

PHYSIQUE STATISTIQUE

Une sélection de sujets

H.J. HILHORST

20 novembre 2010

Notes d'accompagnement du cours *Physique Statistique et Ouvertures*
du Master 2 "Concepts Fondamentaux de la Physique",
parcours "Physique Théorique".

Une version électronique de ces notes est disponible sur
http://www.th.u-psud.fr/page_perso/Hilhorst/

PRÉFACE

La première partie de ces notes (les chapitres **1** à **6**) rappelle les connaissances prérequisées sur les processus aléatoires. Elle ne s'adresse pas aux débutants ; les exercices sont pour la plupart d'un niveau avancé. Cette première partie n'était à l'origine qu'un simple récapitulatif de formules et la version présentée ici en porte encore très visiblement les traces. L'élève trouvera une approche plus graduée, et avec davantage d'exemples, dans les livres de Van Kampen et de Risken. Aux chapitres **5** et **6** beaucoup d'attention a été consacrée à la α -discrétisation de l'équation de Langevin, point seulement technique, mais essentiel pour la suite.

Les chapitres **7** à **13** constituent une introduction aux méthodes de recherche modernes sur les problèmes de réaction–diffusion. Ces “problèmes” sont distincts des “équations” de réaction–diffusion des mathématiciens : ces dernières sont des EDP non linéaires dont ici, justement, il s'agit de démontrer l'existence ou la non existence à partir d'une description microscopique. Les cas les plus intéressants sont ceux où il n'y a pas d'EDP, ce qui arrive, typiquement, en basse dimension au voisinage d'un point de transition de phase.

Après la découverte du groupe de renormalisation par Wilson en 1971 et son extension aux perturbations dynamiques d'un équilibre de Boltzmann, la question s'imposa de savoir comment décrire une transition de phase d'un système à N corps dans un état stationnaire loin d'équilibre. Encore en 1977, dans leur article de revue [*Rev. Mod. Phys.* **49** (1977) 435] sur les phénomènes critiques dynamiques, Hohenberg et Halperin écrivaient : “... *it is not clear whether fluctuations [in a steady state far from equilibrium] can be treated in the same way as for [equilibrium] phase transitions*”.

La réponse, connue aujourd'hui, fait l'objet des chapitres **7** à **12**. Elle passe par la conversion d'équations maîtresses et d'équations de Langevin en théories de champs. Les exemples et les commentaires sont nombreux et tous les calculs, ou presque, sont faits en détail. Cependant, toutes les motivations et tous les raisonnements n'ont pu être inclus et sont seulement donnés en cours.

Les méthodes générales présentées ici ont commencé à être développées aux alentours de 1970. Leur développement s'est fortement accéléré au milieu des années 80, et la forme présentée ici n'a vu le jour qu'au cours des années 90. Elle a été influencée par les articles de Cardy (pour la conversion d'une équation maîtresse en théorie de champs) et de Janssen (en ce qui concerne le passage de l'équation de Langevin à une théorie de champs).

Au chapitre **11**, un exemple de renormalisation est élaboré en grand détail à l'aide de la méthode de Wilson, qui ne requiert pas de connaissances en théorie des champs.

Ces notes ne correspondent à aucun cours précis ou complet. La plupart des matières exposées ont été enseignées par l'auteur au DEA, puis au M2, de Physique Théorique à un moment ou autre durant ces dernières années. Toutefois, pendant leur rédaction, des modifications et des extensions ont été apportées.

L'auteur doit beaucoup à son interaction avec F. van Wijland et K. Oerding, sans laquelle ces notes ne seraient pas devenues ce qu'elles sont. Il les en remercie ici.

Il n'est guère possible que des notes comme celles-ci, inachevées, soient entièrement sans erreurs. L'auteur les distribue à la seule intention de ses élèves et il mettra leurs critiques à son profit.

Orsay, février 2009

H.J. Hilhorst

Les notes de cette année incluent les chapitres **14–20**, qui faisaient déjà partie de l'enseignement. La présentation des chapitres originaux et ceux rajoutés plus récemment n'est pas uniforme, toutefois sans que cela devrait gêner l'élève. L'état inachevé de ces notes est toujours évident. Cependant, l'auteur a fait tous les efforts pour que le développement des idées soit logique et les formules sans erreurs. Les critiques des lecteurs continueront à être les bienvenues. Finalement, l'extension des sujets a conduit à un changement du titre de cette collection de notes.

Orsay, septembre 2010

H.J. Hilhorst

TABLE DES MATIÈRES

1. Processus aléatoires
2. Équation maîtresse
3. Processus markoviens
4. Équation de Fokker–Planck
5. Équation de Langevin
6. Équivalence des équations de Fokker–Planck et de Langevin
 - A. Équivalence
 - B. Le cas de N variables indépendantes
7. Équation de Langevin et théorie des champs
 - A. Intégrales de chemin
 - B. Exemple d'utilisation
8. Équation maîtresse représentée par un opérateur
 - A. Formalisme général
 - B. Opérateurs de spin et fermioniques
 - C. Opérateurs bosoniques
9. Passage à une théorie des champs
10. Équations de Langevin déduites de l'action
11. Renormalisation de $A + A \rightarrow 0$
 - A. Théorie classique
 - B. Considérations dimensionnelles
 - C. Propagateur
 - D. Renormalisation à la Wilson : le principe
 - E. Action renormalisée à l'ordre ϵ
 - F. Terme initial
12. Percolation dirigée
13. La réaction $A + B \rightarrow 0$
14. Réseaux de neurones
15. Le modèle XY bidimensionnel
 1. Généralités sur la dimension critique inférieure
 2. Le modèle XY bidimensionnel
 3. L'approximation par ondes de spin
 4. Les vortex
 5. Analyse par renormalisation
 6. Discussion
 7. Notes historiques

- 16.** La transition rugueuse
 - 1. Les modèles SOS et DG
 - 2. La transition rugueuse
 - 3. Du modèle XY de Villain au modèle Discret Gaussien
 - 4. Commentaires
 - 5. Expériences
- 17.** Le gaz de Coulomb sur réseau
 - 1. Du modèle DG au gaz de Coulomb sur réseau
 - 2. Commentaires
- 18.** La transition superfluide de couches de ^4He
- 19.** La fusion bidimensionnelle
- 20.** Moteurs moléculaires
 - 1. Introduction
 - 2. Mouvement brownien dans un potentiel
 - 3. Un mouvement brownien hors d'équilibre
 - 4. Travail contre une force : le moteur
 - 5. Un modèle à trois états
- 21.** Géométrie aléatoire : les cellules de Voronoi
- 22.** Solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel
- 23.** Appendice
 - A. Intégrales gaussiennes
- 24.** Appendice. Exercices supplémentaires

Bibliographie

1 Processus aléatoires

Les premiers chapitres de ces Notes n'étaient à l'origine qu'un simple récapitulatif de formules. La version présentée ici en porte encore très visiblement les traces. L'élève trouvera une approche plus graduée, et avec davantage d'exemples, dans les livres de Van Kampen [vK92] et de Risken [Ri89].

1.1 Fonctions aléatoires. Une *fonction aléatoire* (ou : *stochastique*) est une famille de fonctions u munie d'une loi de probabilité $\mathcal{P}[u]$. Chaque u est dite une *réalisation* de la fonction aléatoire. On dénotera la fonction aléatoire par le même symbole u que ses réalisations ; le sens sera toujours clair dans le contexte.

Les u dépendent d'une variable indépendante que l'on notera génériquement t et qui parcourt soit l'axe réel entier, soit un intervalle $[T_1, T_2]$. Si t représente le temps, comme il sera admis dans la suite, on appelle $u(t)$ un *processus* aléatoire.

La fonction $u(t)$ prend ses valeurs dans un ensemble S arbitraire, qui peut être discret ou continu. Dans les applications on a souvent $S = \mathbb{R}^d$ ou $S \subset \mathbb{R}^d$. On se placera désormais dans ce cas, sauf mention du contraire.

1.2 Discrétisation. Il est permis d'imaginer que l'axe du temps soit discrétisé et que $u(t)$ soit un vecteur aléatoire ayant autant de composantes qu'il y a de points de discrétisation sur l'axe.

1.3 Étiquette. Il est souvent utile d'imaginer que chaque réalisation d'un processus aléatoire u soit caractérisée par une *étiquette* ι , si bien qu'elle peut être notée $u_\iota(t)$. La loi $\mathcal{P}[u]$ est alors équivalente à une loi $p(\iota)$ sur un ensemble I d'étiquettes. Une étiquette peut être un jeu de paramètres.

1.4 Exemples.

a. Processus dichotome. Soit $u(t)$ une fonction sur $[0, T]$ qui saute entre ± 1 (c'est-à-dire $S = \{-1, 1\}$; on l'appelle un processus *dichotome*). Pour son étiquette on peut prendre $\iota = (u_0, n, t_1, \dots, t_n)$, où $u_0 \equiv u(0)$ est la valeur initiale, n est le nombre de sauts, et la suite t_1, \dots, t_n (non nécessairement ordonnée) donne les instants des sauts.

Pour compléter la définition du processus, on peut, par exemple, prendre t_1, \dots, t_n indépendants et uniformément distribués sur $[0, T]$, et considérer u_0 et n comme fixes. Un processus différent est obtenu si, avec la même loi des t_1, \dots, t_n , on prend n distribué selon une loi de Poisson.

b. Ensemble de trajectoires déterministes. Soit $\Gamma(t)$ une trajectoire déterministe dans l'espace des phases d'un système classique à N particules ponctuelles. Une telle trajectoire est caractérisée de façon unique par sa valeur $\Gamma(0) = \Gamma_0$ à un instant $t = 0$, et pour la distinguer de toutes les autres on peut la noter aussi $\Gamma_{\Gamma_0}(t)$. On a les correspondances $\mathbb{R}^{6N} \Leftrightarrow S$, $\Gamma \Leftrightarrow u$ et $\Gamma_0 \Leftrightarrow \iota$. On peut prendre pour $p(\Gamma_0)$, par exemple, la distribution canonique dans l'espace des phases.

1.5 Moyennes. Soit $F[u]$ une grandeur dépendant du processus aléatoire u , et donc elle-même aléatoire. Exemples : $F[u] = u(t_1)u(t_2)$, $F[u] = \int dt u^2(t)$. La moyenne de $F[u]$ s'exprime de deux façons alternatives :

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int \mathcal{D}u F[u] \mathcal{P}[u] \\ &= \int d\iota F[u_\iota] p(\iota) \end{aligned} \quad (1)$$

1.6 Fonctionnelle caractéristique. Par analogie avec la fonction caractéristique d'une loi de probabilité on définit la *fonctionnelle caractéristique* $G[f]$ du processus aléatoire u par

$$G[f] = \langle \exp \int dt' f(t')u(t') \rangle \quad (2)$$

Les moments de u peuvent être obtenus comme des dérivées fonctionnelles de G . Par exemple

$$\left. \frac{\delta^2 G[f]}{\delta f(t_1) \delta f(t_2)} \right|_{f=0} = \langle u(t_1)u(t_2) \rangle \quad (3)$$

1.7 Loi de probabilité à n fenêtres. Soit

$$P_n(s_1, t_1; \dots; s_n, t_n) ds_1 \dots ds_n \quad (4)$$

la probabilité pour qu'un processus aléatoire ait

- à l'instant t_1 une valeur $u(t_1)$ dans l'intervalle $[s_1, s_1 + ds_1]$;
- et à l'instant t_2 une valeur $u(t_2)$ dans l'intervalle $[s_2, s_1 + ds_2]$;
- et ...
- et à l'instant t_n une valeur $u(t_n)$ dans l'intervalle $[s_n, s_n + ds_n]$.

En considérant ces n intervalles comme autant de "fenêtres" érigées à des instants précis sur l'axe du temps, on appellera dans ces notes la fonction P_n une *loi de probabilité à n fenêtres* (le nom standard est *probabilité à n temps*). Elle se déduit des lois $\mathcal{P}[u]$ ou $p(\iota)$ par la relation

$$P_n(s_1, t_1; \dots; s_n, t_n) = \langle \delta(u(t_1) - s_1) \dots \delta(u(t_n) - s_n) \rangle \quad (5)$$

Les P_n sont non négatives et normalisées telles que $\int P_n ds_1 \dots ds_n = 1$. Pour $m < n$, les P_m découlent des P_n par intégration sur $n - m$ variables. Au lieu de $P_1(s, t)$ on écrira aussi $P(s, t)$.

1.8 Moyennes. La moyenne d'une grandeur $F[u]$ qui ne dépend que des valeurs de $u(t)$ en $t = t_1, t_2, \dots, t_n$ peut être calculée à partir de P_n . L'exemple $F[u] = u(t_1)u(t_2)$ donne ainsi la fonction de corrélation à deux temps,

$$\langle u(t_1)u(t_2) \rangle = \int ds_1 \int ds_2 s_1 s_2 P_2(s_1, t_1; s_2, t_2) \quad (6)$$

On comprendra donc aisément le théorème du paragraphe suivant.

