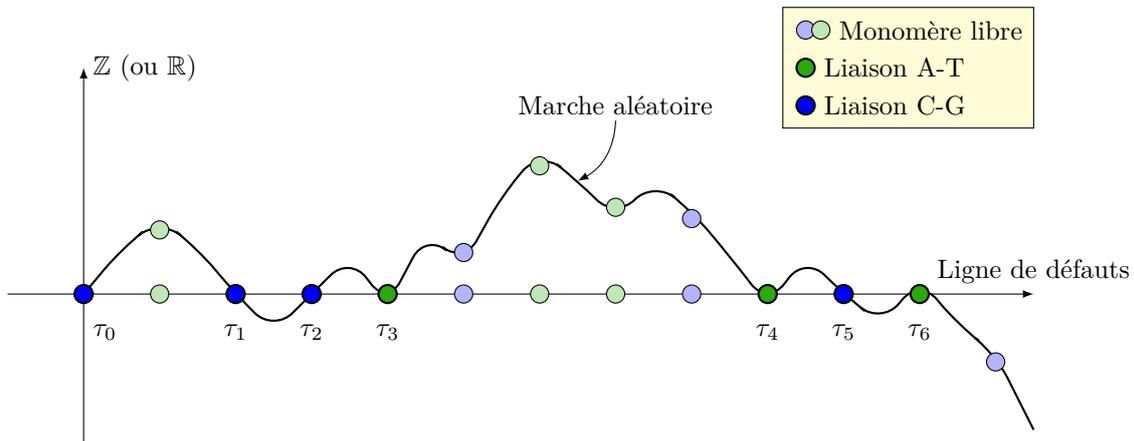


Figure 2: Accrochage d'un polymère dirigé sur une ligne de défaut, les points de contact ($\tau_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots$) sont les seuls points où l'interaction polymère-défaut a lieu. Les autres monomères sont détachés, et n'apportent pas d'énergie à la configuration.

Remarque 1 : il y a donc plusieurs types de variables aléatoires ici : la trajectoire du polymère d'une part, et l'environnement (les énergies de liaison) d'autre part. Les deux aléas ne jouent cependant pas le même rôle. À l'équilibre, les trajectoires et les points de contact fluctuent sur des échelles de temps beaucoup plus courtes que les variables d'environnement (d'où le nom de variables gelées).

Remarque 2 : la ligne de défaut peut prendre une forme différente. Nous pourrions imaginer qu'elle soit elle-même une marche aléatoire fixée par avance, et les contacts se feraient lorsque les trajectoires du polymère dirigé croisent celle de la ligne de défaut. Cette représentation ne change rien à la précédente car ce qui importe est la distance relative entre les deux trajectoires.

0.1.3 D'autres modèles

- Le modèle d'accrochage d'un polymère sur une surface [52], dit de *piégeage* : c'est une variante du modèle d'accrochage sur une ligne de défaut. Ici nous supposons que la ligne de défaut est en fait une membrane solide inhomogène sur laquelle un polymère peut faire des liaisons. Certaines régions de la surface sont des zones d'attraction, les autres sont répulsives. Les idées restent les mêmes que précédemment.
- Les modèles de *copolymère* [16, 48, 70, 71, 77, 83, 94] : il s'agit de décrire un polymère dirigé hétérogène (avec deux types de monomères, l'un hydrophile, l'autre

hydrophobe) proche d'une interface entre deux solvants non-miscibles (voir Fig. 3), par exemple une interface huile-eau. En fonction des interactions, soit le polymère se localise proche de l'interface soit il s'en éloigne. Les questions abordées dans ce sujet sont proches des précédentes : que vaut la température de transition et quelle est son ordre ?

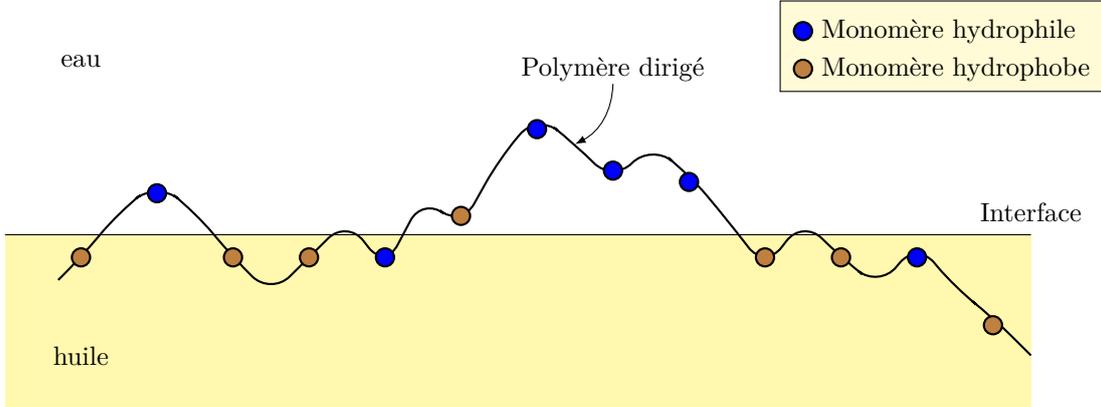


Figure 3: Représentation d'un copolymère (possédant deux type de monomères) à l'interface entre deux solvants non miscibles. Les configurations du système cherchent à contenter le plus de monomères possibles à basse température.

Garel *et al* [48] ont été les premiers à suggérer un modèle simple pour ce phénomène et Sinai y apporta un cadre mathématique rigoureux [83]. Plus tard, Bolthausen et den Hollander [16] contribuèrent à la compréhension problème en prouvant l'existence de la transition et en donnant des bornes sur le point critique. Si les positions des monomères sont notées $(S_i)_{1 \leq i \leq n}$, l'énergie d'une configuration est donnée par :

$$H = - \sum_{1 \leq i \leq n} (\zeta_i + h) \Delta_i$$

où $\Delta_i = \text{Sign}(S_i) = \pm 1$ selon si le monomère est dans une phase ou l'autre, les $\zeta_i = \pm 1$ sont les variables gelées qui représentent la nature (hydrophile ou hydrophobe) des interactions du i -ème monomère avec le solvant. Enfin h est un champ extérieur. Pour minimiser l'énergie d'une configuration, Δ_i doit être du même signe que ζ_i .

Plus tard, Monthus *et al* [71] ont abordé le problème par une approche grand canonique pour un cas de charges périodiques et asymétriques, c'est-à-dire lorsque $\zeta_{2i} = +1$ et $\zeta_{2i+1} = -1$ et $h \geq 0$ pour briser la symétrie entre les solvants. Une expression de la température de transition a été trouvée. En notant β la température inverse, leur résultat suggère que dans la limite des hautes températures

$$h_c(\beta) \underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} \beta.$$

Ce résultat fut néanmoins contredit par Bolthausen *et al.* [17] qui montrèrent qu'en fait, dans cette même limite

$$h_c(\beta) \underset{\beta \rightarrow 0}{\sim} \beta^3.$$

Dans l'article [70], il est également prouvé que pour une distribution non périodique faiblement asymétrique des (ζ_i) , l'expression de l'énergie libre exhibe une transition de phase d'ordre infini. La taille typique des boucles dans le solvant préféré diverge avec une singularité essentielle tandis qu'elle diverge algébriquement dans l'autre.

- Le modèle de Peyrard, Bishop et Dauxois [27, 28, 29, 78], bien qu'assez différent des modèles d'accrochage, est un modèle classique de description de la dénaturation de l'ADN introduit en 1989.

Dans sa formulation originale, l'ADN est décrit par un jeu de variables continues (u_n, v_n) qui repèrent les positions des bases azotées sur chacun des deux brins de la molécule. La description des interactions est phénoménologique : les bases voisines sur un même brin sont couplées par un potentiel harmonique et les bases complémentaires d'un brin à l'autre interagissent par des liaisons hydrogènes. Ces liaisons sont modélisées avec un potentiel de Morse dont l'expression est :

$$V(u_n - v_n) = D \left(e^{-\alpha(u_n - v_n)} - 1 \right)^2,$$

où D est l'énergie de dissociation et α la distance caractéristique de l'interaction. Le Hamiltonien d'un système de taille N est le suivant :

$$\mathcal{H}_N = \sum_{n=1}^N \frac{m}{2} (\dot{u}_n^2 + \dot{v}_n^2) + \frac{k}{2} ((u_n - u_{n-1})^2 + (v_n - v_{n-1})^2) + V(u_n - v_n)$$

où la même masse m est utilisée pour toutes les bases azotées de la chaîne, ainsi que la même constante de couplage k le long d'un brin. Notons qu'ici, le système est supposée homogène, aucun désordre n'est introduit.

En posant $x_n = (u_n + v_n)/\sqrt{2}$ et $y_n = (u_n - v_n)/\sqrt{2}$ pour découpler les variables, le problème peut être reformulé en terme de la fonction de partition selon y :

$$Z_y = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^N dy_n e^{-\beta H_y}$$

où

$$H_y = \frac{m}{2} \dot{y}_n^2 + \frac{k}{2} (y_n - y_{n-1})^2 + D \left(e^{-\alpha y_n} - 1 \right)^2.$$

Z_x serait simplement la fonction de partition d'une chaîne d'oscillateurs harmoniques découplés les uns des autres.

Dans la limite continue, le modèle peut être résolu analytiquement en examinant les valeurs propres de la matrice de transfert. En notant ε_0 la plus petite valeur propre, alors $Z_y \simeq \exp(-N\beta\varepsilon_0)$. Le modèle possède une transition de phase : en dessous d'une certaine température, le spectre est discret (ce qui correspond à des états localisés), tandis qu'au dessus de cette température, les états sont délocalisés. La fraction de contact s'annule continûment, donc la transition est d'ordre deux.

Par contre, le problème ne peut plus être résolu de façon exacte lorsqu'il est discret et les auteurs ont montré numériquement que cette discrétisation induisait un décalage significatif du point critique par rapport au modèle continu.

Le modèle a ensuite été raffiné. Pour prendre en compte le fait que les bases azotées ont des fréquences de vibration plus faibles lorsqu'elles se trouvent au voisinage ou à l'intérieur d'une boucle, le potentiel harmonique a été corrigé par un terme exponentiel (toujours phénoménologique) :

$$W(y_n, y_{n-1}) = \frac{k}{2}(y_n - y_{n-1})^2(1 - \rho e^{-a(y_n + y_{n-1})}).$$

Dans [29], les calculs numériques ont permis d'exhiber une transition beaucoup plus brutale dans le cas où les couplages entre les brins d'une même chaîne sont anharmoniques. La plus petite valeur propre de la matrice de transfert présente une discontinuité lorsque la température varie. Ce changement dans le modèle modifie fortement la valeur de la température critique et la rend beaucoup plus proche des résultats expérimentaux.

0.1.4 Du point de vue expérimental : de la dénaturation au séquençage à gros grains

Les questions de dénaturation de l'ADN sont aussi abordées expérimentalement. Récemment, l'utilisation de techniques de piégeage de molécule unique a permis d'améliorer notre connaissance sur des sujets de biophysique, et en particulier sur les propriétés mécaniques des molécules d'ADN [22, 84, 85, 86]. Il est possible de mesurer la réponse mécanique des molécules pour des régimes de forces très différents et les résultats peuvent être mis en confrontation avec les théories d'élasticité des polymères.

Une expérience classique est l'ouverture sous contrainte mécanique de la molécule d'ADN [12, 14, 13, 40] (voir [23, 69] pour une description théorique). Il est possible d'attacher séparément les deux brins complémentaires de l'extrémité d'une molécule d'ADN à une lamelle de microscope et à une bille microscopique. Un levier souple en verre, agissant comme capteur de force, est attaché à la bille et sa déflexion est mesurée avec un microscope optique.

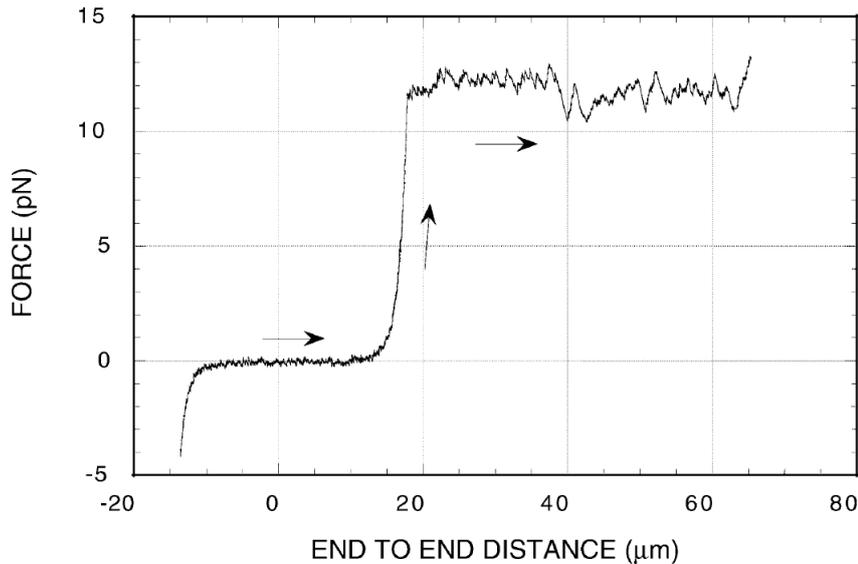


Figure 4: Courbe typique de l'ouverture de l'ADN sous contrainte mécanique extraite de l'article [14] (Fig. 5). Le déplacement se fait à une vitesse de 200 nm.s^{-1} .

En pratique l'échantillon est déplacé lentement par rapport au système de mesure de force. Lorsque la molécule commence à se tendre, la force mesurée augmente rapidement jusqu'au moment où les brins commencent à se détacher. Le reste de l'ouverture se fait selon un mouvement collé-glissé. Les mesures montrent des variations significatives d'une portion d'ADN à une autre ce qui est dû à la séquence des paires de bases. Les forces qui interviennent dans le processus d'ouverture sont de l'ordre de grandeur de $10 - 15 \text{ pN}$.

Plus récemment, d'autres expériences ont été menées en utilisant le phénomène de dénaturation avec l'objectif de séquencer la molécule [59, 80, 81]. L'expérience se base sur le fait que certaines régions, plus riches en bases A et T, se dénaturent à des températures plus basses que d'autres plus riches en bases C et G.¹

Le principe de l'expérience est de se servir de canaux nanométriques (utilisés dans les circuits micro-fluidiques) dans lesquels une molécule d'ADN unique peut s'étendre. Pour procéder à un séquençage, l'ADN est uniformément recouvert d'un marqueur fluorescent. Comme la luminosité émise par les parties dénaturées est plus faible, il est possible de reconnaître des zones plus riches en bases A et T. La dénaturation partielle révèle ainsi l'identité des bases azotées à une échelle typique d'une centaine de paires de bases.

Une fois confinée dans une dimension de l'espace et partiellement dénaturée, la molécule émettra un "code-barre" où les parties sombres seront à dominante A-T (les plus dénaturées). Cette méthode peut être mise en pratique pour des chaînes très longues (de l'ordre de 10^5 paires de bases) et présente l'avantage de pouvoir détecter des variations à grande échelle dans la séquence en laissant intacte la chaîne.

¹Cette différence provient du fait que les interactions A-T sont plus faciles à briser car elles impliquent une liaison hydrogène de moins que les interactions C-G.

0.2 Problématiques sur le phénomène de dépiégeage en milieu aléatoire

Dégageons maintenant les points communs entre les modèles de dépiégeage. La présence de désordre dans le système nous amènera à introduire le critère de Harris et à formuler les problèmes abordées par les auteurs.

0.2.1 Les points communs des modèles de dépiégeage

Les exemples cités jusqu'ici réfèrent à des situations physiques différentes, mais elles présentent toutes certaines similarités que nous pouvons englober dans une description unifiée. La première chose est de se donner une réalisation du désordre. Que nous prenions un brin d'ADN, une surface inhomogène ou un défaut unidimensionnel, nous introduisons une séquence de variables aléatoires $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$ qui décrit les interactions réalisables entre le système et son environnement.

La suite découle de la description des configurations prises par le polymère dirigé : elles se caractérisent par un ensemble de points de contacts $\{\tau_i\}$. Chacun d'entre eux contribue à un poids statistique de la forme $\exp(-\varepsilon_{\tau_i}/T)$. Si les énergies sont choisies attractives $\varepsilon_i < 0$, la trajectoire est récompensée pour la liaison formée. En dehors des contacts, nous associons à la trajectoire des facteurs statistiques qui dépendent essentiellement de la longueur des excursions.

Enfin, nous avons dans ces situations toujours une transition entre une phase localisée où le nombre de contacts croît linéairement avec la taille du système, et une phase délocalisée où ce nombre croît beaucoup moins vite voire pas du tout.

0.2.2 Problématiques et influence du désordre

Prenons un modèle qui rentre dans la classe précédemment décrite pour lequel nous avons une transition de phase bien connue dans le cas pur (c'est souvent le cas). La principale question étudiée est la suivante : *le fait de rendre aléatoires les variables de couplage avec l'environnement perturbe-t-il la transition ?*

Résoudre un modèle dans le cas *gelé* constitue une question très vaste et difficile ; généralement, il n'est même pas évident de savoir si la transition persiste après l'introduction du désordre. Il existe un argument développé dans les années soixante-dix par A. B. Harris [58], appelé *critère de Harris*, qui donne une réponse très simple : les propriétés critiques du système pur sont modifiées par un désordre arbitrairement faible si l'exposant critique de la chaleur spécifique est strictement positif, et ne le sont pas dans le cas strictement négatif (on dira que le désordre est *pertinent* dans le premier cas et *non pertinent* dans le second). Dans le premier cas, nous nous attendons à ce que les températures de transition du système *recuit* (ou *annealed*) et du système *quenched* diffèrent. Il existe aussi un régime *marginal* (pour lequel l'exposant est nul) où il est souvent difficile de savoir si le désordre reste pertinent ou pas.

Remarque : le système *recuit* (ou *annealed*) précédemment cité est un système étalon dans lequel les variables d'interaction avec l'environnement ont été moyennées de la même façon que les variables de configuration du système (on donnera plus de précisions dans la partie suivante). Ces modèles ne nous disent pas ce qui se passe dans la réalité mais ils présentent l'avantage de redonner des modèles purs, pour lesquels les résolutions sont plus simples. La température de transition *annealed* donne alors une estimation assez bonne

de la température de transition *quenched*. Elle constitue aussi une borne supérieure : $T_c^{que} \leq T_c^{ann}$ qui découle de l'inégalité de Jensen. La question de la pertinence du désordre revient à comparer les deux températures de transition, ainsi que les exposants critiques.

Le *critère de Harris* a été formulé à l'origine sur des systèmes magnétiques avec des couplages aléatoires à la transition ferro-paramagnétique. Après plusieurs années il a été étendu bien au-delà de ce contexte (voir [21]). Il existe néanmoins certaines situations où le critère ne s'applique pas (par exemple pour le modèle de Potts à q couleurs sur un réseau hiérarchique non symétrique [32]).

Récemment, l'argument de Harris a été rendu rigoureux dans le cas du polymère dirigé par plusieurs auteurs [3, 54, 66, 89] (voir les détails dans la partie suivante) et l'écart entre les points critiques *annealed* et *quenched* a été estimé dans le cas où le désordre est pertinent. Néanmoins, la question qui concerne l'expression de la surface critique reste toujours ouverte, et nous ne savons pas non plus comment le désordre modifie le comportement critique.

0.2.3 Le plan du manuscrit de thèse

- **Partie 1** : Quelques résultats sur l'effet du désordre dans les modèles d'accrochage.

Dans une première partie, nous passerons en revue plusieurs résultats plus ou moins récents déjà démontrés dans le cadre du modèle de Poland-Scheraga. Cela sera l'occasion d'introduire les outils physiques et mathématiques dont nous ferons usage par la suite. Nous exposerons la résolution du problème dans le cas pur, et nous caractériserons l'ordre de la transition. Puis dans le cas désordonné, nous parlerons de l'égalité des points critiques dans le cas non-pertinent (conformément au critère de Harris), et du décalage de ces derniers dans le cas pertinent. Nous verrons aussi que l'ajout d'impuretés rend plus lisse la transition.

- **Partie 2** : La version hiérarchique de la transition de dénaturation.

Cette partie est essentiellement une revue des résultats existants sur le problème pris dans la représentation hiérarchique introduite dans l'article [34]. Nous verrons que les résultats sur l'effet du désordre sont similaires à ceux du problème original : il existe également deux régimes où le désordre est soit pertinent, soit non-pertinent, délimités par la valeur d'un paramètre géométrique lié au réseau. Cela sera aussi l'occasion de constater les simplifications offertes par le choix de ce réseau.

- **Partie 3** : Un nouveau modèle simplifié : le *Toy-model*.

L'objet de cette partie, qui n'est plus bibliographique, est d'introduire un nouveau modèle (une version simplifiée du problème sur le réseau hiérarchique) sur lequel nous avons travaillé à la fois numériquement et analytiquement. Il consiste à définir une formule de renormalisation très simple pour l'énergie libre. Celle-ci se limite à la somme de variables aléatoires indépendantes sur un intervalle $[a; +\infty[$. Le diagramme de phase est similaire aux modèles précédemment cités. Nous serons en mesure de voir que ce modèle présente une transition de phase d'ordre infini.

- **Partie 4** : Les résultats numériques en faveur d'une transition d'ordre infini.

Nous réaliserons une étude numérique sur le *Toy-model* pour appuyer l'hypothèse d'une transition de phase d'ordre infini par deux méthodes. La première consistera à utiliser une distribution initiale de désordre très simple en contrôlant par un paramètre le taux d'impureté introduit, et à regarder un critère de pseudo transition lorsque le système est de taille finie. La vitesse de convergence vers la valeur critique est compatible avec une transition d'ordre infini. La seconde méthode consiste à regarder directement la valeur de l'énergie libre proche de la transition : nous pouvons vérifier directement qu'elle présente une singularité essentielle. Enfin, nous réaliserons que les courbes obtenues dans le cadre du problème sur réseau hiérarchique conduisent aux mêmes conclusions que celle du *Toy-model*.

- **Partie 5** : Arguments analytiques en faveur d'une transition d'ordre infini.

Le *Toy-model* est abordé analytiquement. Le premier point concerne l'absence de point fixe de l'itération dans le régime désordonné. Cela signifie que si nous introduisons des impuretés, alors la possibilité de voir une distribution fixe lors d'une

renormalisation disparaît. En seconde partie nous faisons l'étude d'une distribution limite qui varie peu lors d'une renormalisation et nous accédons à la dynamique proche et sur la surface critique qui confirme l'ordre infini de la transition.

- **Partie 6** : Généralisation : renormalisation de lois de Lévy modulées.

Dans cette partie qui clôt notre travail sur la dénaturation de l'ADN, nous tentons une généralisation des résultats obtenus analytiquement sur le *Toy-model*. Nous construisons à partir d'une loi de Lévy un type de distribution qui varie peu lors de la renormalisation du système. Nous pouvons montrer que dans un certain régime, nous retrouvons la même évolution que pour le *Toy-model*.

Quelques résultats sur l'effet du désordre dans les modèles d'accrochage

Les modèles d'accrochages (ou de dénaturation) que nous allons étudier dans cette thèse sont déjà intéressants dans leur version homogène, c'est-à-dire sans désordre. De plus, il est important de donner les résultats dans le cas de systèmes purs, afin de les comparer à ceux obtenus pour des systèmes désordonnés, soulignant ainsi dans quelle mesure la présence d'inhomogénéités affecte les propriétés critiques du système.

Dans cette partie nous redonnons dans ses grandes lignes la résolution du modèle de Poland-Scheraga dans le cas pur. Il est possible pour ce système d'avoir l'expression exacte de la température de transition et de connaître l'exposant critique associé.

Ensuite, nous introduirons la notion de désordre dans le système, et nous verrons les deux façons qu'il existe de définir l'énergie libre (modèle *gelé* ou *recuit*). Nous expliquerons de façon plus détaillée le critère de Harris, censé prédire si le désordre est pertinent ou pas selon la valeur d'un paramètre géométrique du modèle. Autrement dit, la question posée est de savoir à quel point le fait de prendre des énergies de liaison aléatoires modifie la fonction de partition à la limite thermodynamique et le comportement critique.

Dans le régime où le désordre est pertinent, il n'existe pas de détermination exacte du point critique gelé dans la littérature, mais une borne sur l'énergie libre a montré que la présence de désordre rend la transition plus lisse que dans le cas pur. Nous verrons aussi que même si la localisation précise du point critique n'est pas connue, l'ordre de grandeur de la distance avec le point critique recuit peut être évalué.

Au contraire, dans le régime où le désordre n'est pas pertinent, le comportement du système gelé est connu. En fait, il est similaire à celui du cas recuit, avec un décalage du point critique du moment que le désordre n'est pas trop fort.

Enfin, dans le cas marginal pour lequel le critère de Harris ne prédit rien, il a été montré que le désordre est pertinent.

1.1 Le cas homogène du modèle de Poland-Scheraga

1.1.1 L'énergie libre du système

Imaginons un système constitué de deux brins d'ADN. Chaque monomère qui constitue la molécule peut être dans deux états différents. Soit il est lié avec son complémentaire, soit il en est détaché. Une configuration typique est représenté en figure 2. Nous y voyons une succession de segments attachés et de boucles d'une longueur plus ou moins grande.

Ce système présente la particularité d'être exactement soluble. Cela signifie qu'il est possible de trouver sans approximation la température de transition et les exposants critiques. Nous allons d'abord définir *l'énergie libre* du système, puis nous proposerons une résolution de ce problème.

Si le système est de taille N et que nous regardons une configuration pour laquelle il y a k contacts en $(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k)$ entre les deux brins, alors le poids statistique vaut :

$$\omega(\tau_2 - \tau_1) \dots \omega(\tau_k - \tau_{k-1}) e^{-k\varepsilon/T}$$

où ε est l'énergie d'un contact et T la température du milieu. Pour des interactions attractives entre monomères, nous devons prendre $\varepsilon < 0$. Les termes en $\omega(\tau_{i+1} - \tau_i)$ sont les poids statistiques des boucles. Pour une boucle de longueur ℓ assez grande (voir [42, 60, 82, 79]), ce facteur prend la forme asymptotique :

$$\omega(\ell) \sim \frac{s^\ell}{\ell^c} \quad (1.1)$$

où $\log s$ est la partie extensive de l'entropie de la boucle, et c est un coefficient déterminé par les propriétés géométriques de la boucle. Le facteur $\omega(\ell)$ est à interpréter comme le nombre de marches aléatoires qui reviennent pour la première fois en 0 après ℓ pas. La dimension du système étudié, ou les contraintes géométriques comme l'auto-évitement de la molécule, sont par exemple des paramètres qui font varier la valeur de c (voir [60]). Un résultat classique pour des marches Browniennes est que $c = 3/2$ pour $d = 1$, $c = 1$ pour $d = 2$ (avec des corrections logarithmiques) et $c = d/2$ pour $d \geq 3$. Dans le cas des marches aléatoires auto-évitantes, il faut s'attendre à voir des valeurs de c plus importante (car le nombre de configurations diminue).

La fonction de partition Z_N d'un système de taille N se définit comme la somme des poids statistiques de toutes les configurations accessibles du système. Pour l'obtenir nous devons faire une somme sur le nombre de contacts puis sur les possibilités de placer ces points de contacts.

$$Z_N(h) = \sum_{k=2}^N \sum_{\tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_k} \omega(\tau_2 - \tau_1) \dots \omega(\tau_k - \tau_{k-1}) e^{kh} . \quad (1.2)$$

où nous avons introduit un champ $h = -\varepsilon/T$. Nous supposons que le système est fixé aux deux extrémités ($\tau_1 = 0$ et $\tau_k = N$), ce qui n'a pas d'influence une fois avoir pris la limite thermodynamique.

L'énergie libre réduite (par unité de longueur) est définie par :

$$f(h) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\log Z_N(h)}{N} . \quad (1.3)$$

Notons que nous adoptons la convention des mathématiciens pour cette définition. Le signe moins est volontairement oublié, ainsi que le facteur $k_B T$.

C'est dans cette fonction que nous pourrons lire le comportement critique. Si une transition de phase se produit, $f(h)$ doit exhiber une singularité pour un champ h_c fini. Habituellement cela s'accompagne d'une divergence de l'une des dérivées de f à un certain champ h_c , mais cela peut aussi ne pas être le cas en présence d'une singularité essentielle.

L'énergie libre est dans la plupart des problèmes de physique statistique à l'équilibre l'objectif principal car elle contient les caractéristiques observables du système (ici la longueur de corrélation, la fraction de monomères attachés, etc...) qui rendent très explicite l'effet physique d'une transition. Nous nous attendons par exemple à avoir une fraction de contacts nulle dans la phase délocalisée, et non nulle dans la phase localisée. Ce qui nous intéresse particulièrement est aussi la façon dont les deux régimes se raccordent.

Remarque : dans les modèles d'accrochage, le polymère dirigé est décrit par une marche aléatoire. Pour connaître l'énergie d'une trajectoire, la seule chose qui compte est de

savoir où se font les contacts avec la ligne de défaut. Pour décrire cette situation, on définit un processus de renouvellement $\mathcal{T} = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k\}$. Notons $K(n)$ la probabilité qu'une marche aléatoire partant de l'origine fasse son *premier* retour en 0 au bout d'un temps n . Nous pouvons donc dans un cadre général modéliser la marche par le biais de la loi de renouvellement, en donnant un exposant α tel que $K(n) n^{1+\alpha} \sim C_K$ où C_K est une constante positive. Le paramètre α joue ici le même rôle géométrique que le coefficient c dans la description de Poland-Scheraga. Pour que la marche repasse par 0, il faut que $\sum_n K(n) < \infty$, soit $\alpha > 0$, on dit dans ce cas que le processus \mathcal{T} est *récurrent*.

1.1.2 Résolution du modèle pur

Commençons la résolution par une constatation simple. La fonction de partition est une somme de termes positifs, elle est donc plus grande que dans le cas où on limiterait la somme à $k = 2$ (avec une unique et grande boucle telle que $\tau_1 = 0$ et $\tau_2 = N$). Ainsi

$$Z_N \geq \omega(N) e^{2h}.$$

De cette inégalité, il vient une borne inférieure à l'énergie libre en utilisant l'expression des facteurs de boucle 1.1 et en passant à la limite thermodynamique :

$$f(h) \geq \log s.$$

Ce résultat est une conséquence du fait que $\log(N)/N \rightarrow 0$.

De plus, nous pouvons observer que dans la définition de la fonction de partition 1.2, le terme $\prod_i \omega(\tau_{i+1} - \tau_i)$ fait ressortir un facteur s^N pour n'importe quelle trajectoire (car nous avons fixé les deux extrémités). Cela contribue à l'énergie libre en une simple constante égale à $\log s$. Nous pouvons donc fixer $s = 1$ sans que cela ait une répercussion sur le comportement critique du système et dans ce cas

$$f(h) \geq 0.$$

D'après [52, 64], nous pouvons écrire la récurrence suivante sur la fonction de partition :

$$Z_N = \sum_{\ell=0}^{N-1} Z_{N-\ell} \omega(\ell) e^h + \delta_{N,1} e^h \quad (1.4)$$

où par convention $\omega(0) = 0$. Lorsque la taille du système devient grande, nous avons par définition $Z_N = \exp(Nf(h) + o(N))$. Par conséquent, l'énergie libre est la solution de l'équation

$$\sum_{\ell=1}^{+\infty} \omega(\ell) e^{-\ell f(h)} = e^{-h}$$

si une telle solution existe (*i.e.* si $\sum_{\ell \geq 1} \omega(\ell) \geq e^{-h}$). Dans le cas inverse, nous aurons $f(h) = 0$. Le point critique est donc donné par

$$e^{-h_c} = \sum_{\ell=1}^{+\infty} \omega(\ell). \quad (1.5)$$

Enfin, un développement proche du point critique conduit à

$$\begin{aligned} f(h) &= 0 \quad \text{si} \quad h < h_c, \\ f(h) &= A_s(h - h_c)^\nu \quad \text{où} \quad \nu = \max\left(1, \frac{1}{c-1}\right) \quad \text{si} \quad h > h_c \end{aligned} \quad (1.6)$$

Dans cette expression, A_s est une constante qui dépend de c et de h_c . Des corrections logarithmiques sont à prendre en compte si $c = 2$. L'exposant ν est l'exposant de la longueur de corrélation. Nous pouvons le relier à l'exposant de la chaleur spécifique α via une relation d'échelle qui donne $2 - \alpha = d\nu$ où d est la dimension.

1.1.3 Propriétés de la transition

Nous venons de retrouver l'expression de l'énergie libre proche de la transition dans le cas non-désordonné du modèle de Poland-Scheraga. La fonction $f(h)$ est donc nulle en dessous de h_c puis devient croissante au-delà de cette valeur. Il y a une singularité en h_c que nous allons identifier.

L'*exposant critique*, noté ν , nous renseigne sur la façon dont se fait la jonction entre les deux régimes. Selon la classification d'Ehrenfest, l'ordre d'une transition est défini de la manière suivante. Si la dérivée première de l'énergie libre est discontinue à la transition, la transition est *d'ordre un*. Ce type de transition est très commun, observable par exemple lors des changements d'état de la matière (par exemple une transition eau liquide en eau vapeur est d'ordre un : la masse volumique est discontinue). Dans le cas contraire, s'il faut dériver deux fois, ou plus, pour trouver une discontinuité, la transition est *d'ordre deux*. Ce type de transition est lisse : le paramètre d'ordre s'annule de façon continue à la transition. Nous pouvons citer comme exemple les systèmes ferromagnétiques-paramagnétiques, où l'aimantation s'annule continûment lorsque la température du milieu s'élève.

Ici, lorsque $1 < c < 2$, la transition est d'ordre deux. En effet, la dérivée de $f(h)$ s'annulerait continûment. En calculant par exemple la fraction moyenne de sites attachés $\rho = f'(h)$ nous voyons que proche de la transition, à des constantes près :

$$\rho \sim (h - h_c)^{\nu(2-c)}. \quad (1.7)$$

Par conséquent, si $1 < c < 2$, la taille des boucles diverge quand h tend vers h_c par valeur supérieure. C'est effectivement le comportement attendu puisque nous passons la transition de dénaturation.

Elle est d'ordre un si $2 < c$: la limite à droite en h_c de $f(h)$ est non nulle, donc il y a bien une discontinuité. Le paramètre de boucle c est donc déterminant sur la nature de la transition. Nous observons que même en h_c , la taille caractéristique des boucles reste finie, il y a donc une discontinuité car au-delà du point de transition, la taille caractéristique des boucles devient de l'ordre de grandeur de N .

Conclusion : nous venons de caractériser la transition de phase du modèle de Poland-Scheraga dans le cas pur. Les éléments essentiels sont d'une part que nous avons pu trouver la valeur du point critique de transition via l'équation 1.5, et qu'il est possible d'avoir l'exposant critique d'autre part. Nous avons constaté que l'exposant dépendait du paramètre géométrique c caractérisant les boucles. La transition est d'ordre deux si $1 < c < 2$ et devient d'ordre un si $2 < c$.

1.1.4 Critère de Harris

Nous allons maintenant aborder la question de l'influence du désordre sur le modèle que nous venons d'étudier. Comme sur l'ADN, la séquence des bases azotées n'est pas modifiée par les fluctuations thermiques, nous considérons que la constitution de la chaîne est fixée. Les énergies de liaison sont modélisées comme des variables aléatoires. Dans cette thèse, le choix a été fait d'introduire un désordre non corrélé, par conséquent les variables d'énergies sont *indépendantes et identiquement distribuées* (i.i.d.).

Remarque : ce choix pourrait être contesté car il n'est pas réaliste de penser que les séquences qui forment les gènes sont complètement décorréelées. Néanmoins cette hypothèse simplifie le problème, et la grande majorité des auteurs en font usage. Il est toutefois possible d'introduire un désordre corrélé. Plusieurs travaux ont été menés dans ce cas de figure [9, 10]. Les questions qui émergent concernent principalement l'effet des corrélations spatiales du désordre sur la transition et sur le critère de Harris.

Pour prédire l'influence d'un désordre *i.i.d.* sur le comportement critique, Harris [58] donne un critère général. Le caractère *i.i.d.* est très important, il permet d'adapter la méthode pour une classe très large de modèles. Ce critère consiste à regarder l'exposant critique α de la chaleur spécifique dans le cas pur et à le comparer à 0 (ce qui revient à comparer ν à 2).

- Si $\nu > 2$ (soit $c < 3/2$) alors le désordre ne devrait pas être pertinent. Pour n'importe quelle distribution initiale de désordre assez faible (autrement-dit pour n'importe quelle loi de répartition des énergies de liaisons), les points critiques *annealed* et *quenched* devraient être confondus. Nous verrons dans la prochaine partie que ce résultat devient faux dans une certaine limite (dite de fort désordre).
- Si $\nu < 2$ (soit $c > 3/2$) alors au contraire, pour n'importe quelle distribution initiale de désordre (même arbitrairement faible), nous devrions obtenir des points critiques *annealed* et *quenched* distincts. Les exposants critiques devraient eux aussi se différencier.
- Si $\nu = 2$ (le cas marginal, soit $c = 3/2$), le critère ne permet pas de conclure, il faut pour cela une analyse plus fine. Ce cas a fait l'objet de nombreuses affirmations contradictoires dans la littérature, mais aujourd'hui il a été montré que le désordre est marginalement pertinent.

Donnons une idée physique du critère de Harris.

Imaginons un système pur ayant une transition à la température critique T_c^{pur} . Si nous nous plaçons proche de la transition, la longueur de corrélation du système se comporte en

$$\xi \sim (T - T_c^{pur})^{-\nu}.$$

Dispersions maintenant aléatoirement des impuretés dans le système avec une concentration moyenne p (en pratique, cela revient à changer la valeur d'une énergie microscopique avec une probabilité p). Sélectionnons une sous-partie du système (de longueur caractéristique ξ), le théorème de la limite centrale affirme qu'au sein de ce sous-système, la fluctuation typique de concentration des impuretés vaut

$$(\Delta p)^2 \sim \xi p(1 - p).$$

Par conséquent nous pouvons observer des fluctuations de la température critique qui ont pour ordre de grandeur :

$$\Delta T_c \sim (\Delta \text{Énergie})^{-1} \sim (\Delta p)^{-1} \sim \xi^{-1/2}$$

donc

$$\Delta T_c \sim (T - T_c^{pur})^{\nu/2}.$$

Par conséquent, si $\nu/2 > 1$, alors $\Delta T_c \ll |T - T_c^{pur}|$, les températures critiques des morceaux du système restent très proches les unes des autres malgré la présence des impuretés. Et à l'inverse, si $\nu/2 < 1$, alors les morceaux du systèmes n'ont plus le même comportement critique.

Dans la partie suivante nous passerons en revue les résultats démontrés dans la littérature dans le cas où du désordre est introduit dans le système, sur le modèle d'accrochage. Nous élargirons et définirons les concepts précédemment introduits (fonction de partition, énergie libre, etc...) puis nous parlerons des trois régimes de pertinence du désordre en regardant comment s'interprète le critère de Harris avec les paramètres du modèle.

1.2 Le cas désordonné du modèle d'accrochage

Nous sommes maintenant dans un cas où les énergies de contact sont aléatoires. Si nous choisissons leur distribution ρ , nous pouvons fixer l'environnement avec lequel le système interagit. Cela revient à faire un tirage de variables $\mathcal{D} = \{\varepsilon_n\}_{n \geq 0}$ (*i.i.d.*) qui donne la nature de la ligne de défaut avec laquelle le polymère se lie. Avant toute chose, l'énergie libre du système doit être redéfinie.

1.2.1 Énergies libres gelée et recuite

Maintenant que nous avons introduit du désordre dans le système, la fonction de partition devient :

$$Z_{\mathcal{D},N}(T) = \sum_{k=2}^N \sum_{\tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_k} \omega(\tau_2 - \tau_1) \dots \omega(\tau_k - \tau_{k-1}) \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\tau_1} + \dots + \varepsilon_{\tau_k}}{T}\right). \quad (1.8)$$

La fonction de partition dépend donc du tirage \mathcal{D} , elle est donc au même titre que les ε_i une variable aléatoire. Effectivement, pour chaque réalisation du désordre \mathcal{D} , le système devra s'adapter et les configurations accessibles n'auront pas les mêmes énergies. Pour deux réalisations différentes de désordre, l'énergie d'une même trajectoire peut être complètement différente.

Si la fonction de partition est aléatoire, l'énergie libre telle que nous l'avons définie dans la section précédente devrait l'être aussi *a priori*. Il est donc nécessaire d'introduire de nouvelles définitions.

Notons $\langle \dots \rangle$ la moyenne faite sur le désordre (*i.e.* sur la distribution ρ).

Remarque : dans la littérature, les notations sont parfois légèrement différentes. En effet, sans perte de généralité, il est possible de fixer la moyenne et la variance de la distribution ρ de telle manière que $\langle \varepsilon \rangle = 0$ et $\sigma_\varepsilon^2 = 1$ et d'introduire en contre-partie les paramètres β (la température inverse) et h un champ extérieur. De cette manière nous redéfinissons la fonction de partition par

$$Z_{\mathcal{D},N}(\beta, h) = \sum_{k=2}^N \sum_{\tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_k} \omega(\tau_2 - \tau_1) \dots \omega(\tau_k - \tau_{k-1}) \exp\left(\sum_{i=1}^k (\beta \varepsilon_{\tau_i} + h)\right);$$

β quantifie le désordre (β^2 est la variance du désordre), et h donne sa moyenne. À partir de maintenant, nous utiliserons ces notations pour plus de proximité avec les articles écrits par les mathématiciens.

- L'énergie libre *quenched*² est définie par

$$f^{que}(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\langle \log Z_{\mathcal{D},N}(\beta, h) \rangle}{N} \quad (1.9)$$

(le signe *moins* est volontairement oublié). Cette définition de l'énergie libre correspond en fait à celle qui est effectivement observée dans un système physique réel. Une propriété remarquable est que l'énergie libre *quenched* est auto-moyennée :

$$f^{que}(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\log Z_{\mathcal{D},N}(\beta, h)}{N} . \quad (1.10)$$

Ce résultat est très important dans l'étude des systèmes désordonnés, il existe des démonstrations rigoureuses dans plusieurs articles (voir [2, 11, 16, 52]) pour ce qui concerne les modèles d'accrochage. La démonstration repose sur la propriété de sur-additivité de $\log Z_{\mathcal{D},N}$.