1.9 Théorème de Kolmogoroff (1933). Un processus aléatoire est complètement spécifié par la donnée des P_n pour tous les n .

1.10 Processus stationnaires. Un processus est appelé *stationnaire* si ses moyennes sont invariantes par translation du temps.

Si $u(t)$ est stationnaire, on a en particulier

$$\langle u(t) \rangle = u_0, \quad \langle u(t)u(t') \rangle = \kappa(|t' - t|) \quad (7)$$

où u_0 est une constante et κ ne dépend que de la différence des temps.

1.11 Processus gaussiens. Un processus est appelé *gaussien* si toutes ses P_n sont des fonctions gaussiennes de leurs arguments s_1, \dots, s_n . Ainsi, les expressions les plus générales pour les fonctions P_1 et P_2 d'un processus gaussien sont

$$P_1(s, t) = C_1 e^{-cs^2}$$

$$P_2(s_1, t_1; s_2, t_2) = C_2 \exp \left[-c_{11} s_1^2 - (c_{12} + c_{21}) s_1 s_2 - c_{22} s_2^2 \right] \quad (8)$$

où c dépend arbitrairement de t , les c_{ij} dépendent arbitrairement de t_1 et de t_2 , et C_1 et C_2 sont des constantes de normalisation.

1.12 Lois conditionnelles. On définit

$$P_{11}(s', t' | s, t) = \frac{P_2(s', t'; s, t)}{P_1(s, t)} \quad (9)$$

La quantité $P_{11}(s', t' | s, t) \Delta s'$ représente la probabilité pour que le processus aléatoire passe par la fenêtre $[s', s' + \Delta s']$ à l'instant t' étant donné que sa valeur était s à l'instant t . On dit que P_{11} est une *probabilité conditionnelle*. Ce concept est facilement étendu à des probabilités $P_{n'n}$ pour que le processus passe par n' fenêtres à n' instants spécifiés étant données ses valeurs à n autres instants. L'intégrale de $P_{n'n}$ sur ses n' premiers arguments vaut 1.

1.13 Notation pour le cas discret. Si $u(t)$ prend ses valeurs dans un ensemble discret, on appellera celles-ci σ, σ', \dots . On notera $P_n(\sigma_1, t_1; \dots; \sigma_n, t_n)$ la probabilité pour que $u(t)$ ait à l'instant t_1 la valeur σ_1, \dots , à l'instant t_n la valeur σ_n . Au lieu de $P_1(\sigma, t)$ on écrira aussi $P_\sigma(t)$.

2 Équation maîtresse

2.1 Introduction. L'exposé qui suit sert, d'une part, à définir l'équation maîtresse et en énoncer les propriétés principales, et d'autre part, à fournir la motivation pour la définition, donnée au chapitre **3**, d'un processus aléatoire markovien. Les valeurs $s \in S$ ou $\sigma \in S$ que peut prendre un processus aléatoire $u(t)$ seront souvent appelées ci-dessous des *états*. La distinction faite entre des ensembles S discrets et continus est motivée uniquement par des considérations pédagogiques. Certaines propriétés de l'équation maîtresse sont discutées plus facilement pour des ensembles discrets d'états, et d'autres pour des ensembles continus.

2.2 Équation maîtresse. On considérera ci-dessous une sous-classe de processus aléatoires $u(t)$ dont les réalisations sont constantes par morceaux (cependant, pas tous les processus constants par morceaux font partie de la sous-classe).

a. Cas discret. Soit un processus aléatoire $u(t)$ pouvant se trouver dans un ensemble discret d'états σ . Supposons qu'il existe des $W_{\sigma'\sigma}$ tels que dans tout intervalle de temps Δt , à la limite $\Delta t \rightarrow 0$,

$$W_{\sigma'\sigma}\Delta t \quad \sigma' \neq \sigma \quad (10)$$

la probabilité pour que le processus u saute de σ à σ' , étant donné qu'il valait σ . On appelle les $W_{\sigma\sigma'}$ des *taux de transition*. Les termes *saut* et *transition* seront synonymes.

Soit $P_\sigma(t)$ la probabilité pour que $u(t)$ vaille σ , étant donné une loi initiale $P_\sigma(t_0)$ pour $u(t_0)$ à un instant $t_0 < t$. Il découle de l'hypothèse de l'existence des $W_{\sigma'\sigma}$ que $P_\sigma(t)$ obéit à l'équation maîtresse

$$\frac{dP_\sigma(t)}{dt} = \sum_{\sigma'(\neq\sigma)} [W_{\sigma\sigma'}P_{\sigma'}(t) - W_{\sigma'\sigma}P_\sigma(t)] \quad (11)$$

Il n'est pas nécessaire de définir $W_{\sigma\sigma}$. On notera $T_{\sigma\sigma_0}(t|t_0)$ la solution particulière correspondant à la condition initiale $P_\sigma(t_0) = \delta_{\sigma,\sigma_0}$.

Bien que la notation ne l'indique pas, les taux de transition peuvent dépendre du temps. Ce sera le cas, par exemple, pour les taux de transitions d'un moment magnétique soumis à un champ oscillatoire.

b. Cas continu. Au cas où σ est remplacé par une variable s continue, on notera

$$W(s'|s)\Delta s'\Delta t \quad s \neq s' \quad (12)$$

la probabilité pour que pendant un intervalle de temps Δt un système se trouvant en s saute à un point dans l'intervalle $[s', s' + \Delta s']$. Notant $P(s, t)\Delta s$ la probabilité pour que le système se trouve dans $[s, s + \Delta s]$ étant donné une condition initiale à un instant antérieur on a pour $P(s, t)$ l'équation maîtresse

$$\frac{\partial P(s, t)}{\partial t} = \int ds' [W(s|s')P(s', t) - W(s'|s)P(s, t)] \quad (13)$$

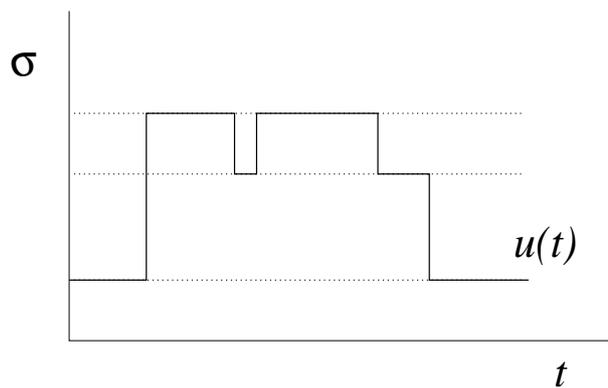


Figure 1: Un exemple de réalisation d'un processus markovien $u(t)$ avec des états σ discrets, indiqués par les pointillés.

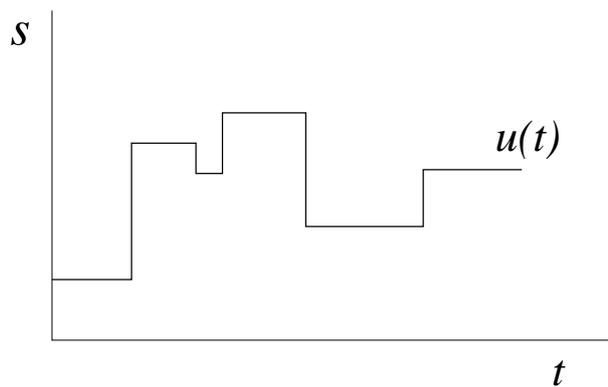


Figure 2: Un exemple de réalisation d'un processus markovien $u(t)$ avec des états s dans un continuum.

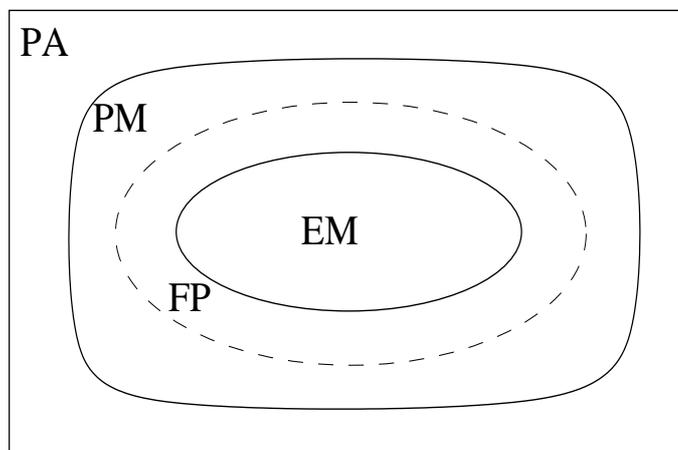


Figure 3: Relations d'inclusion entre des processus aléatoires de divers types. PA : processus aléatoires, PM : processus markoviens, EM : processus obéissant à une équation maîtresse, FP : processus obéissant à une équation de Fokker-Planck ; cette dernière peut être vue comme un cas limite d'une équation maîtresse.

Il n'est pas nécessaire de définir $W(s|s)$. On notera $T(s, t|s_0, t_0)$ la solution particulière de l'équation (13) qui a pour condition initiale $P(s, t_0) = \delta(s - s_0)$.

Les $W_{\sigma'\sigma}$ et les $W(s'|s)$ peuvent être dépendants du temps ; cela arrive, par exemple, dans un système physique soumis à un champ extérieur oscillant.

2.3 Probabilité de transition. La grandeur $T_{\sigma\sigma_0}(t|t_0)$, dans le cas discret, ou $T(s, t|s_0, t_0)$, dans le cas continu, est appelée la *probabilité de transition* du processus. Les processus aléatoires du paragraphe précédent sont complètement spécifiés par

- (i) une loi initiale $P_\sigma(t_0)$ ou $P(s, t_0)$, et
- (ii) leur probabilité de transition $T_{\sigma'\sigma}(t'|t)$ ou $T(s', t'|s, t)$ pour tout $t' \geq t \geq t_0$.

La raison en est que la probabilité à n fenêtres peut être exprimée en termes de ces deux grandeurs selon

$$P_n(s_1, t_1; \dots; s_n, t_n) = T(s_n, t_n|s_{n-1}, t_{n-1}) \dots T(s_2, t_2|s_1, t_1)P(s_1, t_1) \quad (14)$$

(et une relation analogue pour le cas discret), après quoi le théorème de Kolmogoroff du paragraphe 1.9 assure que le processus est entièrement connu.

2.4 Probabilité conditionnelle et probabilité de transition. Pour les processus aléatoires du paragraphe 2.2, la probabilité à deux fenêtres P_{11} est égale à la probabilité de transition T . On le voit en comparant (9) avec (14) pour $n = 2$.

2.5 Équations sous-jacentes. L'équation maîtresse se rencontre dans des situations physiques très diverses. Dans de nombreux cas, une équation maîtresse est tout simplement postulée. Dans d'autres cas, il s'avère possible de la

déduire d'une équation sous-jacente plus fondamentale, telle que l'équation de Liouville classique ou quantique. Une telle dérivation doit à la fois montrer l'existence d'une équation maîtresse et donner les *expressions explicites* des taux de transition. On ne s'occupera pas ici de ce type de questions.

2.6 Temps de séjour dans un état. Cette remarque sert de préalable au paragraphe 4.11. Dans le cas discret, le taux W_σ auquel un processus quitte un état σ est donné par

$$W_\sigma = \sum_{\sigma'(\neq\sigma)} W_{\sigma'\sigma} \quad (15)$$

Dans le cas continu, le processus quitte un état s où il se trouve à un taux $W(s)$ donné par

$$W(s) = \int ds' W(s'|s) \quad (16)$$

Dans un cas comme dans l'autre, étant donné que le processus entre dans un état, son temps de séjour moyen y est non zéro car égal à respectivement $1/W_\sigma$ et $1/W(s)$. Les processus $u(t)$ sont donc des fonctions discontinues du temps, constantes par morceaux. Au lieu de $u(t)$, on les notera à certaines occasions aussi $\sigma(t)$ ou $s(t)$. Le temps de séjour intervient dans les simulations Monte Carlo, comme on le verra ci-dessous.

2.7 Simulation par Monte Carlo de l'équation maîtresse. Trop peu de textes sur les processus aléatoires contiennent la remarque suivante, qui est pourtant d'une grande importance conceptuelle.

À partir d'une valeur $u(t_0) = \sigma_0$ à un instant t_0 , une réalisation du processus aléatoire $u(t)$ peut être engendrée comme suit.

- Tirer un nombre aléatoire τ d'une distribution $q(\tau) = W_{\sigma_0} \exp(-\tau W_{\sigma_0})$, où $0 < \tau < \infty$. Le processus $u(t)$ fera son premier saut à l'instant $t_1 \equiv t_0 + \tau$.
- Diviser l'intervalle $[0, 1]$ en sous-intervalles disjoints ayant les longueurs $W_{\sigma_1, \sigma_0} / W_{\sigma_0}$ (un sous-intervalle pour chaque σ_1). Déterminer le nouvel état σ_1 moyennant un nombre aléatoire tiré d'une distribution uniforme sur $(0, 1)$.
- Recommencer avec la paire (σ_1, t_1) .

Même si en pratique d'autres algorithmes, plus efficaces, peuvent être utilisés, ils constituent une représentation fidèle de l'équation maîtresse seulement s'ils sont équivalents à celui ci-dessus.

Exercice 1. Un générateur de nombres aléatoires engendre des X uniformément distribués sur l'intervalle $(0, 1)$.

a. Comment peut-on transformer un nombre X produit par ce générateur

- (i) en un nombre x tiré de l'exponentielle $a \exp(-ax)$ avec $x > 0$;
- (ii) en un nombre x tiré d'une distribution $q(x)$ quelconque sur l'axe réel ?

Les grandes simulations de systèmes physiques consomment des milliards de nombres aléatoires et il faut pouvoir les engendrer le plus rapidement possible. Qu'est-ce qui limite l'utilité de la méthode que vous avez trouvée en (ii) ci-dessus ?

b. Comment peut-on engendrer des nombres aléatoires gaussiens ? On se sert de l'astuce suivante. Soient x et y deux nombres aléatoires tirés d'une même distribution gaussienne de moyenne zéro et de variance a^2 . On pose $x = r \cos \phi$ et $y = r \sin \phi$. Trouver la loi de probabilité $q(r, \phi)$. Conclure.

c. Trouver une astuce pour engendrer des nombres aléatoires $z > 0$ distribués selon la loi $z e^{-z}$.

2.8 Notation vectorielle. Soit $P(t)$ le vecteur de composantes $P_\sigma(t)$ et soit \mathcal{W} la matrice d'éléments

$$\mathcal{W}_{\sigma'\sigma} = W_{\sigma'\sigma} \quad \mathcal{W}_{\sigma\sigma} = - \sum_{\sigma'(\neq\sigma)} W_{\sigma'\sigma} \quad (17)$$

L'équation maîtresse (11) s'exprime alors sous la forme

$$\frac{dP(t)}{dt} = \mathcal{W}P(t) \quad (18)$$

Dans le cas continu la matrice $\mathcal{W}_{\sigma'\sigma}$ est remplacée par un noyau d'intégrale $\mathcal{W}(s'|s)$.

2.9 Solution formelle. Admettons pour simplifier que \mathcal{W} ne dépend pas du temps. La solution formelle de l'équation (18), avec une condition initiale $P^{\text{in}}(t_0)$, est alors

$$P(t) = e^{\mathcal{W}(t-t_0)} P^{\text{in}}(t_0) \quad (19)$$

Il s'ensuit que la probabilité de transition est donnée par

$$T_{\sigma'\sigma}(t'|t) = [e^{\mathcal{W}(t'-t)}]_{\sigma'\sigma} \quad (20)$$

On ne peut calculer le membre de droite de (20) que si \mathcal{W} est suffisamment simple. Si \mathcal{W} dépend du temps, l'expression $T_{\sigma'\sigma}(t'|t)$ en termes de \mathcal{W} n'est pas donnée par (20) mais est plus compliquée.

2.10 Propriétés de \mathcal{W} . En général \mathcal{W} est une matrice non symétrique. Sa définition (17), combinée avec la positivité des $W_{\sigma'\sigma}$ pour $\sigma' \neq \sigma$, conduit à de nombreuses propriétés intéressantes et utiles. Voir [vK92]. Ici on en relèvera seulement les suivantes.

a. L'équation (17) implique que $(1, 1, \dots, 1)$ est un vecteur propre de gauche de \mathcal{W} avec valeur propre nulle. Il s'ensuit que \mathcal{W} possède au moins un vecteur propre de droite ayant également la valeur propre zéro. Après l'avoir normalisé convenablement on dénotera ce vecteur propre par P^{st} et, comme il satisfait à

$$\frac{dP^{\text{st}}}{dt} = 0 \quad (21)$$

on l'appellera solution *stationnaire* de l'équation (18). Dans les cas où P^{st} décrit un système physique à l'équilibre, on dit aussi que c'est une solution d'*équilibre*, et emploie la notation P^{eq} .

b. Les valeurs propres λ de \mathcal{W} satisfont à $\text{Re } \lambda \leq 0$. Il existe souvent des inégalités plus fortes. Dans les cas qui nous intéressent on aura $\text{Re } \lambda < 0$ pour tout $\lambda \neq 0$, si bien que toute distribution initiale tendra pour $t \rightarrow \infty$ vers une distribution stationnaire (qui pourra ou non être unique).

2.11 *Bilan détaillé.*

a. Définition. Dans l'état stationnaire le membre de droite de l'équation (11) s'annule pour tout σ . Il arrive dans de nombreuses applications que l'expression entre crochets à l'intérieur de la somme sur σ' s'annule :

$$W_{\sigma'\sigma} P_{\sigma}^{\text{st}} = W_{\sigma\sigma'} P_{\sigma'}^{\text{st}} \quad (22)$$

On appelle les égalités (22) les *relations du bilan détaillé*. Si la propriété du bilan détaillé est satisfaite, c'est le plus souvent parce qu'elle découle de la réversibilité microscopique des équations sous-jacentes [vK92].

b. Conséquence pour le spectre de \mathcal{W} . En présence de bilan détaillé, l'analyse de l'équation maîtresse devient plus facile. En particulier, la matrice \mathcal{W} est symétrisable : sa transformée \mathcal{W}^{S} définie par

$$\mathcal{W}_{\sigma'\sigma}^{\text{S}} = (P_{\sigma'}^{\text{st}})^{-\frac{1}{2}} \mathcal{W}_{\sigma'\sigma} (P_{\sigma}^{\text{st}})^{\frac{1}{2}} \quad (23)$$

est symétrique. On en déduit que les valeurs propres de \mathcal{W}^{S} , donc de \mathcal{W} , sont réelles.

c. Cas fréquent. Il arrive souvent que les σ représentent les états d'un système physique à l'équilibre. La probabilité stationnaire est alors

$$P_{\sigma}^{\text{eq}} = Z^{-1} e^{-\beta E_{\sigma}} \quad (24)$$

où β est la température inverse du système et E_{σ} l'énergie (ou parfois l'énergie libre) de l'état σ . Imaginons que, indépendamment d'éventuelles équations du mouvement plus fondamentales qui pourraient régir ce système, l'on veuille le décrire par une équation maîtresse. Un choix possible des taux de transition est alors

$$W_{\sigma'\sigma} = C_{\sigma'\sigma} e^{-\beta E_{\sigma'}} \quad (25)$$

où les $C_{\sigma'\sigma}$ sont des constantes non négatives telles que $C_{\sigma'\sigma} = C_{\sigma\sigma'}$. Ce choix obéit au bilan détaillé et est compatible avec la distribution d'équilibre P_{σ}^{eq} de (24). Pour que cet équilibre puisse effectivement être atteint, il est encore nécessaire qu'un nombre suffisant des $C_{\sigma'\sigma}$ soit non nul pour que l'espace des états σ ne soit pas coupé en sous-espaces non connectés par des transitions.

2.12 Solutions stationnaires sans bilan détaillé. Pour une équation maîtresse sans bilan détaillé il n'y a pas, en général, de relation simple entre les taux de transition et la loi de probabilité stationnaire. Toutefois, Kirchhoff (voir Haken Haken, chapitre 4.8) a développé une méthode diagrammatique qui permet dans certains cas de trouver la solution explicitement et qui dans d'autres cas contribue à la compréhension.

Des équations maîtresse sans bilan détaillé apparaissent, par exemple, pour un système traversé par un courant, ou pour des réactions chimiques irréversibles.

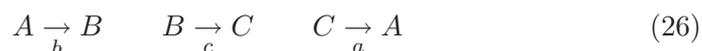
Exemple 1 : Un courant. Sur un réseau unidimensionnel de sites $i = 1, \dots, N$ avec des conditions aux bords périodiques, une marche aléatoire saute à droite (à gauche) au taux γ_+ (γ_-). L'invariance par translation nous fait conclure

que $P_i^{\text{st}} = 1/N$; cependant, les relations de bilan détaillé ne sont pas satisfaites.

Exemple 2 : Un système à trois états. Dans un système à trois états 1, 2 et 3, les seuls taux de transition non nuls sont $W_{21} = a$, $W_{32} = b$ et $W_{13} = c$. Pour $a = b = c$ on récupère un cas particulier de l'exemple précédent.

Exercice 2. Pour le cas de l'exemple ci-dessus, représenter les états par des points et les taux non nuls par des flèches. Écrire la matrice \mathcal{W} . Écrire l'équation aux valeurs propres. Trouver les valeurs propres pour $a = b = c$. Trouver les vecteurs propres de droite.

Exemple 3 : Une réaction chimique cyclique. Trois espèces de particules chimiques A , B et C sont interconvertibles entre elles moyennant les réactions



dont les taux sont indiqués en-dessous des flèches. Les particules sont indépendantes et peuvent sauter entre les sites voisins d'un réseau à un taux γ .

Exercice 3. À quels égards cet exemple est-il simpliste ? Ce modèle a toutefois l'avantage d'être soluble. On se limitera au cas $a = b = c$.

- a. Quel sera l'état stationnaire ?
- b. Montrer comment pour un réseau unidimensionnel de sites $i = 1, \dots, N$ on peut écrire la matrice \mathcal{W} correspondante et trouver son spectre.

3 Processus markoviens

3.1 Processus markoviens.

a. *Définition.* Ce qui précède suggère la définition suivante. On appelle processus *markovien* tout processus aléatoire dont la probabilité à n fenêtres se décompose suivant l'équation (14). Dans les cas où T ne dépend que de la différence $t' - t$ des deux temps, le processus markovien est dit *homogène*.

b. *Commentaires.* La discussion précédente montre que tout processus décrit par une équation maîtresse est markovien. Cependant, on verra par la suite que la classe des processus markoviens en comprend encore d'autres. Ce sont essentiellement des processus que l'on peut obtenir à partir d'une équation maîtresse moyennant une limite dans laquelle les taux de transition $W(s'|s)$ deviennent singuliers.

c. *Attention !* Tout processus aléatoire possède une loi de probabilité à deux fenêtres $P_{11}(s', t'|s, t)$, mais c'est seulement dans le cas d'un processus markovien que cette fonction

- porte le nom de probabilité de transition ;
- peut servir à construire toutes les P_n ;
- est dénotée, dans ces notes, par la lettre T .

3.2 *L'équation de Chapman–Kolmogoroff.* Ayant vu qu'un processus markovien est spécifié complètement par une loi initiale $P(s, t_0)$ à un instant t_0 quelconque, et une probabilité de transition $T(s', t'|s, t)$, on peut se demander quelles sont les fonctions T (de quatre variables !) qui qualifient.

Considérons l'équation (14) pour $n = 3$, c'est-à-dire avec deux facteurs T . En intégrant sur s_2 , puis en utilisant l'équation (9) et simplifiant par $P(s_1, t_1)$, on trouve que la probabilité de transition T doit satisfaire à

$$T(s_3, t_3|s_1, t_1) = \int ds_2 T(s_3, t_3|s_2, t_2) T(s_2, t_2|s_1, t_1) \quad t_1 < t_2 < t_3 \quad (27)$$

Cette équation est dictée également par la simple notion que la probabilité totale doit être conservée au cours du temps. On l'appelle habituellement l'équation de *Chapman–Kolmogoroff*. Chez certains auteurs elle porte le nom de *Smoluchowski*. Le premier à en écrire une version semble avoir été *Bachelier* en 1900.

On arrive à la conclusion suivante. Toute loi de probabilité $T(s', t'|s, t)$ sur la variable s' qui obéit à l'équation (27), en combinaison avec une loi initiale $P(s, t_0)$ à un instant t_0 quelconque, définit de façon unique un processus markovien. Pour s'en convaincre, il suffit de vérifier que les P_n construites à partir de ces deux données, sont positives et correctement normalisées.

Exemples. Les équations (58) et (60) plus loin donnent deux exemples de probabilités de transition T définissant des processus markoviens qui ne sont pas dans la sous-classe de ceux du paragraphe **2.2**. Ce point est discuté plus amplement au chapitre **4**.

Exercice 4. Montrer que si la loi initiale $P(s, t_0)$ et la probabilité de transition $T(s', t'|s, t)$ sont des gaussiennes (respectivement en s et en s', s), alors le processus markovien engendré est gaussien.