L'idée est la suivante : prenons un système de taille N , en notant $Z_{\mathcal{D}_1,N}^*$ la fonction de partition pour des marches contraintes à avoir leur deuxième extrémité fixée, nous pouvons montrer pour tout $0 < m < N$ que :

$$Z_{\mathcal{D}_1,m}^* Z_{\mathcal{D}_2,N-m}^* \leq Z_{\mathcal{D},N}^*$$

où \mathcal{D}_1 et \mathcal{D}_2 sont les réalisations du désordre pour les deux sous-systèmes. Cette inégalité ainsi que l'existence d'une borne supérieure à $\log Z_{\mathcal{D},N}^*$ suffisent pour appliquer le théorème de Kingman sur la super-additivité, qui prouve l'existence de la limite de $1/N \log Z_{\mathcal{D},N}^*$.

Le reste de la démonstration consiste à montrer que les fonctions $1/N \log Z_{\mathcal{D},N}$ et $1/N \log Z_{\mathcal{D},N}^*$ ont la même limite.

Regardons maintenant les propriétés de l'énergie libre *quenched*. À $\beta > 0$ donné, la fonction $h \mapsto f^{que}(\beta, h)$ est convexe, elle est également croissante et positive [50, 52, 56]. Ces résultats suggèrent l'existence de deux phases

$$\begin{aligned} \text{localisée} & \quad \text{si } f^{(q)}(\beta, h) > 0 \quad \text{pour } h > h_c^{(q)}(\beta), \\ \text{délocalisée} & \quad \text{si } f^{(q)}(\beta, h) = 0 \quad \text{pour } h < h_c^{(q)}(\beta). \end{aligned} \quad (1.11)$$

Nous avons noté $h_c^{(q)}(\beta)$ la valeur du champ critique pour le modèle *quenched*. Cela a son importance car il y a une autre façon de décrire le système, qui conduit à une valeur *a priori* différente.

² qui signifie gelée.

- L'énergie libre *annealed*³ est, quant à elle, définie par

$$f^{(a)}(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\log \langle Z_{\mathcal{D}, N}(\beta, h) \rangle}{N}. \quad (1.12)$$

Cette fois la moyenne sur le désordre est prise avant le logarithme. Généralement, un système *annealed* est souvent bien plus simple que sa version *quenched*. Si nous nous donnons une distribution de désordre ρ , il est parfois possible de calculer pour un désordre *i.i.d* le terme $\langle Z_{\mathcal{D}, N}(\beta, h) \rangle$, ou au moins se ramener à un cas pur.

Le modèle *annealed* est intéressant à étudier en soi, mais nous pouvons clarifier ce qu'il représente réellement. Ici, les variables d'environnement sont amenées à jouer le même rôle que les variables qui caractérisent les configurations du système, alors qu'auparavant nous disions avoir fixé l'environnement. Par conséquent, les variables \mathcal{S} sont susceptibles de *sélectionner* des variables \mathcal{D} . En quelque sorte, tout se passe comme si le polymère pouvait modifier le désordre (ou l'environnement) dans lequel il se trouve pour accéder à des configurations plus favorables. Il n'y a plus de hiérarchie entre les deux types de variables, alors que dans le cas *quenched*, les variables \mathcal{S} devaient au contraire s'adapter à la réalisation du désordre.

Nous pouvons voir ici que si la distribution ρ permet de définir $M(\beta) = \langle e^{\beta\varepsilon} \rangle$ (ce qui est le cas pour une distribution à support fini, ou pour un désordre Gaussien), alors nous avons :

$$\langle Z_{\mathcal{D}, N}(\beta) \rangle = \sum_{k=2}^N \sum_{\tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_k} \omega(\tau_2 - \tau_1) \dots \omega(\tau_k - \tau_{k-1}) e^{k \log M(\beta)}$$

donc nous retrouvons une équation similaire au cas pur 1.2, où la somme se fait sur les points de contact et où les énergies sont transformées par $\beta\varepsilon \rightarrow \log M(\beta)$. Au prix de cette opération, nous voyons que le modèle *annealed* est en réalité identique à un modèle *pur*.

Cette propriété prouve l'existence de deux phases et d'une température critique *annealed* :

$$\begin{aligned} &\text{localisée} && \text{si } f^{(a)}(\beta, h) > 0 \text{ pour } h > h_c^{(a)}(\beta), \\ &\text{délocalisée} && \text{si } f^{(a)}(\beta, h) = 0 \text{ pour } h < h_c^{(a)}(\beta). \end{aligned} \quad (1.13)$$

Le modèle *annealed* sert d'étalon au modèle *quenched*. Souvent, $h_c^{(a)}$ est une estimation assez proche de $h_c^{(q)}$.

Nous pouvons d'ores et déjà comparer les deux types d'énergies grâce à l'inégalité de Jensen, qui se base sur la concavité du log. Il a été montré dans [11, 20, 52, 56] que : $\langle \log Z_{\mathcal{D}, N} \rangle \leq \log \langle Z_{\mathcal{D}, N} \rangle$ donc

$$f^{(q)}(\beta, h) \leq f^{(a)}(\beta, h). \quad (1.14)$$

Cela prouve en particulier que

$$h_c^{(q)} \geq h_c^{(a)} \quad (1.15)$$

³ qui signifie recuite.

car l'énergie libre *quenched* reste nulle forcément plus longtemps.

Revenons plus précisément sur le critère de Harris. Ce dernier énonce que si $\alpha < 1/2$ (ou $c < 3/2$ pour le modèle de Poland-Scheraga), les points critiques *quenched* et *annealed* sont confondus, et dans le cas $\alpha > 1/2$ l'inégalité 1.15 devient stricte : n'importe quelle quantité de désordre engendre un comportement critique différent. Nous verrons plus en détails dans les paragraphes suivants les résultats rigoureux qui s'y rapportent.

Dans le cas marginal, le critère de Harris ne prédit rien. Après une controverse assez longue dans la littérature, un consensus a finalement été trouvé. Il existe désormais une preuve rigoureuse de la pertinence du désordre si $\alpha = 1/2$.

1.2.2 Une transition plus lisse

Le modèle *quenched* présente une transition de phase en un certain point critique que nous ne connaissons pas. Néanmoins, nous allons voir dans ce paragraphe qu'il a été montré que dès qu'un désordre est introduit dans le système, alors la transition est au moins d'ordre deux : l'énergie est différentiable au point critique et la fraction de contact s'annule continûment. Cela contraste en particulier avec le cas pur.

Il est possible de donner des bornes à l'énergie libre *quenched* lorsque nous nous trouvons proche de la transition. Rappelons que dans le cas pur ($\beta = 0$), nous avons :

$$f^{(q)}(0, h_c^{(q)}(0) - \delta) \sim Cte \times \delta^\nu \quad (1.16)$$

où $\nu = \max(1; 1/\alpha)$ pour tout $\delta > 0$ et $\alpha > 0$. Pour faire le lien avec le modèle de Poland-Scheraga, il suffit de remplacer α par $c - 1$.

Dans le cas désordonné (voir par exemple dans [1, 2, 3, 50, 51]), il a été montré que la transition est plus lisse, en effet $\forall \alpha > 0, \forall \beta > 0$, il existe une fonction positive à valeur finie $c(\beta)$ telle que

$$0 \leq f^{(q)}(\beta, h_c^{(q)}(\beta) - \delta) \leq (\alpha + 1) c(\beta) \delta^2 \quad (1.17)$$

Ce résultat montre que l'ordre de la transition est au moins égal à deux.

Cette borne sur l'énergie libre fait échos au critère de Harris : si $\alpha > 1/2$ l'exposant du cas pur ν est plus petit que 2, or ici nous avons forcément $\nu^{(q)} \geq 2$ ⁴. Cela signifie que le désordre a pour second effet de modifier les exposants critiques du cas pur dans le cas où le désordre est pertinent (le premier étant de décaler le point critique).

D'ailleurs, en regardant la fraction de contact définie par $\partial_h f^{(q)}(\beta, h)$, nous constatons que celle-ci s'annule continûment lorsque h tend vers $h_c^{(q)}(\beta)$ (bien que cela semble en désaccord avec des études numériques [49]). Cette remarque contraste à nouveau avec le cas pur pour lequel nous avons une divergence au point critique si $0 < \alpha < 1$.

Donnons une idée physique de la preuve du résultat 1.17. Prenons un désordre Gaussien et *i.i.d.*, et imaginons une configuration du système qui se constitue en $k = N/\ell$ blocs de taille ℓ . Parmi eux, différencions les "bons" blocs des "mauvais" blocs.

⁴Voir aussi [21]

Les bons blocs sont ceux pour lesquels le polymère fait beaucoup de contacts, et qui ont donc une énergie importante : si le j -ième blocs est bon, alors introduisons sa charge $\delta > 0$ telle que

$$\sum_{n=\ell_{j+1}}^{\ell(j+1)} \varepsilon_n \sim \ell\delta.$$

Les mauvais blocs sont des grandes excursions du polymère loin de la ligne de défaut, pour lesquels les contacts sont rares.

Une analyse de grandes déviations permet d'écrire que le nombre typique de bons blocs vaut $N_{typ} = k e^{-\ell\delta^2/2}$ et que la distance qui les sépare est de l'ordre de $d_{typ} = \ell e^{\ell\delta^2/2}$.

Appelons \mathcal{S}_ε les configurations du système où les contacts se font *uniquement* dans les bons blocs. La restriction à de telles configurations constitue une borne inférieure pour l'énergie libre :

$$\frac{1}{N} \log Z_{\mathcal{D},N} \geq \frac{1}{N} \log \langle e^{H_{\mathcal{D},N}} |_{\mathcal{S}_\varepsilon} \rangle.$$

Remarquons maintenant que conditionner ℓ variables Gaussiennes indépendantes à avoir une somme égale à $\ell\delta$ revient à décaler leur moyenne de 0 à δ tout en gardant leur variance égale à 1. Par conséquent chaque bon bloc est en fait décrit par les paramètres thermodynamiques $(\beta', h') = (\beta, h - \beta\delta)$. Leur contribution à l'énergie libre contrainte à \mathcal{S}_ε vaut donc leur densité sur le système fois leur énergie libre moyenne :

$$N_{typ}/k f^{(q)}(\beta, h - \beta\delta).$$

Par ailleurs, si K désigne le processus de renouvellement, les excursions (mauvais blocs) contribuent à un facteur d'entropie :

$$\log K(d_{typ}) \sim \log \left(\frac{1}{d_{typ}^{1+\alpha}} \right) \sim -(\alpha + 1) \frac{\ell\delta^2}{2} + \mathcal{O}(\log \ell)$$

qui doit être multiplié par leur densité N_{typ}/k pour avoir leur contribution à l'énergie libre complète.

Enfin, plaçons nous exactement en $h_c^{(q)}(\beta)$, nous avons alors une évaluation de l'énergie libre contrainte en sommant les contributions des deux types de blocs :

$$0 = f^{contr}(\beta, h_c^{(q)}(\beta)) \geq e^{-\ell\delta^2/2} \left(f^{(q)}(\beta, h_c^{(q)}(\beta) - \beta\delta) - (\alpha + 1) \frac{\delta^2}{2} \right)$$

d'où le résultat 1.17.

1.2.3 Un désordre non pertinent

Nous nous plaçons dans le cas où $\alpha < 1/2$; la prédiction de Harris annonce que la présence de désordre, si elle est suffisamment faible, n'est pas pertinente. Autrement dit, si les énergies de liaison entre le polymère et la ligne de défaut sont assez concentrées autour d'une valeur moyenne (ou que la variance de la distribution ρ est assez petite), nous nous attendons à ce que le système se comporte comme dans le cas pur. Nous voulons dans cette partie donner la traduction mathématique du fait que le désordre ne soit pas pertinent.

Premièrement, cette prédiction a été rendue rigoureuse [3, 53, 66, 89]. Il a été montré qu'il existe une valeur limite de variance du désordre β_0 telle que pour $\beta < \beta_0$, alors

$$h_c^{(q)}(\beta) = h_c^{(a)}(\beta) \quad (1.18)$$

et

$$\lim_{h \rightarrow h_c^{(a)}(\beta)} \frac{\log f^{(q)}(\beta, h)}{\log(h - h_c^{(a)}(\beta))} = \frac{1}{\alpha} \quad (1.19)$$

ce qui implique à la fois l'égalité des points critiques et la coïncidence de l'exposant critique entre le cas *quenched* et le système pur.

De plus, les courbes d'énergies libres *quenched* et *annealed* restent arbitrairement proches l'une de l'autre au voisinage du point critique. En effet, on peut montrer que pour tout $\eta > 0$, il existe un $\Delta_0 > 0$ tel que

$$(1 - \eta)f^{(a)}(\beta, h) \leq f^{(q)}(\beta, h) \leq f^{(a)}(\beta, h) \quad (1.20)$$

pour $h - h_c^{(a)}(\beta) < \Delta_0$. Les preuves de [53, 89] s'appuient sur une méthode de répliques couplées. Les caractéristiques critiques du système sont donc identiques à celle du cas pur, avec simplement un décalage du point critique égal à $\log\langle e^{\beta\varepsilon} \rangle$. La transition est donc continue, d'ordre 2, et la fraction de contact s'annule comme dans le cas pur en $(h - h_c^{(a)}(\beta))^{(1-\alpha)/\alpha}$ d'après [3].

Néanmoins, ce que le critère de Harris ne prévoit pas, c'est que pour un désordre suffisamment fort, ces résultats cessent d'être exacts, même dans le régime $\alpha < 1/2$. Il est démontré dans [18, 19, 90] qu'il existe une valeur de désordre $\beta_1 < \infty$ telle que

$$h_c^{(q)}(\beta) > h_c^{(a)}(\beta) \quad (1.21)$$

pour tout $\beta > \beta_1$. Dans ce régime de fort désordre, la nature de la transition n'est pas connue et la question reste ouverte [5, 6, 61, 64, 87]. Il est probable que les résultats du désordre faible ne soient plus vrais ici.

1.2.4 Un désordre pertinent

Cette fois, nous nous plaçons dans le cas où $\alpha > 1/2$; la prédiction de Harris annonce que le désordre est pertinent, quel que soit la valeur de β . Autrement dit, du moment que les énergies de liaison entre le polymère et la ligne de défaut sont aléatoires, nous nous attendons à ce que le comportement critique du système *quenched* soit différent de celui du système *annealed*.

La prédiction de Harris, dans ce régime, a aussi été prouvée rigoureusement [2, 3, 11, 35]. Les points critiques *quenched* et *annealed* sont différents (ce qui signifie que l'inégalité 1.15 est stricte) et il existe des bornes sur l'écart entre ces points.

Si $\alpha > 1$, alors quel que soit $\beta < 1$, il existe une constante K telle que :

$$h_c^{(q)}(\beta) - h_c^{(a)}(\beta) \geq K \beta^2. \quad (1.22)$$

Si $1/2 < \alpha \leq 1$, le résultat est moins simple, il a été montré dans [11, 35] que $\forall \eta > 0$, il existe une fonction $a(\eta)$ telle que :

$$h_c^{(q)}(\beta) - h_c^{(a)}(\beta) \geq a(\eta) \beta^{2\alpha/(2\alpha-1)+\eta} \quad (1.23)$$

pour $\beta < 1$.

Donc $\forall \alpha > 1/2$, nous avons l'inégalité stricte pour n'importe quelle quantité de désordre $\forall \beta > 0$:

$$h_c^{(q)}(\beta) > h_c^{(a)}(\beta). \quad (1.24)$$

Ainsi, le désordre (même si il est arbitrairement faible) change le comportement critique du système. Le premier effet est qu'il induit un décalage du point critique. Le deuxième effet est que l'existence d'une borne sur l'énergie libre 1.17 prouve que l'exposant critique, si la transition est aussi une loi de puissance, est modifié. Par ailleurs, la position précise de la transition $h_c^{(q)}(\beta)$ et la valeur de l'exposant critique restent à ce jour des questions ouvertes.

1.2.5 Un désordre marginal

Un autre cas difficile à étudier est celui dit marginal où $\alpha = 1/2$ (soit $c = 3/2$) pour lequel le critère de Harris n'est pas prédictif. La question est donc de savoir si le désordre est encore pertinent ou s'il ne l'est plus. Après avoir créé une longue controverse dans la littérature où Forgacs *et al.* [45, 46, 47] déclaraient que le désordre est marginalement non-pertinent tandis que Derrida, puis Monthus *et al.* [7, 8, 34, 72, 74] soutenaient le contraire, ce point est aujourd'hui résolu de façon rigoureuse.

Dans [35, 54, 56], il est prouvé que le désordre est marginalement pertinent. Cela signifie que les points critiques *quenched* et *annealed* ne coïncident pas. D'ailleurs des bornes ont aussi été trouvées pour minorer l'écart entre les deux points lorsque le désordre est assez faible.

Ainsi, pour toute valeur de β telle que $0 < \beta \leq 1$, il existe une constante C telle que :

$$h_c^{(q)}(\beta) - h_c^{(a)}(\beta) \geq \exp(-C\beta^{-4}) \quad (1.25)$$

lorsque le désordre est pris Gaussien. Puis ce résultat a été amélioré en $\exp(-C(b)\beta^{-b})$ pour un cas général pas forcément Gaussien, avec $C(b) > 0$ pour tout $b > 2$.

Pour résumer ces trois derniers paragraphes et pour conclure sur le modèle d'accrochage (ou de Poland-Scheraga), nous savons aujourd'hui que pour un fort désordre lorsque $\alpha < 1/2$, ou pour un désordre quelconque lorsque $\alpha \geq 1/2$, le point de transition du modèle *quenched* $h_c^{(q)}$ n'est pas connu et le comportement de l'énergie libre non plus lorsque $h \rightarrow h_c^{(q)}$. En particulier, nous ne savons pas comment l'exposant critique dépend de α , si par ailleurs il en dépend.

Face à la difficulté des questions posées, beaucoup d'auteurs ont choisi une représentation simplifiée du système pour faire des conjectures. Cette nouvelle façon de décrire les choses revient à introduire un réseau particulier, appelé réseau *hiérarchique* sur lequel il existe une formule renormalisation exacte pour la fonction de partition, ce qui rend le problème plus simple.

La version hiérarchique des modèles de dénaturation

La version hiérarchique du modèle d'accrochage sur une ligne de défaut permet de conjecturer de manière fiable le comportement critique du système. C'est pour cela qu'un grand nombre d'auteurs abordent le problème sous ce biais.

Nous présenterons d'abord l'intérêt de cette nouvelle représentation, en expliquant comment construire le réseau, puis en montrant qu'il existe une renormalisation exacte de la fonction de partition. Le problème se ramène à une simple suite réelle dans le cas pur, et à une suite de distribution d'une variable aléatoire dans le cas désordonné. Nous définirons et prouverons l'existence de l'énergie libre dans ce contexte.

Nous établirons ensuite une rapide revue des principaux résultats existants dans les deux cas. Le critère de Harris peut être rendu rigoureux : il a été montré dans le cas non-pertinent que les courbes *annealed* et *quenched* sont arbitrairement proches et que les points critiques sont confondus. Dans le cas non pertinent, il existe des bornes supérieure et inférieure sur l'écart entre ces points critiques. Enfin, le cas marginal également été rendu rigoureux : le désordre reste pertinent dans ce régime.

L'un des résultats importants que nous retrouvons ici est que la présence de désordre rend plus lisse la transition : une borne supérieure à l'énergie libre *quenched* proche de la transition a été trouvée. Cela confirme par ailleurs le critère de Harris en montrant que les exposants critiques *annealed* et *quenched* ne peuvent pas être identiques.

2.1 Construction du modèle hiérarchique

En mécanique statistique, les modèles hiérarchiques sur des réseaux en diamant, qu'ils soient homogènes ou désordonnés, sont des outils importants pour l'étude des propriétés critiques (voir [25, 31, 34]). Les réseaux en diamants sont en effet construits de manière à être auto-similaires, ce qui permet une étude itérative par renormalisations successives, les renormalisations étant exactes grâce aux symétries du système. Cela signifie que nous pouvons écrire de façon simple et sans aucune approximation la fonction de partition d'un système de taille $2N$ en fonction de celle d'un système de taille N .

Plus précisément, la version hiérarchique du modèle d'accrochage sur une ligne de défaut a été introduite dans [34] et reprise plus tard par [10, 54, 65, 67, 68, 75, 87]. Il s'agit de représenter les configurations par des trajectoires sur un réseau en diamant construit par itération de la manière suivante. Soit \mathcal{G}_0 le graphe constitué d'une arête reliant deux points A_0 et A_1 . Soit un entier $B \geq 2$, le graphe \mathcal{G}_n est construit à partir du graphe \mathcal{G}_{n-1} en remplaçant chaque arête par B copies de deux arêtes en séries (voir Fig. 5).

Sur le graphe \mathcal{G}_n , tous les chemins qui relient A_0 à A_1 sont équivalents, et de longueur 2^n . Les configurations du polymère sont donc représentées par l'ensemble de ces chemins. Une des trajectoires est néanmoins particulière : Γ_0 jouera le rôle de la ligne de défaut. Cela signifie que si le polymère possède une (ou plusieurs) arête en commun avec Γ_0 , une

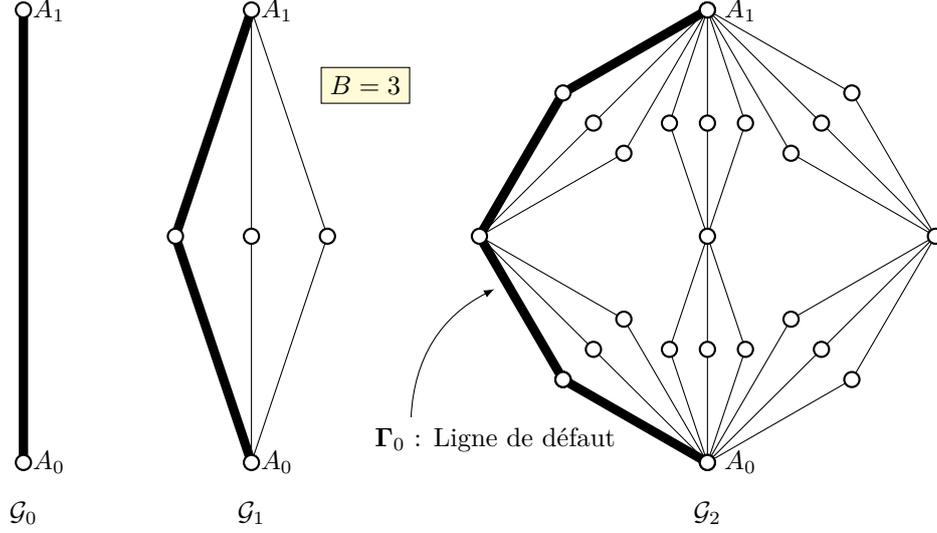


Figure 5: Représentation des deux premières itérations de la construction des graphes hiérarchiques, avec ici $B = 3$. La trajectoire la plus à gauche, avec un trait épais, joue le rôle de la ligne de défaut par analogie avec les modèles d'accrochage.

énergie de liaison est attribuée. Les interactions entre le polymère et la ligne de défaut peuvent être prises homogènes (dans le cas pur) ou aléatoires (dans le cas désordonné).

Si nous introduisons la température inverse β et un champ extérieur h , nous pouvons écrire l'énergie d'une trajectoire Γ , en notant $\{e\}$ les arrêtes communes de Γ_0 et de Γ :

$$H_N(\Gamma) = - \sum_{\{e\}} \left(\varepsilon_e + \frac{h}{\beta} \right) \quad (2.1)$$

de telle sorte que la fonction de partition soit égale à :

$$Z_N(\mathcal{D}) = \sum_{\Gamma} \exp \left(\sum_{\{e\}} (\beta \varepsilon_e + h) \right). \quad (2.2)$$

Le N qui réfère à la taille du système est donc un multiple de 2, nous avons $N = 2^n$ où n est l'indice d'itération. Comme dans la partie précédente, nous présumons (sans perte de généralité) que les énergies ont une distribution fixée de moyenne nulle et de variance égale à 1. Enfin, ce que nous appelons réalisation du désordre \mathcal{D} est ici le tirage qui fixe les énergies de la ligne de défaut Γ_0 .

Remarque : contrairement au modèle d'accrochage, les boucles sont de taille égale à 2^k où $k = 1, 2, \dots, n$ dans cette représentation.

Nous allons voir maintenant que cette structure auto-similaire du réseau nous offre une formule de renormalisation exacte de la fonction de partition. Cela constitue une aide immense car à partir une condition initiale Z_0 , nous serons en mesure de trouver pour n'importe quel n la fonction de partition Z_n pour le système de taille 2^n .

2.2 Le cas pur

Ici, les énergies de liaison ont une valeur certaine, soit $\beta = 0$ dans la description précédente. Nous allons dériver une formule qui permet de calculer la fonction de partition du système après n itérations.

Appelons d'abord Y_n le nombre de trajectoires dans le n -ième réseau. Nous avons la relation de récurrence due à la géométrie du réseau :

$$Y_{n+1} = B Y_n^2.$$

La région de la ligne Γ_0 diffère des $B - 1$ autres régions, ainsi nous pouvons voir avec le graphe que :

$$Z_{n+1} = Z_n^2 + (B - 1)Y_n^2$$

et en faisant la transformation $Z_n \rightarrow Z_n/Y_n$ (qui n'aura pas d'autre conséquence une fois la limite thermodynamique prise que de décaler d'une constante l'énergie libre), nous obtenons la formule de renormalisation de la fonction de partition :

$$Z_{n+1} = \frac{Z_n^2 + B - 1}{B} \quad (2.3)$$

en fonction de B . Il est important de noter ici que cette renormalisation est *exacte*. Nous n'avons fait aucune approximation, c'est la structure auto-similaire du réseau qui fournit une telle récurrence. La valeur de $Z_0 = \exp(h)$ détermine la phase dans laquelle nous nous trouvons.

Notons tout de suite que B fut choisi entier pour construire le réseau, mais que rien n'empêche ici de le supposer réel, tel que $B \geq 1$ (pour que Z_n reste positive). En fait, nous pouvons remarquer que la transformation

$$(Z, B) \rightarrow \left(Z' = \frac{Z}{B-1}, B' = \frac{B}{B-1} \right)$$

laisse inchangée l'itération. Au prix de ce changement de variable, nous pouvons donc nous restreindre à l'intervalle $B \in [1; 2]$ lors de notre étude.

L'utilisation d'un réseau hiérarchique révèle déjà ses simplifications dans le cas pur. Nous avons seulement une suite réelle définie par récurrence à étudier. L'énergie libre se définit naturellement par :

$$f(h) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{\log Z_n(h)}{2^n}. \quad (2.4)$$

La fonction d'itération possède deux points fixes $B - 1$ (stable) et 1 (instable). Comme l'intervalle $[B - 1; +\infty[$ est stable par 2.3 cela implique immédiatement que $f(h) \geq 0$ (et cela restera vrai même en présence de désordre). La détermination de la phase se fait par le choix de la condition initiale. L'expression de la surface critique est ici simplement $Z_0 = 1$, soit $h_c = 0$: c'est le point fixe instable de l'itération. Cela nous permet de distinguer deux phases pour ce système :

$$\begin{aligned} f(h) &= 0 \text{ dans la phase délocalisée si } h \leq 0, \\ f(h) &> 0 \text{ dans la phase localisée si } h > 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

En supposant maintenant que la singularité de $f(h)$ soit en loi de puissance sous la forme

$$f(Z_0) \underset{Z_0 \searrow 1}{\sim} (Z_0 - 1)^\nu,$$

la linéarisation de 2.3 pour Z_n proche du point fixe instable donne

$$Z_{n+1} - 1 \simeq \frac{2}{B}(Z_n - 1),$$

et nous définissons alors l'exposant critique ν du système pur par

$$\nu = \frac{\log 2}{\log 2/B}. \quad (2.6)$$

Il est clair que $\nu > 1$, la transition dans le cas pur est donc d'ordre deux pour n'importe quel choix du paramètre du réseau. Par ailleurs, $\nu = 2$ lorsque B atteint une valeur particulière $B_c = \sqrt{2}$. Si le critère de Harris s'applique ici, nous devrions avoir :

$$\begin{array}{ll} \text{pour } B \in [1; \sqrt{2}[& \text{un désordre pertinent,} \\ \text{pour } B \in]\sqrt{2}; 2] & \text{un désordre non-pertinent,} \\ \text{pour } B = \sqrt{2} & \text{un désordre marginal.} \end{array}$$

Il y a donc une forte analogie entre le rôle joué par B et celui du paramètre de boucle (ou encore le paramètre α). À nouveau, nous trouvons que le désordre joue un rôle différent selon la géométrie choisie pour le problème.

2.3 Le cas désordonné

Considérons maintenant le cas où les énergies ε_i sont aléatoires et *i.i.d.*, la loi d'itération doit être changée dans la mesure où Z_n est maintenant aussi une variable aléatoire. Il suffit de réaliser que la récurrence implique deux différentes valeurs de $Z_n^{(1,2)}$, chacune propre à une réalisation du désordre $\mathcal{D}_1 = \{\varepsilon_1, \varepsilon_2 \dots, \varepsilon_N\}$ et $\mathcal{D}_2 = \{\varepsilon_{N+1}, \varepsilon_{N+2} \dots, \varepsilon_{2N}\}$. L'équation 2.3 s'écrit maintenant :

$$Z_{n+1} = \frac{Z_n^{(1)} Z_n^{(2)} + B - 1}{B} \quad (2.7)$$

avec la condition initiale

$$Z_0^{(i)} = e^{\beta \varepsilon_i + h}.$$

Ainsi, au lieu d'itérer une variable réelle, nous itérons une variable aléatoire. Cela rend le problème plus compliqué, cette fois nous travaillons avec une suite $\rho_n(Z)$ de distributions des variables Z_n . Le problème pourrait être reformulé de la manière suivante : si nous nous donnons une distribution initiale $\rho_0(Z)$, pouvons-nous avoir accès à $\lim_{n \rightarrow +\infty} \rho_n(Z)$?

Une expression de la surface critique sous la forme $G(\rho_0) = 0$ (où G est une fonctionnelle de ρ_0) peut-elle être déterminée ?

2.3.1 Définitions des énergies libres

Par analogie avec la version originale du modèle d'accrochage, nous pouvons définir deux types d'énergies libres et nous démontrerons l'existence de ces fonctions.

- Le cas *annealed* du problème est en fait très simple. La définition de l'énergie libre est la même que précédemment :

$$f^{(a)}(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{\log \langle Z_n \rangle}{2^n} \quad (2.8)$$

il suffit donc de savoir comment se comporte $\langle Z_n \rangle$ pour prendre ensuite la limite thermodynamique $n \rightarrow +\infty$. Or pour un désordre *i.i.d.*, l'itération de la moyenne s'écrit :

$$\langle Z_{n+1} \rangle = \frac{\langle Z_n \rangle^2 + B - 1}{B}$$

ce qui est la même équation que celle du problème pur, avec $\langle Z_0 \rangle = e^h \langle e^{\beta \varepsilon} \rangle$. Les résultats du cas pur nous donnent donc le comportement critique du cas *annealed* du moment que nous remplaçons h par $h + \log \langle e^{\beta \varepsilon} \rangle$.

Par conséquent, l'exposant critique est le même, et le point critique subit juste un décalage :

$$\begin{aligned} h_c^{(a)}(\beta) &= -\log \langle e^{\beta \varepsilon} \rangle \\ \nu^{(a)} &= \frac{\log 2}{\log 2/B}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Remarque : nous pouvons retrouver l'idée du critère de Harris par l'argument suivant (voir [34]). Appelons $\Delta_n = \langle Z_n^2 \rangle - \langle Z_n \rangle^2$ la variance de Z_n , cette grandeur suit la récurrence suivante :

$$\Delta_{n+1} = \frac{\Delta_n(2\langle Z_n \rangle^2 + \Delta_n)}{B^2}.$$

Donc au point critique *annealed*, où $\langle Z_n \rangle = 1$, et pour une distribution initiale de désordre faible ($\Delta_0 \ll 1$), Δ_n est décroissante si $B < \sqrt{2}$. Cela signifie que plus le système grandit, plus le désordre initial se résorbe. La variable Δ_n finit par devenir nulle lorsque $n \rightarrow +\infty$. C'est une façon de voir que le désordre n'est pas pertinent dans ce régime.

Le contraire a lieu lorsque $B > \sqrt{2}$: la distribution a une variance qui est croissante, et l'itération montre qu'elle tendra vers l'infini.

Enfin dans le cas marginal $B = \sqrt{2}$, le désordre semble pertinent car au point critique *annealed* $\Delta_{n+1} = \Delta_n(1 + \Delta_n/2)$. Par conséquent, même avec une quantité infime de désordre initial, nous voyons que la distribution des Z_n a une largeur qui tend vers l'infini quand $n \rightarrow +\infty$. Le désordre ne se résorbe pas sous l'effet des itérations.

Le cas *annealed* sur le réseau hiérarchique se réduit donc au cas pur, il y a simplement un décalage des points critiques que nous pouvons quantifier et expliciter si la distribution initiale le permet.

- L'énergie libre *quenched* est définie par

$$f^{(q)}(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{\langle \log Z_n \rangle}{2^n} = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{\langle X_n \rangle}{2^n} \quad (2.10)$$

en renommant simplement $X_n = \log Z_n$.

L'itération sur les variables X peut être écrite sous la forme :

$$X_{n+1} = X_n^{(1)} + X_n^{(2)} + \log \left(\frac{1 + (B-1)e^{-X_n^{(1)} - X_n^{(2)}}}{B} \right). \quad (2.11)$$

Montrons d'abord que l'énergie libre *quenched* est bien définie. En utilisant la convexité de la fonction d'itération et en utilisant le fait que l'intervalle $X_n \geq \log(B-1)$ soit stable par itération 2.11 (voir [36]), nous tirons l'inégalité de l'itération 2.11 :

$$2\langle X_n \rangle - \log B \leq \langle X_{n+1} \rangle \leq 2\langle X_n \rangle - \log(B-1) \quad (2.12)$$

Cette inégalité montre d'une part que la suite $u_n = 2^{-n}(\langle X_n \rangle - \log B)$ est croissante, et d'autre part que $v_n = 2^{-n}(\langle X_n \rangle - \log(B-1))$ est décroissante. Ces deux suites sont donc convergentes (v_0 majore u_n et u_0 minore v_n) et possèdent la même limite. Cela prouve que la convergence de l'énergie libre d'un système fini vers sa valeur limite est exponentielle :

$$\frac{\langle X_n \rangle - \log B}{2^n} \leq f^{(q)}(\beta, h) \leq \frac{\langle X_n \rangle - \log(B-1)}{2^n}. \quad (2.13)$$

L'inégalité 2.13 redonne en particulier la borne inférieure $0 \leq f^{(q)}(\beta, h)$ en passant à la limite $n \rightarrow +\infty$ à gauche après avoir remarqué que $\langle X_n \rangle \geq \log(B-1)$.

Nous pouvons donc distinguer deux phases distinctes :

$$\begin{aligned} f^{(q)}(\beta, h) &= 0 \text{ dans la phase délocalisée,} \\ f^{(q)}(\beta, h) &> 0 \text{ dans la phase localisée.} \end{aligned} \quad (2.14)$$

et le point critique *quenched* est donc $h_c^{(q)}(\beta) = \sup\{h : f^{(q)}(\beta, h) = 0\}$. Par ailleurs, comme la fonction d'itération 2.11 est croissante et convexe, nous pouvons montrer sans problème par récurrence que l'énergie libre est elle même convexe pour ses deux paramètres (β, h) .

L'énergie libre *annealed*, bien que facile à calculer, apporte un élément de comparaison pour l'énergie libre *quenched*. Nous allons voir dans le prochain paragraphe que les résultats montrés dans le cas des modèles d'accrochage restent vrais dans ce nouveau contexte hiérarchique. La transition est rendue plus lisse par la présence de désordre d'une part, et d'autre part, le critère de Harris peut être rendu explicite avec une estimation de l'écart entre les points critiques.

2.3.2 Comparaison des cas recuit et gelé

Selon la pertinence du désordre, les énergies libres *quenched* ou *annealed* présentent les mêmes propriétés que dans le modèle d'accrochage. Commençons avec la plus simple, l'inégalité de Jensen :

$$f^{(q)}(\beta, h) \leq f^{(a)}(\beta, h)$$

qui implique l'ordre suivant sur les points critiques :

$$h_c^{(q)}(\beta) \geq h_c^{(a)}(\beta).$$

La propriété sur la continuité de la transition de phase reste aussi valable. Pour tout $B \in [1; 2]$, il existe une borne à l'énergie libre *quenched* qui nous assure que la transition en présence de désordre est au moins d'ordre deux. En effet, il est montré dans [65] que $\forall \beta > 0$, il existe une fonction $c(B)$ telle que

$$f^{(q)}(\beta, h) \leq \frac{c(B)}{\beta^2} (h - h_c^{(q)}(\beta))^2. \quad (2.15)$$

La démonstration est très proche dans l'esprit de celle pour le modèle de Poland-Scheraga. Le désordre a donc le même effet de rendre la transition plus *lisse*. En particulier dans le cas où le désordre est pertinent (si $1 < B < \sqrt{2}$), nous savons que nous avons un exposant critique pur $1 < \nu < 2$, donc nous voyons ici que, si il existe, l'exposant du modèle *quenched* vérifie $\nu^{(q)} > \nu$. Ce résultat prouve aussi que les exposants critiques *quenched* et *annealed* diffèrent quand le désordre est pertinent.

En ce qui concerne l'écart entre les points critiques *quenched* et *annealed*, le désordre dans le cas pertinent crée aussi un décalage pour lequel il existe des bornes. Nous distinguons trois cas d'après les articles [54, 55, 67] :

- Si le désordre n'est pas pertinent ($\sqrt{2} < B < 2$) il existe une borne Δ_0 telle que pour une variance de désordre assez petite $\text{var}(X_0) < \Delta_0$, alors

$$h_c^{(q)}(\beta) = h_c^{(a)}(\beta).$$

De plus, pour tout $h > 0$, nous avons

$$(1 - \eta)f^{(a)}(\beta, h) \leq f^{(q)}(\beta, h) \leq f^{(a)}(\beta, h)$$

où η peut être pris arbitrairement petit du moment que β l'est aussi. Les courbes d'énergies libres *quenched* et *annealed* sont donc arbitrairement proches l'une de l'autre aussi dans le cas du réseau hiérarchique.

Idée de la preuve : (voir [55]) définissons la variance réduite $Q_n = \Delta_n / \langle Z_n \rangle^2$ et supposons que nous partions d'une distribution initiale très fine ($Q_0 \ll 1$) et proche du point fixe instable : $\langle Z_0 \rangle - 1 \ll 1$.

Définissons $P_n = \langle Z_n \rangle - 1$. La linéarisation de 2.3 nous permet de voir que la variable P_n croît exponentiellement car $P_n = (2/B)^n P_0$ et reste très petite devant 1 du moment que $n \ll \log P_0 / \log(B/2)$. De plus tant que $P_n \ll 1$, nous avons $Q_{n+1} \simeq 2/B^2(Q_n + Q_n^2/2)$ et donc si la variance initiale est très petite, Q_n décroît exponentiellement vers 0.

Ce scénario va s'arrêter à partir d'un certain entier $n_0 \sim -\log P_0$, quand P_n n'est plus petit devant 1. Au même moment, Q_{n_0} est extrêmement petite et se mettra alors à croître exponentiellement (elle deviendra grande après avoir encore itéré un grand nombre de fois, de l'ordre de n_0). Q_n est encore petite quand P_n est devenu très grand, donc $\langle X_n \rangle$ est très proche de $\log \langle Z_n \rangle$ et par conséquent, en estimant cet écart et en utilisant l'équation 2.13 nous pouvons conclure que les courbes *annealed* et *quenched* sont très proches l'une de l'autre.

- Si le désordre est pertinent ($1 < B < \sqrt{2}$), alors $\forall \beta > 0$,

$$h_c^{(q)}(\beta) > h_c^{(a)}(\beta)$$

et de plus, si $\beta < 1$, alors nous avons des bornes sur l'écart entre le point critique *quenched* et le point critique *annealed* $h^{(a)}(\beta)$, il existe deux constantes c et c' telles que :

$$c \beta^{2/(2-\nu)} \leq h_c^{(q)}(\beta) - h_c^{(a)}(\beta) \leq c' \beta^{2/(2-\nu)}$$

où ν est l'exposant critique du cas pur. Nous voyons que la borne inférieure perd son efficacité lorsque B s'approche du cas marginal en $\sqrt{2}$. En effet, dans ce cas, ν tend vers 2 et le terme de gauche tend vers zéro.

Remarque : il est intéressant de noter que la preuve de l'article [55] fait l'usage de la méthode des moments fractionnaires. Cette méthode permet de montrer que si pour un n_0 donné, la variable Z_{n_0} est suffisamment concentrée autour du point fixe instable 1, alors elle le restera pour tout $n > n_0$ et par conséquent l'énergie libre est nulle. En d'autres mots, la preuve s'appuie sur un critère de transition pour un système de taille finie. Nous aurons également l'usage d'une telle méthode lors d'études numériques.

- Enfin, si le désordre est marginal ($B = \sqrt{2}$), il existe des bornes (inférieure et supérieure) sur l'écart entre les points critiques. D'après [54, 67], pour $\beta < 1$, il existe c_1 et c_2 telles que :

$$\exp\left(-\frac{c_1}{\beta^4}\right) \leq h_c^{(q)}(\beta) - h_c^{(a)}(\beta) \leq \exp\left(-\frac{c_2}{\beta^2}\right)$$

ce qui prouve la pertinence du désordre, via l'inégalité de gauche. Notons par ailleurs que le point critique *quenched* n'a pas été trouvé dans ce cas, ni l'exposant critique (si toutefois il existe).

Récapitulons les principaux faits concernant la comparaison entre les cas *annealed* et *quenched* à l'aide de la figure 6.

Nous avons fait une revue des résultats principaux démontrés ces dernières années autour du sujet initialement introduit par Poland et Scheraga. Bien que le problème fasse partie des plus simples en mécanique statistique à présenter un effet non trivial en présence de désordre, notre connaissance en reste très lacunaire, y compris pour le modèle hiérarchique, censé être plus abordable. Les questions principales sur la localisation du point

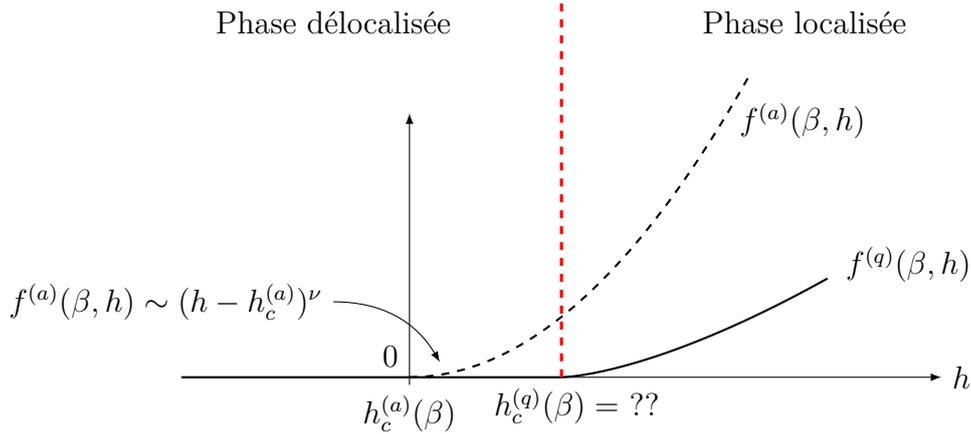


Figure 6: Comparaison des courbes des énergies libres *quenched* et *annealed* à $\beta > 0$ fixé. L'objectif principal est de connaître les caractéristiques de $f^{(q)}(\beta, h)$ proche de la transition. Nous souhaitons savoir s'il existe un exposant critique $\nu^{(q)}$ (égal ou différent de $\nu^{(a)}$) dans le cas d'un désordre pertinent, et connaître la valeur du point critique *quenched* dans le cas où le désordre est pertinent (bien que ce soit sûrement une question très difficile).

critique *quenched* et sur la forme que prend l'énergie libre au voisinage de la transition sont ouvertes et encore débattues aujourd'hui.

Dans la partie suivante, nous franchissons encore un degré de simplification. Nous introduisons un système, que nous avons appelé *Toy-model* dans [36], qui présente la particularité de pouvoir être étudié sur un réseau discret. Autant numériquement qu'analytiquement, ce nouveau système est plus simple. Il existe même un cas particulier résolu de manière exacte dans [25] qui nous a aidé à concrétiser plusieurs hypothèses sur le comportement critique.

Un nouveau modèle simplifié : le *Toy-model*

Bien que le modèle hiérarchique soit plus simple que celui de Poland-Scheraga, de nombreuses questions (principalement sur la transition en régime de fort désordre) sont encore irrésolues. Cela nous a conduit à introduire le *Toy-model* afin de faciliter les études numériques et analytiques. Cette nouvelle représentation consiste à simplifier l'expression de la renormalisation du modèle hiérarchique, cela permet en outre de faire des conjectures numériques précises sur ce qui se passe à la transition.

Dans cette partie, nous présentons le *Toy-model* et ses ressemblances avec le modèle hiérarchique. Nous montrerons qu'il est possible de définir l'énergie libre du système et que le diagramme de phase est similaire aux précédents.

Puis en utilisant une condition initiale particulière très simple, nous définirons une suite de variables réelles $(\lambda_n)_{n \geq 0}$ qui sont les points de pseudo transition pour un système de taille finie. Nous verrons que les λ_n sont des bornes supérieures du λ_c critique de transition pour le système de taille infinie.

Enfin, nous illustrerons par des courbes obtenues numériquement le comportement du système lorsqu'il est proche de la transition, et nous justifierons une conjecture sur l'ordre de la transition par le biais de la vitesse de convergence des $(\lambda_n)_{n \geq 0}$ vers leur limite. Nos résultats numériques nous poussent à croire que ce système a une transition d'ordre infini du type Berezinskii–Kosterlitz–Thouless [62, 63].

3.1 Définition et diagramme de phase

3.1.1 La nouvelle itération

Rappelons sous quelle formule s'écrit la renormalisation du réseau hiérarchique : à chaque fois que le système double de taille, la variable aléatoire d'énergie libre $X_n = \log Z_n$ change de la façon suivante :

$$X_{n+1} = F(X_n^{(1)} + X_n^{(2)}) = X_n^{(1)} + X_n^{(2)} + \log \left(\frac{1 + (B-1)e^{-X_n^{(1)} - X_n^{(2)}}}{B} \right) \quad (3.1)$$

où $B \in [1; 2]$. Les notations $X_n^{(1)}$ et $X_n^{(2)}$ signifient que les deux variables réfèrent à deux réalisations supposées indépendantes du désordre. Nous pouvons remarquer facilement que l'intervalle $[\log(B-1); +\infty[$, est stable par F et que la fonction est croissante et convexe.

Regardons le comportement asymptotique de la fonction d'itération. Lorsque la somme $S = X_n^{(1)} + X_n^{(2)}$ est grande devant $-\log(B-1)$, alors

$$F(S) \sim S - \log B$$

et F devient donc une fonction linéaire. Dans ce régime, la renormalisation se résume donc à la somme de variables *i.i.d.* avec un terme de rappel en $-\log B$. Donc quand B

est proche de 1, le terme de droite dans 3.1 vaut essentiellement 0 partout sauf lorsque S est proche de $2\log(B-1)$.

Ainsi, il y a trois propriétés qui semblent essentielles : l'existence d'un intervalle stable, *i.e.* pour tout $S \geq 2\log(B-1)$, $F(S) \geq \log(B-1)$, le fait que F devienne linéaire lorsque son argument est grand devant $-\log(B-1)$ et enfin que F soit monotone.

Soit a une constante positive fixée qui jouera le rôle de $-\log(B-1)$. Afin de préserver les propriétés précédentes tout en simplifiant le problème, notre nouveau modèle, appelé *Toy-model*, sera défini par la nouvelle itération :

$$X_{n+1} = \max [X_n^{(1)} + X_n^{(2)}, -a]. \quad (3.2)$$

Pour des raisons de simplicité, le paramètre a est choisi entier ; par conséquent si la distribution initiale est aussi répartie sur les entiers, les distributions itérées suivantes le resteront.

Avec cette nouvelle formule, l'intervalle $[-a; +\infty[$ est également stable. L'itération revient donc à faire la somme de deux variables aléatoires indépendantes, sauf lorsque leur somme est plus petite que $-a$. Les probabilités ne peuvent jamais dépasser ce *mur* placé à gauche.

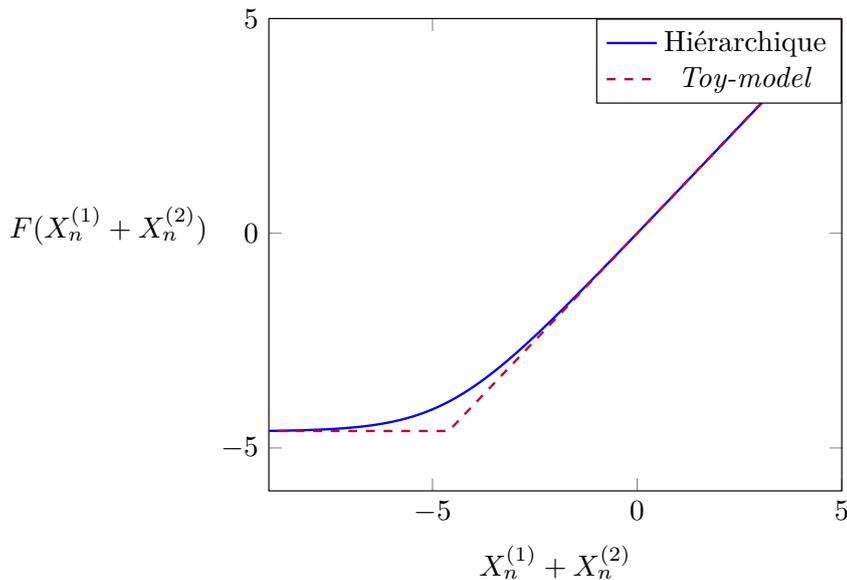


Figure 7: Comparaison des fonctions d'itération entre le cas hiérarchique pour $B = 1.01$ et le cas du *Toy-model*. Les fonctions sont bornées inférieurement par $-a = \log(B-1)$, et lorsque nous nous éloignons suffisamment loin du mur, les deux fonctions dépendent linéairement de la somme $X_n^{(1)} + X_n^{(2)}$. L'écart entre elles vaut $\log B$.

Définissons maintenant l'énergie libre du système par analogie avec 2.10 :

$$f_\infty = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{\langle X_n \rangle}{2^n}. \quad (3.3)$$

On s'attend à observer le diagramme de phase suivant :

$$\begin{aligned} f_\infty &= 0 \text{ dans la phase délocalisée,} \\ f_\infty &> 0 \text{ dans la phase localisée.} \end{aligned} \quad (3.4)$$

La problématique se formule de la même manière qu'avant : que doivent vérifier les différentes distributions initiales $P_0(X)$ des variables X_0 pour être dans une phase ou dans l'autre ?

Remarque : La distribution initiale des X_0 est essentiellement la même chose que la distribution des énergies de liaison que nous avons notée $\rho(\varepsilon)$ précédemment, effectivement $X_0^{(i)} = \beta\varepsilon_i + h$. Ainsi, décider de la distribution du désordre revient bien à fixer une condition initiale pour $P_0(X)$ dans notre problème reformulé.

Le cas pur de ce problème est encore plus simple que celui du réseau hiérarchique. Pour la distribution initiale, il correspond au choix d'un pic de Dirac, si nous appelons h la valeur de l'énergie :

$$P_0(X) = \delta(X - h).$$

Il est facile de voir que la transition sera du premier ordre :

$$\begin{aligned} f_\infty(h) &= 0 \quad \text{si } h \leq 0, \\ f_\infty(h) &= h \quad \text{si } h > 0, \end{aligned} \quad (3.5)$$

en effet la dérivée de f_∞ sera discontinue en 0. Par conséquent, nous pouvons remarquer que puisque l'exposant critique pur vaut 1 (indépendamment de la position du mur en $-a$), le désordre sera toujours pertinent pour ce modèle d'après le critère de Harris.

3.1.2 Existence de l'énergie libre

Nous devons nous assurer que l'énergie libre pour ce système existe telle qu'elle est définie dans 3.3. L'inégalité suivante (qui suit l'esprit de la démonstration pour le modèle hiérarchique) est facilement démontrable :

$$2\langle X_n \rangle \leq \langle X_{n+1} \rangle \leq 2\langle X_n \rangle + a. \quad (3.6)$$

L'inégalité de gauche est évidente en prenant la moyenne dans 3.2, et pour celle de droite il suffit de remarquer que

$$X_{n+1} + 2a = \max [X_n^{(1)} + X_n^{(2)} + 2a, a] \leq X_n^{(1)} + X_n^{(2)} + 3a.$$

En effet, puisque $X_n \geq -a$, le maximum est forcément inférieur à la somme de ses deux arguments car ils sont tous les deux positifs.

L'inégalité 3.6 démontre donc que les deux suites $u_n = 2^{-n}\langle X_n \rangle$ et $v_n = 2^{-n}(\langle X_n \rangle + a)$ sont respectivement croissante et décroissante. Or, comme $X_n \geq -a$, il est clair que $v_n \geq 0$ et donc que la suite est convergente. De plus comme nous avons $u_n \leq v_n \leq v_0 = \langle X_0 \rangle + a$, alors u_n est aussi convergente. Par conséquent u_n et v_n convergent et tendent vers la même limite qui définit l'énergie libre du système.

3.2 Un critère de transition pour le système fini

Pour simplifier la discussion et pour réduire la paramétrisation du problème, nous choisissons la condition initiale particulière suivante :

$$P_0(X) = (1 - \lambda) \delta(X + 1) + \lambda \delta(X - 1) \quad (3.7)$$

où λ est compris entre 0 et 1. Nous adoptons donc le point de vue d'une distribution binaire, comme s'il y avait seulement deux énergies de liaison possibles ($\beta\varepsilon_i = \pm 1$ et $h = 0$), et le paramètre λ sert à fixer la probabilité de tirer l'une ou l'autre.

Bien sûr, avec une telle distribution, nous ne pourrions pas décrire toute la surface critique. Néanmoins, c'est une façon simple de réduire le problème à un unique paramètre, et de décrire localement la surface critique. Après la discussion sur le cas pur, nous savons que si $\lambda = 0$, alors $f_\infty = 0$ et que si $\lambda = 1$, alors $f_\infty = 1$. Or comme $\langle X_n \rangle$ est une fonction croissante et continue de λ pour tout n (cela se montre simplement par récurrence avec 3.2), $f_\infty(\lambda)$ est aussi croissante et continue et nous nous attendons à une transition de phase pour un certain λ_c . En effet, la convergence de la suite de fonction est uniforme car $\sup(|f_\infty - 2^{-n}\langle X_n \rangle|) \leq a 2^{-n}$.

Nous pouvons approfondir cette discussion en définissant une suite de valeurs particulières de λ qui correspondent à des pseudos transitions pour un volume fini.

Si λ est tel que pour tout n , $\langle X_n \rangle_\lambda \leq 0$ alors, $f_\infty(\lambda) = 0$ car nous avons toujours $-a \leq \langle X_n \rangle \leq 0$.

D'autre part, supposons que λ soit choisi tel qu'il existe un n pour lequel $\langle X_n \rangle_\lambda = y$ où $y > 0$. L'inégalité 3.6 permet de voir que pour tout $m > 0$

$$2^m y \leq \langle X_{n+m} \rangle \leq 2^m y + (2^m - 1)a,$$

et nous pouvons montrer en passant à la limite $m \rightarrow \infty$ que

$$\frac{y}{2^n} \leq f_\infty \leq \frac{y+a}{2^n}. \quad (3.8)$$

Cela montre en particulier que $0 < f_\infty$: nous sommes donc dans la phase localisée.

Nous venons donc de voir que dans le cas désordonné, si pour un λ donné il existe un n tel que $\langle X_n \rangle > 0$, alors nous savons d'ores et déjà que nous sommes dans la phase localisée (λ est donc une borne supérieure de λ_c). Cela nous pousse naturellement à définir la suite des λ_n telles que

$$\langle X_n \rangle_{\lambda_n} = 0. \quad (3.9)$$

Propriété : les λ_n sont des bornes supérieures de λ_c . Nous pouvons utiliser l'inégalité de gauche dans 3.6. Cette inégalité est stricte $2\langle X_n \rangle < \langle X_{n+1} \rangle$ dès lors que la distribution $P_n(X)$ a un poids non nul réparti sur les $X < 0$ ce qui est le cas si $\langle X_n \rangle_{\lambda_n} = 0$ en présence de désordre (donc avec une variance non nulle). Par conséquent, $\langle X_{n+1} \rangle_{\lambda_n} > 0$, et nous sommes bien dans la phase localisée :

$$\lambda_n \geq \lambda_c.$$

Prouvons maintenant que la suite des $(\lambda_n)_{n \geq 0}$ possède une limite λ_∞ . Nous avons déjà une borne inférieure, en l'occurrence λ_c . De plus, comme $2^{-n} \langle X_n \rangle_\lambda$ est croissante selon n et selon la variable λ , par continuité, la suite des λ_n doit être décroissante et cela permet de conclure que la limite existe et que $\lambda_c \leq \lambda_\infty$.

Prouvons maintenant que la limite est effectivement le point critique. Rappelons que $\lambda_c = \sup\{\lambda, f_\infty(\lambda) = 0\}$. Si nous avions $f_\infty(\lambda_\infty) > 0$, alors il devrait exister un rang N tel que pour tout $n > N$ nous ayons $\langle X_n \rangle_{\lambda_\infty} > 0$, or cela est impossible puisque $\lambda_\infty \leq \lambda_n$ et que par définition $\langle X_n \rangle_{\lambda_n} = 0$. Par conséquent $f_\infty(\lambda_\infty) = 0$ et donc

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \lambda_n = \lambda_c. \quad (3.10)$$

Nous venons donc de prouver que la suite des λ_n constituait un critère de transition pour le système de taille finie, et que la limite est précisément sur la surface critique. Nous allons voir dans la suite que la vitesse de convergence est liée à l'ordre de la transition.

Généralisation : nous pouvons aussi définir les suites $\mu_n(y)$ pour des $y \geq 0$ telle que

$$\langle X_n \rangle_{\mu_n(y)} = y \quad (3.11)$$

où évidemment $\mu_n(0) = \lambda_n$. Nous prouverions par les mêmes arguments le résultat sur la limite, quel que soit $y \geq 0$:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \mu_n(y) = \lambda_c.$$

3.3 Premières observations numériques

3.3.1 Illustration du diagramme de phase

La simplicité du *Toy-model* et le fait qu'il soit possible de l'étudier sur les entiers font de lui un modèle propice à une approche numérique.

Donnons une description rapide de cette étude numérique. Pour simplifier cette discussion, a sera pris égal à 1 dans cette partie. Avec la distribution initiale 3.7 proposée précédemment, il est évident que les X_n ne prendront que des valeurs entières ; l'ensemble des points $(-1, 0, 1, 2, \dots)$ est donc stable par l'itération 3.2. Néanmoins nous sommes techniquement contraints à fermer la fenêtre à droite sur une valeur limite, notée a' . Le nombre total de points sur la grille vaut donc $N = a' + 2$.

Ainsi à chaque itération, le vecteur de probabilité $(p_n^{(-1)}, p_n^{(0)}, p_n^{(1)}, p_n^{(2)}, \dots, p_n^{(a')})$ défini sur l'espace de travail va être transformé et devenir $(p_{n+1}^{(-1)}, p_{n+1}^{(0)}, p_{n+1}^{(1)}, p_{n+1}^{(2)}, \dots, p_{n+1}^{(a')})$ selon la loi 3.2.

Nous sommes conscients du fait que réduire l'intervalle d'étude à un intervalle fini peut modifier la dynamique. À chaque étape, une certaine partie des probabilités est censée être attribuée à des sites non représentés (dont l'indice est strictement supérieur à a') et se retrouve donc perdue. Nous n'avons pas trouvé de méthode rigoureuse pour remédier à cette erreur, néanmoins nous pouvons argumenter que si a' est pris assez grand et que la distribution initiale est proche de la surface critique, la densité de probabilité doit être concentrée sur des sites proches du mur (car la moyenne doit être négative). La perte de

probabilité est donc très faible et nous pouvons le vérifier quantitativement en calculant à chaque fois l'écart entre $\sum_{-1 \leq i \leq a'} p_n^{(i)}$ et 1.

Il est aussi possible de décider qu'à chaque itération, toutes les probabilités données à des sites non représentés (pour $i > a'$) sont réattribuées au site a' , ce qui conserve les probabilités. Cette méthode a néanmoins l'inconvénient de créer des points fixes artificiels, dont nous parlerons plus tard.

Commençons par illustrer diagramme de phase 3.5 lorsque nous prenons pour condition initiale la distribution 3.7. Si nous regardons $p_n^{(-1)}$ la probabilité du site -1 (ou encore sur le *mur*), nous remarquons que deux comportements sont possibles quand $n \rightarrow +\infty$.

- Soit $p_n^{(-1)} \rightarrow 1$ dans ce cas, nous sommes dans la phase délocalisée car $f_\infty = 0$.
- Soit $p_n^{(-1)} \rightarrow 0$ et dans ce cas nous sommes dans la phase localisée car $f_\infty > 0$.

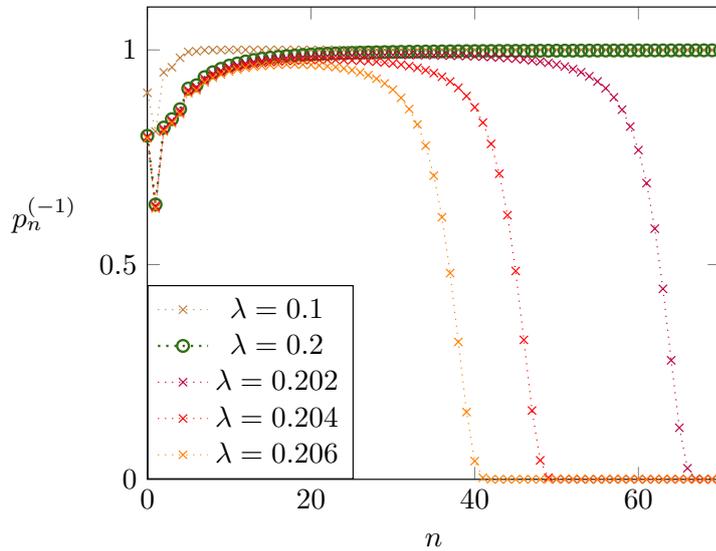


Figure 8: Comparaison du comportement de $p_n^{(-1)}$ en fonction de n pour différentes valeurs de λ . La courbe $\lambda = 0.2$ est particulière, elle correspond exactement au cas critique si $a = 1$. Nous verrons plus loin que l'écart à 1 diminue en $\mathcal{O}(1/n^2)$. Pour cette figure, la valeur limite de fenêtre vaut $a' = 2000$.

Ici, et nous verrons pourquoi plus tard, la valeur critique est $\lambda_c = 0.2$. Plus les λ sont choisis proches de cette valeur, plus le nombre d'itérations qu'il faut faire avant de voir la probabilité $p_n^{(-1)}$ chuter vers 0 est grand. Cette observation est à mettre en parallèle avec la suite des λ_n : plus nous attendons longtemps avant d'avoir $\langle X_n \rangle \geq 0$, plus nous sommes proches de la surface critique.

Ce que nous dit la figure 8, c'est que pour les trois $\lambda > 0.2$, alors $f_\infty > 0$: nous sommes dans la phase localisée, et à l'inverse pour $\lambda = 0.1$, alors $f_\infty = 0$: nous sommes dans la phase délocalisée.

Remarque : bien sûr, cette valeur particulière $\lambda = 0.2$ n'est critique que pour cette distribution initiale précise, avec le mur en -1 et pour un $a' \rightarrow \infty$. Si nous décidions de changer la valeur de a , tout en gardant la même distribution de départ, la valeur critique de λ ne serait plus la même.

3.3.2 Conjecture sur l'ordre de la transition de phase

Dans cette partie, nous nous intéressons particulièrement à la suite des λ_n et à son comportement asymptotique. Nous allons voir numériquement que cette suite converge vers sa limite avec une loi de puissance :

$$\lambda_n - \lambda_c = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (3.12)$$

Remarque : la méthode utilisée pour trouver une valeur de λ_n est la suivante (pour les $\mu_n(y)$, la méthode est la même). Nous prenons la distribution initiale 3.7 avec un λ pris entre 0 et 1 et nous itérons n fois, puis nous calculons la moyenne $\langle X_n \rangle$. Si cette dernière est positive alors nous savons que $\lambda > \lambda_n$. Ainsi par dichotomie, nous pouvons nous approcher de plus en plus de λ_n en recommençant l'opération un nombre suffisant de fois pour des valeurs initiales de λ de plus en plus finement choisies.

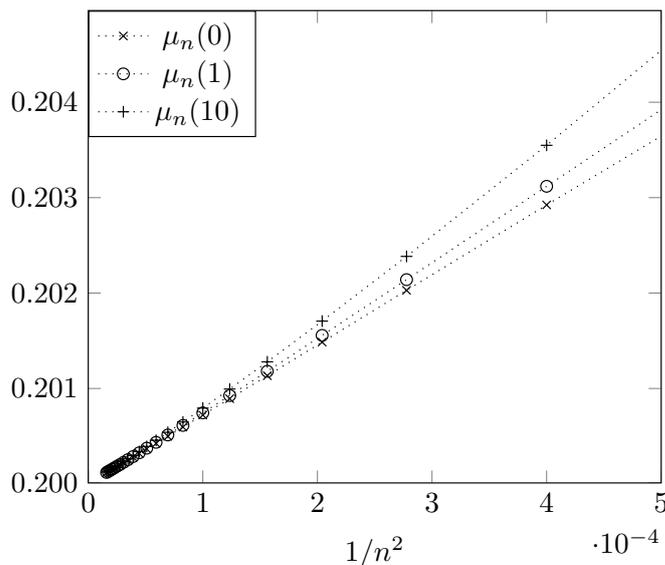


Figure 9: Valeurs de $\mu_n(y)$ solutions de 3.11, pour $y = 0, 1$ et 10 . Comme indiqué dans 3.13, la convergence vers λ_c se fait avec une amplitude A qui ne dépend pas de y (sur la figure, A est la pente à l'origine, commune aux trois courbes). Pour cette figure aussi, la valeur limite de fenêtre vaut $a' = 2000$.

Ce résultat signifie donc que si L est la taille du système, les corrections de taille finie à λ_c sont en $\lambda_L - \lambda_c \sim (\log L)^{-2}$. Ce résultat n'est pas usuel. Nous allons voir en quoi cela suggère une transition d'ordre infini.

Numériquement il semble clair que comme pour 3.12, nous avons pour tout $y \geq 0$ une convergence en

$$\mu_n(y) - \lambda_c \sim \frac{A}{n^2}. \quad (3.13)$$

L'inégalité 3.8 associée à 3.13 montre que pour n grand, $\mu_n(y)$ est proche de λ_c , et que nous devons avoir un comportement en :

$$f_\infty(\mu_n(y)) \sim \exp\left(-\frac{\sqrt{A} \log 2}{\sqrt{\mu_n(y) - \lambda_c}}\right). \quad (3.14)$$

L'énergie libre ne présenterait donc pas une loi de puissance à la transition, mais une singularité essentielle. Cette conjecture découle des observations numériques. Ce qui importe est de constater la corrélation entre la vitesse de convergence de 3.12, et le fait de ne pas trouver une loi de puissance pour le comportement de l'énergie libre proche de la transition.

Remarque : si nous avons trouvé une convergence exponentielle $\mu_n(y) - \lambda_c \sim Ke^{-Cn}$, nous pourrions nous convaincre par les mêmes arguments que f_∞ présenterait alors une loi de puissance $f_\infty \sim (\mu_n(y) - \lambda_c)^\gamma$ avec $\gamma = \log 2/C$.

En principe, la constante A pourrait dépendre du choix de y . Nous pouvons cependant argumenter que ce n'est pas le cas. Par exemple, si y est très grand, changer d'un facteur 2 sa valeur n'a pour effet que de changer n en $n + 1$. En effet, lorsque la distribution est localisée loin du mur sur des X positifs, itérer revient à faire une somme de deux variables *i.i.d.*, donc la moyenne est multipliée par 2 à chaque fois.

Ainsi pour des n grands, nous nous attendons à ce que dans 3.14, la constante A soit indépendante de y . Par conséquent lorsque $\lambda \rightarrow \lambda_c$, nous avons :

$$f_\infty(\lambda) \sim \exp\left(-\frac{\sqrt{A} \log 2}{\sqrt{\lambda - \lambda_c}}\right). \quad (3.15)$$

La transition serait donc d'ordre infini, du type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [62, 63]. Autrement dit, toutes les dérivées de l'énergie libre ont une limite nulle à droite de λ_c . Nous ne verrons aucune divergence bien qu'il y ait une singularité. Cela contraste en particulier avec les transitions de phase en loi de puissance. Ce résultat est par ailleurs en accord avec les prédictions de [87].

Dans la partie suivante, nous voulons appuyer les prédictions établies jusqu'à présent en donnant davantage d'éléments numériques en faveur d'une transition de phase d'ordre infini. Cela sera l'occasion de refaire le lien avec le réseau hiérarchique, en montrant que la conjecture reste valable également dans ce cas.

Les résultats numériques en faveur d'une transition d'ordre infini

Dans cette partie nous allons exposer plusieurs résultats obtenus numériquement qui sont en accord avec la conjecture sur l'ordre de la transition pour le *Toy-model*.

Nous verrons dans un premier temps que la vitesse de convergence des bornes supérieures λ_n vers la valeur critique limite λ_c ne dépend pas de la position du mur à gauche (en $-a$). Puis, nous regarderons la dépendance des valeurs critiques en fonction de a , et lorsque a devient grand, nous observons que $\lambda_c(a)$ tend vers $1/2$ avec un comportement en $1/a$.

Par la suite, nous verrons un deuxième moyen pour vérifier l'hypothèse d'une transition d'ordre infini. Cela consiste à regarder $\log(f_\infty)^{-2}$, et de vérifier que la fonction s'annule linéairement proche d'une valeur critique. Avec cette méthode nous verrons que changer la position du mur ou la forme de la distribution initiale ne fait pas changer la nature de l'énergie libre proche de la transition : la singularité essentielle est toujours présente.

Dans le cas où $a = 1$, l'expression exacte et complète de la surface critique a été trouvée par Collet *et al.* (voir [25]) dans un autre contexte. Nous nous servirons de ce résultat pour examiner le comportement limite des distributions lorsque nous sommes sur la surface critique. Nous observons aussi une loi d'évolution des probabilités en $1/n^2$ vers le point fixe stable.

Enfin, dans le dernier paragraphe, nous nous assurons que le modèle d'accrochage sur le réseau hiérarchique répond aux mêmes conclusions que le *Toy-model*, dans le cas où le désordre est pertinent et que ça n'est plus le cas dans un régime où le désordre n'est pas pertinent.

4.1 Observation d'une transition d'ordre infini dans le cas du *Toy-model*

4.1.1 Convergence des bornes vers la valeur critique

Nous avons vu dans la partie précédente en quoi la convergence en une loi de puissance des bornes supérieures λ_n vers la valeur critique pour un système de taille infinie λ_c pouvait être la signature d'une transition d'ordre infini.

Sur la figure 10 nous illustrons pour plusieurs valeur de a cette convergence en $1/n^2$, avec la même distribution initiale $P_0(X) = (1 - \lambda)\delta(X + 1) + \lambda\delta(X - 1)$. La transition semble effectivement ne pas changer de nature lorsque nous varions le paramètre a , bien que la valeur du λ_c en dépende. Bien sûr quand a devient très grand, nous nous attendons à ce que λ_c tende vers $1/2$. Nous pouvons aussi noter que la pente à l'origine A change avec a dans la relation 3.13.

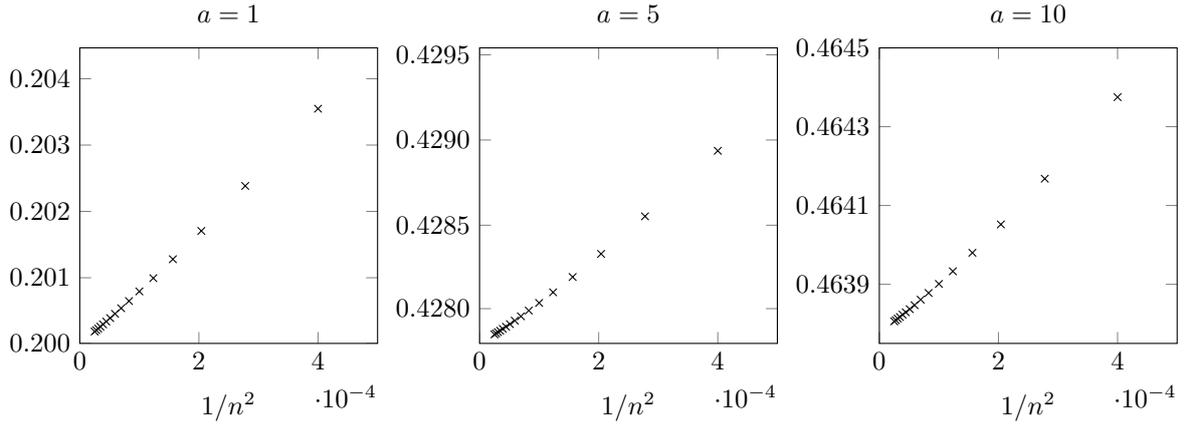


Figure 10: Les bornes supérieures λ_n solutions de 3.9 pour différentes valeurs de a et pour $n = 10, 20, \dots, 200$. Mise à part la pente à l'origine, ces courbes ont le même comportement en $1/n^2$ pour n'importe quel a .

4.1.2 Variation de λ_c en fonction de a

Dans un deuxième temps, sur la figure 11 nous calculons les valeurs approchées de λ_c en fonction de la position du mur en $-a$. En prenant un n assez grand, λ_n constitue une bonne approximation de la valeur critique.

Nous pouvons observer que lorsque a devient grand, alors

$$a(1 - 2\lambda_c) \sim 0.72. \quad (4.1)$$

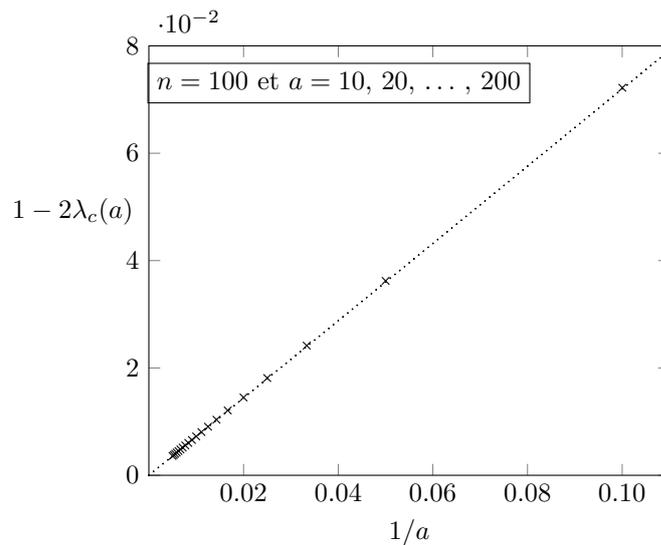


Figure 11: Dépendance des λ_c avec a pour le choix de distribution initiale 3.7. Ici, λ_c est approchée par λ_n pour $n = 100$, nous savons que l'écart entre les deux valeurs est de l'ordre de 10^{-4} . La courbe semble parfaitement linéaire même pour des valeurs de a peu élevées.

Remarque : la valeur 0.72 de la constante dans 4.1 n'est pas universelle, elle dépend de la variance de la distribution initiale utilisée.

Le résultat 4.1 peut être compris à l'aide d'arguments simples. Considérons une distribution initiale $P_0(X)$ et ses deux premiers moments :

$$\int P_0(X)X dX = \mu \quad \text{et} \quad \int P_0(X)X^2 dX = \mu^2 + \sigma.$$

Pour un a donné, nous caractérisons la surface critique par la relation entre la moyenne et la variance : $\mu_c(a, \sigma)$.

Un simple changement d'échelle $a \rightarrow sa$ donne par analyse dimensionnelle que

$$\mu_c(sa, s^2\sigma) = s \mu_c(a, \sigma).$$

D'autre part, si a est très grand et que nous avons $\sigma \ll a^2$, alors en valeurs absolues $\mu_c \ll a$. Itérons une fois la distribution prise sur la surface critique, comme elle est localisée loin du mur en $-a$, la moyenne et la variance sont essentiellement multipliées par un facteur 2, ce qui permet d'écrire sur les quantités itérées que $\tilde{\mu}_c(a, \tilde{\sigma}) = 2\mu_c(a, \sigma/2)$. Donc plus généralement :

$$\mu_c(a, s\sigma) = s \mu_c(a, \sigma).$$

En réunissant les deux dernières propriétés, nous parvenons à montrer lorsque a est grand que la loi d'échelle suivante est vérifiée

$$\mu_c \sim \frac{\sigma}{a}.$$

Avec la distribution initiale binaire 3.7, nous avons $\langle X_0 \rangle = 2\lambda - 1$, donc sur la surface critique nous devons effectivement avoir le résultat 4.1.

4.1.3 Une singularité essentielle

Il existe un autre moyen assez direct de vérifier que l'énergie libre prend localement la forme 3.15 lorsqu'on prend par exemple la distribution initiale 3.7. En effet, si la relation 3.15 est vraie, la fonction $\log(f_\infty)^{-2}$ est censée s'annuler linéairement lorsque nous nous approchons de λ_c .

Sur la figure 12, nous représentons pour plusieurs valeurs de n la fonction $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)^{-2}$ en fonction de λ pour $a = 1$. Dans cette situation nous savons que $\lambda_c = 0.2$, mais dans un cas plus général où a est différent de 1, cette méthode présente l'avantage d'être applicable sans avoir besoin de connaître en avance la valeur de λ_c .

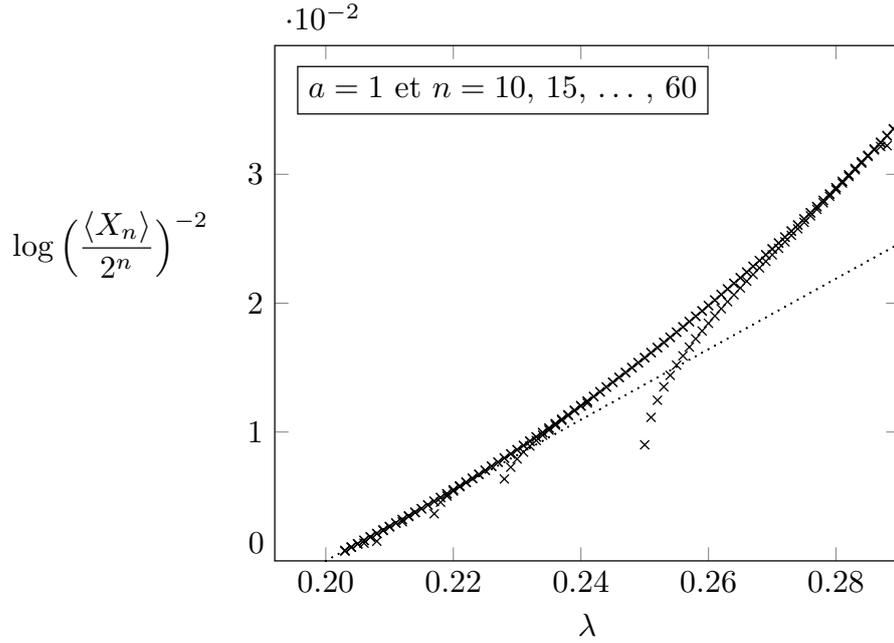


Figure 12: $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)^{-2}$ en fonction de λ dans le cas $a = 1$ pour plusieurs valeurs de n . L'enveloppe commune des courbes s'annule linéairement quand $\lambda \rightarrow \lambda_c$, ce qui est en accord avec notre idée d'une transition d'ordre infini 3.15. La droite tangente à la courbe en λ_c (en pointillés) a une pente égale à $1/(A \log(2)^2)$, où le A correspond à la pente à l'origine pour les courbes 10.

Les régions où les courbes $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)^{-2}$ se superposent pour plusieurs valeurs de n forment une enveloppe commune. Cette dernière ne dépend donc pas de la taille du système et nous donne une image partielle de $\log(f_\infty)^{-2}$.

Remarque 1 : nous remarquons sur la Fig. 12 que les courbes pour des n finis s'écartent de l'enveloppe commune. Pour l'expliquer nous devons nous rappeler que pour un n donné la courbe $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)^{-2}$ s'annule (et devient singulière) en λ_n . Or nous avons vu que les λ_n étaient plus grands que λ_c , ce qui explique le décrochage des courbes du système de taille finie.

Remarque 2 : pour ce système, une loi de puissance $f_\infty(\lambda) \sim (\lambda - \lambda_c)^\nu$ ne semble pas appropriée pour décrire la transition. Sur la figure 13 nous avons tracé $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)$ en fonction de $\log(\lambda - \lambda_c)$ pour plusieurs valeurs de n . Nulle part l'enveloppe commune semble présenter un comportement linéaire.

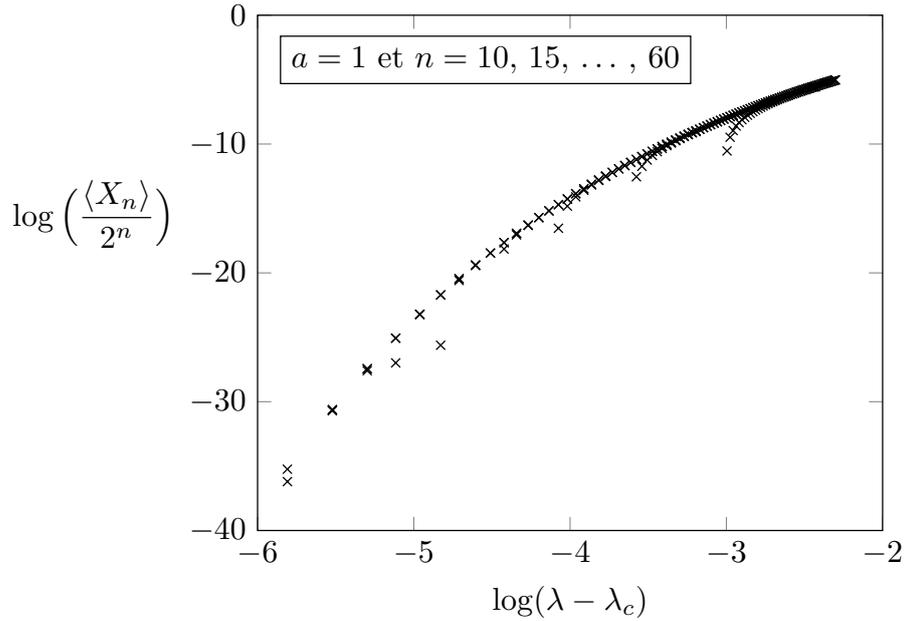


Figure 13: $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)$ en fonction de $\log(\lambda - \lambda_c)$ dans le cas $a = 1$. L'enveloppe commune des courbes n'est pas linéaire quand $\lambda \rightarrow \lambda_c$: une loi de puissance ne serait pas appropriée.

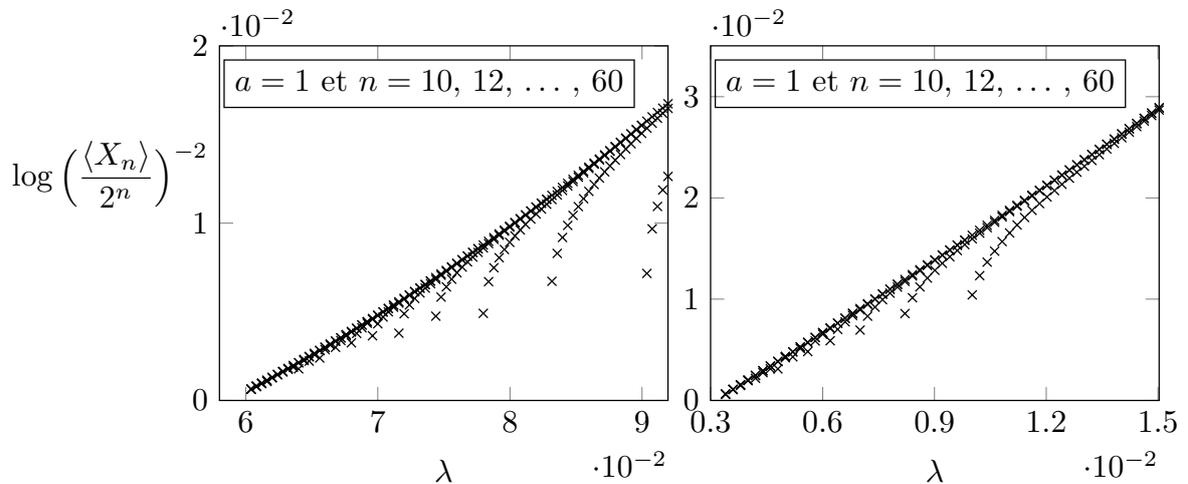


Figure 14: $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)^{-2}$ en fonction de λ dans le cas $a = 1$ pour deux conditions initiales modifiées. À gauche, nous partons avec $P_0(X) = (1 - \lambda)\delta(X + 1) + \lambda\delta(X - 2)$ et à droite avec $P_0(X) = (1 - \lambda)\delta(X + 1) + \lambda\delta(X - 5)$.