Exercice 5. *Formalisme de l'opérateur de projection.* Soit un système à N particules dont on connaît l'équation du mouvement microscopique. Celle-ci peut être, par exemple, l'équation de Liouville ou de Von Neumann, ou une équation maîtresse à laquelle on attribue un statut fondamental. Une question générale en mécanique statistique est de savoir comment déduire d'une équation du mouvement microscopique un système d'équations fermé limité à un nombre restreint de grandeurs d'intérêt physique. Il n'existe pas de réponse universelle à cette question. Le "formalisme de l'opérateur de projection", introduit vers 1960 par Mori et par Zwanzig, ne résout pas le problème, mais le fait réapparaître sous une forme à partir de laquelle de bonnes approximations sont souvent possibles. Ci-dessous on explique ce formalisme sous la forme d'un exercice pour le cas où l'équation de base est une équation maîtresse [Zw60]. Une approche différente, mais essentiellement équivalente, est décrite par Risken [Ri89], chapitre 8.

Soit une équation maîtresse

$$\frac{d}{dt} p(\sigma, t) = \sum_{\sigma'} \left[w(\sigma, \sigma') p(\sigma', t) - w(\sigma', \sigma) p(\sigma, t) \right] \quad (28)$$

Soit S la grandeur physique qui nous intéresse. On écrira s_σ pour la valeur de S dans le micro-état σ . La probabilité de trouver pour S la valeur s à l'instant t est

$$P(s, t) = \sum_{\sigma} \delta(s_\sigma, s) p(\sigma, t) \quad (29)$$

où δ est le delta de Kronecker.

a. Montrer que P est normalisée comme il faut.

On dénotera par

$$\Omega(s) = \sum_{\sigma} \delta(s_\sigma, s) \quad (30)$$

le sous-volume de l'espace des phases où S vaut s . L'opérateur de projection \mathcal{P} sera défini par

$$\mathcal{P} p(\sigma, t) = \bar{p}(\sigma, t) = \Omega^{-1}(s_\sigma) P(s_\sigma, t) \quad (31)$$

b. Interpréter cette application. Montrer que \mathcal{P} est une projection.

On définit

$$(1 - \mathcal{P}) p(\sigma, t) = q(\sigma, t) \quad (32)$$

c. Montrer qu'en appliquant \mathcal{P} et $1 - \mathcal{P}$ aux deux membres de l'équation maîtresse (28), on obtient un système de deux équations couplées pour deux inconnues $P(s, t)$ et $q(\sigma, t)$.

d. Dans l'équation pour q , prendre la condition initiale $q(\sigma, 0) = 0$ et l'interpréter. Résoudre formellement cette équation et substituer le résultat dans celle pour P , ce qui vous donne une équation pour *la seule inconnue* $P(s, t)$. Montrer que celle-ci s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(s, t) &= \sum_{s'} \left[W(s|s') P(s', t) - W(s'|s) P(s, t) \right] \\ &+ \int_0^t d\tau \sum_{s'} K(s, s'; \tau) P(s', t - \tau) \end{aligned} \quad (33)$$

Exprimer W et K en termes des grandeurs données au départ.

La première ligne de la formule finale (33) représente une équation maîtresse, à laquelle la deuxième ligne rajoute un terme à noyau mémoire. L'apparition d'un tel terme est un phénomène général chaque fois que l'on essaie de réduire le nombre de variables dans un système d'équations d'évolution.

Remarque 1. Il existe une variété de méthodes d'approximation qui partent de l'équation (33) et qui, en général, consistent à simplifier le terme de mémoire.

Remarque 2. La *renormalisation* que l'on rencontrera au chapitre **11** consiste également à éliminer une fraction des variables. On s'y débarrasse du terme de mémoire en observant qu'il est non pertinent dans le sens du groupe de renormalisation.

3.3 Processus markoviens et non markoviens. Dans ce paragraphe on illustre à l'aide de quelques exercices la différence entre les processus markoviens et non markoviens.

Exercice 6. La marche aléatoire avec persistance. Une marche aléatoire sur un réseau carré bidimensionnel, initialement localisée dans l'origine $(0, 0)$, fait son premier pas à un taux γ_+ vers le site $(1, 0)$ et à un taux γ_- vers ses trois autres sites voisins. Chaque pas suivant s'effectue à un taux γ_+ dans la direction du pas précédent, et à un taux γ_- dans l'une des trois autres directions.

On note $\mathbf{r}(t)$ la position de la marche à l'instant t et $\mathbf{e}(t) = \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - 1)$ le dernier déplacement qu'elle a subi avant d'arriver à cette position. Montrer que

- a. $\mathbf{r}(t)$ n'est pas markovien ; mais que
- b. $(\mathbf{r}(t), \mathbf{e}(t))$ est markovien.

Cet exemple montre qu'un phénomène physique (ici : la marche aléatoire avec persistance) peut correspondre ou non à la notion mathématique d'un processus markovien, selon les variables que l'on choisit pour le décrire.

Exercice 7. Quel est le processus *non* markovien le plus simple qui soit ? Cette question n'a pas de réponse bien définie. On peut toutefois considérer l'exemple d'un processus $u(t)$ composé de deux réalisations, $u_1(t)$ et $u_2(t)$, qui sont des fonctions sur $[0, 1]$ s'intersectant en un seul point. Montrer que $u(t)$ n'est pas markovien.

L'exercice suivant est utile pour des considérations générales concernant les processus aléatoires et pour la discussion de fonctions de corrélation temporelles.

Exercice 8. Soit un processus aléatoire $u(t)$. Pour un temps t_0 et une constante u_0 donnés, les fonctions telles que $u(t_0) = u_0$ constituent un sous-ensemble qui sera muni de la loi $\tilde{\mathcal{P}}$ définie comme \mathcal{P} restreinte à ce sous-ensemble et proprement normalisée. On notera $\tilde{u}(t)$ les fonctions $u(t)$ de ce sous-ensemble.

- a. Vérifier les énoncés suivants.
 - Le sous-ensemble des $\tilde{u}(t)$ est également un processus aléatoire.
 - Même si $u(t)$ est stationnaire, $\tilde{u}(t)$ ne l'est pas.
 - Si $u(t)$ est markovien, le processus $\tilde{u}(t)$ restreint à $t > t_0$ l'est aussi.
 - Soit $\langle \dots \rangle_{u_0, t_0}$ la moyenne par rapport à $\tilde{u}(t)$. Avec $t_2 > t_1$, la fonction de corrélation du processus $u(t)$ s'écrit

$$\begin{aligned} \langle u(t_1)u(t_2) \rangle &= \langle u(t_1) \langle u(t_2) \rangle_{u(t_1), t_1} \rangle \\ &= \int du_1 P(u_1, t_1) u_1 \langle u(t_2) \rangle_{u_1, t_1} \end{aligned} \quad (34)$$

- b. Si $u(t)$ est markovien, montrer que le processus $\tilde{u}(t)$ avec $t < t_0$ l'est aussi.

Solution 8b. Soit $t_{-n} < t_{-n+1} < \dots < t_{-1} < t_0$ une suite croissante de temps. On écrira $u_{-m} = u(t_{-m})$ et $-m$ au lieu de (u_{-m}, t_{-m}) ; ainsi $P_{n+1}(-n, -n+1, \dots, -1, 0)$ sera la probabilité à $n+1$ temps du processus $u(t)$. En particulier $P_1(0) = P_1(u_0, t_0)$. On voit que

$$\tilde{P}_n(-n, -n+1, \dots, -1) = \frac{P_{n+1}(-n, -n+1, \dots, -1, 0)}{P_1(0)} \quad (35)$$

est la loi de probabilité à n temps du processus $\tilde{u}(t)$, normalisée comme il le faut selon $\int du_{-n} \dots \int du_{-1} \tilde{P}_n = 1$. En intégrant (35) sur u_{-n+1}, \dots, u_{-1} on obtient

$$\tilde{P}_1(-n) = \frac{P_2(-n, 0)}{P_1(0)} = \frac{T(0|-n)P_1(-n)}{P_1(0)} \quad (36)$$

où T est la probabilité de transition de $u(t)$. La question est maintenant de savoir s'il existe $\tilde{T}(-m+1|-m)$ tel que

$$\begin{aligned} \tilde{P}_n(-n, -n+1, \dots, -1) \\ = \tilde{T}(-1|-2)\tilde{T}(-2|-3)\dots\tilde{T}(-n+1|-n)\tilde{P}_1(-n) \end{aligned} \quad (37)$$

Afin de répondre à cette question par l'affirmative et de trouver l'expression de \tilde{T} on réécrit (35) comme

$$\begin{aligned} \tilde{P}_n(-n, -n+1, \dots, -1) \\ = \frac{T(0|-1)T(-1|-2)\dots T(-n+1|-n)P_1(-n)}{P_1(0)} \\ = \frac{T(0|-1)T(-1|-2)}{T(0|-2)} \times \frac{T(0|-2)T(-2|-3)}{T(0|-3)} \times \dots \\ \times \frac{T(0|-n+1)T(-n+1|-n)}{T(0|-n)} \times \frac{T(0|-n)P_1(-n)}{P_1(0)} \end{aligned} \quad (38)$$

En comparant la dernière ligne de (38) à (37) et (36) on voit que $\tilde{u}(t)$ est markovien avec la probabilité de transition \tilde{T} donnée en termes de T . En restituant la notation habituelle on trouve que pour $t < t' < t_0$

$$\tilde{T}(u', t'|u, t) = \frac{T(u_0, t_0|u', t') T(u', t'|u, t)}{T(u_0, t_0|u, t)} \quad (39)$$

On peut encore vérifier que l'on a $\int du' \tilde{T}(u', t'|u, t) = 1$ comme il faut. À noter qu'on n'a pas fait apparaître la dépendance de \tilde{T} en (u_0, t_0) dans la notation de cette grandeur.

Exercice 9. Comme une application de l'exercice précédent, déterminer $\tilde{T}(u', t'|u, t)$ pour le processus dichotome qui saute à un taux γ entre deux états $u = \pm 1$ et qui prend la valeur $u(t_0) = 1$ à l'instant $t = t_0$. Montrer

que le processus $\tilde{u}(t)$ (pour lequel $t \leq t_0$) peut être défini alternativement par une équation maîtresse de matrice $\tilde{W}(t)$ donnée par

$$\tilde{W}(t) = \gamma \begin{pmatrix} -\tanh \gamma(t_0 - t) & \coth \gamma(t_0 - t) \\ \tanh \gamma(t_0 - t) & -\coth \gamma(t_0 - t) \end{pmatrix} \quad (40)$$

Exercice 10. Les deux processus aléatoires dont il est question au paragraphe **1.4a**, sont-ils markoviens ?

Exercice 11. Un gaz parfait à l'équilibre à une température donnée se trouve dans un récipient divisé par une paroi en deux compartiments. La paroi est trouée d'un trou de diamètre plus petit que la distance interatomique du gaz. Faire tout commentaire utile sur les deux énoncés suivants :

- l'échange d'atomes entre les deux compartiments est un processus aléatoire ;
- l'échange d'atomes entre les deux compartiments est un processus markovien.

4 Équation de Fokker–Planck

4.1 Introduction. L'équation de Fokker–Planck est une équation aux dérivées partielles parabolique. L'équation de la diffusion en est l'exemple le plus simple et le mieux connu. L'équation de Fokker–Planck fournit un moyen de décrire l'évolution des lois de probabilité associées à certains processus markoviens qui ne peuvent pas être définis par des équations maîtresses au sens du chapitre **2**.

4.2 Le développement de Kramers–Moyal. Voir Van Kampen [vK92], chapitre VIII, et Risken [Ri89]. À partir de l'équation maîtresse on peut dans certains cas, moyennant une limite convenablement prise, déduire une équation de Fokker–Planck. Cette dernière peut donc être vue comme un cas limite d'équation maîtresse. Le passage à une équation de Fokker–Planck est possible dans la limite où les sauts $\sigma \rightarrow \sigma'$ ou $s \rightarrow s'$ deviennent infiniment petits devant l'échelle des σ ou des s à laquelle on s'intéresse, et infiniment fréquents à l'échelle temporelle d'intérêt.

a. Cas continu. On part de l'équation maîtresse (13) et l'on élimine s' en faveur de $r = s - s'$. La nouvelle notation

$$W_{-r}(s) = W(s'|s) \quad (41)$$

dénotera le taux des sauts de taille r à partir de s . L'équation (13) devient alors

$$\frac{\partial P(s, t)}{\partial t} = \int dr [W_r(s - r)P(s - r, t) - W_{-r}(s)P(s, t)] \quad (42)$$

On se place au cas où $W_r(s)$ est suffisamment piquée autour de la valeur $r = 0$ de son indice, et ne varie que lentement avec son argument s . Le premier



Figure 4: Réalisation d'un processus markovien $u(t)$ dont le temps de séjour est très court. La région marquée par la flèche est montrée agrandie sur la figure 5.