Remarque : nous pouvons nous poser la question du choix de la condition initiale. Depuis le début de la discussion, nous prenons une distribution du type 3.7. En réalité, cela n'a pas d'influence. Le raisonnement de la partie précédente utilisé pour définir les λ_n n'utilise jamais la forme précise de la condition initiale. Nous pouvons observer en figure 14 qu'un autre choix (toujours pour $a = 1$) conduit au même comportement de l'énergie libre proche du point critique. D'ailleurs, nous verrons dans la suite que des distributions

limites émergent lorsque nous sommes sur la surface critique, et que cette forme limite ne dépend pas du choix de distribution initiale (par exemple la distribution en double pic delta n'a rien d'essentiel).

4.2 Sur la surface critique

4.2.1 Une décroissance en $1/n^2$

Dans le contexte des verres de spins, Collet *et al.* [24, 25] ont étudié l'effet d'une renormalisation de Migdal-Kadanoff sur les couplages aléatoires entre spins. La question centrale concernait l'évolution de ces couplages effectifs sous l'effet d'un changement d'échelle du système. L'un de leurs modèles les a conduits à la même renormalisation que celle du *Toy-model*.

Dans le cas où $a = 1$, nous avons accès à l'expression exacte de la surface critique. C'est l'occasion de voir comment évolue aux grands n n'importe quelle distribution initialement sur la surface critique. Nous avons noté que cette évolution semblait ne pas dépendre de la forme précise de la condition initiale, nous prendrons par simplicité la distribution 3.7 avec $\lambda = 0.2$.

En figure 15, nous regardons $1 - p_n^{(-1)}$ dans le but de savoir à quelle vitesse cette quantité tend vers 0.

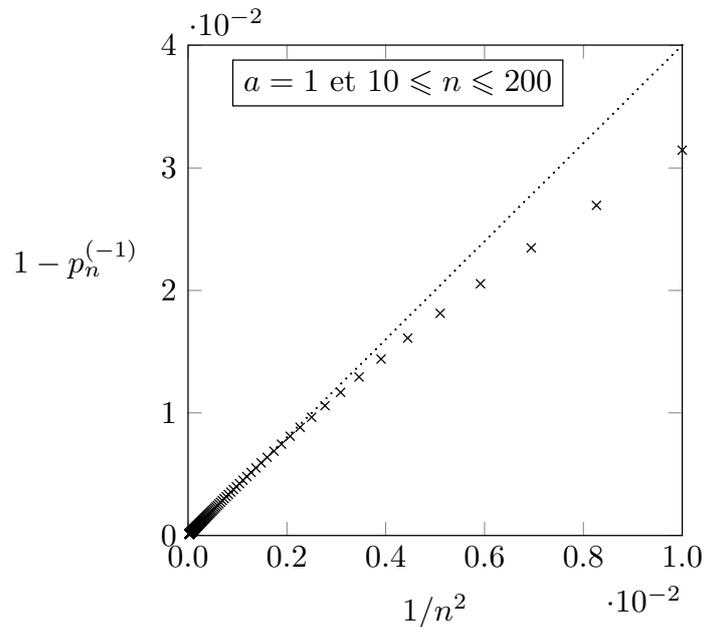


Figure 15: Pour $a = 1$ et $\lambda_c = 0.2$ dans 3.7, nous traçons $1 - p_n^{(-1)}$ pour n grand. La tangente en pointillés a pour équation $4/n^2$.

Sans ambiguïté, la figure 15 montre que la probabilité d'être en -1 varie sur la surface critique aux grands n comme

$$1 - p_n^{(-1)} \sim \frac{4}{n^2}. \quad (4.2)$$

Ce résultat est sûrement à mettre en parallèle avec la vitesse de convergence des bornes λ_n dans l'équation 3.12. Néanmoins, cela n'est *a priori* pas évident d'avoir cette correspondance car les deux objets sont différents.

Ici, nous sommes *sur* la surface critique, et le résultat 4.2 nous montre qu'il y a une évolution en loi de puissance vers un point fixe pur $P_*(X) = \delta(X + 1)$. D'ailleurs, le fait de voir évoluer la distribution sur la surface critique lors d'une renormalisation suggère qu'il n'y a pas de point fixe et rappelle les transitions de type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [62, 63].

Quant aux valeurs des λ_n , elles étaient définies par des équations de pseudo transition pour un volume fini, et constituaient des bornes supérieures pour la valeur critique λ_c . Donc c'est une suite qui réfère à des situations où nous sommes *hors* de la surface critique. Une question intéressante serait de savoir pourquoi les deux vitesses de convergence de λ_n et de $p_n^{(-1)}$ sont les mêmes.

En fait, la dépendance de $p_n^{(-1)}$ en fonction de n 4.2 n'est pas spécifique au site sur lequel nous nous plaçons. Nous pouvons voir qu'au premier ordre, pour tout $k > -1$, nous avons

$$p_n^{(k)} \sim 2^{-k+1}/n^2$$

pour des n grands. Plus précisément, lorsque nous sommes sur la surface critique, l'évolution se fait vers un type de distribution telle que pour $k > -1$

$$p_n^{(k)} 2^k = R_n(k) \underset{n \rightarrow +\infty}{\simeq} \frac{2 e^{-2k/n}}{n^2}. \quad (4.3)$$

Ce résultat ne dépend en outre pas de la condition initiale. Nous pouvons justifier le choix de $R_n(k)$ par le résultat numérique en figure 16. La forme que prend la fonction $R_n(k)$ aux grands n sera retrouvée analytiquement dans la partie suivante. Nous verrons que les équations de renormalisation conduisent à une expression locale de la surface critique et redonnent une évolution en $1/n^2$.

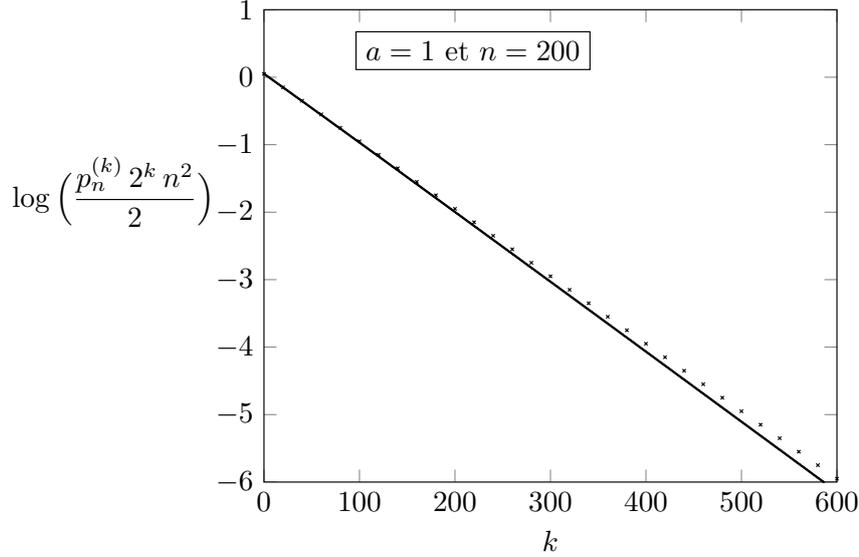


Figure 16: $\log\left(\frac{p_n^{(k)} 2^k n^2}{2}\right)$ en fonction de l'indice k , pour un n donné, avec la condition initiale 3.7 prise sur la surface critique. Nous voyons sur cette courbe que la pente n'est pas exactement égale à $-2/n$ (représentée par la courbe en pointillés) mais plutôt $-2/(n - n_0)$ où $n_0 \simeq 7$. Cela s'explique par le fait que la distribution met plusieurs itérations avant de prendre la forme asymptotique 4.3, d'où le décalage.

4.2.2 Des points fixe artificiels

A première vue, sur la surface critique, l'ensemble de la distribution varie en $1/n^2$ lors des renormalisations. Par ailleurs, d'après [25] les seuls points fixes de l'itération dans le cas $a = 1$ sont les distributions $\delta(X + 1)$, $\delta(X)$ et $\delta(X - \infty)$. Il n'y aurait donc pas de point fixe accessible (*i.e.* avec toutes les $p_n^{(k)} \geq 0$) dans un cas désordonné, ni d'orbite périodique.

Numériquement, nous sommes néanmoins forcés de délimiter la fenêtre de travail pour avoir un nombre fini de points. En nommant a' la valeur maximale à droite, l'itération s'écrit en pratique

$$X_{n+1} = F\left(X_{n-1}^{(1)} + X_{n-1}^{(2)}\right) \quad \text{avec} \quad F(X) = \begin{cases} -a & \text{si } X \leq -a \\ X & \text{si } -a \leq X \leq a' \\ a' & \text{si } X > a'. \end{cases} \quad (4.4)$$

Ainsi a' joue le rôle d'un *cut-off* pour les grandes valeurs de X . Nous montrerons dans la partie suivante que du moment que a' est fini, alors il existe une distribution fixe instable accessible au système. Cette distribution disparaît en prenant la limite $a' \rightarrow \infty$. L'apparition d'une distribution fixe instable laisse prédire des exposants. Il est d'ailleurs possible que le point fixe trouvé dans [75] pour le réseau hiérarchique soit un artefact similaire à celui dont nous parlons ici.

Ainsi en prenant une valeur petite $a' = 18$, nous voyons émerger un point fixe pour une valeur de λ assez proche de $\lambda_c = 0.2$ (celle attendue pour le système où $a' = +\infty$).

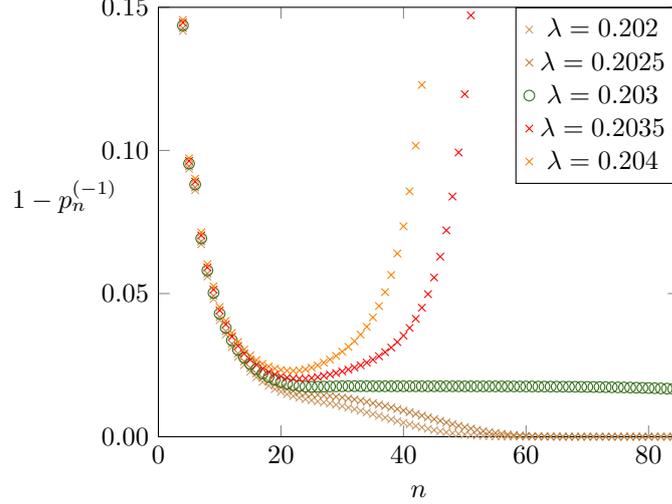


Figure 17: $1 - p_n^{(-1)}$ en fonction de n pour plusieurs valeurs de λ dans la distribution initiale 3.7. Ici la valeur limite à droite est égale à $a' = 18$ (pour un total de $N = 20$ points sur la grille).

Imposer un *cut-off* pour les grandes valeurs de X change donc les conclusions sur l'existence d'un point fixe et donc sur la transition d'ordre infini. Néanmoins, nous constatons que ce point fixe disparaît lorsque $a' \rightarrow \infty$. Pragmatiquement, pour une simulation numérique, prendre une grande valeur de a' et vérifier la coïncidence entre les courbes obtenues pour $a'/2$ et $2a'$ est un moyen de s'assurer que les résultats se décorrèlent de cet artefact.

4.3 Une transition d'ordre infini pour le modèle hiérarchique

Nous terminons ce chapitre dédié à nos résultats numériques par un paragraphe concernant le réseau hiérarchique. Il s'agit ici de s'assurer que le comportement critique du *Toy-model* coïncide bien avec celui du modèle hiérarchique, pour un désordre fort.

Rappelons que sur le réseau hiérarchique, la variable d'énergie libre $X = \log Z$ s'itère de la manière suivante :

$$X_{n+1} = X_n^{(1)} + X_n^{(2)} + \log \left(\frac{1 + (B - 1)e^{-X_n^{(1)} - X_n^{(2)}}}{B} \right) \quad (4.5)$$

et pour faire le lien avec ce qui précède nous appellerons

$$a = -\log(B - 1).$$

Nous avons déjà vérifié que l'intervalle $X_n > -a$ est stable. Par ailleurs le critère de Harris prédit que pour $a > -\log(\sqrt{2} - 1) \simeq 0.88137$ alors le désordre est pertinent, alors que pour $0 < a < -\log(\sqrt{2} - 1)$, une quantité suffisamment faible de désordre n'est pas pertinente.

Nous allons voir que pour un désordre pertinent, nos données montrent aussi une transition de phase d'ordre infini, tandis que pour un désordre non pertinent, nous verrons que la transition est similaire au cas pur, avec une singularité en loi de puissance.

4.3.1 Avec un désordre pertinent

Contrairement au *Toy-model* dans le cas où $a = 1$, le point critique *quenched* n'est pas connu pour le modèle sur réseau hiérarchique. Toutefois, nous pouvons calculer de la même façon que précédemment une suite de bornes supérieures λ_n . Rappelons d'abord l'inégalité 2.12 :

$$2\langle X_n \rangle - \log B \leq \langle X_{n+1} \rangle \leq 2\langle X_n \rangle - \log(B - 1)$$

qui est vraie pour $1 < B < 2$. Par les mêmes arguments, avec une distribution initiale binaire $P_0(X) = (1 - \lambda) \delta(X + 1/2) + \lambda \delta(X - 1/2)$, les valeurs de λ_n telles que

$$\langle X_n \rangle_{\lambda_n} = \log(B) \tag{4.6}$$

sont des bornes supérieures de la valeur critique λ_c . Ici la distribution est volontairement choisie avec deux pics centrés en $\pm 1/2$ pour pouvoir l'utiliser également dans le cas non pertinent, avec $a < 0.88137$.

Nous traçons sur la figure 18 la suite λ_n en fonction de $1/n^2$ dans le régime pertinent, avec $a = 2$. Nous observons un comportement très similaire à celui du *Toy-model* en figure 9, la convergence des bornes supérieures est aussi en $1/n^2$.

Nous pouvons aussi tracer pour plusieurs n la fonction $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)^{-2}$ en fonction de λ , sans avoir besoin de la valeur de λ_c . Nous trouvons en figure 18 un comportement linéaire proche du point critique, comme sur la figure 12.

Ces deux courbes confirment les similitudes entre le *Toy-model* et le modèle hiérarchique. Elles sont aussi en accord avec la conjecture faite sur l'ordre de transition faite par Tang et Chaté [87]. Cela permet aussi de voir qu'à la transition, le détail de la fonction d'itération ne semble pas avoir d'importance : que ce soit dans le *Toy-model* ou sur le modèle hiérarchique, l'énergie libre présente une singularité essentielle.

Remarque : ici, contrairement au *Toy-model*, il n'existe pas de distribution initiale qui reste concentrée sur les entiers après itération. Pour remédier à cela, nous travaillons sur un réseau de pas DX fixé et assez petit, ainsi qu'une valeur limitante a' à droite.

Une distribution concentrée sur n'importe quel réseau n'a pas de raison d'y rester après une itération car chacune d'entre elles multiplie le nombre possible de valeurs de X accessibles. Nous avons donc utilisé une interpolation linéaire pour ramener chaque nouvelle valeur de X sur le réseau de points. Au prix de cet effort, nous rendons donc la grille de points $(-a, -a + DX, -a + 2DX, \dots, a')$ stable par itération.

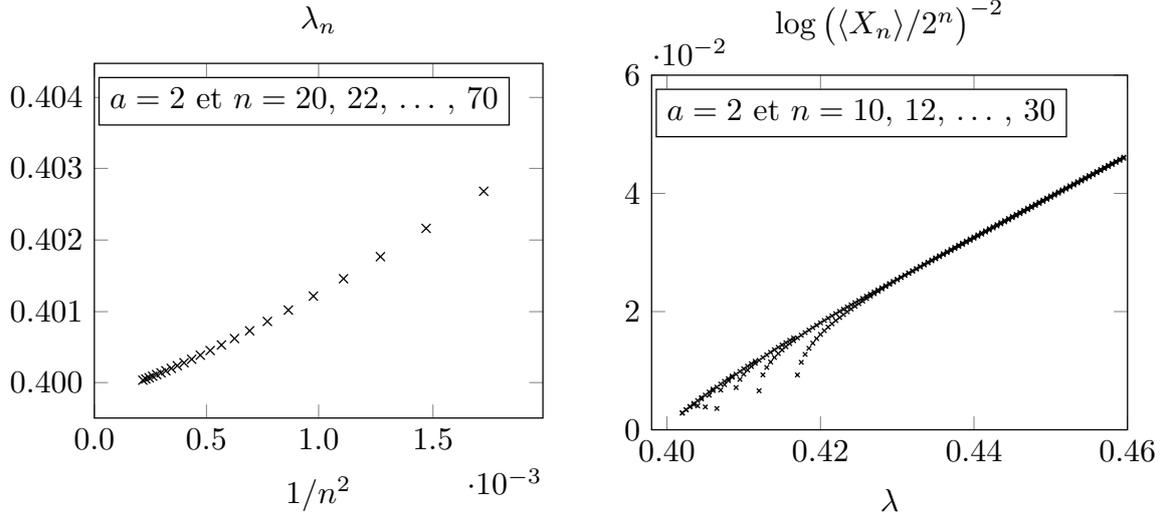


Figure 18: Ces deux graphes correspondent au cas $a = 2$ sur le réseau hiérarchique pour lequel le désordre est pertinent selon le critère de Harris. La distribution initiale est un double pic $P_0(X) = (1 - \lambda)\delta(X + 1/2) + \lambda\delta(X - 1/2)$. Nous retrouvons bien la convergence en $1/n^2$ des λ_n et la singularité essentielle de l'énergie libre.

4.3.2 Avec un désordre non pertinent

Avec $a = 0.7$, nous nous attendons en vertu du critère de Harris, à voir un comportement différent car le désordre n'est plus pertinent. Les courbes d'énergies libres *annealed* et *quenched* sont censées être arbitrairement proches et les points critiques identiques.

Ainsi, avec la distribution initiale $P_0(X) = (1 - \lambda)\delta(X + 1/2) + \lambda\delta(X - 1/2)$, nous devrions voir que $\lambda_c = \lambda_c^a$, ce dernier étant donné par l'équation $\langle e^{X_0} \rangle = 1$. Donc

$$\lambda_c^a = \frac{1 - e^{-1/2}}{e^{1/2} - e^{-1/2}} \simeq 0.37754.$$

Il faut aussi s'attendre à observer à la transition une loi de puissance dont l'exposant est donné par le modèle pur : $\nu = \log(2)/\log(2/B)$.

La figure 19 montre que pour $a = 0.7$ la convergence des bornes λ_n n'est pas en $1/n^2$. À gauche, nous traçons $\log(\lambda_n - \lambda_l)$ où $\lambda_l = 0.37752$ est presque égale à λ_c^a (la légère différence est due à la discrétisation du réseau et à la taille finie de la fenêtre de travail). Nous pouvons comparer la pente de la courbe avec celle de la droite tracée en traits pleins sur Fig.19 de coefficient directeur égal à $\ln 2/\nu$ où $\nu = \log(2)/\log(2/B)$ avec $B = 1.496$. À droite, l'enveloppe commune des courbes $\log(\langle X_n \rangle / 2^n)$ pour différents n en fonction de $\log(\lambda - \lambda_c^a)$ est bien linéaire. Elle a une pente environ égale à 2.387, ce qui correspond à la valeur de l'exposant pur ν . Cela montre que les énergies libres *quenched* et *annealed* ont le même exposant critique.

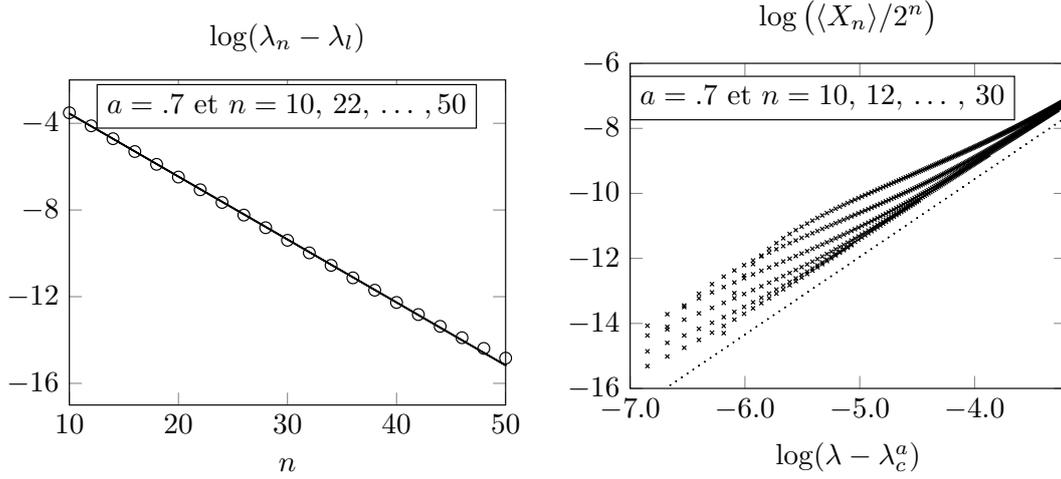


Figure 19: Ces deux graphes correspondent au cas $a = 0.7$ pour lequel le désordre n'est pas pertinent. La distribution initiale est un double pic $P_0(X) = (1 - \lambda)\delta(X + 1/2) + \lambda\delta(X - 1/2)$.

Conclusions sur l'ensemble des résultats numériques : la possibilité d'avoir une transition de phase d'ordre infini est claire pour le *Toy-model* ainsi que pour le modèle sur réseau hiérarchique. Cela rejoint en particulier la prédiction de Tang et Chaté [87].

Que nous soyons très proche ou exactement sur la surface critique, un type de distribution limite apparaît 4.3 : ces dernières attribuent un poids très proche de 1 au site situé en -1 (on peut généraliser facilement si le mur est en $-a < -1$), et distribuent le reste de façon exponentiellement décroissante sur le réseau. Nous avons vérifié que lorsque nous sommes sur la surface critique, la probabilité de ne pas être sur le site en -1 vaut $4/n^2$ (pour $a \neq 1$, la valeur 4 n'est plus correcte) au premier ordre.

Cette décroissance particulière en loi de puissance coïncide avec celle des bornes supérieures λ_n bien que les situations en question soient différentes.

Dans la prochaine partie, nous réaliserons un travail analytique en partant des distributions du type 4.3 afin de retrouver la décroissance asymptotique en $1/n^2$ sur la surface critique. Nous serons en mesure de trouver une expression locale de la surface critique.

Arguments analytiques en faveur d'une transition d'ordre infini

Dans cette partie, nous engageons un travail analytique sur le *Toy-model*, où nous prendrons un a entier quelconque et des distributions réparties sur les entiers. Plusieurs questions sont abordées dans cette partie.

Premièrement, après avoir introduit un autre formalisme via la fonction génératrice, nous montrerons qu'il n'y a pas de point fixe en dehors des attracteurs triviaux du cas pur. Cela signifie que nous ne pouvons pas trouver de distribution dans un cas avec désordre qui ne varie pas lors d'une renormalisation, y compris sur la surface critique.

Il existe pourtant un type de distributions limites qui varient peu lors d'une itération. En limitant notre approche à des distributions du type $p_n^{(k)} = v \phi^k R_n(uk)$ où u et v sont de petits paramètres, il est possible de trouver perturbativement une équation de renormalisation pour la fonction R_n . En paramétrant cette fonction, nous retrouverons des équations caractéristiques d'une transition d'ordre infini du type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [62, 63]. Ces résultats nous donneront accès à une expression "locale" de la surface critique, et lorsque nous nous plaçons sur cette dernière, nous trouvons une dépendance en $1/n^2$, en accord avec les prédictions numériques exposées dans la partie précédente.

Nous pousserons aussi le calcul perturbatif un ordre plus loin pour obtenir une expression plus fine de la surface critique.

Enfin, nous terminerons sur une discussion à propos des points fixes artificiels observés numériquement. Lorsque l'itération est tronquée à droite par une valeur a' , nous pouvons trouver par le calcul une famille de distributions fixes accessibles au système. Cet effet est probablement à l'origine de ce que nous observions numériquement et qui semblaient contradictoire avec notre idée d'une transition d'ordre infini. En fait, ces points fixes disparaissent si nous prenons la limite $a' \rightarrow +\infty$.

5.1 Introduction de la fonction génératrice

Dans le problème du *Toy-model* avec un a entier, le choix d'une distribution initiale $P_0(X)$ localisée sur les entiers implique que les distributions des systèmes renormalisés $P_n(X)$ sont aussi sur les entiers. Nous ferons ce choix dans toute cette partie. Par conséquent les distributions que nous regardons sont toutes de la forme :

$$P_n(X) = \sum_{k \geq -a} p_n^{(k)} \delta(X - k). \quad (5.1)$$

Rappelons l'expression de la renormalisation de la variable aléatoire d'énergie libre sur le *Toy-model* 3.2 :

$$X_{n+1} = \max \left[X_n^{(1)} + X_n^{(2)}, -a \right].$$

Cette itération peut se lire directement sur les probabilités des sites du réseau d'entiers en écrivant :

$$\begin{aligned} p_{n+1}^{(k)} &= \sum_{q=-a}^{k+a} p_n^{(q)} p_n^{(k-q)} \quad \text{pour } k > -a \\ p_{n+1}^{(-a)} &= \sum_{q_1=-a}^0 \sum_{q_2=-a}^{-a-q_1} p_n^{(q_1)} p_n^{(q_2)} . \end{aligned} \quad (5.2)$$

Par conséquent si nous introduisons la fonction génératrice $H_n(z)$:

$$H_n(z) = \sum_{k \geq -a} p_n^{(k)} z^{a+k} \quad (5.3)$$

la transformation s'écrit alors :

$$H_{n+1}(z) = \frac{H_n^2(z) - Q_n(z)}{z^a} + Q_n(1) \quad (5.4)$$

où $Q_n(z)$ est le polynôme de degré $a - 1$ obtenu en gardant les a premiers coefficients du développement de $H_n^2(z)$ en $z = 0$:

$$H_n^2(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \beta^{(k)} z^k \quad \Rightarrow \quad Q_n(z) = \sum_{k=0}^{a-1} \beta^{(k)} z^k . \quad (5.5)$$

$H_n(z)$ est une fonction génératrice : les probabilités de chacun des sites se trouvent dans les dérivées successives en zéro. C'est donc une écriture très synthétique, qui contient toute l'information de la distribution après un nombre arbitraire de renormalisations. Nous pouvons en extraire aussi les moments de la distribution, $\langle X_n \rangle = H'_n(1) - 1$, $\langle X_n^2 \rangle = H''_n(1) - H'_n(1) + 1$, etc...

Regardons comment interpréter le diagramme de phase en fonction de H . Lorsque nous sommes dans la phase délocalisée, l'ensemble du poids statistique est localisé sur le mur en $-a$, ici cela correspond à la situation où $H_n(z) \rightarrow 1$ pour tout $|z| \leq 1$, quand n tend vers l'infini.

La phase délocalisée correspond au cas où les probabilités peuplent des sites à l'infini, donc $H_n(z) \rightarrow 0$ sur l'intervalle $z \in [0; 1[$. Enfin, le point critique du cas pur correspond au point fixe instable $H_n(z) = z^a$ de la transformation 5.4.

Quels sont les scénarios les plus simples que nous pourrions observer dans le régime où le désordre est fort ⁵ ?

Pour les phénomènes critiques en présence d'un désordre fort, la première possibilité est d'observer un nouveau point fixe instable $H_c(z)$ correspondant à la transition. Cela implique l'existence d'un exposant critique associé à la valeur propre répulsive du problème linéarisé autour de ce point fixe $H_c(z)$. Nous verrons plus loin qu'il n'est pas possible ici d'observer un point fixe accessible en présence de désordre (par accessible nous entendons une distribution fixe avec des poids non négatifs sur tous les sites).

La seconde possibilité est d'avoir une transition d'ordre infini sans point fixe, avec des équations de renormalisation du type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [62, 63]. Jusqu'ici, nos études numériques vont clairement dans ce sens là.

⁵Un fort désordre peut désigner deux situations différentes : soit nous sommes dans le régime où le désordre est pertinent selon Harris, soit nous n'y sommes pas, mais le désordre initial est suffisamment fort pour ne pas se résorber et le considérer aussi comme pertinent.

5.2 Les points fixes de l'itération

Dans cette partie, nous allons répertorier les points fixes de l'itération. Dans le cas pur, ils sont triviaux : deux sont attractifs et représentent chacun l'une des deux phases stables dans lequel le polymère peut se trouver. Le troisième est instable et sépare les deux bassins d'attractions. En présence de désordre, nous allons voir qu'il n'existe plus de point fixe instable accessible.

5.2.1 Le cas $a = 1$

Dans ce cas, l'itération sur la fonction H s'écrit :

$$H_{n+1}(z) = \frac{H_n^2(z) - H_n(0)^2}{z} + H_n(0)^2.$$

Cette itération a déjà été étudiée dans un travail de Collet *et al.* réalisé dans un contexte de verres de spins [24, 25]. Ils ont montré en particulier qu'il n'y a pas d'autre point fixe accessible que $H(z) = 0$, $H(z) = z$ et $H(z) = 1$ et que l'expression de la surface critique, sous réserve que $H(z)$ soit analytique sur le disque $|z| < 2$, est

$$H(2) - 2H'(2) = 0. \quad (5.6)$$

Cette surface dans l'espace des probabilités $p^{(k)}$ sépare le bassin d'attraction du point fixe $H(z) = 0$ (phase localisée) de celui de $H(z) = 1$ (phase délocalisée). Bien que les attracteurs soient triviaux, la façon dont nous les approchons l'est beaucoup moins.

Lorsque nous sommes exactement sur la surface critique, montrons que $H_n(z)$ ne peut pas tendre vers 0 dans ce cas.

L'équation de la surface critique 5.6 s'écrit en terme des probabilités :

$$p_n^{(-1)} = \sum_{k=1}^{\infty} k 2^{k+1} p_n^{(k)}$$

donc il existe une borne inférieure triviale à $p_n^{(-1)}$:

$$p_n^{(-1)} > 4 \sum_{k=1}^{\infty} p_n^{(k)}.$$

Si nous combinons ceci au fait que la somme des probabilités vaut 1, il vient :

$$p_n^{(0)} > \max \left[0; 1 - \frac{5p_n^{(-1)}}{4} \right].$$

En écrivant que $p_{n+1}^{(-1)} = p_n^{(-1)^2} + 2p_n^{(-1)}p_n^{(0)}$, nous trouvons alors une borne inférieure pour la probabilité $p_n^{(-1)}$:

$$p_{n+1}^{(-1)} > p_n^{(-1)^2} + 2p_n^{(-1)} \max \left[0; 1 - \frac{5p_n^{(-1)}}{4} \right].$$

Traçons maintenant le graphe de la fonction $y \mapsto y^2 + 2y \max \left[0; 1 - 5y/4 \right]$ pour $0 \leq y \leq 1$:

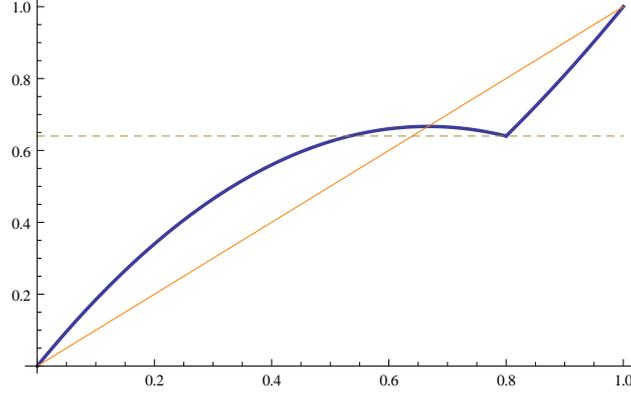


Figure 20: Borne inférieure pour $p_n^{(-1)}$. La courbe bleue est celle de la fonction $y \mapsto y^2 + 2y \max \left[0; 1 - 5y/4 \right]$. La ligne en pointillée est à l'ordonnée $16/25$. Nous voyons que quelle que soit la condition initiale, nous nous rapprochons toujours de l'intersection entre la courbe de la fonction et la droite $y = x$, située à l'abscisse $2/3$, et à une ordonnée plus grande que $16/25$.

Nous voyons donc avec la figure 20 qu'au bout d'un certain nombre d'itérations, $p_n^{(-1)} > 16/25$. Cette technique pourrait d'ailleurs être généralisée pour donner des bornes inférieures plus fines. Cela prouve en particulier que $H_n(z)$ ne peut pas tendre vers 0 sur la surface critique.

Un autre résultat de [25] est que sur la ligne critique (*i.e.* si $H_0(2) = 2H'_0(2)$ et si $H_0(z)$ est analytique sur le disque $|z| < 2$) nous avons pour des grands n le comportement asymptotique :

$$1 - H_n(0) \sim \frac{4}{n^2} \quad (5.7)$$

ce que nous avons déjà observé numériquement (car $H_n(0) = p_n^{(-1)}$) et que nous retrouverons plus tard avec notre approche perturbative.

Remarque 1 : avec la distribution en double pic 3.7 pour laquelle $H_0(z) = (1 - \lambda) + \lambda z^2$, nous vérifions bien avec 5.6 que $\lambda_c = 1/5$, en accord avec nos observations numériques.

Remarque 2 : la condition qui oblige $H_0(z)$ à être analytique sur le disque $|z| < 2$ est évidemment respectée pour n'importe quelle condition initiale dont le support est fini (c'est le cas où $H_0(z)$ est un polynôme). Elle pourrait néanmoins ne pas l'être si la variable aléatoire X_0 pouvait prendre un nombre infini de valeurs.

5.2.2 Le cas $a > 1$

Prenons maintenant un a entier au moins égal à 2. L'expression complète de la surface critique qui viendrait généraliser 5.6 n'est malheureusement pas connue. Nous allons néanmoins montrer que les seuls points fixes de l'itération sont $H_*(z) = 0$ (phase localisée), $H_*(z) = 1$ (phase délocalisée) et $H_*(z) = z^a$ (point fixe instable du cas pur).

Si $H_*(z)$ est un point fixe, du fait de l'itération 5.4, il doit obéir à l'équation :

$$H_*(z) = \frac{z^a \pm \sqrt{\Delta(z)}}{2}$$

avec

$$\Delta(z) = z^{2a} + 4Q_*(z) - 4z^a Q_*(1) \quad (5.8)$$

où le polynôme Q_* est défini par 5.5. Il est clair que si les $p^{(k)}$ sont non négatives, alors les $\beta^{(k)}$ issues du développement en $z = 0$ de $H^2(z)$ le sont aussi.

Montrons d'abord que $\Delta(z)$ ne s'annule pas sur l'axe réel positif.

- Si $|z| \leq 1$, alors en écrivant que

$$\Delta(z) = z^{2a} + 4 \sum_{k=0}^{a-1} \beta_*^{(k)} (z^k - z^a)$$

il est évident que $\Delta(z) > 0$ sur l'axe réel en dehors de zéro.

- Pour $|z| \geq 1$, en utilisant le fait que $\sum_{k=-a}^{\infty} p^{(k)} = 1 = \sum_{k=0}^{\infty} \beta^{(k)}$ nous pouvons réécrire $\Delta(z)$ comme :

$$\Delta(z) = z^{2a} \sum_{k=a}^{\infty} \beta_*^{(k)} + \sum_{k=0}^{a-1} \beta_*^{(k)} (z^a - 2)^2 + 4 \sum_{k=0}^{a-1} \beta_*^{(k)} (z^k - 1)$$

et dans ce cas aussi, $\Delta(z) > 0$.

Prouvons maintenant que $\sqrt{\Delta(z)}$ est forcément un polynôme. Raisonnons par l'absurde, si ce n'est pas un polynôme alors $H_*(z)$ est une série entière possédant un nombre infini de coefficients non nuls. Or comme nous cherchons une distribution accessible, les coefficients de $H_*(z)$ sont tous positifs ou nuls et le rayon de convergence R est supérieur ou égal à 1 car $|H_*(z)| \leq \sum p_*^{(k)} |z^k| \leq 1$ pour $|z| \leq 1$.

Le théorème de Pringsheim [43] affirme qu'une série à coefficients tous positifs ou nuls a sa singularité de plus petit module située à l'intersection de l'axe des réels positifs et de son cercle de convergence. La singularité de plus petit module de $H_*(z)$ est donc exactement égale à R .

Mais comme $\Delta(z) > 0$ sur l'axe des réels positifs, la fonction $\sqrt{\Delta(z)}$ y est régulière et la singularité de plus petit module de $H_*(z)$ ne peut pas s'y trouver, ce qui contredit l'hypothèse de départ.

Par conséquent, $\sqrt{\Delta(z)}$ est forcément un polynôme. L'équation 5.8 et le fait que $Q_*(z)$ soit un polynôme de degré $a - 1$ imposent que $Q_*(z) = Q_*(1)^2$ ce qui implique que $Q_*(z) = 0$ ou $Q_*(z) = 1$. Par conséquent, 5.8 autorise deux possibilités : $\Delta(z) = z^{2a}$ ou $\Delta(z) = (z^a - 2)^2$ ce qui donne $H_*(z) = 0$, $H_*(z) = 1$ ou $H_*(z) = z^a$.

Pour conclure ce paragraphe, nous avons vu que pour n'importe quel a entier, la renormalisation 5.4 ne présente pas d'autre point fixe que $H_*(z) = 0$, $H_*(z) = 1$ ou $H_*(z) = z^a$. Ces distributions ont des variances nulles, ce sont des points fixes purs. La transition en présence de désordre n'a donc pas de point fixe.

Remarque : lorsque la taille de la fenêtre est limitée à droite, nous avons vu en figure 17 qu'un point fixe pouvait émerger. Nous aurons l'occasion plus tard de reparler de cette question, liée à l'existence d'une famille de points fixes non accessibles pour le système (c'est-à-dire avec des probabilités négatives).

5.3 Une approche perturbative

5.3.1 Les équations de renormalisation

Il est difficile de calculer analytiquement l'énergie libre f_∞ par itérations successives en partant d'une distribution initiale quelconque $P_0(X)$. Notre approche se limite à un type de distribution qui varie assez peu par renormalisation. Pour un a entier quelconque, et $k > -a$, nous prenons :

$$p_n^{(k)} = v \phi^k R_n(uk) \quad (5.9)$$

et

$$p_n^{(-a)} = 1 - \sum_{k > -a} p_n^{(k)}. \quad (5.10)$$

Dans l'expression 5.9, u et v sont deux paramètres petits, la fonction $R_n(x)$ est supposée lisse et ϕ est une constante positive qui vérifie

$$2\phi^a = 1. \quad (5.11)$$

Cette relation s'impose si l'on souhaite que la distribution varie peu lors d'une renormalisation. Évidemment ϕ est plus petite que 1 et traduit la décroissance exponentielle de la distribution que nous avons observée numériquement, le coefficient de décroissance dépend bien de la position du mur.

La raison principale du choix 5.9 est que pour une distribution initiale quelconque proche de la surface critique, nous observons que la renormalisation conduisait à des fonctions de ce type après quelques itérations, puis évoluait lentement en gardant cette forme un certain temps avant de changer plus rapidement selon si nous nous trouvions à gauche ou à droite de la surface critique.

Nous avons donc bien une distribution très concentrée en $-a$. En effet, la normalisation des probabilités donne au premier ordre en u :

$$p_n^{(-a)} = 1 - v \frac{2\phi}{1-\phi} R_n(0) + v \mathcal{O}(u). \quad (5.12)$$

En utilisant la formule d'Euler-Maclaurin lorsque nous prenons $v = \mathcal{O}(u^2)$, nous pouvons voir que la distribution garde sa forme lors d'une renormalisation, avec un changement de la fonction R_n donné par :

$$R_{n+1}(x) = R_n(x) + u a \frac{dR_n(x)}{dx} + \frac{v}{u} \int_0^x R_n(x-x_1) R_n(x_1) dx_1 + \mathcal{O}(u^2). \quad (5.13)$$

Comme la différence $R_{n+1}(x) - R_n(x)$ est petite (d'ordre u), nous pouvons réécrire la fonction R sous la forme

$$R_n(x) = r(un, x) \quad (5.14)$$

et en posant $w = v/u^2$ et $\tau = nu$, la fonction d'échelle r vérifie l'équation

$$\frac{\partial r(\tau, x)}{\partial \tau} = a \frac{\partial r(\tau, x)}{\partial x} + w \int_0^x r(\tau, x-x_1) r(\tau, x_1) dx_1 + \mathcal{O}(u). \quad (5.15)$$

L'équation de renormalisation de cette distribution est donc non-linéaire car elle comporte un terme de convolution.

Pour comprendre le problème quand u est petit, il faut être capable de prédire le comportement pour τ grand de la fonction $r(\tau, x)$ solution de 5.15 pour une condition initiale donnée $r(0, x)$. Cela reste une question compliquée dans l'absolu, mais pour un choix particulier de condition initiale :

$$r(0, x) = B(0) e^{-D(0)x} \quad (5.16)$$

le problème peut être résolu. En effet, il est facile de vérifier que $r(\tau, x)$ solution de 5.15 reste de la forme

$$r(\tau, x) = B(\tau) e^{-D(\tau)x} \quad (5.17)$$

où les deux paramètres (qui ne dépendent que de la taille du système via la variable τ) évoluent selon les équations :

$$\begin{aligned} \frac{dB(\tau)}{d\tau} &= -a B(\tau) D(\tau) \\ \frac{dD(\tau)}{d\tau} &= -w B(\tau) . \end{aligned} \quad (5.18)$$

Nous obtenons donc un système différentiel pour l'évolution des deux fonctions B et D . Cette renormalisation est caractéristique d'une transition d'ordre infini [62, 63, 87].

Il y a trois domaines distincts selon notre position par rapport à la surface critique. Dans le paragraphe suivant, nous expliciterons le comportement des deux fonctions dans chacun d'entre eux pour déterminer à quelle phase cela correspond.

5.3.2 Dans la phase délocalisée

Si $2B(0)w - aD(0)^2 < 0$, la solution de 5.18 est

$$\begin{aligned} D(\tau) &= D(0) - \frac{2B(0)w \sinh(\kappa\tau)}{2\kappa \cosh(\kappa\tau) + aD(0) \sinh(\kappa\tau)} \\ B(\tau) &= \frac{aD(\tau)^2}{2w} - \frac{2\kappa^2}{aw} \end{aligned} \quad (5.19)$$

où κ est la racine positive de

$$\kappa^2 = -\frac{aB(0)w}{2} + \frac{a^2D(0)^2}{4}$$

(on peut également choisir la racine négative car $D(\tau)$ et $B(\tau)$ sont des fonctions paires de κ). Nous pouvons facilement vérifier que lorsque $\tau \rightarrow \infty$, alors

$$D(\tau) \rightarrow \frac{2\kappa}{a} \quad \text{et} \quad B(\tau) \rightarrow 0$$

ce qui correspond à la phase délocalisée car cela signifie dans 5.12 que $p_n^{(-a)} \rightarrow 1$. Notons que la vitesse de convergence est exponentielle.

5.3.3 Sur la surface critique

Si $2B(0)w - aD(0)^2 = 0$, la solution de 5.18 est

$$\begin{aligned} D(\tau) &= \frac{2D(0)}{2 + aD(0)\tau} \\ B(\tau) &= \frac{aD(\tau)^2}{2w}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Cette évolution en loi de puissance correspond à la surface critique. Nous voyons en utilisant 5.12 que

$$1 - H_n(0) = 1 - p_n^{(-a)} = \frac{2\phi}{1 - \phi} v B(\tau) \simeq \frac{4\phi}{a(1 - \phi)n^2}. \quad (5.21)$$

Dans le cas où $a = 1$, alors $\phi = 1/2$ et nous retrouvons le résultat 5.7 de Collet *et al.* [25] en accord avec nos études numériques. Nous nous attendons à ce que pour d'autres valeurs de a , l'amplitude $4\phi/((1 - \phi)a)$ de la décroissance en $1/n^2$ dans 5.21 ne dépende pas du choix de la distribution initiale (tant qu'elle est sur la surface critique).

Remarque : il y a néanmoins des exceptions, par exemple pour la distribution initiale avec deux pics en ± 1 lorsque a est pair. Après une itération, la distribution est concentrée sur les valeurs paires de X et en itérant nous ne pourrions jamais atteindre une distribution de la forme 5.9 avec une fonction $R_n(x)$ qui soit lisse.

5.3.4 Dans la phase localisée

Si $2B(0)w - aD(0)^2 > 0$, la solution de 5.18 est

$$\begin{aligned} D(\tau) &= D(0) - \frac{2B(0)w \sin(\kappa\tau)}{2\kappa \cos(\kappa\tau) + aD(0) \sin(\kappa\tau)} \\ B(\tau) &= \frac{aD(\tau)^2}{2w} + \frac{2\kappa^2}{aw} \end{aligned} \quad (5.22)$$

où

$$\kappa^2 = \frac{aB(0)w}{2} - \frac{a^2D(0)^2}{4}. \quad (5.23)$$

Cette solution prédit que $D(\tau)$ et $B(\tau)$ divergent quand $\tau \rightarrow \tau_c$ où τ_c est la première solution positive de

$$\tan \kappa\tau_c = -\frac{2\kappa}{aD(0)}.$$

Quand τ augmente nous observons d'abord que $D(\tau)$ et $B(\tau)$ sont décroissantes, donc d'après 5.12, $p_n^{(-a)}$ se rapproche de 1. Puis lorsque τ se rapproche de τ_c , $D(\tau)$ et $B(\tau)$ deviennent croissantes ce qui implique que $p_n^{(-a)}$ décroît. Enfin, quand $\tau \sim \tau_c$ la distribution change très vite à cause de la divergence et ne peut plus être décrite par 5.9, et la renormalisation 5.18 n'est plus une bonne approximation de la renormalisation réelle.

La solution indique toutefois que $p_n^{(-a)}$ décroît quand $\tau \rightarrow \tau_c$ ce qui correspond à la phase localisée.

Remarque 1 : imaginons que $D(0)$ soit fixé, dans ce cas la valeur de $B(0)$ à choisir pour être sur la surface critique est

$$B_c(0) = \frac{aD(0)^2}{2w}. \quad (5.24)$$

Nous venons de voir que pour $B(0) - B_c(0)$ petit mais positif, le nombre d'itérations à faire pour s'échapper du voisinage de la surface critique est $n \sim \tau_c/u$. Par conséquent si nous définissons $B_n(0)$ la valeur de $B(0)$ pour laquelle n itérations sont nécessaires pour atteindre τ_c , nous avons

$$B_n(0) - B_c(0) = \frac{2\kappa^2}{aw} \simeq \frac{2\pi^2}{awn^2}$$

en accord avec la dépendance en $1/n^2$ des λ_n conjecturée en 3.12. La première égalité vient de la valeur de 5.23. La seconde vient du fait que $\tau \sim \pi/\kappa$ afin que $\tau \sim \tau_c$.

Remarque 2 : dans le cas $a = 1$ une distribution de la forme 5.9 donne pour la fonction génératrice $H_0(z)$ l'expression suivante :

$$H_0(z) = 1 + 4vB(0) \frac{z - 1}{(2 - e^{-D(0)u})(2 - ze^{-D(0)u})}$$

et la surface critique $H_0(2) = 2H'_0(2)$ redonne bien au premier ordre $B_c(0) = D(0)^2/2w$ pour $v = wu^2$.

Remarque 3 : nous pouvons noter que la surface définie par

$$\int_0^\infty x r(x, \tau) dx = \frac{a}{2w} \quad (5.25)$$

est stable sous la renormalisation 5.15. Avec une distribution initiale 5.16, nous pouvons facilement voir que 5.25 and 5.24 coïncident. Il serait intéressant de savoir si cela reste vrai pour d'autres choix de $r(x, \tau)$.

5.4 À un ordre correctif

Nous venons de voir que la relation 5.24 est l'expression de la surface critique à l'ordre dominant en u pour une condition initiale de la forme 5.16 :

$$p_0^{(k)} = v \phi^k R_0(uk) \quad \text{pour } k > -a \quad (5.26)$$

avec

$$R_0(x) = B(0)e^{-D(0)x} .$$

Nous pouvons essayer de développer une théorie de perturbation pour déterminer l'expression de la surface critique à l'ordre suivant en u . Nous allons expliquer dans ce qui suit comment nous obtenons la première correction à 5.24.

Pour parvenir à l'ordre suivant en u nous changeons la forme initiale de la distribution 5.9 pour $k > -a$, en rajoutant un terme, qui lui aussi varie lentement spatialement :

$$p_n^{(k)} = \phi^k w u^2 e^{-D(\tau)uk} \left[B(\tau) + uF(uk, \tau) + O(u^2) \right] \quad (5.27)$$

où $n = \tau/u$ avec τ d'ordre 1.

La raison pour laquelle ce choix est fait est qu'une fonction correctrice F est générée comme dans l'écriture 5.27 par l'itération, même si nous partons sans elle initialement.

Nous pouvons répéter le processus précédent avec cette nouvelle condition initiale. Comme nous regardons l'équation à un ordre correctif, nous nous attendons à tomber sur une

équation dynamique linéaire pour la fonction F . En insérant la forme initiale 5.27, dans 5.2, nous obtenons une version de 5.13 à un ordre correctif

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \tau} = & (D'x - aD)F + a\frac{\partial F}{\partial x} + 2wB \int_0^x F(x_1, \tau) dx_1 \\ & - \frac{D'^2 B}{2} x^2 + \frac{D''B + 2D'B'}{2} x + w \left(2a - \frac{1 + \phi}{1 - \phi} \right) B^2 + \frac{a^2 B D^2 - B''}{2}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Sans ambiguïté de notation, les D' et B' désignent les dérivées des fonctions D et B . Comme attendu, nous obtenons une équation linéaire en F , avec un second membre qui est une fonction explicite de x et τ . Néanmoins, la résolution pour une condition initiale quelconque $F(x, 0)$ donnée n'est pas facile.

L'astuce consiste ici à introduire des moments $I_m(\tau)$ de F définis par :

$$I_m(\tau) = \int_0^\infty x^m F(x, \tau) e^{-D(\tau)x} dx.$$

Encore une fois le problème n'est pas facile car les $I_m(\tau)$ sont tous couplés : si nous écrivons l'évolution pour un m donné, $I_m(\tau)$ dépend de tous les $I_k(\tau)$ précédent (*i.e.* pour $0 \leq k \leq m - 1$) et $I_0(\tau)$ dépend lui-même de $F(0, \tau)$, la quantité cherchée.

Par exemple, nous tirons de 5.28 l'équation pour $I_1(\tau)$:

$$\begin{aligned} \frac{dI_1(\tau)}{d\tau} = & \left(\frac{2wB}{D^2} - a \right) I_0(\tau) + \frac{2wB}{D} I_1(\tau) \\ & - \frac{3D'^2 B}{D^4} + \frac{D''B + 2D'B'}{D^3} + w \left(2a - \frac{1 + \phi}{1 - \phi} \right) \frac{B^2}{D^2} + \frac{a^2 B D^2 - B''}{2D^2}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Nous pouvons d'ailleurs simplifier l'équation en utilisant les équations de renormalisation de l'ordre dominant 5.18 pour $B(\tau)$ et $D(\tau)$, cela donne :

$$\frac{dI_1(\tau)}{d\tau} = \left(\frac{2wB}{D^2} - a \right) I_0(\tau) + \frac{2wB}{D} I_1(\tau) - 3w^2 \frac{B^3}{D^4} + w \left(\frac{9a}{2} - \frac{1 + \phi}{1 - \phi} \right) \frac{B^2}{D^2}.$$

La résolution est possible lorsque nous nous trouvons sur la surface critique sur laquelle $2wB(\tau) = aD(\tau)^2$; l'évolution de $I_1(\tau)$ présente la particularité de devenir indépendante de tous les autres $I_{k \neq 1}(\tau)$, et nous arrivons sur l'équation suivante :

$$\frac{dI_1(\tau)}{d\tau} = \frac{a^2}{4w} \left(3a - \frac{1 + \phi}{1 - \phi} \right) D(\tau)^2 + aD(\tau)I_1(\tau)$$

où $D(\tau)$ est donné par 5.20. Cette équation a pour solution :

$$I_1(\tau) = -\frac{a}{6w} \left(3a - \frac{1 + \phi}{1 - \phi} \right) D(\tau) + K(2 + aD(0)\tau)^2$$

où K est une constante d'intégration.

Comme F est une correction, la condition pour rester sur la surface critique est que F reste finie lorsque τ varie. Par conséquent, la constante d'intégration K doit être prise nulle pour se débarrasser du terme quadratique, et la surface critique est donnée par l'expression :

$$I_1(0) = -\frac{a}{6w} \left(3a - \frac{1 + \phi}{1 - \phi} \right) D(0).$$

Remarque : si $a = 1$, alors $\phi = 1/2$ et $I_1(0) = 0$ et nous pouvons vérifier que cela est bien en accord avec 5.6.

5.5 Les points fixes de l'itération tronquée

Nous finissons cette partie par une discussion qui répond à l'observation de points fixes lors des simulations numériques. Nous souhaitons montrer que le système peut accéder à des points fixes lorsque l'itération est tronquée à droite par une valeur supérieure a' comme dans 4.4. Ce résultat ne contredit pas la thèse d'une transition d'ordre infini sans point fixe car nous verrons que ces distributions disparaissent lorsque $a' \rightarrow +\infty$. Dans ce paragraphe, nous prendrons $a = 1$ pour simplifier la discussion.

Prenons un cas trivial pour débiter. Si $a' = 1$, le système peut accéder à trois états : $X = -1, 0$ ou 1 . Il est alors facile de voir que le vecteur de probabilité $(1/3; 1/3; 1/3)$ est un point fixe de l'itération limitée à ces trois sites.

Pouvons-nous encore déterminer le point fixe si a' est différent de 1 ?

Si nous reprenons l'itération tronquée 4.4 :

$$X_{n+1} = F(X_{n-1}^{(1)} + X_{n-1}^{(2)}) \quad \text{avec} \quad F(X) = \begin{cases} -a & \text{si } X \leq -a \\ X & -a \leq X \leq a' \\ a' & X > a' \end{cases} \quad (5.30)$$

nous voyons que pour les entiers $-a \leq k < a'$, la troncature ne modifie pas la façon dont les probabilités se transforment lors d'une renormalisation. Le seul changement à noter est celui pour $k = a'$. En effet, celle-ci devient :

$$p_{n+1}^{(a')} = \sum_{q_1=0}^{a'} \sum_{q_2=a'-q_1}^{a'} p_n^{(q_1)} p_n^{(q_2)}. \quad (5.31)$$

La relation d'itération pour la fonction génératrice pour laquelle toutes les probabilités au-delà de a' sont prises nulles

$$H_n(z) = \sum_{k=-a}^{a'} p_n^{(k)} z^{k+a} \quad (5.32)$$

est la même que 5.4 sauf pour le site en a' , donc

$$H_{n+1} = \frac{H_n(z)^2 - H_n(0)^2}{z} + H_n(0)^2 + \mathcal{O}(z^{a+a'}) \quad (5.33)$$

par conséquent, un point fixe de 5.33 doit être de la forme :

$$H_*(z) = \frac{z}{2} + H(0) \sqrt{1 - z + \frac{z^2}{4H(0)^2}} + \mathcal{O}(z^{a+a'}) .$$

Pour $k < a + a' - 1$, (ici $a = 1$) nous obtenons les poids de la distribution en utilisant une intégration complexe :

$$p_*^{(k)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}(r)} \frac{dz}{z^{k+2}} \left[\frac{z}{2} + H(0) \sqrt{1 - z + \frac{z^2}{4H(0)^2}} \right]$$

où le contour d'intégration $\mathcal{C}(r)$ est un petit cercle autour de l'origine de rayon $r < 2$.

Comme la racine est multivaluée, nous définissons comme coupure le segment qui rejoint les deux pôles $z_{\pm} = 2\left(H(0)^2 \pm iH(0)\sqrt{1-H(0)^2}\right)$ dans le plan complexe.

Soit $\mathcal{C}(R)$ un chemin d'intégration circulaire de rayon R très grand devant 2. Par le lemme de Jordan, une intégration sur le chemin $\mathcal{C}(R)$ donnerait zéro (en faisant tendre R vers l'infini).

Ce contour peut être déformé : intégrer sur $\mathcal{C}(R)$ revient à intégrer autour de la coupure et autour de l'origine.

Par conséquent, intégrer sur $\mathcal{C}(r)$ revient à faire l'intégration le long de la coupure en changeant le signe du résultat. Pour $H(0)$ proche de 1, la variable d'intégration z prend la forme

$$z = 2\left(1 + iy\sqrt{2(1-H(0))}\right)$$

où y évolue entre -1 et 1 . Après simplification, cela aboutit à :

$$p_*^{(k)} \simeq \frac{1}{2^{k-1}} \frac{1-H(0)}{\pi} \int_0^1 dy \sqrt{1-y^2} \cos\left(k\sqrt{2(1-H(0))}y\right). \quad (5.34)$$

Soit q le premier zéro de la fonction $\int_0^1 dy \sqrt{1-y^2} \cos(qy)$, toutes les $p_*^{(k)}$ sont positives tant que $k < k_0$ où $k_0 = q/\sqrt{2(1-H(0))}$. Par conséquent, pour un a' donné, il y a une valeur particulière de $H(0)$ qui fait coïncider k_0 avec a' et qui donne naissance à un point fixe accessible. Cette valeur doit être telle que :

$$1 - H(0) \simeq \frac{q^2}{2a'^2}.$$

Dans la limite $a' \rightarrow \infty$, évidemment $H(0) \rightarrow 1$ et ce point fixe finit par coïncider avec le point fixe $H_*(z) = 1$.

Remarque : la solution 5.34 revient en terme de la fonction $r(x)$ (définie par 5.14) à dire que

$$r(x) = \frac{4r(0)}{\pi} \int_0^1 dy \sqrt{1-y^2} \cos\left(2x\sqrt{r(0)w}y\right), \quad (5.35)$$

la variable τ ne rentrant plus en jeu puisque nous regardons un point fixe. Nous avons vu que la renormalisation suivait l'équation l'équation 5.15. Par conséquent, une solution fixe doit être solution de l'équation

$$-r(0) + p\mathbf{r}(p) + w\mathbf{r}(p)^2 = 0.$$

où $\mathbf{r}(p)$ est la transformée de la Laplace $\mathbf{r}(p) = \int_0^\infty dx r(x) e^{-px}$. Nous vérifions bien ici que la solution 5.35 satisfait à cette condition.

Une généralisation : renormalisation de lois de Lévy modulées

L'approche perturbative que nous avons utilisée pour le *Toy-model* et les résultats numériques nous poussent à croire que la transition de phase de ce modèle est d'ordre infini. La question qui vient naturellement concerne la généralisation des résultats pour le modèle sur le réseau hiérarchique. Pouvons-nous trouver un type de distribution dont la renormalisation est simple et aboutit aux mêmes équations?

Cet objectif n'a été atteint que partiellement. Nous exposons dans cette partie les principales idées que nous avons suivies, tout en prévenant des difficultés que nous avons rencontrées pour retrouver une équation de renormalisation similaire à celle que nous avons pour le *Toy-model*.

Pour cela, nous introduisons une fonction de renormalisation à laquelle nous attribuons seulement les propriétés essentielles du réseau hiérarchique : la monotonie, l'existence d'un intervalle stable et un comportement asymptotique linéaire à l'infini. Nous observons ensuite que les distributions qui varient peu sous l'effet d'une renormalisation sont le produit d'une loi de Lévy très étroite et d'une queue exponentiellement décroissante. Enfin, si l'équivalent de la fonction R_n est introduit pour moduler la fonction aux très grands x , nous voyons que la dynamique de la renormalisation conduit à la même équation que celle pour le *Toy-model*.

Nous discutons en fin de partie les difficultés que nous avons rencontrées lors de cette étude. Nous avons réussi à retrouver la même équation de renormalisation 5.18 que pour le *Toy-model*, cependant la solution simple 5.17 que nous proposons et qui conduit aux équations du type BKT ne peut pas respecter la contrainte imposée par la normalisation de la distribution.

6.1 Reformulation du problème

6.1.1 Introduction d'une formule générale de renormalisation

Rappelons que pour le modèle sur le réseau hiérarchique, l'itération de la variable aléatoire d'énergie libre $X = \log Z$ lors d'une renormalisation est donnée par

$$\tilde{X} = X_1 + X_2 + \log \left(\frac{1 + (B-1)e^{-X_1 - X_2}}{B} \right)$$

et que l'intervalle $X > \log(B-1)$ est stable. En faisant un simple changement de variable $x = X - \log(B-1)$, l'itération devient :

$$\tilde{x} = x_1 + x_2 + \log \left(\frac{(B-1) + e^{-x_1 - x_2}}{B} \right)$$

et le nouvel intervalle stable est $x > 0$.

Les études numériques de la partie 4 suggèrent que les résultats ne dépendent pas en détail de la fonction d'itération, mais seulement de certaines de ses propriétés : d'abord

l'existence d'un intervalle stable, puis le comportement asymptotique linéaire et enfin la monotonie.

Pour faire une généralisation, nous nous intéressons à la dynamique de la distribution d'une variable aléatoire dont l'évolution est donnée par :

$$\tilde{x} = F(x_1 + x_2)$$

F est une fonction indéterminée dont le développement en zéro est

$$F(x) = \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \alpha_3 x^3 + \dots \quad (6.1)$$

où les coefficients $(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ sont pour l'instant simplement supposés réels.

Pour garder les propriétés essentielles de la fonction d'itération du réseau hiérarchique, nous ne pouvons pas prendre n'importe quelle fonction F . Nous devons faire l'hypothèse que F est convexe et croissante. De plus le comportement de F pour $x \rightarrow +\infty$ est supposé être linéaire :

$$F(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} x - b \quad (6.2)$$

où $b > 0$ est une constante. Enfin, dans le cas particulier du réseau hiérarchique, nous avons vu qu'il était possible de se restreindre au cas $1 < B < 2$. Cela implique des contraintes sur les coefficients α . Par exemple, $\alpha_1 = (B - 1)/B$ donc $0 < \alpha_1 < 1/2$.

Puisque la fonction de renormalisation F est convexe et croissante, elle est bijective sur $[0; +\infty[$. Si $\rho(x)$ représente une distribution de la variable x , alors la renormalisation implique la transformation $\rho \rightarrow \tilde{\rho}$ suivante :

$$\tilde{\rho}(x) = \int_0^\infty \int_0^\infty dx_1 dx_2 \rho(x_1) \rho(x_2) \delta(x - F(x_1 + x_2)).$$

Comme F est bijective sur $[0; +\infty[$, cette équation peut s'écrire sous une forme plus compacte :

$$F'(x) \rho^{(n+1)}(F(x)) = \int_0^x \rho^{(n)}(x_1) \rho^{(n)}(x - x_1) dx_1 \quad (6.3)$$

où $\rho^{(n)}$ est ce que devient une distribution initiale $\rho^{(0)}$ après n itérations.

6.1.2 Un cas particulier

Dans le cas particulier où la fonction d'itération est purement linéaire sur l'intervalle d'étude, *i.e.*

$$F(x) = \alpha_1 x,$$

il existe une famille de solutions fixes exactes de l'équation 6.3. Ce sont des lois de Lévy (souvent appelées lois stables). Par transformée de Laplace ⁶, elles doivent vérifier :

$$\rho(\lambda/\alpha_1) = \rho(\lambda)^2. \quad (6.4)$$

Les solutions de 6.4 peuvent s'écrire sous la forme

$$\rho(\lambda) = \exp\left(-\lambda^\gamma p(\ln \lambda / \ln \alpha_1)\right)$$

⁶Les grandeurs en caractère gras désignent une transformée de Laplace.

où la fonction p est 1-périodique. Par souci de simplicité, nous choisirons pour la suite une fonction p constante, égale à A . L'exposant γ est donné par l'équation :

$$2 \alpha_1^\gamma = 1, \quad (6.5)$$

il est donc compris entre 0 et 1.

Par conséquent, dans l'espace des x , les distributions fixes (les lois de Lévy) se comportent à l'infini en

$$\rho(x) \underset{+\infty}{\sim} \frac{C}{x^{1+\gamma}} \quad (6.6)$$

où C est une constante simplement reliée à A par $C \Gamma(-\gamma) = -A$.

Reconsidérons maintenant le cas général où F n'est plus linéaire (pour lequel les $\alpha_{k \geq 2}$ ne sont pas tous nuls). Dans l'absolu, les lois de Lévy ne sont plus des solutions fixes de 6.3. Pourtant, si nous faisons le choix d'une distribution initiale dont le poids est très concentré près de zéro, nous pouvons imaginer que celle-ci sera particulièrement sensible au comportement de F proche de zéro et n'en sentira que le régime linéaire (pour les $x \rightarrow 0$). Nous pouvons donc quand même envisager qu'une loi de Lévy très étroite en zéro soit presque stable sous l'effet d'une renormalisation.

En revanche nous savons que le comportement aux grands x des lois de Lévy ne convient pas. Nous envisageons donc une modulation. Nos études numériques ont montré que sur la surface critique, les distributions se concentrent proche de zéro après plusieurs itérations et se répartissent exponentiellement aux grands x . Dans le paragraphe suivant, nous montrons que le caractère linéaire de F à l'infini implique que la modulation des lois de Lévy doit être faite par des exponentielles décroissantes.

6.1.3 La loi de Lévy modulée

Pour étudier la dépendance en x de la distribution quand x est grand, prenons un cas de distribution très concentrée en zéro. Choisissons par exemple une distribution

$$\rho(x) = (1 - \varepsilon)\delta(x) + \varepsilon \nu(x) \quad (6.7)$$

où ε est petit. À l'ordre dominant en ε , la renormalisation 6.3 conduit à la transformation $\nu \rightarrow \tilde{\nu}$ suivante :

$$F'(x) \tilde{\nu}(F(x)) = 2 \nu(x). \quad (6.8)$$

Nous pouvons déduire le comportement asymptotique d'une solution fixe de cette équation. En l'infini, l'équation 6.8 impose que

$$\nu(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} K \exp(-\phi_1 x) \quad (6.9)$$

où K est une constante, et la valeur du coefficient ϕ_1 de l'exponentielle est fixée par 6.2 :

$$\exp(\phi_1 b) = 2.$$

Proche de zéro, ν doit avoir un comportement en loi de puissance :

$$\nu(x) \underset{x \rightarrow 0}{\sim} \frac{\phi_2}{x^{1+\gamma}} \quad (6.10)$$

où l'exposant γ vérifie 6.5 et ϕ_2 est une constante.

En revanche, une distribution de type 6.7 ne peut pas être solution : elle n'est pas normalisable. L'équation 6.8 montre en effet que

$$\int_{F(x)}^{+\infty} \nu(x) dx = 2 \int_x^{+\infty} \nu(x) dx.$$

Le poids de la distribution sur l'intervalle $[x; +\infty]$ est donc le même que celui sur $[F(x); x]$. Or, d'après les propriétés de F , la récurrence donnée par la transformation $x \mapsto F(x)$ tend vers zéro en itérant un nombre infini de fois.

Par conséquent, si nous cherchons des distributions qui varient peu sous l'effet d'une itération, les bons ingrédients semblent être les suivants : proche de zéro, la fonction est une loi de Lévy et pour les x grands, c'est une exponentielle décroissante.

Afin de bien séparer ces deux régions, nous introduisons un petit paramètre ε_n pour que la loi de Lévy soit très étroite en zéro. Nous partirons donc d'une distribution de la forme

$$\rho^{(n)}(x) = \frac{\varphi(x/\varepsilon_n)}{\varepsilon_n} \nu(x) x^{1+\gamma} T_n(ux) \quad (6.11)$$

où u est un autre petit paramètre dont nous fixerons l'ordre de grandeur par rapport à ε_n plus loin. Notons que le paramètre ε_n dépend de n car il est aussi renormalisé lors d'une itération.

Dans l'expression 6.11, la fonction φ est la loi de Lévy dont le comportement à l'infini est donné par 6.6. Nous vérifierons plus loin que la fonction ν est bien une solution fixe de 6.8 (pour laquelle nous choisirons un $\phi_2 = 1$). Enfin $T_n(ux)$ est une fonction qui varie spatialement lentement et qui module la distribution aux grands x .

Il y a donc trois domaines distincts ($x \sim \varepsilon$, $x \sim 1$ et $x \sim 1/u$) où chacune des fonctions φ , ν et T_n obéit à une équation qu'il n'est pas simple de résoudre. La loi de Lévy φ n'est explicite que pour les $x \gg \varepsilon$. L'expression de la fonction ν est connue pour les régimes $x \gg 1$ et $x \ll 1$, mais pas dans le régime intermédiaire. Enfin, T_n sera déterminée pour les $x \sim 1/u$.

Remarque : une distribution de la forme 6.11 ressemble aux distributions limites observées sur le *Toy-model*. Les probabilités sont très concentrées proche de zéro et lorsque nous nous éloignons de l'origine, la distribution a un poids réparti en exponentielle avec une modulation lentement variable

$$\rho^{(n)}(x) \underset{x \sim 1/u}{\simeq} C \varepsilon_n^\gamma K e^{-\phi_1 x} T_n(ux).$$

Dans cette expression $CK\varepsilon_n^\gamma$ joue le rôle du petit paramètre v dans 5.9 et nous verrons que T_n joue un rôle similaire à celui de la fonction R_n .

6.1.4 Propriété sur une intégrale impliquant une loi de Lévy

Avant de regarder comment se transforme une distribution 6.11 lors de la renormalisation, nous devons analyser la convolution de 6.3 et nous avons besoin de calculer l'intégrale. Soit H une fonction test régulière en zéro et qui reste bornée à l'infini. Introduisons une loi de Lévy telle que

$$\varphi(x) \sim \frac{C}{x^{1+\gamma}}.$$

Nous pouvons montrer la propriété suivante : pour tout $x_0 \gg \varepsilon$, lorsque la loi de Lévy est très étroite (de largeur caractéristique ε), nous avons

$$\int_0^{x_0} \frac{\varphi(x/\varepsilon)}{\varepsilon} H(x) dx = H(0) + \frac{C\varepsilon^\gamma}{\gamma} \left(\int_0^{x_0} \frac{H'(x)}{x^\gamma} dx - \frac{H(x_0)}{x_0^\gamma} \right) + o(\varepsilon^\gamma) \quad (6.12)$$

où l'intégrale de droite est régulière en 0 puisque $0 < \gamma < 1$. L'effet de la loi de Lévy est donc de sélectionner la valeur en zéro de la fonction test et d'ajouter une correction ε^γ fois plus petite, qui dépend de H sur tout l'intervalle.

Conséquence 1 : nous pouvons d'ores et déjà utiliser cette formule pour la distribution 6.11. Si nous faisons tendre x_0 vers l'infini, la normalisation de la distribution $\rho^{(n)}$ s'écrit

$$T_n(0) = 1 - \frac{C\varepsilon_n^\gamma}{\gamma} \int_0^{+\infty} \frac{(T_n(ux) \nu(x) x^{1+\gamma})'}{x^\gamma} dx. \quad (6.13)$$

La fonction T_n est donc contrainte à l'origine à valoir 1 plus une petite correction.

Conséquence 2 : la formule 6.12 permet d'évaluer l'ordre dominant et la première correction de l'intégrale de convolution dans 6.3. La méthode est la suivante : nous coupons l'intégrale dans 6.3 en deux morceaux, de 0 à x_0 puis de x_0 à x , où x_0 n'est proche ni de 0 ni de x , puis nous utilisons 6.12. Nous pouvons montrer que pour une fonction test $H(x)$, il vient

$$\int_0^{x_0} dx_1 \frac{\varphi(x_1/\varepsilon)}{\varepsilon} H(x_1) H(x - x_1) \frac{\varphi((x - x_1)/\varepsilon)}{\varepsilon} = \frac{C\varepsilon^\gamma}{x^{1+\gamma}} H(0) H(x) + \frac{C^2\varepsilon^{2\gamma}}{\gamma} \left[\int_0^{x_0} \frac{(H(x_1)H(x - x_1)(x - x_1)^{-1-\gamma})'}{x^\gamma} dx_1 - \frac{x_0 H(x_0) H(x - x_0)}{x_0^{1+\gamma} (x - x_0)^{1+\gamma}} \right]. \quad (6.14)$$

Par symétrie, il est immédiat de transposer cette équation pour l'autre morceau, en remplaçant x_0 par $x - x_0$.

Dans la partie suivante, nous allons étudier la façon dont est modifiée lors d'une renormalisation une distribution du type 6.11 dans les trois régimes mentionnés. D'abord lorsque $x \sim \varepsilon$ pour voir comment évolue ε_n , puis dans un régime intermédiaire $x \sim 1$ et enfin nous verrons que pour des grands x (de l'ordre de $1/u$), il est possible de retomber sur une équation similaire à 5.13 pour la fonction T_n .

6.2 Comportement de la distribution dans les trois régions

6.2.1 Pour $x \sim \varepsilon$

Dans cette partie, nous allons traduire l'effet d'une itération sur le coefficient ε_n . Nous nous plaçons dans la région où $x \sim \varepsilon$ et ainsi les fonctions $\nu(x)x^{1+\gamma}$ et $T_n(ux)$ sont quasiment constantes. La fonction $H_n(x) = \nu(x)x^{1+\gamma}T_n(ux)$ se développe donc au voisinage de 0 :

$$H_n(x) = H_n^{(0)} + H_n^{(1)}x + H_n^{(2)}x^2 + \dots \quad (6.15)$$

Nous savons que la renormalisation 6.13 oblige le premier coefficient $H_n^{(0)}$ à valoir 1 plus une petite correction de l'ordre de ε_n^γ . Si nous notons

$$\chi_n = \frac{C}{\gamma} \int_0^{+\infty} \frac{(T_n(ux)\nu(x)x^{1+\gamma})'}{x^\gamma} dx$$

alors

$$H_n^{(0)} = T_n(0) = 1 - \varepsilon_n^\gamma \chi_n + o(\varepsilon_n^\gamma). \quad (6.16)$$

Regardons maintenant l'effet de l'itération 6.3. À gauche, le début du développement limité donne :

$$F'(x)\rho^{(n+1)}(F(x)) = (\alpha_1 + 2\alpha_2x + \dots) \frac{\varphi(F(x)/\varepsilon_{n+1})}{\varepsilon_{n+1}} (H_{n+1}^{(0)} + H_{n+1}^{(1)}F(x) + \dots).$$

Et à droite, nous avons :

$$\int_0^x \rho^{(n)}(x_1)\rho^{(n)}(x-x_1)dx_1 = (H_n^{(0)2} + xH_n^{(0)}H_n^{(1)} + \dots) \frac{\varphi(x/(2^{1/\gamma}\varepsilon_n))}{2^{1/\gamma}\varepsilon_n}$$

car la convolution de deux lois de Lévy reste une loi de Lévy.

Dans les deux cas nous avons un terme dominant, puis une correction ε_n^γ plus petite qui provient de la normalisation des probabilités 6.16. À l'ordre dominant, pour avoir une loi stable lorsque nous itérons, nous retrouvons la relation

$$2\alpha_1^\gamma = 1.$$

Et à un ordre ε_n^γ plus petit, nous arrivons sur l'équation de renormalisation de ε_n :

$$\varepsilon_{n+1}^\gamma - \varepsilon_n^\gamma = \chi_n \varepsilon_n^{2\gamma}. \quad (6.17)$$

Ce résultat est difficile à interpréter. Nous nous attendions en fait à voir une condition de transition, avec un scénario où nous sommes sur la surface critique qui conduirait à une décroissance en $1/n^2$. Or ici, il n'est pas clair de savoir comment un choix initial de ε_0^γ et de χ_0 nous placerait sur ou en dehors d'un régime critique.

Remarque : si F est linéaire, $H_n(x) = 1$, donc $\chi_n = 0$, dans ce cas ε_n reste constant. Nous vérifions bien le fait que les lois de Lévy sont des solutions fixes de 6.4.

6.2.2 Pour $x \sim 1$

Regardons maintenant dans le régime intermédiaire comment est transformée la distribution 6.3. Dans cette région, la loi de Lévy peut déjà s'écrire selon son comportement asymptotique car x/ε_n est grand devant 1. Nous avons :

$$\frac{\varphi(x/\varepsilon_n)}{\varepsilon_n} \sim \frac{C\varepsilon_n^\gamma}{x^{1+\gamma}}.$$

En utilisant l'équation 6.14 pour traiter la convolution, l'itération prend la forme :

$$\begin{aligned} C\varepsilon_{n+1}^\gamma F'(x) \nu(F(x)) T_{n+1}(uF(x)) &= 2C\varepsilon_n^\gamma T_n(0) \nu(x) T_n(ux) + \frac{C^2\varepsilon_n^{2\gamma}}{\gamma} \times \dots \\ &\left[\int_0^{x_0} \frac{\left(\nu(x_1) T_n(ux_1) \nu(x-x_1) T_n(u(x-x_1)) x_1^{1+\gamma} \right)'}{x_1^\gamma} dx_1 + \text{"}x_0 \longrightarrow x-x_0\text{"} \right. \\ &\quad \left. -x_0 \nu(x_0) \nu(x-x_0) T_n(ux_0) T_n(u(x-x_0)) + \text{"}x_0 \longrightarrow x-x_0\text{"} \right]. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Cette formule est correcte pour des x grands devant ε_n . L'indication " $x_0 \longrightarrow x-x_0$ " signifie qu'il faut rajouter le terme précédent où x_0 est changé en $x-x_0$. Cela fait partie de la procédure qui consiste à séparer la convolution en deux morceaux.

Puisque nous nous plaçons dans un régime intermédiaire ($x \sim 1$), la fonction T_n , qui varie spatialement lentement, peut être considérée comme une constante en première approximation. L'équation 6.18 conduit effectivement à l'équation 6.8 pour la fonction ν à l'ordre dominant. Nous retrouvons effectivement

$$F'(x)\nu(F(x)) = 2\nu(x). \quad (6.19)$$

Cela redonne les comportements asymptotiques en zéro 6.10 et en l'infini 6.9 que nous avons décrit précédemment. Néanmoins, cette formule ne donne pas de manière simple le comportement de la fonction ν pour des x intermédiaires.

Remarque : pour passer de 6.18 à 6.19 nous devons nous assurer du fait que les corrections sont effectivement petites devant l'ordre dominant. L'intégrale entre crochets est convergente si $x_0 \sim 1$ car l'intégrand est équivalent en zéro à $Cte \times x_1^{-\gamma}$ où la constante ne dépend pas de x_1 . Par conséquent, ce terme est un nombre fini et reste petit à cause du terme $\varepsilon_n^{2\gamma}$ en facteur.

6.2.3 Pour $x \sim 1/u$

Essayons enfin d'interpréter la renormalisation dans des régions où x est grand. Par hypothèse, nous avons $F(x) \simeq x-b$ et nous connaissons le comportement asymptotique de la fonction ν . Nous allons voir dans ce paragraphe que nous pouvons retrouver une équation identique à l'équation 5.13. Pour cela, nous partons de la relation 6.18.

La normalisation des probabilités 6.13 et la renormalisation 6.17 se compensent en apportant chacun un terme en $2C\varepsilon_n^{2\gamma}\chi_n\nu(x)T_n(ux)$ de part et d'autre de l'équation. Nous pouvons donc simplifier partout par $C\varepsilon_n^\gamma$ et l'équation 6.18 devient alors :

$$\begin{aligned} \nu(x-b)T_{n+1}(u(x-b)) &= 2\nu(x)T_n(ux) + \frac{C\varepsilon_n^\gamma}{\gamma} \times \dots \\ &\left[\int_0^{x_0} \frac{\left(\nu(x_1)T_n(ux_1)\nu(x-x_1)T_n(u(x-x_1))x_1^{1+\gamma} \right)'}{x_1^\gamma} dx_1 + \text{"}x_0 \longrightarrow x-x_0\text{"} \right. \\ &\quad \left. -x_0\nu(x_0)\nu(x-x_0)T_n(ux_0)T_n(u(x-x_0)) + \text{"}x_0 \longrightarrow x-x_0\text{"} \right] \end{aligned} \quad (6.20)$$

Regardons maintenant plus en détail les intégrales, et raisonnons sur celle qui va de 0 à x_0 (l'autre est symétrique et ne demande pas plus d'effort). Nous allons montrer que de ces expressions émerge la même convolution que dans 5.13 qui est l'ordre $1/u$, accompagnée d'une correction qui restera toujours plus petite.

Si nous introduisons une échelle intermédiaire Λ telle que $1 \ll \Lambda \ll 1/u$, nous pouvons couper l'intégrale en deux, il en ressort après une intégration par parties que :

$$\begin{aligned} &\int_0^{x_0} \frac{\left(\nu(x_1)T_n(ux_1)\nu(x-x_1)T_n(u(x-x_1))x_1^{1+\gamma} \right)'}{x_1^\gamma} dx_1 - x_0\nu(x_0)\nu(x-x_0)T_n(ux_0)T_n(u(x-x_0)) \\ &= \gamma K^2 e^{-\phi_1 x} \int_0^{x_0} T_n(ux_1)T_n(u(x-x_1)) dx_1 \\ &\quad + K e^{-\phi_1 x} T_n(0)T_n(ux) \int_0^\Lambda \left[\frac{\left(\nu(x_1)e^{\phi_1 x_1} x_1^{1+\gamma} \right)'}{x_1^\gamma} - K(1+\gamma) \right] dx_1 + \mathcal{O}(u\Lambda). \end{aligned} \quad (6.21)$$

Or l'intégrand de la seconde intégrale s'annule assez vite quand x_1 est grand

$$\frac{\left(\nu(x_1)e^{C x_1} x_1^{1+\gamma} \right)'}{x_1^\gamma} - (1+\gamma) \underset{x_1 \sim \Lambda}{\simeq} 0.$$

Ce nombre restera donc d'ordre 1 tandis que la première intégrale est d'ordre $1/u$ (ce que nous pouvons voir en faisant le changement de variables $ux_1 \rightarrow y_1$).

Par conséquent, après avoir regroupé les deux morceaux de l'intégrale de convolution, nous retrouvons le résultat suivant :

$$T_{n+1}(y) = T_n(y) + u b T_n'(y) + \frac{C\varepsilon_n^\gamma}{u\gamma} \int_0^y T_n(y_1)T_n(y-y_1) dy_1. \quad (6.22)$$

Pour retomber sur une équation comme 5.17, nous devons choisir

$$C\varepsilon_0^\gamma = w u^2 \gamma$$

où w est une constante. Dans ce cas, en posant $\tau = nu$, la solution $T_n(y) = t(\tau, y)$ vérifie l'équation de renormalisation du *Toy-model* :

$$\partial_\tau t(\tau, y) = b \partial_y t(\tau, y) + w \int_0^y t(\tau, y_1) t(\tau, y - y_1) dy_1. \quad (6.23)$$

6.2.4 Remarques

La fonction T_n semble donc obéir à la même dynamique que la fonction R_n introduite pour le *Toy-model*. Néanmoins, nous allons voir que les ordres de grandeurs de $T_n(0)$ et $T'_n(0)$ imposés par 6.13 nous empêchent de proposer une solution analogue à 5.17 sous la forme

$$t(x, \tau) = B(\tau)e^{-D(\tau)x}. \quad (6.24)$$

Une solution sous cette forme impliquerait que nous ayons sur la surface critique

$$B(\tau) = \frac{bD(\tau)^2}{2w}. \quad (6.25)$$

Cependant, si nous prenons en compte la contrainte 6.13, nous pouvons montrer par un développement en zéro de 6.22 que

$$T'_n(0) = \frac{\chi_{n+1} - \chi_n}{ub} \varepsilon_n^\gamma.$$

$T'_n(0)$ est donc petit, d'ordre ε_n^γ . Or, d'une part nous avons

$$t(\tau, 0) = B(\tau) = T_n(0) = 1 + \mathcal{O}(\varepsilon_n^\gamma)$$

et d'autre part

$$t'(\tau, 0) = -D(\tau)B(\tau) = T'_n(0) = \mathcal{O}(\varepsilon_n^\gamma)$$

donc $D(\tau) = \mathcal{O}(\varepsilon_n^\gamma)$ ce qui n'est pas compatible avec 6.25.