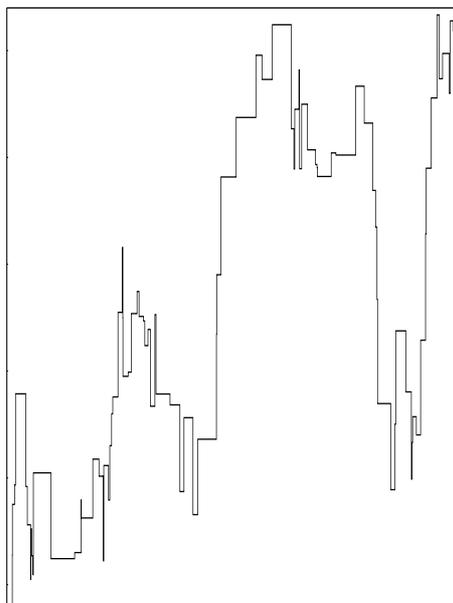


Figure 5: Détail de la figure 4.

terme entre crochets dans (42) dépend de l'argument $s - r$. En développant ce terme en série de Taylor autour de l'argument s on trouve

$$\frac{\partial P(s, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial s^n} [a_n(s) P(s, t)] \quad (43)$$

avec des coefficients $a_n(s)$ donnés par

$$\begin{aligned} a_n(s) &= \int dr r^n W_r(s) \\ &= \int ds' (s' - s)^n W(s'|s) \end{aligned} \quad (44)$$

L'équation (43) s'appelle le *développement de Kramers–Moyal*.

Le coefficient $a_n(s)$ a la dimension $[a_n] = [s]^n [t]^{-1}$; on l'appellera le n ième *taux de moment*. Le produit $a_n(s) \Delta t$ représente, en effet, pour $\Delta t \rightarrow 0$, le n ième moment du déplacement Δs , effectué pendant Δt à partir d'une position initiale s .

b. Cas discret. Dans la discussion précédente σ pouvait parcourir un ensemble X arbitraire. Soit maintenant σ un nombre sans dimension qui mesure des positions sur l'axe d'une variable s continue. Soit a l'échelle microscopique des sauts $\sigma \rightarrow \sigma'$, donc une grandeur physique de même dimension que s . On posera

$$\sigma a = s, \quad P_\sigma(t) = a P(s, t) \quad (45)$$

On s'intéresse aux phénomènes à l'échelle macroscopique. Soit $\rho = \sigma - \sigma'$, et soit

$$W_{-\rho}(\sigma a) = W_{\sigma' \sigma} \quad (\sigma' \neq \sigma) \quad (46)$$

le taux des sauts de taille ρ à partir de σ . On admettra que le taux $W_\rho(s)$ et la fonction $P(s, t)$ d'intérêt ne varient avec s qu'à une échelle $\gg a$. En effectuant ces changements de variables et de fonctions dans l'équation (11) et développant comme ci-dessus, on arrive de nouveau à la série (43), cette fois-ci avec

$$a_n(s) = \sum_{\rho} (\rho a)^n W_\rho(s) \quad (47)$$

Il n'y a pas de terme $\rho = 0$ dans cette somme.

c. Développement systématique. Les termes de la série (43) ne correspondent pas automatiquement à des puissances croissantes d'un petit paramètre. Risken ([Ri89], chapitre 4.6) considère la troncature de cette série après un nombre fini de termes. Van Kampen [vK92] explique sous quelles conditions et comment on peut en extraire un développement systématique.

4.3 Équation de Fokker–Planck.

a. Définition. En tronquant le développement (43) après le second terme, on obtient

$$\frac{\partial P(s, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial s} [a_1(s) P(s, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s^2} [a_2(s) P(s, t)] \quad (48)$$

qui s'appelle l'équation de Fokker–Planck ou parfois aussi l'équation de Smoluchowski. Elle représente, sous certaines conditions, l'ordre le plus bas dans un développement systématique de l'équation maîtresse.

b. Terminologie. L'équation de Fokker–Planck est une équation linéaire pour l'inconnue $P(s, t)$. Ceci dit,

– si $a_2(s) = B$, où B est une constante, l'équation de Fokker–Planck est appelée *quasi-linéaire* ;

– si, en plus, $a_1(s) = A_0 - As$, où A_0 et A sont des constantes, l'équation de Fokker–Planck est dite *linéaire* ; dans ce cas on peut se ramener à $A_0 = 0$ par une translation de s .

c. Commentaires.

(i) L'équation maîtresse de départ, (13), est une équation intégral-différentielle déterminée par une fonction à deux variables, à savoir le noyau d'intégrale $W(s'|s)$. L'équation de Fokker–Planck est une équation aux dérivées partielles déterminée par deux fonctions à une variable, $a_1(s)$ et $a_2(s)$.

(ii) Bien que la notation ne l'indique pas, les $a_n(s)$ peuvent dépendre du temps. On admettra toutefois partout dans la suite que tel n'est pas le cas, sauf si le contraire est précisé.

Exercice 12. Soit $P(s, t_0) > 0$. Montrer que l'équation de Fokker–Planck (48) conserve la positivité, c'est-à-dire que $P(s, t) > 0$ pour tout $t > t_0$.

4.4 Équivalence formelle. L'équation maîtresse (13) donne directement, sans aucun développement, l'équation de Fokker–Planck (48) dans le cas où on choisit [Ri89]

$$W(s|s') = -\frac{\partial}{\partial s}[a_1(s)\delta(s' - s)] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial s^2}[a_2(s)\delta(s' - s)] \quad (49)$$

Mais, contrairement à ce qui était supposé jusqu'ici, ces taux de transition ne sont évidemment pas des grandeurs finies.

Exercice 13. Dédurre l'équation de Fokker–Planck (48) par substitution de (49) dans (13).

4.5 Équation de Fokker–Planck et processus markovien. Soit $T(s, t|s_0, t_0)$ la solution de l'équation de Fokker–Planck (48) avec la condition initiale

$$P^{\text{in}}(s, t_0) = \delta(s - s_0) \quad (50)$$

Cette “fonction de Green” T obéit évidemment à l'équation de Chapman–Kolmogoroff, (27). L'équation de Fokker–Planck définit donc un processus aléatoire markovien qu'on peut construire à partir de la condition initiale P^{in} et de la probabilité de transition T ci-dessus.

4.6 Solution stationnaire. On ne sait pas résoudre l'équation de Fokker–Planck générale (48). Il est facile, toutefois, de trouver sa solution d'équilibre,

$$P^{\text{eq}}(s) = \frac{C}{a_2(s)} \exp \left[2 \int_{s_0}^s ds' \frac{a_1(s')}{a_2(s')} \right] \quad (51)$$

où C est une constante de normalisation.

Exercice 14. La condition de stationnarité $\partial P(x, t)/\partial t = 0$ appliquée à (48) donne une équation différentielle linéaire de second ordre. Trouver sa solution générale, qui doit dépendre de deux constantes d'intégration. Qu'est-ce qui distingue la solution (51) donnée ci-dessus des autres solutions stationnaires ?

4.7 Diffusion dans un potentiel. Pour $a_1(s) = -U'(s)$ et $a_2(s) = 2k_B T$ on obtient l'équation de Fokker-Planck quasi-linéaire

$$\frac{\partial}{\partial t} P(s, t) = \frac{\partial}{\partial s} U'(s)P(s, t) + k_B T \frac{\partial^2}{\partial s^2} P(s, t) \quad (52)$$

Celle-ci décrit la diffusion d'une particule dans un potentiel $U(s)$. La solution d'équilibre est un cas particulier de (51),

$$P^{\text{eq}}(s) = C \exp(-U(s)/k_B T) \quad (53)$$

Exercice 15. Un mouvement brownien unidimensionnel. Une particule effectue des sauts entre les sites proches voisins d'un réseau unidimensionnel de maille a . Soit V_i le potentiel au site i , où $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Soit $P_i(t)$ la probabilité à l'instant t que la particule occupe le site i . On cherche l'équation de Fokker-Planck pour l'évolution temporelle de $P_i(t)$ valable à une échelle spatiale grande devant a , si bien qu'on peut écrire $P_i(t) = aP(ia, t) = aP(x, t)$. On choisit des taux de transition entre sites voisins donnés par

$$W_{i+1, i} = \gamma_{i+\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2}\beta(V_{i+1}-V_i)}, \quad W_{i, i+1} = \gamma_{i+\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2}\beta(V_i-V_{i+1})} \quad (54)$$

On admettra que $\gamma_{i+\frac{1}{2}}$ et V_i varient seulement lentement avec i (c'est-à-dire à une échelle $\gg a$), si bien qu'on peut les remplacer par respectivement $\gamma(x + \frac{1}{2}a)$ et $V(x)$.

[Interprétation : on peut imaginer qu'il s'agit de la diffusion d'un gaz dans un matériau poreux dont $\gamma(x)$ est la porosité locale.]

a. Écrire l'équation maîtresse pour $P_i(t)$. Montrer que $P_i^{\text{eq}} = C \exp(-\beta V_i)$ est la solution d'équilibre, quels que soient les $\gamma_{i+\frac{1}{2}}$.

b. Dédurre de l'équation maîtresse pour $P_i(t)$ celle qui régit $P(x, t)$. Montrer que $P^{\text{eq}}(x)$ ne dépend pas de $\gamma(x)$.

c. Soit $P_J^{\text{st}}(x)$ la solution stationnaire telle que le système est parcouru d'un courant de probabilité J . Montrer que contrairement à $P^{\text{eq}}(x)$, la solution stationnaire $P_J^{\text{st}}(x)$ dépend de $\gamma(x)$. Trouver son expression.

4.8 Mouvement déterministe. Soit un système déterministe régi par l'équation du mouvement

$$\frac{ds}{dt} = -U'(s) \quad (55)$$

Un ensemble de points, de densité $\rho(s, t)$ dans l'espace des phases de ce système, obéit à l'équation de Liouville

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(s, t) = \frac{\partial}{\partial s} U'(s) \rho(s, t) \quad (56)$$

c'est-à-dire à l'équation (52) avec $k_B T = 0$. On comprend donc que le premier terme de l'équation (52) est à l'origine d'une dérive déterministe, alors que le second prend en compte les fluctuations thermiques autour de celle-ci. Voir [vK92], chapitre XI.5.

4.9 Processus d'Ornstein–Uhlenbeck.

a. Soit l'équation de Fokker–Planck linéaire

$$\frac{\partial}{\partial t} P(s, t) = A \frac{\partial}{\partial s} s P(s, t) + \frac{1}{2} B \frac{\partial^2}{\partial s^2} P(s, t), \quad (57)$$

qui décrit la diffusion dans un potentiel harmonique $U(s) = \frac{1}{2} A s^2$. Sa solution pour la condition initiale (50) est

$$T(s, t | s_0, t_0) = \frac{\sqrt{A}}{\sqrt{\pi B (1 - e^{-2A(t-t_0)})}} \exp \left[-\frac{A(s - s_0 e^{-A(t-t_0)})^2}{B(1 - e^{-2A(t-t_0)})} \right] \quad (58)$$

Il s'agit encore d'une probabilité de transition qui ne dépend que de la différence des temps.

b. La probabilité de transition (58) et la condition initiale

$$P^{\text{in}}(s, t_0) = (A/\pi B)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{As^2}{B}\right) \quad (59)$$

définissent un processus aléatoire dit d'*Ornstein–Uhlenbeck*. Ce processus est stationnaire.

Avec toute autre condition initiale, la même probabilité de transition (58) définit un processus non stationnaire qui pour $t \rightarrow \infty$ tend asymptotiquement vers celui d'Ornstein–Uhlenbeck.

c. *Théorème de Doob* (1942). Le processus d'Ornstein–Uhlenbeck est le seul processus aléatoire qui soit à la fois (i) markovien, (ii) stationnaire et (iii) gaussien, ceci à des facteurs d'échelle près.

Exercice 16. Dédurre (58) de (57) et (50).

Indication : appliquer une transformation de Fourier.

4.10 *Processus de Wiener* ou de *Wiener–Lévy*. Dans la limite $A \rightarrow 0$ le processus d'Ornstein–Uhlenbeck (58) se réduit au *processus de Wiener*, dont la probabilité de transition est

$$T(s, t | s_0, t_0) = (2\pi B(t - t_0))^{-\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{(s - s_0)^2}{2B(t - t_0)} \right] \quad (60)$$

Ce processus décrit la marche brownienne. Il n'est pas stationnaire.