Par conséquent, bien que nos courbes numériques soient en faveur d'une décroissance en $1/n^2$ des distributions sur la surface critique, le résultat analytique est plus difficile à obtenir que pour le *Toy-model*. Nous retrouvons bien la même équation mais une solution du type 6.24 aboutit sur une contradiction d'ordre de grandeur.

Par ailleurs une autre difficulté vient du fait que pour la renormalisation de la distribution aux petits x , nous ne comprenons pas l'évolution du paramètre ε_n . Pour mieux comprendre l'équation 6.17, il faudrait savoir si χ_n est positif ou négatif et si ce signe reste constant ou pas. Cela nous empêche de connaître les variations de ε_n^γ .

De plus, nous n'arrivons pas à interpréter le fait que l'évolution de ε_n fasse intervenir les valeurs de la distribution sur l'ensemble du système via χ_n (qui est donnée par une intégrale sur tout le support de la distribution). Nous nous attendions plutôt à ce que la renormalisation de ε_n ne fasse intervenir que des données locales.

Conclusion et perspectives

Les modèles de dépiégeage, comme le modèle de Poland-Scheraga et sa version hiérarchique, sont des systèmes très simples dans le cas homogène. Dans ces situations, nous sommes capables de décrire entièrement le comportement critique.

En revanche, en présence de désordre, ils soulèvent encore beaucoup de questions irrésolues jusqu'à présent. La valeur du point critique et la forme que prend l'énergie libre proche de la transition en régime de fort désordre sont par exemple des objectifs encore non atteints.

Ce travail de thèse a permis d'améliorer la compréhension de ces transitions de dépiégeage grâce à l'introduction d'un *Toy-model*. Ce modèle consiste à simplifier la loi de renormalisation du problème sur réseau hiérarchique et cette simplification permet de travailler sur un réseau stable d'énergies ayant des valeurs discrètes entières.

Dans le cadre physique très différent des verres de spin, Collet *et al.* avaient déjà introduit ce *Toy-model* en 1984. L'article [25] fournit une expression exacte de la surface critique du modèle grâce à laquelle nous avons pu montrer numériquement que l'énergie libre présente une singularité essentielle à la transition. Proche du point critique, elle prend la forme

$$f_\infty(\lambda) \sim \exp\left(-\frac{A}{\sqrt{\lambda - \lambda_c}}\right)$$

où λ est la concentration d'impureté, un paramètre qui peut être relié à la température du système.

Nos travaux analytiques ont confirmé cette conclusion. Nous avons pu montrer que le *Toy-model* ne présentait pas de point fixe accessible en présence de désordre. Ce comportement est en accord avec l'idée que la transition est d'ordre infini. De plus, en prenant une distribution initiale particulière très concentrée sur le mur de gauche, nous avons pu voir que la renormalisation conduisait en première approximation à l'équation

$$\frac{\partial r(\tau, x)}{\partial \tau} = a \frac{\partial r(\tau, x)}{\partial x} + w \int_0^x r(\tau, x - x_1) r(\tau, x_1) dx_1 \quad (6.26)$$

dont une solution en $r(\tau, x) = B(\tau)e^{-D(\tau)x}$ génère des équations du type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless.

Plusieurs questions peuvent encore être abordées dans le cadre du *Toy-model*.

- Nos études numériques suggèrent que les distributions limites qui émergent lorsque nous sommes sur la surface critique ne dépendent pas de la condition initiale. Il serait donc intéressant de savoir si une classe plus large de distributions initiales prises proches ou sur la surface critique conduit aussi à cette équation de renormalisation.
- L'équation 6.26 possède peut-être d'autres solutions et il serait possible d'essayer de les déterminer afin de voir si elles redonnent le même comportement à grands τ .

Par ailleurs, il serait intéressant de calculer les corrections d'ordre u à l'équation de la surface critique donnée par 6.26

$$\int_0^\infty x r(\tau, x) dx = \frac{a}{2w}$$

pour des fonctions $r(\tau, x)$ arbitraires et de vérifier leur concordance avec l'équation exacte (connue pour $a = 1$).

- Enfin, nous espérons que les questions ouvertes seront abordées du point de vue des mathématiques afin de donner une preuve rigoureuse à nos résultats, si cela est possible. En effet, il est peut-être possible de fournir des bornes à l'énergie libre proche du point critique afin de prouver la singularité essentielle.

Dans le cadre du modèle hiérarchique, déterminer la surface critique et prouver l'hypothèse de transition de phase d'ordre infini est une extension possible de ce travail, mais nécessite encore des efforts. Cela confirmerait la prédiction de Tang et Chaté faite dans [87]. Les lois de Lévy modulées par une exponentielle semblent constituer une classe de distributions qui ne varient presque pas lors d'une itération. Nous espérons qu'elles sont le bon point de départ pour une renormalisation identique à celle sur le *Toy-model*, mais nous sommes encore confrontés à des difficultés techniques pour conclure.

Enfin, si la version hiérarchique du problème de Poland-Scheraga offre les mêmes conclusions sur la transition que le *Toy-model*, nous pouvons envisager un travail de généralisation sur le problème original.

Bibliographie

- [1] Aizenman M., Wehr J. : *Rounding effects of quenched randomness on 1st-order phase transition*. Commun. Math. Phys. **130**, 489-528 (1990).
- [2] Alexander K.S., Sidoravicius V. : *Pinning of polymers and interfaces by random potentials*. Ann. Appl. Prob. **16**, 636-669 (2006).
- [3] Alexander K. S. : *The effect of disorder on polymer depinning transitions*. Commun. Math. Phys. **279**, 117-146 (2008).
- [4] Alexander K.S., Zygouras N. : *Quenched and annealed critical points in polymer pinning models*. Commun Math. Phys. **291**, 659-689 (2009).
- [5] Azbel M.Y. : *Long-range interaction and heterogeneity yield a different kind of critical phenomenon*. Phys. Rev. E **68**, 050901 (2003).
- [6] Azbel M.Y. : *Giant non-universal critical index and fluctuations in DNA phase transition*. Physica A-Stat. Mech. Appl. **321**, 571-576 (2003).
- [7] Bhattacharjee S.M., Mukherji S. : *Directed polymers with random interaction marginal relevance and novel criticality*. Phys. Rev. Lett. **70**, 49-52 (1993).
- [8] Bhattacharjee S.M., Mukherji S. : *Directed polymers with random interaction - An exactly solvable case*. Phys. Rev. E **48**, 3483-3496 (1993).
- [9] Berger Q., Lacoïn H. : *Sharp critical behavior for random pinning model with correlated environment*. Stoch. Proc. and Appl., **122**, 1397-1436 (2012).
- [10] Berger Q., Toninelli F.L. : *Hierarchical pinning model in correlated random environment*. Annales de l'Institut Henri Poincaré, **48**, 781-816 (2013).
- [11] Birkner M., Sun R. : *Annealed vs quenched critical points for a random walk pinning model*. Annales de l'Institut Henri Poincaré, **46**, 414-441 (2010).
- [12] Bockelmann U., Essevaz-Roulet B., Heslot F. : *Molecular Stick-Slip Motion Revealed by Opening DNA with Piconewton Forces*. Phys. Rev. Lett. **79**, 4489 (1997).
- [13] Bockelmann U., Essevaz-Roulet B., Heslot F. : *DNA strand separation studied by single molecule force measurement*. Phys. Rev. E **58** 2386-2394 (1998).
- [14] Bockelmann U., Essevaz-Roulet B., Thomen P., Heslot F. : *Mechanical opening of DNA by micro manipulation and force measurements*. C. R. Phys. **3**, 585-594 (2002).
- [15] Bodineau T., Giacomin G., Lacoïn H., Toninelli F.L. : *Copolymers at selective interfaces: new bounds on the phase diagram*. J. Stat. Phys. **132**, 603-626 (2008).
- [16] Bolthausen E., den Hollander F. : *Localization transition of random copolymers near selective interface*. Ann. Probab. **25**, 1334-1366 (1997).

- [17] Bolthausen E., Giacomin G. : *Periodic copolymers at selective interfaces: a large deviation approach*. Ann. App. Probab. **15**, 963-983 (2005).
- [18] Bolthausen E., Caravenna E., de Tiliere B. : *The quenched critical point of a diluted disordered polymer model*. Stoch. Process. Appl. **119**, 1479-1504 (2009).
- [19] Bolthausen E., Funaki T., Otobe T. : *Concentration under scaling limits for weakly pinned Gaussian random walks*. Prob. Theory Relat. Fields **143**, 441-480 (2009).
- [20] Caravenna F., Giacomin G. : *On constrained annealed bounds for pinning and wetting models*. Electron. Commun. Probab. **10**, 179-189 (2005).
- [21] Chayes J. T., Chayes L., Fisher D.S., Spencer T. : *Finite-Size Scaling and Correlation Lengths for Disordered Systems*. Phys. Rev. Lett. **57**, 2999 (1986).
- [22] Cluzel P., Lebrun A., Heller H., Lavery R., Viovy J-L., Chatenay D., Caron F. : *DNA: An Extensible Molecule*. Science **271**, 792-794 (1996).
- [23] Cocco S., Monasson R., Marko J.F. : *Force and kinetic barriers to unzipping of the DNA double helix*. Proc. Natl. Acad. Sci. USA **98** 8608-8613 (2001).
- [24] Collet P., Eckmann J.P., Glaser V., Martin A. : *A spin glass with random couplings*. J. Stat. Phys. **36**, 89-106 (1984).
- [25] Collet P., Eckmann J.P., Glaser V., Martin A. : *Study of the iterations of a mapping associated to a spin-glass model*. Commun. Math. Phys. **94**, 353-370 (1984).
- [26] Cuesta J. A., Sánchez A. : *General non-existence theorem for phase transitions in one-dimensional systems with short range interactions, and physical examples of such transitions*. J. Stat. Phys, **115** (2004).
- [27] Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R. : *Entropy-driven DNA denaturation*. Phys. Rev. E **47**, 44-47 (1993).
- [28] Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R. : *Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation*. Phys. Rev. E **47**, 684-697 (1993).
- [29] Dauxois T., Peyrard M. : *Entropy-driven transition in a one dimensional system*. Phys. Rev. E **47**, 4027-4040 (1993).
- [30] De Gennes, P.G. : *Scaling concepts in polymer physics*. Cornell University Press, Ithaca, NY, (1979).
- [31] Derrida B., Gardner E. : *Renormalisation group study of a disordered model*. J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 3223-3236 (1984).
- [32] Derrida B., Dickinson H., Yeomans J. : *On the Harris criterion for hierarchical lattices*. J. Phys. A: Math. Gen. **18**, 53-55 (1985).
- [33] Derrida, B. : *Directed polymers in a random medium* Physica A: Stat. Mech. App. **163**, 71-84 (1990).

- [34] Derrida B., Hakim V., Vannimenus J. : *Effect of disorder on 2-dimensional wetting*. J. Stat. Phys. **66**, 1189-1213 (1992).
- [35] Derrida B., Giacomin G., Lacoïn H., Toninelli, F.L. : *Fractional moment bounds and disorder relevance for pinning models*. Commun. Math. Phys. **287**, 867-887 (2009).
- [36] Derrida B., Retaux M. : *The Depinning Transition in Presence of Disorder: A Toy Model*. J Stat Phys **156**, 268-290 (2014).
- [37] Doi M., Edwards S.F. : *The theory of Polymer dynamics*. Oxford University Press, (1986).
- [38] Dyson F.J. : *An Ising ferromagnet with discontinuous long-range order*. Commun. Math. Phys. **21**:269 (1971).
- [39] Edwards, S.F. : *The statistical mechanics of polymers with excluded volume*. Proc. Phys. Sci., **85**, 613-624 (1965).
- [40] Essevaz-Roulet B., Bockelmann U., Heslot F. : *Mechanical separation of the complementary strands of DNA*. Proc. Natl. Acad. Sci. USA **94** 11935-11940 (1997).
- [41] Fisher M.E. : *Effect of excluded volume on phase transitions in biopolymers*. J. Chem. Phys, **45**, 1469-1473 (1966).
- [42] Fisher M.E. : *Walks, walls, wetting and melting*. J. Stat. Phys. **34**, 684-689 (1984).
- [43] Flajolet P., Sedgewick R. : *Analytic Combinatorics*. Cambridge University Press, New York (2009).
- [44] Flory P. : *Principles of Polymer Chemistry*. Cornell University Press, (1953).
- [45] Forgacs G., Luck J.M., Nieuwenhuizen T.M., Orland H. : *Wetting of a disordered substrate - Exact critical behavior in 2 dimension*. Phys. Rev. Lett. **57**, 2184-2187 (1986).
- [46] Forgacs G., Luck J.M., Nieuwenhuizen T.M., Orland H. : *Exact critical behavior of two dimensional wetting problems with quenched disorder*. J. Stat. Phys. **51**, 29-56 (1988).
- [47] Gangardt D.M., Nechaev S.K. : *Wetting transition on a one-dimensional disorder*. J. Stat. Phys. **130**, 483-502 (2008).
- [48] Garel T., Huse D.A., Leibler S. and Orland H. : *Localization transition of random chains at interfaces*. Europhys. Lett. **8**, 9-13 (1989).
- [49] Garel T., Monthus C. : *Two-dimensional wetting with binary disorder: a numerical study of the loop statistics*. Eur. Phys. J. B **46**, 117-125 (2005).
- [50] Giacomin G., Toninelli F.L. : *Smoothing effect of quenched disorder on polymer depinning transitions*. Commun. Math. Phys. **266**, 1-16 (2006).
- [51] Giacomin G., Toninelli F.L. : *Smoothing of depinning transitions for directed polymers with quenched disorder*. Phys. Rev. Lett. **96**, 070602 (2006).

- [52] Giacomin G. : *Random Polymer models*. Imperial College Press, (2007).
- [53] Giacomin G., Toninelli F.L. : *On the irrelevant disorder regime of pinning models*. Ann. Prob. **37**, 1841-1875, (2009).
- [54] Giacomin G., Lacoïn H., Toninelli F.L. : *Marginal relevance of disorder for pinning models*. Comm. Pure Appl. Math. **63**, 233-265 (2010).
- [55] Giacomin G., Lacoïn H., Toninelli F.L. : *Hierarchical pinning models, quadratic maps and quenched disorder*. Prob. Theory Relat. Fields **147**, 185-216 (2010).
- [56] Giacomin G., Lacoïn H., Toninelli F.L. : *Disorder relevance at marginality and critical point shift*. Annales de l'Institut Henri Poincaré - Prob. Stat. **47**, 148-175 (2011).
- [57] Halpin-Healy T., Zhang Y.C. : *Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that. Aspects of multidisciplinary statistical mechanics*. Phys. Reports, **254**, 215-414 (1995).
- [58] Harris A.B. : *Effect of random defects on the critical behaviour of ising models*. J. Phys. C, **7**, 1671-1692 (1974).
- [59] Jo K, et al. : *A single-molecule barcoding system using nanoslits for DNA analysis*. PNAS **104**:2673-2678 (2007).
- [60] Kafri Y., Mukamel D., Peliti L. : *Why is the DNA denaturation transition first order?* Phys. Rev. Lett. **85**, 4988-4991 (2000).
- [61] Kafri Y., Mukamel D. : *Griffiths singularities in unbinding of strongly disordered polymers*. Phys. Rev. Lett. **91**, 038103 (2003).
- [62] Kosterlitz J.M., Thouless D.J. : *Ordering, metastability and phase-transitions in 2 dimensional systems*. J. Phys. C **6**, 1181-1203 (1973).
- [63] Kosterlitz J.M., Thouless D.J. : *Early work on defect driven phase transitions*. In: Jose Jorge, V. (ed.) 40 Years of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Theory, pp. 1-67. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2013).
- [64] Kunz H., Livi R. : *DNA denaturation and wetting in the presence of disorder*. Eur. Phys. Lett. **99**, 30001 (2012).
- [65] Lacoïn H., Toninelli F.L. : *A smoothing inequality for hierarchical pinning models*. Prog. Prob. **62**, 271-278 (2009).
- [66] Lacoïn H. : *The martingale approach to disorder irrelevance for pinning models*. Electron. Commun. Prob. **15**, 418-427 (2010).
- [67] Lacoïn H. : *Hierarchical pinning model with site disorder: disorder is marginally relevant*. Prob. Theory Relat. Fields **148**, 159-175 (2010).
- [68] Lacoïn H., Moreno G. : *Directed polymers on hierarchical lattices with site disorder*. Stoch. Process. Appl. **120**, 467-493 (2010).

- [69] Lubensky D.K., Nelson D.R. : Pulling Pinned Polymers and Unzipping DNA. *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000).
- [70] Monthus C. : *On the localization of random heteropolymers at the interface between two selective solvents.* *Eur. Phys. J. B* **13**, 111-130 (2000).
- [71] Monthus C., Garel T., Orland H. : *Copolymer at a selective interface and two-dimensional wetting: a grand canonical approach.* *Eur. Phys. J. B* **17**, 121-130 (2000).
- [72] Monthus C., Garel T. : *Distribution of pseudo-critical temperatures and lack of self-averaging in disordered Poland–Scheraga models with different loop exponents.* *Eur. Phys. J. B* **48**, 393-403 (2005).
- [73] Monthus C. : *Random walks and polymers in the presence of quenched disorder.* *Lett. Math. Phys.* **78**, 207-233 (2006).
- [74] Monthus C., Garel T. : *Multifractal statistics of the local order parameter at random critical points: application to wetting transitions with disorder.* *Phys. Rev. E* **76**, 021114 (2007).
- [75] Monthus C., Garel T. : *Critical points of quadratic renormalizations of random variables and phase transitions of disordered polymer models on diamond lattices.* *Phys. Rev. E* **77**, 021132 (2008).
- [76] Mukherji S., Bhattacharjee S.M. : *Failure of the Harris criterion for directed polymers on hierarchical lattices.* *Physical Review E*, **52**, 1930-1933 (1995).
- [77] Orlandini E., Tesi M.C., Whittington S.G. : *A self-avoiding walk model of random copolymer adsorption.* *J. Phys. A.: Math. Gen.* **32**, 469-477 (1999).
- [78] Peyrard M., Bishop A.R. : *Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation.* *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2755 (1989).
- [79] Poland D., Scheraga H.A. : *Occurrence of a phase transition in nucleic acid models.* *J. Chem. Phys.* **45**, 1464-1469 (1966).
- [80] Reisner *et al.* : *Statics and dynamics of single DNA molecules confined in nanochannels.* *Phys. Rev. Lett.* **94**:196101 (2005).
- [81] Reisner *et al.* : *Single-molecule denaturation mapping of DNA in nanofluidic channels.* *PNAS* **107**, 13299 (2010).
- [82] Richard C., Guttmann A.J. : *Poland–Scheraga models and the DNA denaturation transition.* *J. Stat. Phys.* **115**, 943-965 (2004).
- [83] Sinai Y.G. : *A random walk with random potential.* *Th. Probab. Appl.* **38**, 382-385 (1993).
- [84] Smith S.B., Finzi L., Bustamante C. : *Direct mechanical measurements of the elasticity of single DNA molecules by using magnetic beads.* *Science.* **258**, 1122-1126 (1992).

- [85] Smith S.B., Cui Y., Bustamante C. : *Overstretching B-DNA: The Elastic Response of Individual Double-Stranded and Single-Stranded DNA Molecules*. Science. **271**, 795-799 (1996).
- [86] Strick T.R., Croquette V., Bensimon D. : *Biophysics Homologous pairing in stretched supercoiled DNA*. Proc. Natl. Acad. Sci. USA. **95**, 10579-10583 (1998).
- [87] Tang L.H., Chaté H. : *Rare-event induced binding transition of heteropolymers*. Phys. Rev. Lett. **86**, 830-833 (2001).
- [88] Toninelli F.L. : *Critical properties and finite-size estimates for the depinning transition of directed random polymers*. J. Stat. Phys., **126**, 1025-1044 (2007).
- [89] Toninelli F.L. : *A replica-coupling approach to disordered pinning models*, Commun. Math. Phys. **280**, 389-401 (2008).
- [90] Toninelli F.L. : *Disordered pinning models and copolymers: beyond annealed bounds*. Ann. Appl. Prob. **18**, 1569-1587 (2008).
- [91] Toninelli F.L. : *Coarse graining, fractional moments and the critical slope of random copolymers*. Elect. J. Prob., **14**, 531-547 (2009).
- [92] Van Erp T., Peyrard M. : *The dynamics of the DNA denaturation transition*. Europhys. Lett. **98**, 48004 (2012).
- [93] van Hove L. : Physica **16**:137 (1950).
- [94] Whittington S.G. : *Random copolymers*. Physica A **314**, 214-219 (2002).

CORRECTION DE TAILLE FINIE À LA FONCTION DE
GRANDES DÉVIATIONS DE DENSITÉ
DU PROCESSUS D'EXCLUSION SYMÉTRIQUE.

Le Processus Simple d'Exclusion Symétrique : introduction et présentation de nos résultats

Le but de cette partie est d'introduire le processus d'exclusion symétrique (SSEP) sur lequel nous avons travaillé au début de ma thèse et d'expliquer la question que nous avons abordée, à savoir le calcul des corrections de la fonction de grandes déviations pour un système de taille finie. Le but est d'introduire simplement les concepts qui seront utilisés dans l'article que nous avons publié.

Le SSEP est un système qui échange des particules avec deux réservoirs à des densités différentes, il est donc maintenu hors de l'équilibre thermodynamique. Cela signifie que même en régime stationnaire les paramètres intensifs ne sont pas homogènes (ici la densité). En premier lieu, nous décrirons la dynamique microscopique du système ainsi que la nature des couplages avec les réservoirs de particules qui le maintiennent hors de l'équilibre. Ensuite, nous parlerons de la fonction de grandes déviations de densité, en la mettant en rapport avec l'énergie libre, puis nous introduirons la fonction génératrice de densité.

Enfin, nous exposerons nos résultats et le raisonnement suivi dans l'article pour les dériver. La question centrale concerne l'expression de la fonction génératrice et de sa première correction de taille finie. L'objectif est de trouver cette correction et de la comparer à celle d'un système générique à l'équilibre thermodynamique.

7.1 Définition du processus simple d'exclusion symétrique

Imaginons la situation suivante : un objet conducteur de la chaleur est mis en contact avec deux bains thermiques aux températures T_a et T_b (voir Fig.7.1), a priori différentes l'une de l'autre, et nous nous posons la question du profil de température dans un régime stationnaire.

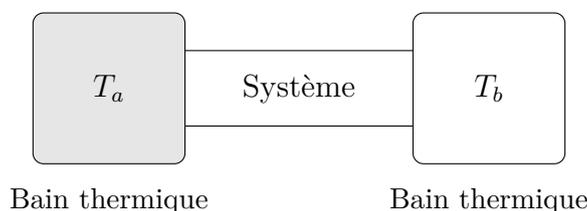


Figure 21: Un système physique en contact avec deux réservoirs thermiques.

Le cas à l'équilibre : lorsque les températures des deux réservoirs sont les mêmes $T_a = T_b = T$, la probabilité de trouver le système dans une configuration \mathcal{C} est donnée par la distribution de Gibbs-Boltzmann :

$$P_{\text{équilibre}} = Z^{-1} \exp\left(-\frac{E(\mathcal{C})}{k_B T}\right) \quad (7.1)$$

où $E(\mathcal{C})$ est l'énergie interne du système quand il se trouve dans la configuration \mathcal{C} . La fonction de partition Z est la somme sur toutes les configurations des poids de Boltzmann. Le calcul de cette fonction est souvent l'objectif à atteindre en mécanique statistique, en effet la connaissance de Z permet d'obtenir les propriétés des grandeurs macroscopiques du système à l'équilibre (équation d'état, diagramme de phase, fluctuations, etc...). En général, cette fonction ne dépend pas de la nature précise des couplages avec le bain thermique.

Le cas hors de l'équilibre : lorsque les températures des deux réservoirs sont différentes $T_a \neq T_b$, le système peut atteindre un état stationnaire hors-d'équilibre après un certain temps, mais nous ne sommes plus en mesure de donner une formule générale pour le poids statistique $P_{\text{hors-d'équilibre}}(\mathcal{C})$ qui étendrait 7.1 aux états stationnaires.

Contrairement au cas précédent, la mesure stationnaire $P_{\text{hors-d'équilibre}}(\mathcal{C})$ dépend généralement de la dynamique microscopique propre au système et des couplages avec les réservoirs thermiques. Dans quelques cas rares (voir par exemple [3, 4, 5, 12, 17, 23]), cette mesure peut être calculée et permet de déterminer des propriétés stationnaires hors-d'équilibre du système [13, 14, 19, 26], comme la température ou le profil et le flux d'énergie à travers le système, etc...

Une autre situation stationnaire hors-d'équilibre peut être décrite par un système qui échange des particules avec deux réservoirs de densité ρ_a et ρ_b (voir Fig. 7.1). Comme dans le cas précédent, si $\rho_a \neq \rho_b$, un flux de particule s'établit le long du système. Nous pouvons alors nous poser les questions suivantes : quel est le courant moyen de particules entre les réservoirs? quel est le profil typique de densité? etc...

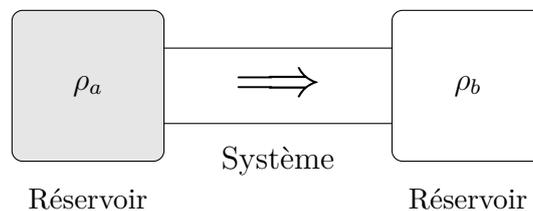


Figure 22: Un système physique en contact avec deux réservoirs de particule. Si $\rho_a > \rho_b$, nous observons un flux moyen de particules de la gauche vers la droite.

Pour modéliser plus en détails la situation de la Fig.7.1, introduisons maintenant le processus simple d'exclusion symétrique [20, 25] . Le modèle est défini comme un réseau unidimensionnel de L sites, chacun pouvant être soit peuplé par une particule, soit être

vide. Avec ces L variables binaires, il y a donc 2^L configurations. Les extrémités du système sont laissées ouvertes.

Pendant la durée infinitésimale dt , chacune des particules a un taux de probabilité dt de sauter sur le site voisin de gauche (ou de droite) si celui-ci est vide. Aux extrémités, sur les sites 1 et L , le couplage avec les réservoirs modifie la dynamique. Nous modélisons les échanges de la manière suivante : pendant dt , une particule est injectée sur le site 1 (respectivement L) avec la probabilité αdt (resp. δdt) si le site est vide et une particule est retirée avec le taux γdt (resp. βdt) si le site est occupé.

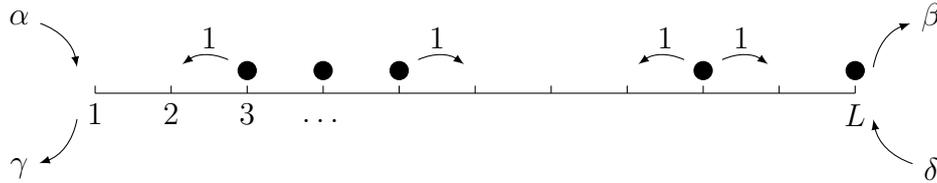


Figure 23: Le processus simple d'exclusion symétrique couplé avec des réservoirs aux densités ρ_a et ρ_b données par 7.2.

Ces taux avec lesquels les particules sont injectées ou retirées sur les sites 1 et L correspondent aux contacts avec les réservoirs de densité :

$$\rho_a = \frac{\alpha}{\alpha + \gamma} \quad \text{et} \quad \rho_b = \frac{\delta}{\delta + \beta}. \quad (7.2)$$

Pour justifier 7.2, il est facile de vérifier en utilisant le bilan détaillé que si nous coupons le contact avec le réservoir de droite ($\beta = \delta = 0$), la mesure stationnaire est une mesure de Bernoulli où les sites sont occupés avec une densité $\rho_a = \alpha/(\alpha + \gamma)$. Le même argument sert pour l'expression de ρ_b .

Le SSEP présente l'avantage d'être l'un des modèles les plus simples de systèmes diffusifs hors-d'équilibre en contact avec deux réservoirs et d'avoir une mesure stationnaire connue quelles que soient $\alpha, \beta, \delta, \gamma$ et L . Il fut d'ailleurs l'un des premiers modèles pour lequel une expression de la fonction de grandes déviations (que nous allons définir juste après) a été trouvée [6, 7, 8], confirmant ainsi le caractère non-local des fonctions de corrélations de densité dans des systèmes hors-d'équilibre (voir [1, 15, 11, 18, 21, 22, 24]).

7.2 Les fonctions de grandes déviations

7.2.1 Définitions

Dans une situation de physique à l'équilibre, l'énergie libre d'un système se définit à partir de la fonction de partition :

$$F = -k_B T \log Z.$$

On parle aussi souvent de l'énergie libre volumique, définie par :

$$\frac{f}{k_B T} = - \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\log Z_V}{V}. \quad (7.3)$$

Dans cette partie, nous allons montrer que la connaissance de cette fonction permet de calculer les fluctuations au sein du système et de connaître la fonction de grandes déviations. Cette dernière permettra d'ailleurs d'étendre la notion d'énergie libre à la physique hors-d'équilibre.

Considérons un système en dimension d , de volume $V = L^d$, peuplé par N particules en interaction de courte portée (par exemple un gaz réel). Le nombre moyen de particules dans une région ouverte de volume $v = \ell^d$ repéré par le vecteur \vec{r} dans l'enceinte du système vaut intuitivement pN , avec $p = v/V$. Nous savons aussi que les écarts typiques autour de cette valeur sont d'ordre \sqrt{N} .

Les plus grandes fluctuations autour de la moyenne sont en revanche rares et nous pouvons écrire leur probabilité comme

$$P_v(n) \sim \exp \left[-v a_{\vec{r}}(n/v) \right] \quad (7.4)$$

où $a_{\vec{r}}(\rho)$ est la fonction de grandes déviations de densité du système. Pour un système non diphasé avec des interactions locales et pris suffisamment loin d'une éventuelle transition de phase, $a_{\vec{r}}(\rho)$ est convexe et possède un unique minimum en une valeur $\rho^* = N/V$.

Si nous prenons les limites $L \rightarrow \infty$ et $\ell \rightarrow \infty$ tout en maintenant $\ell \ll L$, nous pouvons généraliser cette notion de grandes déviations à une fonctionnelle de la densité, en introduisant une coordonnée locale :

$$\vec{r} = L\vec{x}.$$

La probabilité d'observer le profil de densité $\rho(\vec{x})$ est alors donnée par :

$$\text{Prob}(\rho(\vec{x})) \sim \exp \left[-L^d \mathcal{F}(\rho(\vec{x})) \right] \quad (7.5)$$

et $\mathcal{F}(\rho(\vec{x}))$ est la fonctionnelle de grandes déviations de la densité. Il est clair que définies comme telles, les fonctions $a(\rho)$ ou $\mathcal{F}(\rho(\vec{x}))$ peuvent être aussi bien considérées dans le cadre d'un système à l'équilibre que dans le cas d'un système hors-d'équilibre en régime stationnaire.

7.2.2 Lien avec l'énergie libre et propriétés élémentaires

D'après [8], pour un système à l'équilibre, nous pouvons montrer que $a_{\vec{r}}(\rho)$ est reliée à l'énergie libre de façon très simple. Si $\ell = v^{1/d}$ est assez grande devant la distance typique d'interaction entre les particules, $v \ll V$ et en l'absence d'un potentiel extérieur, $a_{\vec{r}}(\rho)$ ne dépend plus de la position. Dans ces conditions, nous avons

$$P_v(n) = \frac{Z_v(n)Z_{V-v}(N-n)}{Z_V(N)} \exp \left(\mathcal{O}(v^{(d-1)/d}) \right)$$

où $Z_V(N)$ est la fonction de partition de N particules dans un volume V et le terme exponentiel représente les interactions entre les paires de particules dont l'une appartient au volume v et l'autre dans le volume $V - v$. En prenant le logarithme de la relation précédente et en utilisant 7.3 nous arrivons sur l'expression

$$a_{\vec{r}}(\rho) = a(\rho) = \frac{f(\rho) - f(\rho^*) - (\rho - \rho^*)f'(\rho^*)}{k_B T} \quad (7.6)$$

où $\rho^* = N/V$. La fonctionnelle de grandes déviations de densité peut aussi être reliée à l'énergie libre volumique. En prenant la limite continue, nous obtenons de la même façon

$$\mathcal{F}(\rho(\vec{x})) = \frac{1}{k_B T} \int d\vec{x} [f(\rho(\vec{x})) - f(\rho^*)]. \quad (7.7)$$

Donc pour un système à l'équilibre, la fonctionnelle de grandes déviations est entièrement déterminée par la connaissance de l'énergie libre volumique. Comme \mathcal{F} est un objet qui garde son sens pour un système hors-d'équilibre, cela revient à généraliser la définition de l'énergie libre. Cette fonction reste néanmoins difficile à calculer et n'est connue que pour un petit nombre de systèmes hors-d'équilibre.

Remarque 1 : quand $f(\rho)$ peut être développée autour de ρ^* (pour des densités où $f(\rho)$ n'est pas singulière), l'équation 7.6 montre que les fluctuations du profil de densité sont Gaussiennes. Pour des v assez grands, nous avons :

$$P_v(n) \sim \exp \left[-\frac{f''(\rho^*)}{2vk_B T} (n - v\rho^*)^2 \right]$$

et nous retrouvons le résultat connu d'Einstein et Smoluchowki (équation de fluctuation-dissipation), la variance est donnée par

$$\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = v k_B T \kappa(\rho)$$

où $\kappa(\rho) = f''(\rho)^{-1}$ est la compressibilité. Notons que si il y a une transition de phase, f présente une singularité en une densité ρ_c et les dérivées peuvent diverger. Les fluctuations de densité ne sont donc a priori plus Gaussiennes en ce point ou dans son voisinage.

Remarque 2 : pour un système à l'équilibre, la relation 7.7 nous apprend que \mathcal{F} est une fonctionnelle locale de la densité $\rho(\vec{x})$. Cela implique que les corrélations du profil de densité s'établissent sur des distances typiquement microscopiques (loin d'une transition de phase, elles décroissent exponentiellement vite). Nous allons voir que cela contraste fortement avec les systèmes hors-d'équilibre.

Remarque 3 : comme $f(\rho)$ est une fonction convexe, la fonctionnelle de densité l'est également. Cela signifie que pour deux profils de densités $\rho_1(\vec{x})$ et $\rho_2(\vec{x})$, nous avons l'inégalité suivante pour $0 < \lambda < 1$:

$$\mathcal{F}(\lambda \rho_1(\vec{x}) + (1 - \lambda)\rho_2(\vec{x})) \leq \lambda \mathcal{F}(\rho_1(\vec{x})) + (1 - \lambda)\mathcal{F}(\rho_2(\vec{x}))$$

7.2.3 La fonction génératrice

Introduisons dans ce paragraphe la fonctionnelle génératrice de densité. Pour un système unidimensionnel (ce qui nous intéressera par la suite), de taille L , où x est une coordonnée réduite, nous définissons :

$$\exp [L \mathcal{G}(h(x))] = \left\langle \exp \left[L \int_0^1 h(x) \rho(x) dx \right] \right\rangle \quad (7.8)$$

où $h(x)$ est une fonction arbitraire et $\langle \cdot \rangle$ dénote la moyenne sur le profil de densité $\rho(x)$ prise dans l'état stationnaire. La définition 7.8 ne requiert pas nécessairement que nous soyons à l'équilibre.

Comme la probabilité de trouver un profil $\rho(x)$ est donnée par 7.5, la moyenne dans 7.8 est dominée aux grandes valeurs de L par le profil optimal (qui dépend de $h(x)$), et donc nous pouvons voir que \mathcal{G} est la transformée de Legendre de \mathcal{F} :

$$\mathcal{G}(h(x)) = \max_{\{\rho(x)\}} \left[\int_0^1 h(x) \rho(x) dx - \mathcal{F}(\rho(x)) \right] \quad (7.9)$$

Vu la formule 7.9, il est clair que si \mathcal{F} est une fonctionnelle locale de la densité, alors \mathcal{G} l'est également.

La fonctionnelle \mathcal{G} est dite génératrice car elle permet de trouver toutes les corrélations du profil de densité en dérivant par rapport à $h(x)$. Nous avons :

$$\begin{aligned} \langle \rho(x) \rangle &= \left. \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta h(x)} \right|_{h=0} \\ \langle \rho(x) \rho(y) \rangle - \langle \rho(x) \rangle \langle \rho(y) \rangle &= \frac{1}{L} \left. \frac{\delta^2 \mathcal{G}}{\delta h(x) \delta h(y)} \right|_{h=0} \end{aligned} \quad (7.10)$$

Remarque : si le système est considéré discret, la définition de la fonctionnelle génératrice 7.8 pourrait être écrite en fonction du taux d'occupation n_i du i -ème site et d'un champ extérieur h_i :

$$\exp \left[L \mathcal{G}(h_1, \dots, h_L) \right] = Z_L(h_1, \dots, h_L) = \sum_{\{n_1, \dots, n_L\}} P(n_1, \dots, n_L) \exp \left[\sum_{i=1}^L h_i n_i \right]. \quad (7.11)$$

où $P(n_1, \dots, n_L)$ est la probabilité de trouver le profil d'occupation (n_1, \dots, n_L) le long du système. Dans un cas à l'équilibre, le membre de droite de cette équation n'est rien d'autre que la fonction de partition du système que nous soumettons à un champ extérieur (h_1, \dots, h_L) .

7.3 Comparaison des fonctionnelles de densité pour les cas à l'équilibre et hors-d'équilibre

7.3.1 À l'ordre dominant : l'extensivité

Pour le processus simple d'exclusion symétrique en contact avec un réservoir de densité ρ_a au site 1 et de densité ρ_b au site L , il est possible de calculer algébriquement à partir d'un *ansatz* matriciel la mesure d'un état $P(n_1, \dots, n_L)$ en régime stationnaire. Cette approche microscopique fait intervenir des éléments d'un produit de L matrices, et permet ensuite de trouver le comportement à grande échelle du système [4, 6, 7].

La partie extensive (c'est-à-dire proportionnelle à la taille du système) de la fonctionnelle génératrice de la densité a été calculée dans le régime stationnaire :

$$\mathcal{G}(h(x)) = \int_0^1 dx \left[\log(1 + F(x)(e^{h(x)} - 1)) - \log \left(\frac{F'(x)}{\rho_a - \rho_b} \right) \right] \quad (7.12)$$

où la fonction $F(x)$ est la solution monotone de l'équation

$$F''(x) = \frac{F'(x)^2 (e^{h(x)} - 1)}{1 + F(x)(e^{h(x)} - 1)} \quad (7.13)$$

qui satisfait aux bords les conditions $F(0) = \rho_a$ et $F(1) = \rho_b$. Notons que le caractère non-local de la fonctionnelle génératrice \mathcal{G} se voit par le fait que $F(x)$ ne dépende pas que de la valeur du champ extérieur h au voisinage de x , mais bien de l'ensemble de ses valeurs sur tout l'intervalle $0 < x < 1$.

D'ailleurs, en prenant un faible écart de densité (i.e. avec $\rho_a - \rho_b$ petit), nous pouvons exprimer le début du développement de $F(x)$ en fonction de h , ce qui permet d'avoir l'expression de la fonction de corrélation connexe de densité via 7.10. Nous montrons que

$$\langle \rho(x) \rangle = \rho_a + x(\rho_b - \rho_a) \quad (7.14)$$

ce qui correspond au profil de densité le plus favorable, ainsi que

$$\langle \rho(x)\rho(y) \rangle_c = -\frac{x(1-y)}{L} (\rho_a - \rho_b)^2 \quad (7.15)$$

ce qui permet de voir que les corrélations s'étendent sur des distances égales à la taille du système.

En revanche, pour un système à l'équilibre, loin d'une transition, l'équation 7.7 qui relie la fonction de grandes déviations à l'énergie libre montre que la fonction génératrice de densité est locale. Nous nous attendons généralement à avoir une fonction sous la forme

$$\mathcal{G}(h(x)) = \int_0^1 dx g(h(x)) \quad (7.16)$$

où $g(h)$ est (au signe près) l'énergie libre du système sous un champ constant h . Cela peut se comprendre en divisant le système de taille L en un grand nombre de sous-systèmes de taille Ldx grande devant la longueur de corrélation ξ , mais petite devant L . Dans chacun de ces sous-systèmes, le champ h est essentiellement constant et l'énergie libre de ces systèmes peut être simplement sommée.

7.3.2 La correction de taille finie

Dans ce paragraphe, nous posons la question que nous avons abordé et nous donnons les résultats obtenus dans l'article [10].

En mécanique statistique, il est fréquent d'utiliser la limite thermodynamique pour le calcul de l'énergie libre ou des fonctions de grandes déviations. Cette limite est une simplification car elle fait dominer les effets de volume sur les effets de surface. En prenant des systèmes grands, mais pas de taille infinie, nous pouvons nous demander quelle est l'expression de la correction à la partie extensive de ces fonctions. Plus précisément, si pour des L grands nous écrivons

$$L\mathcal{G} = LG_0 + G_1 + \frac{1}{L}G_2 \dots$$

pouvons-nous trouver les termes G_1 , G_2 , etc... en fonction des paramètres de couplage avec les réservoirs et du champ extérieur imposé ? Le but est d'obtenir la correction pour le SSEP et de le comparer au cas d'un système à l'équilibre.

Dans l'article [10], nous procédons à un calcul afin de trouver l'ordre correctifs des équations 7.12 et 7.16 en prenant un champ extérieur h qui varie peu à l'échelle du système. Autrement dit, le champ sur le i -ème site est de la forme

$$h_i = h(i/L). \quad (7.17)$$

Pour le cas du SSEP dans un état stationnaire, l'ordre dominant accompagné de la première correction s'écrivent de la façon suivante :

$$L\mathcal{G}(h(x)) = L \int_0^1 dx \left[\log(1 + F(x)(e^{h(x)} - 1)) - \log\left(\frac{F'(x)}{\rho_a - \rho_b}\right) \right] \\ - a \log\left(\frac{F'(0)}{\rho_b - \rho_a}\right) - b \log\left(\frac{F'(1)}{\rho_b - \rho_a}\right) - \frac{1}{2} \log(\varphi(0)) \quad (7.18)$$

où F est la solution de 7.13, les paramètres a et b sont définis par rapport aux couplages avec les réservoirs par

$$a = \frac{1}{\alpha + \gamma} \quad \text{et} \quad b = \frac{1}{\beta + \delta} \quad (7.19)$$

et φ est la solution de l'équation différentielle linéaire

$$\varphi''(x) = -\left(\frac{F''(x)}{F'(x)}\right)' \varphi(x) \quad (7.20)$$

qui satisfait les conditions aux limites $\varphi(1) = 0$ et $\varphi'(1) = -1$. Cette première correction possède un caractère non local, comme l'ordre dominant. En effet, $\varphi(0)$ dépend de la détermination de F sur tout l'intervalle $0 < x < 1$. Nous remarquons aussi que cette première correction ne dépend pas de la taille du système, ce qui sera aussi valable pour la cas à l'équilibre.

Ce résultat peut être mis en comparaison avec celui d'un système à l'équilibre pour lequel nous avons obtenu [10] :

$$L\mathcal{G}(h(x)) = L \int_0^1 dx g(h(x)) + A^{\text{left}}(h(0)) + A^{\text{right}}(h(1)) \\ + \frac{1}{L} \left[h'(0) B^{\text{left}}(h(0)) + h'(1) B^{\text{right}}(h(1)) + \int_0^1 dx C(h(x)) h'(x)^2 \right] \quad (7.21)$$

où A^{left} , A^{right} , B^{left} et B^{right} sont des fonctions définies dans l'article. Nous constatons que contrairement au cas du SSEP, la première correction se résume ici à un terme de bords. À l'ordre suivant, celui en $1/L$ (que nous n'avons pas étudié pour le cas hors-d'équilibre), nous observons également des termes des bords ainsi qu'une intégrale sur le système qui fait intervenir le carré du gradient du champ extérieur, caractéristique d'une théorie de Landau-Ginzburg.

La fonction C dans 7.21 s'exprime en fonction de la fonction de corrélation connexe à deux points. En notant,

$$\langle n_i n_j \rangle_c = c_{j-i}(h)$$

nous avons obtenu

$$C(h) = -\frac{1}{2} \sum_{k \geq 1} k^2 c_k(h). \quad (7.22)$$

Cette fonction a la particularité de ne pas dépendre du détail des interactions microscopiques du modèle.

7.4 La dérivation du résultat

Pour finir d'introduire l'article présenté dans la partie suivante, nous proposons ici un résumé du raisonnement pour dériver le résultat 7.18.

Le but est donc de calculer la première correction de taille finie de la fonction $Z_L(h_1, \dots, h_L)$ définie par 7.11. Nous commençons d'abord par considérer la question sur un modèle discret, nous ne prendrons la limite continue qu'à la fin.

En utilisant l'ansatz matriciel introduit par [4, 6, 7] pour calculer 7.12, l'expression exacte d'une fonction génératrice a été trouvée (voir par exemple Équ. 3.7 de [7]). Cette dernière permet donc en particulier d'obtenir Z_L lorsque le champ h est constant le long du système. Ce résultat sera la base qui nous permettra ensuite de répondre à la question quand le champ n'est plus constant, mais lentement variable. Lorsque L est grand, nous avons :

$$Z_L(h, \dots, h) \simeq \frac{\left(\frac{\rho_a - \rho_b}{\mu_0}\right)^{L+a+b}}{(1 + \rho_a(e^h - 1))^a (1 + \rho_b(e^h - 1))^b} \left(1 + \mathcal{O}(1/L)\right) \quad (7.23)$$

où

$$\mu_0 = \frac{1}{e^h - 1} \log \frac{1 + \rho_a(e^h - 1)}{1 + \rho_b(e^h - 1)}. \quad (7.24)$$

Dans ces expressions, a et b sont définis par 7.19.

Par conséquent, pour un système de taille L (grande) avec un champ h constant et les densités ρ à gauche et ρ' à droite, la fonction génératrice prend la forme :

$$z(\rho, \rho', h) \simeq B(\rho, \rho', h) e^{L[A(\rho, \rho', h) + \log(\rho - \rho')]} \quad (7.25)$$

Imaginons maintenant que le système de taille L soit divisé en n sous-systèmes (ou boîtes) de taille L_1, L_2, \dots, L_n , toutes grandes et qu'au sein de chacune d'entre elles soient imposés des champs extérieurs constants h_1, h_2, \dots, h_n . Dans ce cas, l'équation 7.13 est encore soluble : il suffit de raccorder par continuité F et sa dérivée aux jonctions des boîtes. Les valeurs F_n de F aux jonctions entre les boîtes sont des interpolations de la valeur de la densité le long du système.

Il existe, encore grâce à l'ansatz matriciel, une formule qui permet de calculer sans approximation la fonction génératrice du grand système en fonction de celle des n sous systèmes. Cette formule fait intervenir $n - 1$ intégrations complexes (où les variables d'intégration sont les densités aux jonctions des sous systèmes). Elle est appelée formule d'additivité, et donne :

$$Z_L(h_1, \dots, h_n; L_1, \dots, L_n) = \frac{\Gamma(L_1 + a + b) \Gamma(L_2 + 1) \dots \Gamma(L_n + 1)}{\Gamma(L + a + b)} (\rho_a - \rho_b)^{L+a+b} \\ \oint \frac{d\rho_1}{2i\pi} \dots \oint \frac{d\rho_{n-1}}{2i\pi} \frac{z_1(\rho_a, \rho_1, h_1) z_2(\rho_1, \rho_2, h_2) \dots z_n(\rho_{n-1}, \rho_b, h_n)}{(\rho_a - \rho_1)^{L_1+a+b} (\rho_1 - \rho_2)^{L_2+1} \dots (\rho_{n-1} - \rho_b)^{L_n+1}} \quad (7.26)$$

où les contours d'intégration vérifient $\rho_b < |\rho_{n-1}| < \dots < |\rho_1| < \rho_a$. Cette identité est vraie pour n'importe quel choix des h_m et des L_m : il n'est pas nécessaire d'avoir de

grandes taille de boîtes. Cette hypothèse ne sera faite qu'après, afin d'utiliser l'expression 7.25 des fonctions génératrices de chacune des boîtes : $z_m(\rho_{m-1}, \rho_m, h_m)$.

Remarque : le rôle particulier donné au premier sous-système (celui le plus à gauche, en contact avec le réservoir) est un artefact du calcul.

Si les boîtes sont de grandes tailles, nous pouvons écrire les $z_m(\rho_{m-1}, \rho_m, h_m)$ sous la forme 7.25 dans 7.26. Les conditions sont alors réunies pour utiliser une méthode du col car L est grand. Cela donne accès à l'expression de la fonction génératrice dans le cas d'un champ extérieur constant par morceaux, que nous pouvons écrire sous la forme :

$$Z_L(h_1, \dots, h_n; L_1, \dots, L_n) \simeq \mathcal{B}^* e^{L[\mathcal{A}^* + \log(\rho_a - \rho_b)]}. \quad (7.27)$$

où les expressions de \mathcal{A}^* et \mathcal{B}^* sont données dans [10].

La dernière étape du calcul consiste à remplacer le champ h constant par morceaux par un champ de la forme 7.17. Il s'agit de faire tendre le nombre de boîtes n vers l'infini, tout en gardant $L/n \gg 1$. Nous avons montré dans [10] que la solution de 7.13 ne diffère alors de celle d'un champ constant par morceaux que par un terme de l'ordre de $1/n^2$. Ainsi, en utilisant la formule d'Euler-McLaurin, il est possible d'avoir la version continue du résultat 7.27.

Bibliographie

- [1] Bertini L., De Sole A., Gabrielli D., Jona-Lasinio G., Landim C. : *On the long range correlations of thermodynamic systems out of equilibrium*. Cond-mat arXiv:0705.2996 (2007).
- [2] Bodineau T., Derrida B., Lecomte V., van Wijland F. : *Long range correlations and phase transition in non-equilibrium diffusive systems*. J. Stat. Phys. **133**, 1013-1031 (2008).
- [3] Derrida B., Domany E., Mukamel D. : *An exact solution of a one-dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries*. J. Stat. Phys. **69**, 667 (1992).
- [4] Derrida B., Evans M.R., Hakim V., Pasquier V. : *Exact solution of a 1d asymmetric exclusion model using a matrix formulation*. J. Phys. A: Math. Gen. **26**, 1493 (1993).
- [5] Derrida B., Janowsky S.A., Lebowitz J. L., Speer E. R. : *Exact solution of the totally asymmetric simple exclusion process—shock profiles*. J. Stat. Phys. **73**, 813 (1993).
- [6] Derrida B., Lebowitz J.L. and Speer E.R. : *Free energy functional for nonequilibrium systems: an exactly solvable case*. Phys. Rev. Lett. **87**, 150601 (2001).
- [7] Derrida B., Lebowitz J.L., Speer E.R. : *Large deviation of the density profile in the steady state of the open symmetric simple exclusion process*. J. Stat. Phys. **107**, 599 (2002).
- [8] Derrida B. : *Non-equilibrium steady states: fluctuations and large deviations of the density and of the current*. J. Stat. Mech. P07023, (2007).
- [9] Derrida B., Lebowitz J.L. and Speer E.R. : *Entropy of open lattice systems*. J. Stat. Phys **126**, 1083 (2007).
- [10] Derrida B., Retaux M. : *Finite size corrections to the large deviation function of the density in the one dimensional symmetric simple exclusion process*. J. Stat. Phys. **152**, 824-845 (2013).
- [11] Dorfman J.R., Kirkpatrick T.R., Sengers J.V. : *Generic long-range correlations in molecular fluids*. Annu. Rev. Phys. Chem. **45**, 213-239 (1994).
- [12] Evans M.R., Majumdar S.N., Zia R.K.P. : *Factorized steady states in mass transport models*. J. Phys. A: Math. Gen. **37**, L275 (2004).
- [13] Eckmann J.P., Young L.S. : *Temperature profiles in Hamiltonian heat conduction*. Europhys. Lett. **68**, 790 (2004).
- [14] Eckmann J. P., Young L. S. : *Nonequilibrium energy profiles for a class of 1-D models*. Commun. Math. Phys. **262**, 237 (2006).

- [15] Eyink G., Lebowitz J.L., Spohn H. : *Hydrodynamics of stationary non-equilibrium states for some stochastic lattice gas models*. Comm. Math. Phys. **132**, 253-283 (1990).
- [16] Eyink G., Lebowitz J.L., Spohn H. : *Lattice gas models in contact with stochastic reservoirs: local equilibrium and relaxation to the steady state*. Commun. Math. Phys. **140**, 119-131 (1991).
- [17] Katz S., Lebowitz J., Spohn H. : *Non-equilibrium steady states of stochastic lattice gas models of fast ionic conductors*. J. Stat. Phys. **34**, 497 (1984).
- [18] Kirkpatrick T.R., Cohen E.G.D., Dorfman J.R. : *Fluctuations in a nonequilibrium steady state: Basic equations*. Phys. Rev. A **26**, 950-971 (1982).
- [19] Lepri S., Livi R., Politi A. : *On the anomalous thermal conductivity of one-dimensional lattices*. Europhys. Lett. **43** 271 (1998).
- [20] Liggett T.M. : *Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter and Exclusion Processes*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 324, Springer, (1999).
- [21] Ortiz de Zarate J.M., Sengers J.V. : *On the physical origin of long-ranged fluctuations in fluids in thermal nonequilibrium states*. J. Stat. Phys. **115**, 1341-1359 (2004).
- [22] Santos J.E., Schütz G.M. : *Exact time-dependent correlation functions for the symmetric exclusion process with open boundary*. Phys. Rev. E **64**, 036107 (2001).
- [23] Schütz G., Domany E. : *Phase transitions in an exactly soluble one-dimensional asymmetric exclusion model*. J. Stat. Phys. **72**, 277 (1993).
- [24] Spohn H. : *Long range correlations for stochastic lattice gases in a non-equilibrium steady state*. J. Phys. A **16**, 4275-4291 (1983).
- [25] Spohn H. : *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*. Springer, Berlin, (1991).
- [26] Srebro Y., Levine D. : *Exactly solvable model for driven dissipative systems.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 240601 (2004).
- [27] Touchette H. : *The large deviation approach to statistical mechanics.*, Physics Reports **478**, 1-69 (2009).

Finite Size Corrections to the Large Deviation Function of the Density in the One Dimensional Symmetric Simple Exclusion Process

Bernard Derrida · Martin Retaux

Received: 28 March 2013 / Accepted: 2 July 2013 / Published online: 26 July 2013
© Springer Science+Business Media New York 2013

Abstract The symmetric simple exclusion process is one of the simplest out-of-equilibrium systems for which the steady state is known. Its large deviation functional of the density has been computed in the past both by microscopic and macroscopic approaches. Here we obtain the leading finite size correction to this large deviation functional. The result is compared to the similar corrections for equilibrium systems.

Keywords Exclusion processes · Large deviations · Non-equilibrium · Large deviations

1 Introduction

Over recent years there has been a growing interest in understanding the fluctuations and the large deviations of the density of systems in a non equilibrium steady state [1–4]. A number of approaches have been developed to determine the large deviation functions in these steady states: fluctuating hydrodynamics and macroscopic theories [2, 5–11], exactly soluble microscopic models [12–16], perturbation and numerical methods [17–21]. In such non equilibrium steady states, the generic situation is that the correlation range of density fluctuations extends through the whole system [22–29] and the large deviation functional of the density is non local [2, 3, 5–8, 12–16]. This contrasts with systems at equilibrium (with short range interactions and far from a critical point), where the range of correlations is microscopic and the large deviation functional is local.

Two main approaches have been followed recently to study these large deviations: for some microscopic models such as exclusion processes the steady state measure is known

B. Derrida (✉) · M. Retaux
Laboratoire de Physique Statistique, École Normale Supérieure, Université Pierre et Marie Curie,
Université Denis Diderot, CNRS, 24, rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France
e-mail: derrida@lps.ens.fr

M. Retaux
e-mail: martin.retoux@ens.fr

exactly [3, 12–16] and finding the large deviation functional is a matter of computing large scale properties (very much like when one tries to calculate the free energy in equilibrium systems starting from the Gibbs measure). Obviously this microscopic approach is limited to cases where the steady state is exactly known [30, 31]. The other approach is the macroscopic fluctuation theory [2, 5–9, 32]) for diffusive systems which calculates the large deviation functional by identifying the optimal path followed by the system to generate a given deviation. In systems at equilibrium, time reversal symmetry gives a simple relation between this path and the relaxation path starting from the same deviation, and so identifying this optimal path is easy. On the contrary in non equilibrium steady states this time reversal symmetry does not hold and the approach is limited to cases where the equations giving this optimal path can be solved.

One motivation to study the large deviation functional of the density is that it generalizes the notion of free energy to non equilibrium states [3, 9]. As analytic expressions of these large deviation functionals are usually hard to obtain, they are known so far for a rather limited number of models. The one dimensional symmetric simple exclusion process (SSEP) is one of the first models [2, 3, 6, 12, 13] for which an explicit expression could be derived which showed the non local character of this large deviation functional. In the present work we try to obtain the leading finite size corrections to this large deviation functional and to compare it with the corrections one typically finds in equilibrium systems.

The SSEP describes a lattice of L sites in which each site i is either occupied by a single particle or empty [33–38]. Each particle independently attempts to jump to its right neighboring site, and to its left neighboring site with rate one. It succeeds if the target site is empty; otherwise nothing happens. At the boundary sites, 1 and L , particles are added or removed: a particle is added to site 1, when the site is empty, at rate α , and removed, when the site is occupied, at rate γ ; similarly particles are added to site L at rate δ and removed at rate β . These injection and removal rates at the boundaries correspond to the left and right boundaries being in contact with reservoirs at densities

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

(to justify (1) it is easy to check using detailed balance that, when one forbids the exchanges of particles at site L by setting $\beta = \delta = 0$, the steady state measure is a Bernoulli measure where all the sites are occupied with probability ρ_a . Similarly one can check that when the contacts between site 1 and the left reservoir are broken, the system equilibrates at density ρ_b). The main advantage of the SSEP is that its steady state measure is known [12, 13, 23, 30] for arbitrary $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ and L .

Here we try to determine the generating function of the density, which is simply the Legendre transform of the large deviation functional. Let $P(n_1, \dots, n_L)$ be the steady state measure of a one dimensional lattice gas on a lattice of L sites, where $n_i \geq 0$ is the number of particles on site i (for the SSEP the only possible values are $n_i = 0$ or 1 but in the more general case discussed in Sect. 4 the occupation numbers n_i will be arbitrary). We want to calculate the following generating function $Z_L(h_1, \dots, h_L)$ (which, in the equilibrium case, is nothing but a partition function in a varying field)

$$Z_L(h_1, \dots, h_L) = \sum_{\{n_1, \dots, n_L\}} \exp\left(\sum_{i=1}^L h_i n_i\right) P(n_1, \dots, n_L) \tag{2}$$

where h_i depends on the site i . Let us define $G_L(h_1, \dots, h_L)$ as

$$G_L(h_1, \dots, h_L) = \log Z_L(h_1, \dots, h_L). \tag{3}$$

We would like to obtain an expression of $G_L(h_1, \dots, h_L)$ for a slowly varying field, that is when h_i is of the form

$$h_i = H\left(\frac{i}{\lambda} - \frac{1}{2\lambda}\right) \quad (4)$$

where λ is large (the reason for the shift of $-1/2\lambda$ in (4) is simply to make sites 1 and L play symmetric roles). This choice for the i dependence of h_i allows one to test density deviations which vary on a large length scale λ , which might be different from the system size L .

In the following we will consider the case where the two lengths λ and L are large (compared with the lattice spacing) but comparable

$$L = \lambda y \quad (5)$$

with y of order 1. For the symmetric exclusion process in contact at site $i = 1$ and at site $i = L$ with two reservoirs at densities ρ_a and ρ_b it is known [6, 7, 12, 13] (see for example Eqs. (80), (81) of [3]) that, in the steady state,

$$G_L(h_1, \dots, h_L) \sim \lambda \min_{\{F(x)\}} \int_0^y dx \left(\log(1 + F(x)(e^{H(x)} - 1)) - \log\left(y \frac{F'(x)}{\rho_b - \rho_a}\right) \right) \quad (6)$$

where the minimum is over all the monotone functions $F(x)$ which satisfy $F(0) = \rho_a$ and $F(y) = \rho_b$. From (6) it is easy to see that the equation satisfied by the optimal F is

$$F''(x) = \frac{F'(x)^2 (e^{H(x)} - 1)}{1 - F(x) + F(x) e^{H(x)}}. \quad (7)$$

Note that the non local character of the functional (6) comes from the fact that the optimal $F(x)$ depends on all values of $H(z)$ for the whole range $0 < z < y = \frac{L}{\lambda}$.

On the other hand for a system at equilibrium (with short range interactions) one expects [3, 9] that

$$G_L(h_1, \dots, h_L) \sim \lambda \int_0^y dx g(H(x)) \quad (8)$$

where $g(h) = \lim_{L \rightarrow \infty} G_L(h, \dots, h)/L$ is the extensive part of the free energy in a constant h . This is obviously a local functional of $H(x)$.

The main result of the present work is that the leading correction to (6) is

$$\begin{aligned} G_L(h_1, \dots, h_L) \simeq & \lambda \int_0^y dx \left(\log(1 + F(x)(e^{H(x)} - 1)) - \log\left(\frac{y F'(x)}{\rho_b - \rho_a}\right) \right) \\ & - a \log\left(\frac{y F'(0)}{\rho_b - \rho_a}\right) - b \log\left(\frac{y F'(y)}{\rho_b - \rho_a}\right) - \frac{1}{2} \log(\varphi(0)) \end{aligned} \quad (9)$$

where F is the solution of (7), the parameters a and b are defined as in [13, 27]

$$a = \frac{1}{\alpha + \gamma}; \quad b = \frac{1}{\beta + \delta} \quad (10)$$

and $\varphi(x)$ is the solution of the linear differential equation

$$\varphi''(x) = -\left(\frac{F''(x)}{F'(x)}\right)' \varphi(x) \quad (11)$$

which satisfies the boundary conditions $\varphi(0) = 0$ and $\varphi'(y) = -1/y$.

This can be compared to the case of a system at equilibrium where the form of the leading orders of G_L is

$$\begin{aligned}
 G_L(h_1, \dots, h_L) \simeq & \lambda \int_0^y g(H(x))dx + A^{\text{left}}(H(0)) + A^{\text{right}}(H(y)) \\
 & + \frac{1}{\lambda} \left[H'(0) B^{\text{left}}(H(0)) + H'(y) B^{\text{right}}(H(y)) \right. \\
 & \left. + \int_0^y C(H(x)) H'(x)^2 dx \right] + o\left(\frac{1}{\lambda^2}\right) \tag{12}
 \end{aligned}$$

where $A^{\text{left}}(h)$, $A^{\text{right}}(h)$, $B^{\text{left}}(h)$, $B^{\text{right}}(h)$ and $C(h)$ are defined in (46), (52), (53). We see that the leading correction (i.e. the term of order 0 in λ) is also non local (9) in the out of equilibrium SSEP whereas it corresponds to boundary contributions A^{left} and A^{right} in the equilibrium case (12). At the next order (the order $1/\lambda$), which we did not study in the non-equilibrium case, one can notice in (12) an integral containing the gradient term $H'(x)^2$ characteristic of the Ginzburg-Landau theory. In (12) as in [39], the corrections due to the non-uniform field h_i are expressed in terms of properties of the near-by uniform system.

The paper is organized as follows. In Sect. 2, we do a direct perturbative calculation when the h_i 's are small and we check that the expansion agrees with the prediction (9) for the SSEP. In Sect. 3, we present the derivation of (9) for arbitrary h_i 's. In Sect. 4, we discuss how (12) can be derived in the equilibrium case.

2 Perturbations for small h_i

In this section we present the straightforward calculation of G_L from the knowledge of the correlation functions of the density in the steady state. From the definition (3), one can relate the expansion of G_L in powers, of the h_i 's to the steady state correlations. For example to second order in the h_i 's one has

$$G_L(h_1, \dots, h_L) = \sum_i h_i \langle n_i \rangle + \sum_i \frac{h_i^2}{2} (\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2) + \sum_{i < j} h_i h_j \langle n_i n_j \rangle_c + O(h^3). \tag{13}$$

For the SSEP, it is known that in the steady state [23, 27]

$$\begin{aligned}
 \langle n_i \rangle = \langle n_i^2 \rangle &= \frac{\rho_a(L + b - i) + \rho_b(i + a - 1)}{L + a + b - 1}, \\
 \langle n_i n_j \rangle_c &= -\frac{(\rho_a - \rho_b)^2 (i + a - 1)(L + b - j)}{(L + a + b - 1)^2 (L + a + b - 2)} \quad \text{for } i < j.
 \end{aligned} \tag{14}$$

For large L and λ (keeping their ratio constant as in (5), when the h_i have the form (4) the various sums in (13) can be computed by the Euler MacLaurin formulae:

$$\begin{aligned}
 \epsilon \sum_{i=1}^L f\left(i\epsilon - \frac{\epsilon}{2}\right) &= \int_0^{L\epsilon} f(x)dx - \epsilon^2 \frac{[f'(L\epsilon) - f'(0)]}{24} + O(\epsilon^4) \\
 \epsilon^2 \sum_{1 \leq i < j \leq L} f\left(i\epsilon - \frac{\epsilon}{2}\right) g\left(j\epsilon - \frac{\epsilon}{2}\right) \\
 &= \int_0^{L\epsilon} f(x)dx \int_x^{L\epsilon} g(y)dy - \frac{\epsilon}{2} \int_0^{L\epsilon} f(x)g(x)dx + O(\epsilon^2)
 \end{aligned}$$

and one gets

$$\begin{aligned}
 \sum_i h_i \langle n_i \rangle &= \lambda \int_0^y \bar{\rho}(x) H(x) dx + (\rho_a - \rho_b) \\
 &\quad \times \int_0^y \frac{y - 2ay - 2x + 2ax + 2bx}{2y^2} H(x) dx \\
 \sum_i h_i^2 \langle n_i \rangle &= \lambda \int_0^y \bar{\rho}(x) H^2(x) dx + (\rho_a - \rho_b) \\
 &\quad \times \int_0^y \frac{y - 2ay - 2x + 2ax + 2bx}{2y^2} H^2(x) dx \\
 \sum_i h_i^2 \langle n_i \rangle^2 &= \lambda \int_0^y \bar{\rho}^2(x) H^2(x) dx + (\rho_a - \rho_b) \\
 &\quad \times \int_0^y \frac{y - 2ay - 2x + 2ax + 2bx}{y^2} \bar{\rho}(x) H^2(x) dx
 \end{aligned} \tag{15}$$

where $\bar{\rho}(x)$ is the steady state profile

$$\bar{\rho}(x) = \frac{\rho_a(y-x) + \rho_b x}{y}$$

and

$$\begin{aligned}
 \sum_{i < j} h_i h_j \langle n_i n_j \rangle_c &= -\lambda (\rho_a - \rho_b)^2 \int_0^y dx \int_x^y dz \frac{x(y-z)}{y^3} H(x) H(z) \\
 &\quad + \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{2y^4} \left[y \int_0^y x(y-x) H(x)^2 dx + \int_0^y dx \int_x^y dz H(x) H(z) \right. \\
 &\quad \left. \times [(1-2a)(y-x)(y-z) + (4a+4b-6)x(y-z) + (1-2b)xz] \right].
 \end{aligned}$$

We have checked that these expressions coincide with (9) at second order in $H(x)$. For example at first order in $H(x)$ the solutions of (7) and (11) are

$$\begin{aligned}
 F(x) &= \frac{\rho_a(y-x) + \rho_b x}{y} + (\rho_a - \rho_b)^2 \left[\int_x^y \frac{x(z-y)}{y^3} H(z) dz - \int_0^x \frac{z(y-x)}{y^3} H(z) dz \right] \\
 \varphi(x) &= (y-x)/y + \frac{(\rho_a - \rho_b)}{y^2} \int_x^y (2z - y - x) H(z) dz
 \end{aligned}$$

and inserting these expressions into (9) one gets (15).

3 Derivation of the main result (9)

Our approach to obtain (9) consists in choosing h_i piecewise constant: h_i takes n possible values H_1, \dots, H_n in consecutive boxes of lengths L_1, \dots, L_n . The boxes are assumed to be large, of a size comparable to the system size (for example $L_m = L/n$). In each box

h_i is constant (i.e. $h_i = H_m$ for $L_1 + \dots + L_{m-1} < i \leq L_1 + \dots + L_m$). We will first discuss the case of a single box (i.e. the case where all the h_i are equal) which is the easiest (16), (17). Then we will use an additivity formula (70) to go from the expression for one box to the expression for a finite number n of boxes. Finally we will take the limit $n \rightarrow \infty$ to establish (9).

3.1 A single box

Using the matrix ansatz (see Appendix A), one gets, for large L , the following expression for $Z_L(h, h, \dots, h)$ by dividing (69) by (62)

$$Z_L(h, \dots, h) \simeq \frac{(\rho_a - \rho_b)^{L+a+b} \mu_0^{-L-a-b}}{(1 + \rho_a(e^h - 1))^a (1 + \rho_b(e^h - 1))^b} \tag{16}$$

where

$$\mu_0 = \frac{1}{e^h - 1} \log \frac{1 + \rho_a(e^h - 1)}{1 + \rho_b(e^h - 1)}. \tag{17}$$

Remark Let us check that these expressions agree with the claim (9) in the introduction: one has by solving (7) and (11) for a constant h

$$F(x) = \frac{1}{e^h - 1} \left[(1 + \rho_a(e^h - 1))^{1-x/y} (1 + \rho_b(e^h - 1))^{x/y} - 1 \right]$$

and

$$\varphi(x) = \frac{y - x}{y}$$

from which it follows that

$$\begin{aligned} \log[1 + (e^h - 1)F(x)] - \log\left(\frac{y F'(x)}{\rho_b - \rho_a}\right) &= \log\left(\frac{\rho_a - \rho_b}{\mu_0}\right) \\ F'(0) &= \frac{1 + \rho_a(e^h - 1)}{y(e^h - 1)} \log\left(\frac{1 + \rho_b(e^h - 1)}{1 + \rho_a(e^h - 1)}\right) \\ F'(y) &= \frac{1 + \rho_b(e^h - 1)}{y(e^h - 1)} \log\left(\frac{1 + \rho_b(e^h - 1)}{1 + \rho_a(e^h - 1)}\right) \end{aligned}$$

and by replacing into (9) one finds an expression equivalent to (16) obtained by the direct calculation. This shows that (9) is valid in the case of a constant h_i .

3.2 Several boxes: the prediction (9)

Let us now come to the case of several large boxes with a constant h_i in each box. We will first write down the expressions predicted by the claim (9). Then we will see in the next subsection that these expressions coincide with those obtained by a direct microscopic calculation.

For piecewise constant $H(x)$, with

$$H(x) = H_m \quad \text{for } x_{m-1} < x < x_m \tag{18}$$

with

$$x_0 = 0; \quad x_m = x_{m-1} + y_m; \quad x_n = y \quad (19)$$

the solution of (7) in the interval $x_{m-1} < x < x_m$ is

$$F(x) = \frac{1}{e^{H_m} - 1} \left[(1 + (e^{H_m} - 1)F_{m-1})^{\frac{x_m - x}{x_m - x_{m-1}}} (1 + (e^{H_m} - 1)F_m)^{\frac{x - x_{m-1}}{x_m - x_{m-1}}} - 1 \right] \quad (20)$$

where $F_m = F(x_m)$. Writing that $F'(x)$ is continuous (i.e. $F'(x_m)^- = F'(x_m)^+$) at all the x_m 's leads to the $n - 1$ equations that these F_m 's should satisfy

$$\begin{aligned} & \frac{1 + (e^{H_m} - 1)F_m}{y_m(e^{H_m} - 1)} \log \left(\frac{1 + (e^{H_m} - 1)F_m}{1 + (e^{H_m} - 1)F_{m-1}} \right) \\ &= \frac{1 + (e^{H_{m+1}} - 1)F_m}{y_{m+1}(e^{H_{m+1}} - 1)} \log \left(\frac{1 + (e^{H_{m+1}} - 1)F_{m+1}}{1 + (e^{H_{m+1}} - 1)F_m} \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Equations (20), (21) fully determine the solution of (7) for a piecewise constant $H(x)$.

To solve Eq. (11) for $\varphi(x)$, one can first notice that the discontinuity of the $\varphi'(x)$ at $x = x_m$ is

$$\varphi'(x_m)^+ - \varphi'(x_m)^- = \frac{F''(x_m)^- - F''(x_m)^+}{F'(x_m)} \varphi(x_m).$$

Everywhere else the function $\varphi(x)$ is piecewise linear. These jumps of $\varphi'(x)$ and the fact that $\varphi(y) = 0$ and $\varphi'(y) = -1/y$ determine the function $\varphi(x)$ everywhere: in the interval $x_m < x < x_{m+1}$ one gets

$$\begin{aligned} \varphi(x) = & \frac{1}{y} \left[y - x + \sum_{m_1 > m} (y - x_{m_1})(x_{m_1} - x) W_{m_1} \right. \\ & + \sum_{m_1 > m_2 > m} (y - x_{m_1})(x_{m_1} - x_{m_2})(x_{m_2} - x) W_{m_1} W_{m_2} \\ & \left. + \sum_{m_1 > m_2 > m_3 > m} (y - x_{m_1})(x_{m_1} - x_{m_2})(x_{m_2} - x_{m_3})(x_{m_3} - x) W_{m_1} W_{m_2} W_{m_3} + \dots \right] \end{aligned} \quad (22)$$

with W_m defined by

$$W_m = \frac{F''(x_m)^- - F''(x_m)^+}{F'(x_m)}. \quad (23)$$

Using (20) and (21), one can show that

$$W_m = \frac{1}{y_m} \log \left[\frac{1 + (e^{H_m} - 1)F_m}{1 + (e^{H_m} - 1)F_{m-1}} \right] - \frac{1}{y_{m+1}} \log \left[\frac{1 + (e^{H_{m+1}} - 1)F_{m+1}}{1 + (e^{H_{m+1}} - 1)F_m} \right]. \quad (24)$$

In summary in the case of several large boxes the claim (9) leads to

$$Z_L(h_1, \dots, h_L) = e^{G_L(h_1, \dots, h_L)} \simeq \mathcal{B} \exp[\lambda \mathcal{C}(\rho_a, \rho_b)] \quad (25)$$

with

$$\mathcal{C} = - \sum_m y_m \log \left[\frac{y}{y_m(\rho_b - \rho_a)(e^{H_m} - 1)} \log \left(\frac{1 + (e^{H_m} - 1)F_m}{1 + (e^{H_m} - 1)F_{m-1}} \right) \right] \tag{26}$$

and

$$\mathcal{B} = \left(\frac{\rho_b - \rho_a}{y F'(0)} \right)^a \left(\frac{\rho_b - \rho_a}{y F'(y)} \right)^b \frac{1}{\varphi(0)^{1/2}} \tag{27}$$

with $F(x)$ and $\varphi(x)$ given by (20), (22) and the F_m 's solutions of (21).

3.3 Several boxes: the microscopic approach

Let us now see how the microscopic calculation for the single box can be generalized to the case of several boxes and leads to expressions equivalent to (26), (27). We consider the case of several large boxes with a constant h_i in each box

$$h_i = H_m \quad \text{for } L_1 + \dots + L_{m-1} < i \leq L_1 + \dots + L_m. \tag{28}$$

We will use the additivity formula (70) and the saddle point method.

Let us define

$$z_1(\rho_a, \rho) = \frac{\langle \rho_a, a | (e^{H_1} D + E)^{L_1} | \rho, b \rangle}{\langle \rho_a, a | (D + E)^{L_1} | \rho, b \rangle}$$

and for $i \geq 2$

$$z_i(\rho, \rho') = \frac{\langle \rho, 1 - b | (e^{H_i} D + E)^{L_i} | \rho', b \rangle}{\langle \rho, 1 - b | (D + E)^{L_i} | \rho', b \rangle}$$

which are the generating functions for each box (see Appendix A). (z_1 is special simply because in z_2, \dots, z_n the parameter a has been replaced by $1 - b$.) Then using the additivity formula (70) derived in Appendix A one gets for $Z_L(h_1, \dots, h_L)$ when

$$L_1 + L_2 + \dots + L_n = L$$

and the h_i are of the form (28)

$$\begin{aligned} & Z_L(h_1, \dots, h_L) \\ &= \frac{\Gamma(L_1 + a + b) \Gamma(L_2 + 1) \dots \Gamma(L_n + 1)}{\Gamma(L + a + b)} \\ &\quad \times \oint \frac{d\rho_1}{2i\pi} \dots \oint \frac{d\rho_{n-1}}{2i\pi} \frac{(\rho_a - \rho_b)^{L+a+b} z_1(\rho_a, \rho_1) z_2(\rho_1, \rho_2) \dots z_n(\rho_{n-1}, \rho_b)}{(\rho_a - \rho_1)^{L_1+a+b} (\rho_1 - \rho_2)^{L_2+1} \dots (\rho_{n-1} - \rho_b)^{L_n+1}} \end{aligned} \tag{29}$$

where the integral contours verify $\rho_b < |\rho_{n-1}| < \dots < |\rho_1| < \rho_a$. So far (29) is exact for arbitrary H_m 's and L_m 's. The virtue of (70) is that it relates the properties of the whole system of those of the n subsystems.

When the lengths L_m of the boxes become large, if we define the y_m 's by

$$L_m = \lambda y_m$$

one knows (16) from the single box calculation that

$$z_m(\rho, \rho') \sim B_m(\rho, \rho') e^{\lambda y_m [A_m(\rho, \rho') + \log(\rho - \rho')]},$$

with

$$A_m(\rho, \rho') = -\log \left[\frac{1}{e^{H_m} - 1} \log \frac{1 + \rho(e^{H_m} - 1)}{1 + \rho'(e^{H_m} - 1)} \right] \tag{30}$$

$$B_1(\rho, \rho') = \frac{(\rho - \rho')^{a+b} e^{(a+b)A_1(\rho, \rho')}}{(1 + \rho(e^{H_1} - 1))^a (1 + \rho'(e^{H_1} - 1))^b} \tag{31}$$

and for $i \geq 2$

$$B_i(\rho, \rho') = \frac{(\rho - \rho') e^{A_i(\rho, \rho')}}{(1 + \rho(e^{H_i} - 1))^{1-b} (1 + \rho'(e^{H_i} - 1))^b}. \tag{32}$$

Then using the saddle point method in (29) one finds that

$$Z_L(h_1, \dots, h_L) \simeq \mathcal{B}^* e^{\lambda[\mathcal{A}^* + y \log(\rho_a - \rho_b)]} \tag{33}$$

where

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^* &= \min_{\{r_m\}} [y_1 A_1(\rho_a, r_1) + y_2 A_2(r_1, r_2) + \dots + y_n A_n(r_{n-1}, \rho_b)] \\ &\quad - y \log y + \sum_{i=1}^n y_i \log y_i, \end{aligned} \tag{34}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^* &\simeq \frac{(\rho_a - \rho_b)^{a+b}}{y^{a+b-\frac{1}{2}}} \frac{y_1^{a+b-\frac{1}{2}} B_1(\rho_a, r_1)}{(\rho_a - r_1)^{a+b}} \frac{y_2^{\frac{1}{2}} B_2(r_1, r_2)}{r_1 - r_2} \dots \frac{y_n^{\frac{1}{2}} B_n(r_{n-1}, \rho_b)}{r_{n-1} - \rho_b} \\ &\quad \times (\det[\Delta])^{-1/2} \end{aligned} \tag{35}$$

and Δ is a tridiagonal matrix

$$\Delta = \begin{pmatrix} U_1 & V_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ V_1 & U_2 & V_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & V_{n-2} & U_{n-1} \end{pmatrix} \tag{36}$$

with

$$U_m = \left. \frac{\partial^2 [y_m A_m(r_{m-1}, \rho) + y_{m+1} A_{m+1}(\rho, r_{m+1})]}{\partial \rho^2} \right|_{\rho=r_m} \tag{37}$$

$$V_m = \left. \frac{\partial^2 [y_{m+1} A_{m+1}(\rho, \rho')]}{\partial \rho \partial \rho'} \right|_{\rho=r_m, \rho'=r_{m+1}}. \tag{38}$$

(Note that in (34) one takes the minimum and not the maximum because the integration contours are perpendicular to the real axis, and a maximum over r_m along a contour becomes a minimum when r_m varies along the real axis.)

The saddle point values r_1, \dots, r_{n-1} (i.e. those which achieve the minimum in (34)) satisfy the $n - 1$ equations

$$\left. \frac{\partial [y_m A_m(r_{m-1}, \rho) + y_{m+1} A_{m+1}(\rho, r_{m+1})]}{\partial \rho} \right|_{\rho=r_m} = 0.$$

These saddle point equations turn out to be the same equations as those (21) satisfied by the F_m 's. Therefore one has

$$r_m = F_m. \tag{39}$$

This already allows one to verify, using (30), (34), that the term proportional to λ in (25) and (33) is the same.

One can also show by a direct computation that the U_m 's and the V_m 's defined in (37), (38) can be expressed in terms of the function $F(x)$ given in (20).

$$U_m = \left(\frac{1}{y_m} + \frac{1}{y_{m+1}} \right) \frac{1}{F'(x_m)^2} + \frac{F''(x_m)^{(-)} - F''(x_m)^{(+)}}{F'(x_m)^3} \tag{40}$$

$$V_m = - \frac{1}{y_{m+1} F'(x_m) F'(x_{m+1})}. \tag{41}$$

It is then easy to see that one can rewrite U_m as

$$U_m = \left(\frac{1}{y_m} + \frac{1}{y_{m+1}} \right) \frac{1}{F'(x_m)^2} + \frac{W_m}{F'(x_m)^2}$$

with W_m given in (23). Then the determinant of the matrix Δ defined in (36) can be computed

$$\begin{aligned} \det[\Delta] = & \frac{1}{y_1 \cdots y_n [F'(x_1) \cdots F'(x_{n-1})]^2} \\ & \times \left[y + \sum_m (y - x_m) x_m W_m + \sum_{m_1 > m_2} (y - x_{m_1})(x_{m_1} - x_{m_2}) x_{m_2} W_{m_1} W_{m_2} \right. \\ & \left. + \sum_{m_1 > m_2 > m_3} (y - x_{m_1})(x_{m_1} - x_{m_2})(x_{m_2} - x_{m_3}) x_{m_3} W_{m_1} W_{m_2} W_{m_3} + \cdots \right] \tag{42} \end{aligned}$$

and using the fact (see (30), (20)) that

$$\exp[A_m(F_{m-1}, F_m)] = - \frac{1 + (e^{H_m} - 1)F_m}{y_m F'(x_m)} = - \frac{1 + (e^{H_m} - 1)F_{m-1}}{y_m F'(x_{m-1})} \tag{43}$$

one gets for \mathcal{B}^*

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^* = & \left(\frac{\rho_b - \rho_a}{y F'(0)} \right)^a \left(\frac{\rho_b - \rho_a}{y F'(y)} \right)^b \\ & \times \left(1 + \sum_m \frac{x_m (y - x_m)}{y} W_m + \sum_{m_1 > m_2} \frac{(y - x_{m_1})(x_{m_1} - x_{m_2}) x_{m_2}}{y} W_{m_1} W_{m_2} + \cdots \right)^{-1/2}. \end{aligned}$$

This expression coincides with the expected expression (27). Therefore this subsection has established the validity of (9) in the case of several boxes.

3.4 A large number of boxes

Let us now try to take the large n limit of the above result. We consider that we have n boxes, of equal length $L/n = \lambda y/n$, and that the field H_m in the m -th box is given by

$$H_m = H\left(\frac{my}{n} - \frac{y}{2n}\right)$$

where $H(x)$ is a smoothly varying function. For simplicity we choose the boxes of equal lengths. Therefore one has

$$x_m = \frac{my}{n}.$$

One then need to solve the equations (21) satisfied by the F_m 's. For large n one can show by a direct calculation that the solution of these equations is given by

$$F_m = F\left(\frac{my}{n}\right) + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (44)$$

where $F(x)$ is the solution of (7). (Note that from now on, $F(x)$ is the solution of (7) when $H(x)$ is a smoothly varying function. This solution $F(x)$ is not identical to (20) which was obtained for a piecewise $H(x)$. The difference is at the origin of the correction of order $O(n^{-2})$ in (44). This difference will lead to negligible terms anyway.) One has from (30)

$$\begin{aligned} A_m(F_{m-1}, F_m) &= -\log \frac{y}{n} + \log\left(\frac{1 + F(x_m)(e^{H(x_m)} - 1)}{-F'(x_m)}\right) \\ &\quad - \frac{y}{2n} \frac{F(x_m)H'(x_m)e^{H(x_m)}}{1 + (e^{H(x_m)} - 1)F(x_m)} + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \end{aligned}$$

which can be rewritten using the fact that $F(x)$ is solution of (7)

$$\begin{aligned} A_m(F_{m-1}, F_m) &= -\log \frac{y}{n} + \log\left(\frac{1 + F(x_m)(e^{H(x_m)} - 1)}{-F'(x_m)}\right) \\ &\quad - \frac{y}{2n} \left(\log\left(\frac{1 + F(x)(e^{H(x)} - 1)}{-F'(x)}\right)\right)' \Big|_{x=x_m} + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \end{aligned}$$

Using then the Euler McLaurin formula to perform the sum (34), one finds that

$$\mathcal{A}(\rho_a, \rho_b) = -n \log \frac{y}{n} + \int_0^y \log\left(\frac{1 + F(x)(e^{H(x)} - 1)}{-F'(x)}\right) dx + O\left(\frac{1}{n}\right) \quad (45)$$

and this leads (33), (34) to the term proportional to λ in (9).