4.11 Temps de séjour. Les exemples des paragraphes 4.9 et 4.10 montrent la différence entre les nouveaux processus markoviens qu'on vient de trouver dans ce chapitre, et ceux définis par les équations maîtresses du chapitre 2. Pour les nouveaux, si $s(t_0) = s_0$, dès que $t > t_0$ la probabilité de trouver $s(t)$ dans un intervalle $[s_0 - \frac{1}{2}\Delta s, s_0 + \frac{1}{2}\Delta s]$ tend vers 0 pour $\Delta s \rightarrow 0$. Le temps de séjour dans n'importe quel état est donc nul ; il n'existe pas de taux de transition. Les trajectoires $s(t)$ sont des fonctions continues de t . Dans le cas du paragraphe 4.10 ce sont les trajectoires browniennes, très étudiées.

4.12 Les taux de moment. Soit un processus markovien, défini par sa probabilité de transition $T(s', t' | s, t)$. Ses taux de moment s'écrivent en termes de T sous la forme

$$a_n(s) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int ds' (s' - s)^n T(s', t + \Delta t | s, t) \quad (61)$$

Cette expression coïncide avec la définition (44) pour les processus markoviens considérés au chapitre 2, qui ont des temps de séjour finis. Mais elle étend la définition des taux de moments à des processus markoviens arbitraires, pour lesquels on peut donc désormais écrire le développement de Kramers–Moyal. Dans le cas particulier où (61) conduit à $a_3(s) = a_4(s) = \dots = 0$, on sait que le processus markovien en question est décrit par une équation de Fokker–Planck.

Quand on construit selon (61) le développement du processus markovien défini par l'équation de Fokker–Planck (48), on trouve que cette équation s'autoreproduit.

4.13 Équation de Fokker–Planck dépendante du temps. Les $a_n(s)$, et donc l'équation de Fokker–Planck, peuvent dépendre du temps. En pratique cela arrive surtout pour des systèmes physiques soumis à des champs extérieurs variables. L'exercice suivant montre un exemple d'un autre type.

Exercice 17. On considère le processus de Wiener du paragraphe 4.10 limité à $t < t_0$ et avec la condition finale supplémentaire que $P(s, t_0) = \delta(s - s_0)$. Se rappeler le processus $\tilde{u}(t)$ de l'exercice 8b.

- a. Trouver la probabilité de transition $\tilde{T}(s', t' | s, t)$ de ce processus.
- b. Montrer à partir de l'expression de \tilde{T} que (pour $B = 1$) ce processus est décrit par l'équation de Fokker–Planck

$$\frac{\partial P(s, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial s} \left[\frac{s - s_0}{t_0 - t} P(s, t) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial s^2} P(s, t) \quad (62)$$

et en interpréter le premier terme du membre de droite.

- c. Le sous-processus de $\tilde{u}(t)$ limité à l'intervalle $0 \leq t \leq t_0$ et avec une condition initiale $\tilde{u}(0) = s_0$ identique à la finale est appelé un *pont brownien*. Montrer que la loi de probabilité $P(s, t)$ de ce processus est donnée par

$$P(s, t) = [2\pi t(1 - t/t_0)]^{-\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{(s - s_0)^2}{2t(1 - t/t_0)} \right) \quad (63)$$

4.14 Le diagramme de la figure 3 montre les relations d'inclusion–exclusion entre les processus aléatoires arbitraires (PA), les processus markoviens (PM), les processus décrits par une équation maîtresse (EM), et ceux décrits par une équation de Fokker–Planck (FP).

Exercice 18. Donner un exemple de processus markovien qui ne soit décrit ni par une équation maîtresse du chapitre 2 ni par une équation de Fokker–Planck (48).

4.15 *Équation de Fokker–Planck multidimensionnelle.* Voir Risken [Ri89], chapitre 6 ; Van Kampen [vK92], chapitre VIII.6.

À la fin de ce chapitre on considère le cas où $s = s_1, \dots, s_N$ est une variable à n composantes. Il est facile de déduire la généralisation du développement (43) et l'on trouve

$$\frac{\partial P(s, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial s_i} [a_{1,i}(s)P] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial s_i \partial s_j} [a_{2,ij}(s)P] + \dots \quad (64)$$

où les coefficients sont donnés par

$$\begin{aligned} a_{1,i}(s) &= \int ds' (s'_i - s_i) W(s'|s) \\ a_{2,ij}(s) &= \int ds' (s'_i - s_i)(s'_j - s_j) W(s'|s) \\ &\dots\dots \\ a_{n,i_1\dots i_n}(s) &= \int ds' (s'_{i_1} - s_{i_1}) \dots (s'_{i_n} - s_{i_n}) W(s'|s) \end{aligned} \quad (65)$$

S'il existe une limite où l'on peut supprimer les termes représentés par les points dans (64), on obtient une équation de Fokker–Planck multivariée. Cette équation est moins facile à manipuler que l'équation de Langevin qui lui est équivalente et dont il sera question dans les chapitres suivants.

5 Équation de Langevin

5.1 *Introduction.* Dans ce chapitre on considère la classe de processus markoviens qui peuvent être définis à l'aide de l'équation de Langevin. Au chapitre suivant on verra que ce sont les mêmes processus déjà vus au chapitre 4, c'est-à-dire ceux pour lesquels il existe une équation de Fokker–Planck.

5.2 *Bruit blanc gaussien.* Soit une fonction aléatoire $\xi(t)$ de premier moment $\langle \xi(t) \rangle = 0$ et de second moment

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t') \quad (66)$$

et dont les *cumulants* au-delà du second s'annulent. Tous les moments de ce processus sont alors déterminés. Le processus défini ainsi s'appelle *bruit blanc gaussien*. Il est stationnaire. L'équation (66) implique que $\xi(t)$ ne peut être une fonction continue.

5.3 Bruits convergeant vers le bruit blanc gaussien. Le bruit blanc gaussien est obtenu comme la limite d'une suite de *bruits* (= processus aléatoires). Différentes suites sont possibles.

a. Dans l'exemple suivant, basé sur Van Kampen [vK92], le bruit blanc gaussien apparaît comme la limite d'un bruit continu. Soit

$$\xi(t) = \sqrt{\frac{\Gamma}{\rho}} \sum_i \frac{c_i}{\tau} f\left(\frac{t-t_i}{\tau}\right) \quad (67)$$

où les t_i sont des instants aléatoires distribués uniformément avec une densité ρ sur l'axe du temps ; les c_i sont indépendants et aléatoirement égaux à ± 1 ; et $f(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}x^2)$. Dans la limite $\tau \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow \infty$ la fonction $\xi(t)$ devient le bruit blanc gaussien du paragraphe précédent. La démonstration passe par le calcul de la fonctionnelle génératrice de ce bruit. Voir [vK92].

b. On peut diviser l'axe du temps en intervalles Δt , écrire

$$\xi(t) = \sum_n \xi_n \delta(t - n\Delta t) \quad (68)$$

où ξ_n est une variable aléatoire de loi gaussienne,

$$p(\xi_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Gamma\Delta t}} \exp\left(-\frac{\xi_n^2}{2\Gamma\Delta t}\right) \quad (69)$$

Dans la limite $\Delta t \rightarrow 0$ ce bruit $\xi(t)$ devient également le bruit blanc gaussien du paragraphe **5.2**.

c. Soit $\xi(t)$ donné par

$$\xi(t) = a \sum_i \delta(t - t_i) - \rho a \quad (70)$$

où les t_i sont uniformes de densité ρ et a est une constante positive. Ce bruit est donc composé de deltas de Dirac positifs superposés sur un fond négatif de manière à ce que $\langle \xi(t) \rangle = 0$.

Exercice 19. Montrer que dans la limite $a \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow \infty$ avec $\rho a^2 \equiv \Gamma$ fixe, le bruit (70) devient encore une fois le bruit blanc gaussien du paragraphe **5.2**.

Cet exercice montre que le bruit dont on prend la limite, n'a pas besoin d'être symétrique par rapport à $\xi = 0$.

5.4 Équation de Langevin.

a. Équation. Soit $s(t)$ une grandeur fluctuante qui satisfait à l'équation

$$\frac{ds(t)}{dt} = G(s) + H(s) \xi(t) \quad (71)$$

où G et H sont des fonctions données et où $\xi(t)$ est du bruit blanc gaussien d'autocorrélation (66). L'équation (71) est appelée l'*équation de Langevin*. Si $H(s)$ est égal à une constante H_0 , l'équation de Langevin est dite *linéaire* ; dans le cas contraire, elle est dite *non linéaire*. Le terme aléatoire $H(s)\xi(t)$ est

souvent appelée une *force de Langevin* ; le terme $G(s)$ représente une *dérive* systématique.

La même équation (71) avec un bruit $\xi(t)$ défini autrement (par exemple avec un bruit continu) ne s'appelle plus "équation de Langevin".

b. Règle de lecture. Soit $0 \leq \alpha \leq 1$. Convenons d'interpréter (71) comme

$$s(t + \Delta t) - s(t) = \Delta t G(s_\alpha(t)) + H(s_\alpha(t)) \int_t^{t+\Delta t} dt' \xi(t') \quad (72)$$

où $s_\alpha(t)$ est une abréviation pour la moyenne pondérée

$$s_\alpha(t) = (1 - \alpha) s(t) + \alpha s(t + \Delta t) \quad (73)$$

si bien que $s_0(t) = s(t)$ et $s_1(t) = s(t + \Delta t)$. On dit que les équations (72) et (73) représentent la version α -*discrétisée* de l'équation de Langevin (71), ou encore qu'elles définissent une *règle de lecture* pour (71). On verra que, sauf si $H(s) = H_0$, le sens de l'équation (71) est *indéterminée* sans une telle règle : des α différents donnent lieu, de manière générale, à des processus $s(t)$ différents. Ceci sera démontré au paragraphe **6.2**.

c. Terminologie. Deux cas particuliers portent des noms spécifiques :

- pour $\alpha = 0$ on a la règle de lecture d'*Itô* ;
- pour $\alpha = \frac{1}{2}$ on a la règle de lecture de *Stratonovitch*.

On parle aussi de discrétisations *pré-point*, *mi-point* et *post-point* pour respectivement $\alpha = 0, \frac{1}{2}, 1$.

d. Notons que, si $s(t)$ est connu, (72) est une équation pour $s(t + \Delta t)$ qui est explicite quand $\alpha = 0$, et implicite quand $0 < \alpha \leq 1$. Dans le premier cas on appelle (71) aussi une *équation d'Itô*. Voir Gardiner [Ga83], chapitre 4.

5.5 Bruit continu. Si dans l'équation (71) on prend un bruit $\xi(t)$ *continu*, aucune règle de lecture n'est nécessaire. Avec le bruit $\xi(t)$ de l'exemple **a** du paragraphe **5.3**, on obtient à la limite du bruit blanc gaussien la règle de lecture de Stratonovitch, $\alpha = \frac{1}{2}$. Cette règle a donc, de ce point de vue, un statut privilégié.

5.6 Continuité. Le bruit blanc gaussien $\xi(t)$ n'est nulle part continu. Le processus $s(t)$ est continu, mais sa dérivée n'existe nulle part. Ces propriétés proviennent du fait que le bruit blanc gaussien est une suite infiniment dense de deltas de Dirac infiniment faibles, comme le montrent les suites approximantes **b** et **c** du paragraphe **5.3**.

5.7 Moyennes. L'équation de Langevin faisant intervenir une fonction aléatoire $\xi(t)$, sa solution $s(t)$ sera fonctionnelle de $\xi(t)$ et donc également aléatoire. Les moyennes telles que $\langle s(t) \rangle$ et $\langle s(t)s(t') \rangle$ s'entendent comme des moyennes sur toutes les réalisations de $\xi(t)$.