One can also obtain the large n estimate of W_m

$$W_m = -\frac{y}{n} \left(\frac{F''(x)}{F'(x)}\right)' \Big|_{x=x_m}.$$

Then by defining $W(x)$ by

$$W(x) = -\left(\frac{F''(x)}{F'(x)}\right)'$$

one can see that

$$\mathcal{B} = \frac{(\rho_a - \rho_b)^{a+b}}{(-F'(0))^a (-F'(1))^b} \times \left(1 + \int_0^y \frac{x(y-x)}{y} W(x) dx + \int_0^1 dx \int_x^1 dz \frac{(y-z)(z-x)x}{y} W(z)W(x) + \dots \right)^{-1/2}.$$

Then if $\varphi(x)$ is solution of

$$\varphi''(x) = W(x)\varphi(x)$$

with $\varphi(y) = 0$ and $\varphi'(y) = -1/y$ one has

$$\varphi(x) = 1 - \frac{x}{y} + \int_x^y dz \frac{(y-z)(z-x)}{y} W(z) + \int_x^y dz \int_z^y dz' \frac{(y-z')(z'-z)(z-x)}{y} W(z)W(z') + \dots$$

and one finds

$$\mathcal{B} = \left(\frac{\rho_b - \rho_a}{F'(0)} \right)^a \left(\frac{\rho_b - \rho_a}{F'(y)} \right)^b (\varphi(0))^{-1/2}$$

as claimed in (9).

4 Equilibrium case

Let us consider a one dimensional lattice gas on a lattice of L sites, where each site i is occupied by an integer $n_i \geq 0$ number of particles. We assume that the interactions are short range and that at equilibrium the system is homogeneous in the bulk with correlation functions decaying exponentially fast with the distance. We would like to obtain an expression of $G_L(h_1, \dots, h_L)$ defined in (2), (3) for a slowly varying field of the form (4) when both λ and L are much larger than the range ξ of the correlations between the occupation numbers n_i .

4.1 The constant field case

Let us discuss first the case of a constant field ($h_i = h$). If $g(h)$ is the extensive part of the free energy G_L

$$g(h) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{G_L(h, \dots, h)}{L}$$

one expects that in the large L limit

$$G_L(h) = L g(h) + A^{\text{left}}(h) + A^{\text{right}}(h) + O(\exp[-L/\xi(h)]) \tag{46}$$

where $A^{\text{left}}(h)$ and $A^{\text{right}}(h)$ represent the contributions of the left and right boundaries respectively and $\xi(h)$ is the correlation length (in presence of the constant field h). The form (46) can be easily understood by the transfer matrix method, in particular $\exp(-1/\xi(h))$ is

the ratio of the two largest eigenvalues of the transfer matrix. These two contributions A^{left} and A^{right} are not necessarily equal as they may differ if one imposes different boundary conditions at the two ends.

In a constant field, one can also define the average density $\langle n_i \rangle$ at site i by

$$\langle n_i \rangle = \frac{\partial \log Z_L}{\partial h_i}(h, \dots, h)$$

and the pair correlation function

$$\langle n_i n_j \rangle_c = \frac{\partial^2 \log Z_L}{\partial h_i \partial h_j}(h, \dots, h).$$

In the large L limit, far from the boundaries (i.e. for $i \gg \xi(h)$ and $L - i \gg \xi(h)$), the average density $\langle n_i \rangle$ has a limit independent of i

$$\langle n_i \rangle \rightarrow g'(h), \tag{47}$$

the pair correlation function $\langle n_i n_j \rangle_c$ depends only on the distance $j - i$

$$\langle n_i n_j \rangle_c \rightarrow c_{j-i}(h) \tag{48}$$

and one has

$$g''(h) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k(h). \tag{49}$$

On the other hand, close to the left or to the right boundary, i.e. as long as $i \sim \xi(h)$ or $L - i \sim \xi(h)$ these quantities keep in general a dependence on i even in the large L limit. For example

$$\langle n_i \rangle - g'(h) \rightarrow a_i^{\text{left}}(h); \quad \langle n_{L-i} \rangle - g'(h) \rightarrow a_i^{\text{right}}(h). \tag{50}$$

4.2 The slowly varying field case

Now for a slowly varying field of the form (4), when $\lambda \gg \xi(h)$ (more precisely $\lambda \gg \max_i \xi(h_i)$) one expects [3, 9] that to leading order

$$G_L(h_1, \dots, h_L) \simeq \lambda \int_0^y g(H(x)) dx$$

where y is defined in (5). This can be easily understood by cutting the system of length L into many subsystems of size λdx much larger than ξ but much smaller than λ . In each of these subsystems the field h_i is essentially constant, and the free energies of these subsystems can simply be added.

As explained in Appendix B, the leading corrections to this formula when L and λ are much larger than the correlation length $\xi(h)$ is

$$\begin{aligned} G_L(h_1, \dots, h_L) &\simeq \lambda \int_0^y g(H(x)) dx + A^{\text{left}}(H(0)) + A^{\text{right}}(H(y)) \\ &+ \frac{1}{\lambda} \left[H'(0) B^{\text{left}}(H(0)) + H'(y) B^{\text{right}}(H(y)) \right] \\ &+ \int_0^y C(H(x)) H'(x)^2 dx \Big] + o\left(\frac{1}{\lambda^2}\right) \end{aligned} \tag{51}$$

which is the result announced in (12) where

$$B^{\text{left}}(h) = \frac{g'(h)}{24} + \sum_{i=1}^{\infty} \left(i - \frac{1}{2}\right) a_i^{\text{left}}(h);$$

$$B^{\text{right}}(h) = -\frac{g'(h)}{24} - \sum_{i=0}^{\infty} \left(i + \frac{1}{2}\right) a_i^{\text{right}}(h)$$
(52)

and

$$C(h) = -\frac{1}{2} \sum_{k \geq 1} k^2 c_k(h).$$
(53)

Remark For the same system on ring with periodic boundary conditions, implying in particular that $H(y+x) = H(x)$, the boundary terms disappear and one gets

$$G_L(h_1, \dots, h_L) \simeq \lambda \int_0^y g(H(x)) dx + \frac{1}{\lambda} \int_0^y C(H(x)) H'(x)^2 dx + \dots$$
(54)

Note that at order $\frac{1}{\lambda}$ the integral of $H'(x)^2$ in (51) and in (54) is nothing but the square of the gradient of the Ginzburg Landau theory.

5 Conclusion

In this paper we have obtained the first correction (9) to the large deviation functional of the density for the non equilibrium steady state of the SSEP and compared it with the corresponding term for equilibrium systems (12). Like in the equilibrium case, this first correction does not depend on the system size. On the other hand in the non-equilibrium case (9) the correction has a non-local character, very much like the leading term (the non-locality comes from the fact that the function F and φ in (9) are both non local functions of the field $H(x)$). Our derivation is based on the knowledge of the steady state measure, as given by the matrix ansatz.

The reason why here we preferred to calculate the generating function with a slowly varying field h_i rather than the large deviation of the density is that at the microscopic level the density is discontinuous. Therefore to define a density profile at the macroscopic scale one would need to convolute the microscopic profile with a slowly varying test function and the successive terms in the expansion would eventually depend on the test function.

In the equilibrium case, the finite size corrections in (12) give first boundary terms and then gradient terms with prefactors which can be expressed in terms of equilibrium correlation functions. Close to a phase transition the prefactor of the gradient becomes large and this contribution is crucial in the study of second order phase transitions. In the non-equilibrium case, we could only determine the leading correction. We do not know whether this correction could be related to correlation functions as in the equilibrium case. Finding such a relation for this leading correction as well as for higher order corrections and the role of these corrections at a phase transition is an open interesting question raised by one of our referees.

Another interesting question would be to try to recover our result by the macroscopic approach: in the macroscopic fluctuation theory [2, 5, 6], the large deviation functional of the density is given by the contribution of the optimal trajectory in the space of all the time

dependent density profiles which produces a given deviation starting from the steady state profile. A natural question would be to try to calculate the correction by integrating over all the profiles in the neighborhood of this optimal profile. Such an approach was successful in understanding the first corrections to the large deviation function of the current [40, 41], and it would be of course interesting to see whether it works as well for the deviations of the density. If this is the case, one could try to determine similar corrections for other models such as generalizations of the SSEP [11, 16, 42].

Recently, it has been noticed that the large deviation functional could exhibit phase transitions [43–45]. Whether the corrections calculated here would become singular at such phase transitions is another question one could try to investigate.

It has also been shown that the SSEP, in a non equilibrium steady state, could be mapped by a non local change of variables onto a system at equilibrium [46]. It would be interesting to know whether this transformation could be used to confirm our prediction (9) and establish a connection with (12).

Acknowledgements We would like to thank Vincent Hakim for helpful discussions.

Appendix A: Additivity formulae

It is known [3, 30, 31] and has been used in several previous works [12, 13] that the steady state measure of the SSEP with injection and removal rates $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, as defined in the introduction, can be calculated by the matrix ansatz [30, 31]. The probability of any microscopic configuration $\{n_1, \dots, n_L\}$ (with $n_i = 0$ or 1) is given by

$$P(\{n_1, \dots, n_L\}) = \frac{\langle W | X_1 X_2 \dots X_L | V \rangle}{\langle W | (D + E)^L | V \rangle} \quad (55)$$

where each matrix X_i depends on the occupation n_i of site i

$$X_i = n_i D + (1 - n_i) E \quad (56)$$

and the matrices D, E and the vectors $|V\rangle, \langle W|$ satisfy the following algebraic rules

$$\begin{aligned} DE - ED &= D + E \\ \langle W | (\alpha E - \gamma D) &= \langle W | \\ (\beta D - \delta E) | V \rangle &= | V \rangle. \end{aligned} \quad (57)$$

Given these algebraic rules, one can define a family of left and right eigenvectors $\langle \rho_a, a |$ and $|\rho_b, b\rangle$ by

$$\langle \rho_a, a | (\rho_a E - (1 - \rho_a) D) = a \langle \rho_a, a | \quad (58)$$

$$((1 - \rho_b) D - \rho_b E) |\rho_b, b\rangle = b |\rho_b, b\rangle. \quad (59)$$

The vectors $\langle W |$ and $|V\rangle$ which appear in (55), (57) are examples of such eigenvectors

$$\langle W | = \langle \rho_a, a |, \quad |V\rangle = |\rho_b, b\rangle \quad (60)$$

when $\rho_a = \alpha / (\alpha + \gamma)$, $\rho_b = \delta / (\delta + \beta)$ and $a = 1 / (\alpha + \gamma)$, $b = 1 / (\delta + \beta)$ as in (1), (10).

Then for $0 < b < 1$ and $\rho_a > \rho_b$, one can prove the following key *additivity formula*

$$\frac{\langle \rho_a, a | X_1 X_2 | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle} = \oint \frac{d\rho}{2\pi i} \frac{(\rho_a - \rho_b)^{a+b}}{(\rho_a - \rho)^{a+b}(\rho - \rho_b)} \frac{\langle \rho_a, a | X_1 | \rho, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho, b \rangle} \frac{\langle \rho, 1 - b | X_2 | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho, 1 - b | \rho_b, b \rangle} \tag{61}$$

where X_1 and X_2 are arbitrary polynomials of D 's and E 's and the contour is such that $\rho_b < |\rho| < \rho_a$.

Proof of (61) Let us first derive of the following identity [13]

$$\frac{\langle \rho_a, a | (D + E)^L | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle} = \frac{\Gamma(a + b + L)}{\Gamma(a + b)(\rho_a - \rho_b)^L}. \tag{62}$$

To do so one can notice that in the steady state of the SSEP, as defined in the introduction, the average occupations satisfy

$$\alpha - (\alpha + \gamma)\langle n_1 \rangle = \langle n_1 - n_2 \rangle = \dots = \langle n_i - n_{i+1} \rangle = \dots = (\beta + \delta)\langle n_L \rangle - \delta.$$

These L equations which express simply that in the steady state the current is conserved, can be solved. From the solution (14) one can see that

$$\langle n_i - n_{i+1} \rangle = \frac{(\rho_a - \rho_b)}{L + a + b - 1}.$$

On the other hand using the matrix representation (55), (57), (60) one has

$$\begin{aligned} \langle n_i - n_{i+1} \rangle &= \frac{\langle \rho_a, a | (D + E)^{i-1} (DE - ED) (D + E)^{L-i-1} | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | (D + E)^L | \rho_b, b \rangle} \\ &= \frac{\langle \rho_a, a | (D + E)^{L-1} | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | (D + E)^L | \rho_b, b \rangle}. \end{aligned}$$

These two identities give the recursion

$$\frac{\langle \rho_a, a | (D + E)^{L-1} | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | (D + E)^L | \rho_b, b \rangle} = \frac{(\rho_a - \rho_b)}{L + a + b - 1}$$

which establishes the veracity of (62).

Now to prove (61) (as in [3]) one can first notice that the discussion can be limited to X_1 and X_2 of the form

$$\begin{aligned} X_1 &= [\rho_a E - (1 - \rho_a) D]^{p_1} [D + E]^{q_1} \\ X_2 &= [D + E]^{p_2} [(1 - \rho_b) D - \rho_b E]^{q_2} \end{aligned}$$

as any polynomial in D 's and E 's can be written as a sum of such terms (this is because D and E are linear functions of the operators A and B defined by $A = D + E$ and $B = \rho_a E - (1 - \rho_a) D$ and that $AB - BA = A$. Thus any word made up of A 's and B 's can be ordered as a sum of terms of the form $B^{p_1} A^{q_1}$ or $A^{p_2} B^{q_2}$). Then the left hand side of (61) becomes

$$\frac{\langle \rho_a, a | X_1 X_2 | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle} = a^{p_1} b^{q_2} \frac{\langle \rho_a, a | (D + E)^{q_1+p_2} | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle} \tag{63}$$

while the right hand side of (61) becomes

$$a^{p_1} b^{q_2} \oint \frac{d\rho}{2\pi i} \frac{(\rho_a - \rho_b)^{a+b}}{(\rho_a - \rho)^{a+b}(\rho - \rho_b)} \frac{\langle \rho_a, a|(D+E)^{q_1}|\rho, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho, b\rangle} \frac{\langle \rho, 1-b|(D+E)^{p_2}|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho, 1-b|\rho_b, b\rangle} \quad (64)$$

and the equality of (63) and (64) follows from the expression (62) and the Cauchy theorem. This completes the derivation of (61).

First consequence of (61) It is possible to show directly from the algebra (55), (57) that

$$\frac{\langle \rho_a, a|D|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho_b, b\rangle} = \frac{b\rho_a + a\rho_b}{\rho_a - \rho_b}; \quad \frac{\langle \rho_a, a|E|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho_b, b\rangle} = \frac{b(1 - \rho_a) + a(1 - \rho_b)}{\rho_a - \rho_b}$$

which becomes by replacing ρ_a by ρ and a by $1 - b$

$$\frac{\langle \rho, 1-b|D|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho, 1-b|\rho_b, b\rangle} = b + \frac{\rho_b}{\rho - \rho_b}; \quad \frac{\langle \rho, 1-b|E|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho, 1-b|\rho_b, b\rangle} = -b + \frac{1 - \rho_b}{\rho - \rho_b}.$$

Therefore (61) becomes after integration

$$\begin{aligned} \frac{\langle \rho_a, a|X_0 D|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho_b, b\rangle} &= b \frac{\langle \rho_a, a|X_0|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho_b, b\rangle} \\ &+ \rho_b \frac{d}{d\rho} \left[\left(\frac{\rho_a - \rho_b}{\rho_a - \rho} \right)^{a+b} \frac{\langle \rho_a, a|X_0|\rho, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho, b\rangle} \right] \Bigg|_{\rho=\rho_b}, \end{aligned} \quad (65)$$

$$\begin{aligned} \frac{\langle \rho_a, a|X_0 E|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho_b, b\rangle} &= -b \frac{\langle \rho_a, a|X_0|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho_b, b\rangle} \\ &+ (1 - \rho_b) \frac{d}{d\rho} \left[\left(\frac{\rho_a - \rho_b}{\rho_a - \rho} \right)^{a+b} \frac{\langle \rho_a, a|X_0|\rho, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho, b\rangle} \right] \Bigg|_{\rho=\rho_b}. \end{aligned} \quad (66)$$

These last two formulae are exact and valid for all values of ρ_a, ρ_b, a, b . (They have been derived from (61) under the condition that $\rho_a > \rho_b$ and $0 < b < 1$, but as all expressions are rational functions of all their arguments, they remain valid everywhere.)

From (66) it is possible to show that $\Phi(\mu, h)$ defined by

$$\Phi(\mu, h) = \frac{\langle W|\exp[(e^h D + E)\mu]|V\rangle}{\langle W|V\rangle} \quad (67)$$

satisfies the following equation

$$\frac{d\Phi}{d\mu} = \frac{b(1 + \rho_a(e^h - 1)) + a(1 + \rho_b(e^h - 1))}{\rho_a - \rho_b} \Phi + (1 + \rho_b(e^h - 1)) \frac{d\Phi}{d\rho_b}.$$

This equation can be solved by the method of characteristics, which tells us that the solution is of the form

$$\Phi(\mu, h) = \frac{(\rho_a - \rho_b)^{a+b}}{(1 + \rho_b(e^h - 1))^b} \mathcal{F}((1 + \rho_b(e^h - 1)) \exp[\mu(e^h - 1)]).$$

The fact that $\Phi(0, h) = 1$ determines the unknown function \mathcal{F} and one gets

$$\Phi(\mu, h) = \left(\frac{(\rho_a - \rho_b)(e^h - 1)}{1 + \rho_a(e^h - 1) - \exp[\mu(e^h - 1)](1 + \rho_b(e^h - 1))} \right)^{a+b} \times \exp[b\mu(e^h - 1)] \tag{68}$$

(see Eqs. (3.7)–(3.10) of [13]).

This expression becomes singular as $\mu \rightarrow \mu_0$ with

$$\mu_0 = \frac{1}{e^h - 1} \log \left(\frac{1 + \rho_a(e^h - 1)}{1 + \rho_b(e^h - 1)} \right)$$

and by analysing the power law singularity one can get the asymptotic expression valid for large L

$$\frac{\langle W|(e^h D + E)^L|V \rangle}{\langle W|V \rangle} \simeq \frac{\Gamma(a + b + L)(\rho_a - \rho_b)^{a+b} \mu_0^{-L-a-b}}{\Gamma(a + b) (1 + \rho_a(e^h - 1))^a (1 + \rho_b(e^h - 1))^b}. \tag{69}$$

Second consequence of (61) Another important consequence which can be obtained by dividing (61) by (62) is the following additivity formula

$$\begin{aligned} & \frac{\langle \rho_a, a|X_1 X_2|\rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a|(D + E)^{L+L'}|\rho_b, b \rangle} \\ &= \frac{\Gamma(L + a + b)\Gamma(L' + 1)}{\Gamma(L + L' + a + b)} \oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \\ & \times \frac{(\rho_a - \rho_b)^{a+b+L+L'}}{(\rho_a - \rho)^{a+b+L}(\rho - \rho_b)^{1+L'}} \frac{\langle \rho_a, a|X_1|\rho, b \rangle}{\langle \rho_a, a|(D + E)^L|\rho, b \rangle} \frac{\langle \rho, 1 - b|X_2|\rho_b, b \rangle}{\langle \rho, 1 - b|(D + E)^{L'}|\rho_b, b \rangle}. \end{aligned} \tag{70}$$

which is the same as Eq. (65) of [3] up to the prefactor which was wrong in [3] and which is corrected here. This formula allows one to compute the properties of a lattice of $L + L'$ sites if one knows those of two systems of size L and L' .

Third consequence of (61) Using (66) and (62) one can write an exact recursion for Z_L defined in (2)

$$Z_{L+1} = \left[1 + \rho_b e^{h_{L+1}} + b \frac{\rho_a - \rho_b}{L + a + b} e^{h_{L+1}} \right] Z_L + \frac{(\rho_a - \rho_b)(1 + \rho_b e^{h_{L+1}})}{L + a + b} \frac{dZ_L}{d\rho_b}. \tag{71}$$

We won't use this recursion relation in this paper, but we believe that it could be an alternative starting point to recover the result (9) and possibly further corrections.

Appendix B: Derivation of (51), (52), (53) in the equilibrium case

Let us consider a site dependent field h_i with small variations

$$z_i = h_i - h$$

around a certain value h . One can then expand G_L defined in (2), (3) in powers of the z_i 's

$$G_L(h_1, \dots, h_L) = G_L(h, \dots, h) + \sum_i z_i \langle n_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j} z_i z_j \langle n_i n_j \rangle_c + O(z^3)$$

where $\langle . \rangle$ denotes an average in the constant field h . Far from the boundaries i.e. when $i \gg 1$ and $L - i \gg 1$, the correlations become translational invariant (because the system is at equilibrium)

$$\langle n_i \rangle = g'(h); \quad \langle n_i n_j \rangle_c = c_{j-i}(h) \tag{72}$$

and

$$g''(h) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k(h).$$

One can rewrite $G_L(h_1, \dots, h_L)$ as

$$\begin{aligned} G_L(h_1, \dots, h_L) &= G_L(h, \dots, h) + g'(h) \sum_i z_i + \frac{c_0(h)}{2} \sum_i z_i^2 + \sum_{k \geq 1} c_k(h) \sum_{i=1}^{L-k} z_i z_{i+k} \\ &+ \sum_i z_i (\langle n_i \rangle - g'(h)) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} z_i z_j (\langle n_i n_j \rangle_c - c_{j-i}(h)) \\ &+ O(z^3) \end{aligned} \tag{73}$$

and using the fact (which follows from (73) by looking at the term proportional to L when all the h_i 's are equal) that

$$g(h_i) = g(h) + z_i g'(h) + \frac{z_i^2}{2} \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k(h) + O(z^3)$$

one gets

$$\begin{aligned} G_L(h_1, \dots, h_L) &- \sum_i g(h_i) \\ &= G_L(h, \dots, h) - Lg(h) \\ &+ \sum_{k \geq 1} c_k(h) \left[\sum_{i=1}^{L-k} \left(z_i z_{i+k} - \frac{z_i^2 + z_{i+k}^2}{2} \right) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k z_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i=L-k+1}^L z_i^2 \right] \\ &+ \sum_i z_i (\langle n_i \rangle - g'(h)) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} z_i z_j (\langle n_i n_j \rangle_c - c_{j-i}(h)) + O(z^3). \end{aligned} \tag{74}$$

In the large L limit, the correlation functions, near the boundaries, have a limit which is not translational invariant

$$\langle n_i \rangle - g'(h) \rightarrow a_i^{\text{left}}(h); \quad \langle n_{L-i} \rangle - g'(h) \rightarrow a_i^{\text{right}}(h)$$

whereas

$$\langle n_i n_j \rangle_c - c_{j-i}(h) \rightarrow b_{i,j}^{\text{left}}(h); \quad \langle n_{L-i} n_{L-j} \rangle_c - c_{j-i}(h) \rightarrow b_{i,j}^{\text{right}}(h).$$

One then should have

$$\frac{dA^{\text{left}}(h)}{dh} = \sum_{i=1}^{\infty} a_i^{\text{left}}(h); \quad \frac{dA^{\text{right}}(h)}{dh} = \sum_{i=0}^{\infty} a_i^{\text{right}}(h), \tag{75}$$

$$\frac{da_i^{\text{left}}(h)}{dh} = \sum_j b_{i,j}^{\text{left}}(h) - \sum_{k \geq i} c_k(h); \quad \frac{da_i^{\text{right}}(h)}{dh} = \sum_j b_{i,j}^{\text{right}}(h) - \sum_{k \geq i+1} c_k(h) \tag{76}$$

so that using (46) and the fact that $c_k(h) = c_{-k}(h)$

$$\frac{d^2 A^{\text{left}}(h)}{dh^2} = \sum_{i \geq 1, j \geq 1} b_{i,j}(h) - \sum_{k \geq 1} k c_k(h); \quad \frac{d^2 A^{\text{right}}(h)}{dh^2} = \sum_{i \geq 0, j \geq 0} b_{i,j}(h) - \sum_{k \geq 1} k c_k(h).$$

For large L this becomes

$$\begin{aligned} G_L(h_1, \dots, h_L) - \sum_i g(h_i) &= A^{\text{left}}(h) + A^{\text{right}}(h) \\ &+ \sum_{k \geq 1} c_k(h) \left[\sum_{i=1}^{L-k} \left(z_i z_{i+k} - \frac{z_i^2 + z_{i+k}^2}{2} \right) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k z_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i=L-k+1}^L z_i^2 \right] \\ &+ \sum_i z_i (\langle n_i \rangle - g'(h)) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} z_i z_j (\langle n_i n_j \rangle_c - c_{j-i}(h)) + O(z^3) \end{aligned}$$

which can be rewritten, up to terms of third order in the z_i 's

$$G_L(h_1, \dots, h_L) - \sum_i g(h_i) = D^{\text{left}} + D^{\text{right}} - \sum_{k \geq 1} c_k(h_i) \left[\sum_{i=1}^{L-k} \frac{(h_i - h_{i+k})^2}{2} \right] \tag{77}$$

where

$$\begin{aligned} D^{\text{left}} &= A^{\text{left}}(h_1) - \frac{1}{2} \sum_{k \geq 1} c_k(h_1) \left[\sum_{i=1}^k (h_i - h_1)^2 \right] + \sum_i (h_i - h_1) a_i^{\text{left}}(h_1) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} (h_i - h_1)(h_j - h_1) b_{i,j}^{\text{left}}(h_1) + O(z^3) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} D^{\text{right}} &= A^{\text{right}}(h_L) - \frac{1}{2} \sum_{k \geq 1} c_k(h_L) \left[\sum_{i=1}^k (h_{L+1-i} - h_L)^2 \right] + \sum_i (h_{L-i} - h_L) a_i^{\text{right}}(h_L) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} (h_{L-i} - h_L)(h_{L-j} - h_L) b_{i,j}^{\text{right}}(h_L) + O(z^3). \end{aligned}$$

All the differences $h_i - h_j$ which appear in (77) are between nearby sites i, j . Under this form, the differences $h_i - h_j$ between remote sites do not need to be small. In what follows

we will assume that (77) remains true as long as these differences $h_i - h_j$ remain small for nearby sites (i.e. for $|i - j| \ll \lambda$) even if these differences could be large when $|i - j| \sim \lambda$.

Now for a slowly varying field of the form (4), with $L = y\lambda$ as in (5) one can evaluate the different terms using the Euler MacLaurin formula

$$\sum_{i=1}^L g(h_i) \simeq \lambda \int_0^y g(H(x)) dx - \frac{H'(y)g'(H(y)) - H'(0)g'(H(0))}{24\lambda},$$

$$D^{\text{left}} \simeq A^{\text{left}}(H(0)) + \frac{H'(0)}{\lambda} \sum_{i \geq 1} \left(i - \frac{1}{2}\right) a_i^{\text{left}}(H(0)),$$

$$D^{\text{right}} \simeq A^{\text{right}}(H(y)) - \frac{H'(y)}{\lambda} \sum_{i \geq 0} \left(i + \frac{1}{2}\right) a_i^{\text{right}}(H(y)),$$

$$\sum_{k \geq 1} c_k(h_i) \left[\sum_{i=1}^{L-k} \frac{(h_i - h_{i+k})^2}{2} \right] \simeq \frac{1}{2\lambda} \int_0^y \sum_{k \geq 1} k^2 c_k(H(x)) H'(x)^2 dx.$$

References

1. Kipnis, C., Olla, S., Varadhan, S.R.S.: Hydrodynamics and large deviation for simple exclusion processes. *Commun. Pure Appl. Math.* **2**, 115–137 (1989)
2. Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: Stochastic interacting particle systems out of equilibrium. *J. Stat. Mech.* P07014 (2007)
3. Derrida, B.: Non-equilibrium steady states: fluctuations and large deviations of the density and of the current. *J. Stat. Mech.* P07023 (2007)
4. Touchette, H.: The large deviation approach to statistical mechanics. *Phys. Rep.* **478**, 1–69 (2009)
5. Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: Fluctuations in stationary non equilibrium states of irreversible processes. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 040601 (2001)
6. Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: Macroscopic fluctuation theory for stationary non equilibrium states. *J. Stat. Phys.* **107**, 635–675 (2002)
7. Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: Large deviations for the boundary driven symmetric simple exclusion process. *Math. Phys. Anal. Geom.* **6**, 231–267 (2003)
8. Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: Minimum dissipation principle in stationary non equilibrium states. *J. Stat. Phys.* **116**, 831–841 (2004)
9. Bertini, L., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: Thermodynamic transformations of nonequilibrium states. *J. Stat. Phys.* **149**, 773–802 (2012)
10. Weinar, E., Ren, W., Vanden-Eijnden, E.: Minimum action method for the study of rare events. *Commun. Pure Appl. Math.* **57**, 637–656 (2004)
11. Bertini, L., Gabrielli, D., Lebowitz, J.: Large deviation for a stochastic model of heat flow. *J. Stat. Phys.* **121**, 843–885 (2005)
12. Derrida, B., Lebowitz, J.L., Speer, E.R.: Free energy functional for nonequilibrium systems: an exactly solvable case. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 150601 (2001)
13. Derrida, B., Lebowitz, J.L., Speer, E.R.: Large deviation of the density drofile in the steady state of the symmetric simple exclusion process. *J. Stat. Phys.* **107**, 599–634 (2002)
14. Derrida, B., Lebowitz, J.L., Speer, E.R.: Exact free energy functional for a driven diffusive open stationary nonequilibrium system. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 030601 (2002)
15. Derrida, B., Lebowitz, J.L., Speer, E.R.: Exact large deviation functional of a stationary open driven diffusive system: the asymmetric exclusion process. *J. Stat. Phys.* **110**, 775–810 (2003)
16. Enaud, C., Derrida, B.: Large deviation functional of the weakly asymmetric exclusion process. *J. Stat. Phys.* **114**, 537–562 (2004)
17. van Wijland, F., Racz, Z.: Large deviations in weakly interacting boundary driven lattice gases. *J. Stat. Phys.* **118**, 27–54 (2005)
18. Giardinà, C., Kurchan, J., Peliti, L.: Direct evaluation of large-deviation functions. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 120603 (2006)

19. Lecomte, V., Tailleur, J.: A numerical approach to large deviations in continuous time. *J. Stat. Mech.* P03004 (2007)
20. Giardinà, C., Kurchan, J., Lecomte, V., Tailleur, J.: Simulating rare events in dynamical processes. *J. Stat. Phys.* **45**, 787–811 (2011)
21. Bunin, G., Kafri, Y., Podolsky, D.: Large deviations in boundary-driven systems: numerical evaluation and effective large-scale behavior. *Europhys. Lett.* **99**, 20002 (2012)
22. Kirkpatrick, T.R., Cohen, E.G.D., Dorfman, J.R.: Fluctuations in a nonequilibrium steady state: basic equations. *Phys. Rev. A* **26**, 950–971 (1982)
23. Spohn, H.: Long range correlations for stochastic lattice gases in a non-equilibrium steady state. *J. Phys. A* **16**, 4275–4291 (1983)
24. Schmitz, R., Cohen, E.G.D.: Fluctuations in a fluid under a stationary heat-flux. 1. General theory. *J. Stat. Phys.* **39**, 285–316 (1985)
25. Dorfman, J.R., Kirkpatrick, T.R., Sengers, J.V.: Generic long-range correlations in molecular fluids. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **45**, 213–239 (1994)
26. Ortiz de Zarate, J.M., Sengers, J.V.: On the physical origin of long-ranged fluctuations in fluids in thermal nonequilibrium states. *J. Stat. Phys.* **115**, 1341–1359 (2004)
27. Derrida, B., Lebowitz, J.L., Speer, E.R.: Entropy of open lattice systems. *J. Stat. Phys.* **126**, 1083–1108 (2007)
28. Bodineau, T., Derrida, B., Lecomte, V., van Wijland, F.: Long range correlations and phase transition in non-equilibrium diffusive systems. *J. Stat. Phys.* **133**, 1013–1031 (2008)
29. Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: On the long range correlations of thermodynamic systems out of equilibrium (2007). *cond-mat* [arXiv:0705.2996](https://arxiv.org/abs/0705.2996)
30. Derrida, B., Evans, M.R., Hakim, V., Pasquier, V.: Exact solution of a 1d asymmetric exclusion model using a matrix formulation. *J. Phys. A* **26**, 1493–1517 (1993)
31. Blythe, R.A., Evans, M.R.: Nonequilibrium steady states of matrix-product form: a solver’s guide. *J. Phys. A, Math. Gen.* **40**, R333–R441 (2007)
32. Bertini, L., Gabrielli, A.D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: Thermodynamic transformations of nonequilibrium states. *J. Stat. Phys.* **149**, 773–802 (2012)
33. Spitzer, F.: Interaction of Markov processes. *Adv. Math.* **5**, 246–290 (1970)
34. Eyink, G., Lebowitz, J.L., Spohn, H.: Hydrodynamics of stationary non-equilibrium states for some stochastic lattice gas models. *Commun. Math. Phys.* **132**, 253–283 (1990)
35. Eyink, G., Lebowitz, J.L., Spohn, H.: Lattice gas models in contact with stochastic reservoirs: local equilibrium and relaxation to the steady state. *Commun. Math. Phys.* **140**, 119–131 (1991)
36. Spohn, H.: *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*. Springer, Berlin (1991)
37. Liggett, T.M.: *Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter and Exclusion Processes*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, vol. 324. Springer, Berlin (1999)
38. Kipnis, C., Landim, C.: *Scaling Limits of Interacting Particle Systems*. Springer, Berlin (1999)
39. Lebowitz, J.L., Percus, J.K.: Statistical thermodynamics of nonuniform fluids. *J. Math. Phys.* **4**, 116–123 (1963)
40. Appert-Rolland, C., Derrida, B., Lecomte, V., van Wijland, F.: Universal cumulants of the current in diffusive systems on a ring. *Phys. Rev. E* **78**, 021122 (2008)
41. Imperato, A., Lecomte, V., Van Wijland, F.: Equilibrium-like fluctuations in some boundary-driven open diffusive systems. *Phys. Rev. E* **80**, 011131 (2009)
42. Carinci, G., Giardinà, C., Giberti, C., Redig, F.: Duality for stochastic models of transport. [arXiv:1212.3154](https://arxiv.org/abs/1212.3154)
43. Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C.: Lagrangian phase transitions in nonequilibrium thermodynamic systems. *J. Stat. Mech.* L11001 (2010)
44. Bunin, G., Kafri, Y., Podolsky, D.: Cusp singularities in boundary-driven diffusive systems. [arXiv:1301.1708](https://arxiv.org/abs/1301.1708)
45. Bunin, G., Kafri, Y., Podolsky, D.: Non differentiable large-deviation functionals in boundary-driven diffusive systems. *J. Stat. Mech.* L10001 (2012)
46. Tailleur, J., Kurchan, J., Lecomte, V.: Mapping out-of-equilibrium into equilibrium in one-dimensional transport models. *J. Phys. A, Math. Theor.* **41**, 505001 (2008)

Abstract

This thesis is a study of a DNA denaturation model, introduced by Poland and Scheraga during the 1960s. The depinning models with random environment, with which the similarity has been made, are also concerned.

If the interactions between the system and the environment are homogeneous, the problem has been solved: depending on the value of a geometrical parameter, a first or a second order phase transition happens. On the other hand, when the interactions are random, we know neither the critical point nor the phase transition order in the case of strong disorder.

In order to simplify the problem, some authors have used a hierarchical representation through which an exact renormalization can be written. Despite this simplification, the critical point and the transition order have not been found.

By changing the renormalization relation, we introduced a Toy-model which is simpler than the hierarchical version. The new problem led us to a family of distributions, which stay almost the same under renormalization, and allow us to derive the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless equations. Also, with strong disorder, the phase transition does not have a critical fixed point. These two elements, according to our numerical results, predict that the order transition is infinite.

The second part of this thesis reports on a work about the simple symmetric exclusion process, which is one of the simplest out of equilibrium models for which a stationary state is known. The large deviation function has been calculated in the past through microscopic and macroscopic approaches. Here, we calculated the leading finite-size correction. Then the result has been compared to similar corrections for equilibrium systems.

Keywords : Poland-Scheraga model - Depinning transition - Strong disorder - Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition - Simple symmetric exclusion process - Large deviation

Résumé

Cette thèse se consacre à l'étude du modèle de dénaturation de l'ADN introduit par Poland et Scheraga dans les années soixante. Les modèles de dépiégeage en milieu aléatoire, avec lesquels la correspondance a été établie, sont également traités.

Dans le cas où les interactions entre le système et l'environnement sont homogènes, le problème a été résolu : selon la valeur d'un paramètre géométrique, une transition de phase d'ordre un ou deux se produit. En revanche, lorsque les interactions sont prises aléatoires (on parle d'un système en présence de désordre), nous ne connaissons ni le point critique, ni l'ordre de la transition en régime de fort désordre.

Pour simplifier le problème, de nombreux auteurs font usage d'une représentation hiérarchique grâce à laquelle une renormalisation exacte de la fonction de partition peut être écrite. Mais à nouveau, la question du point critique et de l'ordre de la transition n'a pas été résolue.

Nous avons introduit un nouveau système (*Toy-model*) plus simple que la version hiérarchique en changeant la forme de la renormalisation. Le problème, ainsi posé, permet de mettre en évidence une famille de distributions qui ne varient presque pas lors d'une renormalisation, avec lesquelles nous avons pu dériver des équations du type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless. Aussi, en présence de désordre, la transition de phase n'admet pas de point fixe critique. Ces deux éléments, en accord avec nos résultats numériques, nous poussent à croire que nous sommes en présence d'une transition de phase d'ordre infini.

La seconde partie de la thèse rapporte un travail sur le processus simple d'exclusion symétrique, qui est l'un des modèles les plus simples de physique statistique hors d'équilibre pour lequel un état stationnaire est connu. La fonction de grandes déviations a été calculée dans le passé par les approches microscopiques et macroscopiques et ici, nous en avons calculé la première correction de taille finie. Le résultat a ensuite été comparé aux corrections similaires pour des systèmes à l'équilibre.

Mots clés : Modèle de Poland-Scheraga - Transition de dépiégeage - Désordre fort - Transition de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless - Processus d'exclusion symétrique simple - Grandes déviations

Résumé

Cette thèse se consacre à l'étude du modèle de dénaturation de l'ADN introduit par Poland et Scheraga dans les années soixante. Les modèles de dépiégeage en milieu aléatoire, avec lesquels la correspondance a été établie, sont également traités.

Dans le cas où les interactions entre le système et l'environnement sont homogènes, le problème a été résolu : selon la valeur d'un paramètre géométrique, une transition de phase d'ordre un ou deux se produit. En revanche, lorsque les interactions sont prises aléatoires (on parle d'un système en présence de désordre), nous ne connaissons ni le point critique, ni l'ordre de la transition en régime de fort désordre.

Pour simplifier le problème, de nombreux auteurs font usage d'une représentation hiérarchique grâce à laquelle une renormalisation exacte de la fonction de partition peut être écrite. Mais à nouveau, la question du point critique et de l'ordre de la transition n'a pas été résolue.

Nous avons introduit un nouveau système (Toy-model) plus simple que la version hiérarchique en changeant la forme de la renormalisation.

Le problème, ainsi posé, permet de mettre en évidence une famille de distributions qui ne varient presque pas lors d'une renormalisation, avec lesquelles nous avons pu dériver des équations du type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless. Aussi, en présence de désordre, la transition de phase n'admet pas de point fixe critique. Ces deux éléments, en accord avec nos résultats numériques, nous poussent à croire que nous sommes en présence d'une transition de phase d'ordre infini.

La seconde partie de la thèse rapporte un travail sur le processus simple d'exclusion symétrique, qui est l'un des modèles les plus simples de physique statistique hors d'équilibre pour lequel un état stationnaire est connu. La fonction de grandes déviations a été calculée dans le passé par les approches microscopiques et macroscopiques et ici, nous en avons calculé la première correction de taille finie. Le résultat a ensuite été comparé aux corrections similaires pour des systèmes à l'équilibre.

Mots Clés

Modèle de Poland-Scheraga - Transition de dépiégeage - Désordre fort - Transition de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless - Processus d'exclusion symétrique simple - Grandes déviations

Abstract

This thesis is a study of a DNA denaturation model, introduced by Poland and Scheraga during the 1960s. The depinning models with random environment, with which the similarity has been made, are also concerned.

If the interactions between the system and the environment are homogeneous, the problem has been solved: depending on the value of a geometrical parameter, a first or a second order phase transition happens. On the other hand, when the interactions are random, we know neither the critical point nor the phase transition order in the case of strong disorder.

In order to simplify the problem, some authors have used a hierarchical representation through which an exact renormalization can be written. Despite this simplification, the critical point and the transition order have not been found.

By changing the renormalization relation, we introduced a Toy-model which is simpler than the hierarchical version. The new problem led us to a family of distributions, which stay almost the same under renormalization, and allow us to derive the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless equations. Also, with strong disorder, the phase transition does not have a critical fixed point. These two elements, according to our numerical results, predict that the order transition is infinite.

The second part of this thesis reports on a work about the simple symmetric exclusion process, which is one of the simplest out of equilibrium models for which a stationary state is known. The large deviation function has been calculated in the past through microscopic and macroscopic approaches. Here, we calculated the leading finite-size correction. Then the result has been compared to similar corrections for equilibrium systems.

Keywords

Poland-Scheraga model - Depinning transition - Strong disorder - Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition - Simple symmetric exclusion process - Large deviation