5.8 Équation de Langevin discrète. L'équation (72) définit $s(t)$ pour une suite d'instantanés séparés par de petits intervalles temporels, que l'on peut tous prendre égaux à Δt . Posons

$$t_n = n\Delta t, \quad s_n = s(t_n), \quad s_{n\alpha} = s_\alpha(t_n) \quad (74)$$

La suite des $s(t_n)$ ne dépend que des variables aléatoires

$$\xi_n = \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} dt' \xi(t') \quad (75)$$

qui sont indépendantes et distribuées selon la loi (69), si bien que $\langle \xi_n^2 \rangle = \Gamma \Delta t$. La règle de lecture (72) équivaut donc au remplacement de l'équation de Langevin (71) par la version discrétisée

$$s_{n+1} - s_n = \Delta t G(s_n) + H(s_n) \xi_n \quad (76)$$

5.9 Exemple : Modèle de Landau–Guinsbourg dépendant du temps. Le hamiltonien de Landau–Guinsbourg pour un modèle de spins continus S_i sur un réseau de sites $i = 1, 2, \dots, N$ est

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i - S_j)^2 + \frac{1}{2} r \sum_i S_i^2 - \frac{1}{12} u \sum_i S_i^4 + \dots \quad (77)$$

où $\langle i, j \rangle$ dénote une paire de sites voisins. On peut doter ce système d'une dynamique représentée par le système d'équations de Langevin

$$\frac{dS_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S_i} + \xi_i(t) \quad (78)$$

où les $\xi_i(t)$ sont des bruits blancs gaussiens indépendants sur chaque site et satisfaisant

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2k_B T \delta_{ij} \delta(t - t') \quad (79)$$

L'approche vers l'état d'équilibre correct, $P^{\text{eq}}(S_1, S_2, \dots, S_N) = Z^{-1} \exp(-\mathcal{H}/k_B T)$, est alors garantie. En rajoutant à \mathcal{H} un terme $-\sum_i H_i(t) S_i$ avec, par exemple, $H_i(t) = H_0 \cos(i \cdot q - \omega t)$, on peut se poser la question de calculer la *susceptibilité magnétique dynamique* $\chi(q, \omega; T)$. Or, sauf si $u = \dots = 0$ si bien que tout est gaussien, il n'est pas possible de résoudre le système (78). On peut cependant l'analyser au voisinage de son point critique ferromagnétique à l'aide des techniques de renormalisation. Voir [HHM72].

6 Équivalence des équations de Fokker–Planck et de Langevin

A. Équivalence

6.1 Introduction. Dans ce chapitre on montre l'équivalence des équations de Fokker–Planck et de Langevin. On paie une attention particulière au rôle du paramètre α lors du passage entre les deux types d'équation.

6.2 Équivalence. Voir Risken [Ri89], chapitre 3.3, où il est surtout question des cas $\alpha = 0$ et $\alpha = \frac{1}{2}$. Voir aussi Gardiner [Ga83] pour $\alpha = 0$. On considère à nouveau l'équation (71),

$$\frac{ds(t)}{dt} = G(s) + H(s) \xi(t) \quad (80)$$

a. Cas général. Soit l'équation de Langevin (80) avec le temps discrétisé selon (76). On considère (76) comme une équation pour $\Delta s = s_{n+1} - s_n$, à s_n donné. Avec cette notation on a $s_{n\alpha} = s_n + \alpha\Delta s$. Sachant que Δt et ξ_n sont petits, on réécrit (76) comme

$$\begin{aligned} \Delta s &= \Delta t[G(s_n) + \alpha\Delta s G'(s_n) + \frac{1}{2}\alpha^2\Delta s^2 G''(s_n) + \dots] \\ &\quad + \xi_n[H(s_n) + \alpha\Delta s H'(s_n) + \frac{1}{2}\alpha^2\Delta s^2 H''(s_n) + \dots] \end{aligned} \quad (81)$$

En résolvant Δs en termes de s_n on trouve

$$\Delta s = \Delta t G(s_n) + \xi_n H(s_n) + \alpha \xi_n^2 H(s_n) H'(s_n) + \dots \quad (82)$$

où les points indiquent le reste de la double série en puissances de ξ_n et de Δt . On voit qu'il s'agit d'un processus markovien, car l'incrément Δs ne dépend que de la valeur s_n et de la variable aléatoire indépendante ξ_n . Il existe donc une probabilité de transition $T(s_n + \Delta s, t_n + \Delta t | s_n, t_n)$. Comme cela a été indiqué au paragraphe 4.12, on peut alors construire le développement de Kramers–Moyal pour la loi de probabilité $P(s, t)$ à l'aide de l'équation (61), qui dans le cas présent prend la forme

$$a_n(s) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta s^n \rangle}{\Delta t} \quad (83)$$

où la moyenne est par rapport à ξ_n . En substituant la série (82) dans (83) et effectuant la moyenne à l'aide de la loi de ξ_n , on trouve pour $\langle \Delta s^n \rangle$ une série en puissances de Δt . Après la limite $\Delta t \rightarrow 0$ il reste

$$\begin{aligned} a_1(s) &= G(s) + \alpha\Gamma H(s)H'(s) \\ a_2(s) &= \Gamma H^2(s) \\ a_n(s) &= 0 \quad \text{pour } n \geq 3 \end{aligned} \quad (84)$$

Il s'ensuit que l'équation de Langevin (80) avec la règle de lecture (72)–(73) est équivalente à l'équation de Fokker–Planck

$$\frac{\partial P(s, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial s}[(G(s) + \alpha\Gamma H(s)H'(s))P(s, t)] + \frac{1}{2}\Gamma \frac{\partial^2}{\partial s^2}[H^2(s)P(s, t)] \quad (85)$$

qui, à un changement de notation près, est identique à (48).

b. Cas particulier de l'équation de Langevin linéaire. Ce cas est certainement le plus fréquent dans les applications. Si l'on pose $G(s) = -U'(s)$ et $H^2(s) = 2k_B T/\Gamma$, on trouve que l'équation de Langevin linéaire

$$\frac{ds(t)}{dt} = -U'(s) + \sqrt{\frac{2k_B T}{\Gamma}} \xi(t) \quad (86)$$

où $\xi(t)$ satisfait à (66), est équivalente à l'équation de Fokker–Planck (52). Il s'ensuit que sa solution d'équilibre, donnée par (53), est aussi la solution d'équilibre de (86). C'est ainsi qu'on connaît les distributions d'équilibre des équations de Langevin.

6.3 Discussion.

a. Le résultat démontré ci-dessus signifie que tous les moments

$$\langle s^{m_1}(t_1)s^{m_2}(t_2)\dots s^{m_n}(t_n) \rangle \quad (87)$$

calculés à l'aide de l'équation de Langevin peuvent l'être aussi à l'aide de l'équation de Fokker–Planck équivalente.

b. L'équation de Fokker–Planck (85) est une EDP qui ne souffre d'aucune indétermination. Le fait que cette équation dépende de α , montre que différentes règles de lecture pour l'équation de Langevin conduisent à différents processus $s(t)$.

c. L'équation de Langevin *linéaire*, où $H(s)$ est égal à une constante H_0 , conduit à une équation de Fokker–Planck quasi-linéaire *indépendante de α* . Le processus $s(t)$ défini par l'équation de Langevin linéaire est donc indépendante de la règle de lecture.

6.4 *Question inverse.* Soit un processus markovien $s(t)$ dont la probabilité de transition est définie par l'équation de Fokker–Planck (48), et donc caractérisée par les taux de moment $a_1(s)$ et $a_2(s)$. Pour un α prescrit, peut-on trouver une équation de Langevin – c'est-à-dire des fonctions $G(s)$ et $H(s)$, ainsi qu'un bruit $\eta(t)$ – qui produit ce processus ? Afin de répondre à cette question, il suffit de résoudre $G(s)$ et $H(s)$ des équations (84). On trouve que l'équation de Fokker–Planck (48) est équivalente à l'équation de Langevin

$$\frac{ds(t)}{dt} = a_1(s) - \frac{1}{2}\alpha \frac{da_2(s)}{ds} + \sqrt{\frac{a_2(s)}{\Gamma}} \xi(t) \quad (88)$$

assortie de la règle de lecture de paramètre α , et avec un bruit blanc gaussien d'autocorrélation $\langle \xi(t')\xi(t) \rangle = \Gamma\delta(t' - t)$. On voit qu'un changement de choix de α doit être compensé par un changement de la dérive déterministe dans l'équation de Langevin. On appelle la contribution compensatoire une *dérive fantôme*.

6.5 *Changement de variable dans l'équation de Langevin.* Supposons que $s = f(r)$ où f est une fonction non linéaire donnée, et qu'à partir de l'équation de Langevin (80) pour s on veuille établir une équation pour la nouvelle variable indépendante r . Par exemple, $r = \frac{1}{2}mv^2$ et $s = v$ sont l'énergie cinétique et la vitesse d'une particule, et donc $f(r) = \sqrt{2r/m}$. En appliquant les règles algébriques usuelles on trouve

$$\frac{dr(t)}{dt} = \bar{G}(r) + \bar{H}(r)\xi(t) \quad (89)$$

où $\bar{G}(r) = f'(r)G(f(r))$ et $\bar{H}(r) = f'(r)H(f(r))$. Cependant, on peut s'apercevoir qu'il y a un problème en regardant le cas particulier suivant. Si $H(s) = H_0$, l'équation de Langevin (80) pour s est linéaire et on n'a pas besoin de parler de la valeur de α ; toutefois, l'équation (89) pour r est devenue non linéaire et il faut spécifier α . Mais comment ?

La réponse est que, de façon générale, une transformation $s \rightarrow r$ n'est permise que pour $\alpha = \frac{1}{2}$, à moins qu'on abandonne les règles usuelle de l'algèbre.

Démonstration : Convertir les équations (80) et (89), toutes les deux avec le même α arbitraire, en équations de Fokker-Planck ; effectuer le changement de variable $s \rightarrow r$ dans la première de ces équations (un changement de variable dans une EDP est toujours bien défini) ; constater que l'on aboutit sur la seconde uniquement si $\alpha = \frac{1}{2}$.

6.6 *Corrélations entre s et ξ* . Outre les moments (87), on peut considérer des corrélations entre des ξ et des s , dont la plus simple est $\langle s(t)\xi(t') \rangle$.

a. *Avertissement*. De telles corrélations ne sont pas bien définies à moins que l'on précise comment elles sont apparues lors de la limite $\Delta t \rightarrow 0$. Par exemple, dans cette limite les expressions $\langle s(t_n)\xi(t_n - \Delta t) \rangle$, $\langle s(t_n)\xi(t_n) \rangle$, et $\langle s(t)\xi(t_n + \Delta t) \rangle$, seront toutes les trois notées $\langle s(t)\xi(t) \rangle$, mais n'auront pourtant pas la même valeur.

b. Le cas le plus fréquent est celui où l'on veut obtenir une équation pour $d\langle s(t) \rangle / dt$ en moyennant l'équation (71) par rapport au bruit. Ceci fait apparaître le besoin de connaître $\langle H(s(t))\xi(t) \rangle$. Dans ce cas, l'équation (72) montre que cette moyenne doit être interprétée comme

$$\begin{aligned} \langle H(s(t))\xi(t) \rangle &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\langle H((1 - \alpha)s(t) + \alpha s(t + \Delta t)) \underbrace{\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt' \xi(t')}_{\xi_{\Delta t}} \right\rangle \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle [H(s(t)) + \alpha(s(t + \Delta t) - s(t))H'(s(t)) + \dots] \xi_{\Delta t} \rangle \\ &= \alpha H'(s(t)) \langle s(t + \delta t) \xi_{\Delta t} \rangle \end{aligned} \quad (90)$$

avec des explications qui vont suivre. D'abord, pour passer à la deuxième ligne de (90) on a développé H en série de Taylor autour de $s = s(t)$, les points représentant des termes d'ordre supérieur dont on peut montrer qu'ils ne contribuent pas à la limite $\Delta t \rightarrow 0$. Noter que $\xi_{\Delta t}$ est définie à partir des valeurs de $\xi(t)$ sur l'intervalle $[t, t + \Delta t]$. Puis pour passer à la troisième ligne on s'est servi du fait que $s(t)$, et donc $H(s(t))$ et $H'(s(t))$, ne sont pas corrélés avec $\xi_{\Delta t}$.

Afin d'évaluer (90) on se sert encore une fois de (72) pour exprimer $s(t + \Delta t)$ en fonction (i) de grandeurs prises au temps t et (ii) du bruit $\xi_{\Delta t}$. Le seul terme dans l'expression pour $s(t + \Delta t)$ qui contribue est $H(s(t))\xi_{\Delta t}$. En substituant dans (90) on trouve

$$\begin{aligned} \langle H(s(t))\xi(t) \rangle &= \alpha H(s(t))H'(s(t)) \langle \xi_{\Delta t}^2 \rangle \\ &= \alpha \Gamma H(s(t))H'(s(t)) \end{aligned} \quad (91)$$

ce qui est le résultat recherché.

Exercice 20. Montrer qu'en moyennant pour le même problème physique les équations d'Itô et de Stratonovitch, on obtient la même équation pour $d\langle s \rangle / dt$.

6.7 La pratique. Pour la pratique on retiendra les règles suivantes, qui découlent des considérations ci-dessus.

Règle 1. Afin de passer d'Itô à Stratonovitch sans changer le problème physique, il convient de soustraire du terme déterministe dans l'équation de Langevin le terme $\frac{1}{4}da_2(s)/ds$. Afin de passer en sens inverse, il faut rajouter ce terme.

Règle 2. Les changements de variable non linéaires ne sont permis que pour $\alpha = \frac{1}{2}$.

Règle 3. La corrélation $\langle H(s)\xi(t) \rangle$, si elle intervient, est donnée par (91).

Exercice 21. Soit

$$\frac{dv}{dt} = -v + \sqrt{2k_B T} \xi(t) \quad (92)$$

l'équation de Langevin bien connue pour la vitesse d'une particule brownienne, où $\xi(t)$ est du bruit blanc gaussien de moyenne zéro et d'auto-corrélation $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \Gamma\delta(t-t')$.

a. Établir l'équation pour l'énergie cinétique $E = \frac{1}{2}mv^2$ de cette particule (i) avec $\alpha = \frac{1}{2}$ et (ii) avec $\alpha = 0$.

b. Montrer que pour $t \rightarrow \infty$ l'énergie cinétique moyenne tend vers une valeur d'équilibre $\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle_{\text{eq}}$ que vous calculerez. Pourquoi cette valeur doit-elle être indépendante de α ?

c. Donner l'expression explicite de la corrélation $\langle \xi(t)v(t) \rangle_{\text{eq}}$ dans les deux cas $\alpha = 0$ et $\alpha = \frac{1}{2}$.

B. Le cas de N variables

6.8 Voir Risken [Ri89], chapitre 3.4 et 3.6.

a. Les équations. Soit un système d'équations de Langevin couplées pour N variables $s \equiv (s_1, \dots, s_N)$,

$$\frac{ds_i(t)}{dt} = G_i(s) + \sum_{j=1}^N H_{ij}(s)\xi_j(t) \quad (93)$$

où les $G_i(s)$ et $H_{ij}(s)$ sont des fonctions données, les $\xi_k(t)$ sont des bruits blancs gaussiens de moyenne zéro et de covariance

$$\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = \Gamma\delta_{ij}\delta(t-t') \quad (94)$$

et la règle de lecture est imposée par un α arbitraire donné, c'est-à-dire que lors du passage des $s_i(t)$ aux $s_i(t + \Delta t)$, les G_i et H_{ij} sont évaluées en $(1 - \alpha)s_i(t) - \alpha s_i(t + \Delta t)$.

b. Équivalence. Les nièmes "moments de saut" de ce système sont

$$a_{n,i_1\dots i_n} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta s_{i_1} \dots \Delta s_{i_n}}{\Delta t} \quad (95)$$

Par la même méthode qu'au cas d'une seule variable on trouve facilement que

$$\begin{aligned}
 a_{1,i}(s) &= G_i(s) + \alpha \sum_{k,\ell=1}^N H_{\ell k}(s) \frac{\partial H_{ik}(s)}{\partial s_\ell} \\
 a_{2,ij} &= \sum_{k=1}^N H_{ik}(s) H_{jk}(s)
 \end{aligned} \tag{96}$$

alors que les a_n d'ordre supérieur ou égal à trois sont zéro.

c. Non unicité de G et de H . On a montré ci-dessus comment les G_i et H_{ij} déterminent le vecteur a_1 et la matrice a_2 , et donc définissent une équation de Fokker–Planck. Cependant, on peut toujours symétriser cette équation en remplaçant $a_{2,ij}$ et $a_{2,ji}$ par $(a_{2,ij} + a_{2,ji})/2$. Il est donc clair qu'inversement une équation de Fokker–Planck multivariée ne détermine pas de façon unique les fonctions G_i et H_{ij} . À bien noter que cette discussion n'a rien à voir avec le choix de α .

7 Équation de Langevin et théorie des champs

A. Intégrales de chemin

7.1 Point de départ. On considère dans ce chapitre un problème physique décrit par l'équation de Langevin

$$\frac{ds(t)}{dt} = G(s) + H(s) \xi(t) \tag{97}$$

avec une discrétisation pré-point (donc $\alpha = 0$, Itô), et avec $\xi(t)$ comme au paragraphe 5.2, mais avec $\Gamma = 1$. Si une équation de Langevin avec une autre discrétisation était donnée, on la transformerait en équation d'Itô selon la prescription du chapitre précédent. L'équation de Langevin discrète associée à (97) est l'équation (76) avec $\alpha = 0$,

$$s_{n+1} - s_n = \Delta t G(s_n) + H(s_n) \xi_n \tag{98}$$

7.2 Les variables conjuguées \tilde{s}_n . Voir Janssen [Ja92].

Au processus (98) est associée une probabilité de transition entre deux instants successifs séparés de Δt que l'on notera $T_{\Delta t}(s_{n+1}|s_n)$ et qui est donnée par

$$T_{\Delta t}(s_{n+1}|s_n) = [2\pi H^2(s_n)\Delta t]^{-\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{(s_{n+1} - s_n - G(s_n)\Delta t)^2}{2H^2(s_n)\Delta t} \right] \tag{99}$$

En introduisant une intégrale gaussienne on la réécrit

$$T_{\Delta t}(s_{n+1}|s_n) = \int_{-\infty}^{i\infty} \frac{d\tilde{s}_{n+1}}{2\pi i} \Omega_{\Delta t}(s_{n+1}, \tilde{s}_{n+1}|s_n) \tag{100}$$

où l'on a abrégé

$$\Omega_{\Delta t}(s_{n+1}, \tilde{s}_{n+1}|s_n) = \exp \left[-\tilde{s}_{n+1}(s_{n+1} - s_n) - \tilde{s}_{n+1} G(s_n) \Delta t + \frac{1}{2} \tilde{s}_{n+1}^2 H^2(s_n) \Delta t \right] \quad (101)$$

Cette quantité n'est pas nécessairement positive et on la qualifera de *poïds* plutôt que de probabilité. Elle satisfait à la normalisation

$$\int \int \frac{ds d\tilde{s}}{2\pi i} \Omega_{\Delta t}(s, \tilde{s}|s') = 1 \quad (102)$$

où s est intégré le long de l'axe réel et \tilde{s} le long de l'axe imaginaire. Ce choix des chemins d'intégration a l'avantage notationnel de ne pas faire apparaître l'unité imaginaire dans l'exponentielle de (101). On appelle \tilde{s}_{n+1} une *variable conjuguée*, ou encore, pour des raisons qu'on verra, une *variable de réponse*. Elle est associée au passage de s_n à s_{n+1} . Ce type de variable a fait son apparition en 1973 [MSR73].

7.3 Intégrale de chemin. Soit un intervalle de temps $[0, T]$, divisé en N intervalles élémentaires Δt . On érige une fenêtre à chaque instant $t_n = n\Delta t$, pour $n = 1, 2, \dots, N$. La probabilité P_N pour que, étant donnée sa valeur initiale s_0 , le processus $s(t)$ passe par les N fenêtres est

$$P_N(s_1, t_1; \dots; s_N, t_N | s_0, 0) = \prod_{n=0}^{N-1} T_{\Delta t}(s_{n+1} | s_n) \quad (103)$$

On dit que P_N donne la probabilité du *chemin* s_0, s_1, \dots, s_N .

Soit $F[s]$ une grandeur physique dépendant du processus $s(t)$ discrétisé en temps. Sa moyenne s'exprime comme une *intégrale de chemin*

$$\langle F[s] \rangle = \int ds_1 \dots ds_N F[s] P_N[s] \quad (104)$$

où $P_N[s]$ est une notation simplifiée pour le membre de gauche de l'équation (103).

7.4 Action. En introduisant dans (103) la représentation (100) on obtient la moyenne (104) sous la forme

$$\langle F[s] \rangle = \int \prod_{n=1}^N \frac{ds_n d\tilde{s}_n}{2\pi i} F[s] e^{-\mathcal{S}[s, \tilde{s}]} \quad (105)$$

où l'*action* \mathcal{S} est donnée par

$$e^{-\mathcal{S}[s, \tilde{s}]} = \prod_{n=0}^{N-1} \Omega_{\Delta t}(s_{n+1}, \tilde{s}_{n+1} | s_n) \quad (106)$$

et donc

$$\mathcal{S}[s, \tilde{s}] = \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \left[\tilde{s}_{n+1} \frac{s_{n+1} - s_n}{\Delta t} - \tilde{s}_{n+1} G(s_n) - \frac{1}{2} \tilde{s}_{n+1}^2 H^2(s_n) \right] \quad (107)$$

L'exponentielle de $-\mathcal{S}$ donne une description plus fine du processus que ne le fait P_N : elle donne le poids, complexe, d'une suite $s_0, \tilde{s}_1, s_1, \tilde{s}_2, \dots, s_{N-1}, \tilde{s}_N, s_N$ comprenant aussi bien les variables physiques s_n que les variables conjuguées \tilde{s}_n .

7.5 La fonction $s(t)$ est continue mais sa dérivée n'existe nulle part. La fonction $\tilde{s}(t)$ n'est nulle part continue ; elle partage cette propriété avec le bruit $\xi(t)$ considéré précédemment.

7.6 *Réponse à une force extérieure.*

7.7 *Action en temps continu.* En pratique il est plus commode de travailler en temps continu. Aussi prend-on dans l'expression (107) formellement la limite $\Delta t \rightarrow 0$, ce qui donne

$$\mathcal{S}[s, \tilde{s}] = \int_0^T dt [\tilde{s}\dot{s} - \tilde{s}G(s) - \frac{1}{2}\tilde{s}^2 H^2(s)] \quad (108)$$

Cependant, tout comme l'équation de Langevin, cette expression est dénuée de sens si elle n'est pas accompagnée d'une règle de lecture ; celle-ci est fournie par la version discrète (107).

7.8 *Voie rapide.* Une "voie rapide" pour passer de l'équation (98) à l'action (108) consiste à écrire la moyenne de F comme une intégrale fonctionnelle sur tous les $s(t)$ solutions de (98) et sur toutes les réalisations $\xi(t)$ du bruit,

$$\langle F[s] \rangle = \int \mathcal{D}s \int \mathcal{D}\xi F[s] \prod_t \delta(\dot{s} - G(s) - H(s)\xi) \quad (109)$$

puis à introduire une représentation intégrale pour la fonction δ et à intégrer sur le bruit ξ . Cette méthode manque cependant de rigueur, car elle ne permet pas d'établir que (108) doit être interprété comme (107).

7.9 *Autres discrétisations.*

a. Supposons que l'on veuille décrire le *même phénomène physique*, énoncé au paragraphe **7.1**, mais en termes d'une action α -discrétisée, donc dans laquelle $G(s)$ et $H(s)$ soient évalués non pas en $s = s_n$ mais en $s = s_{n\alpha}$. Pour y parvenir, on peut transformer (97) en son équivalent α -discrétisé, en déterminer la probabilité de transition, puis construire $\mathcal{S}^{(\alpha)}$ de la même façon que $\mathcal{S} \equiv \mathcal{S}^{(0)}$ ci-dessus. Cependant, ci-dessous on se servira d'une méthode plus courte [Ja92].

b. Dans l'action \mathcal{S} on utilise le développement en série de Taylor

$$G(s_n) = G(s_{n\alpha}) - (s_{n+1} - s_n) \frac{\partial}{\partial s_{n+1}} G(s_{n\alpha}) + \frac{1}{2}(s_{n+1} - s_n)^2 \frac{\partial^2}{\partial s^2} G(s_{n\alpha}) + \dots \quad (110)$$

et le développement analogue de $H(s_{n+1})$. Ensuite on se demande jusqu'à quel ordre il faut garder les termes de la série (110). On calcule donc la moyenne $\langle s_k^m \rangle$, que l'on sait indépendante de α si toute la série est gardée.

Il s'ensuit que l'action \mathcal{S} de l'équation (107) est équivalente à $\mathcal{S}^{(\alpha)}$ donnée par

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^{(\alpha)}[s, \tilde{s}] = \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \left[\tilde{s}_{n+1} \frac{s_{n+1} - s_n}{\Delta t} - \left(\tilde{s}_{n+1} - \frac{\partial}{\partial s_{n+1}} \right) G(s_{n\alpha}) \right. \\ \left. - \left(\tilde{s}_{n+1} - \frac{\partial}{\partial s_{n+1}} \right)^2 H^2(s_{n\alpha}) \right] \end{aligned} \quad (111)$$

À la limite $\Delta t \rightarrow 0$ cette action devient

$$\mathcal{S}^{(\alpha)}[s, \tilde{s}] = \int_0^T dt \left[\tilde{s} \dot{s} - \left(\tilde{s} - \alpha \frac{\partial}{\partial s} \right) G(s) - \left(\tilde{s} - \alpha \frac{\partial}{\partial s} \right)^2 H^2(s) \right] \quad (112)$$

assortie de la règle de lecture l'assimilant à (111). Pour $\alpha = 0$ on récupère l'expression (108).

B. Exemple d'utilisation

7.10 Application. Soit $\rho(x, t)$ la densité d'une espèce de particules A pouvant diffuser dans l'espace et s'annihiler lors de leurs rencontres selon la réaction $A + A \rightarrow 0$. L'équation d'évolution classique (anglais : *rate equation*) pour ρ est

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \Delta \rho - \kappa \rho^2 \quad (113)$$

où D et κ sont respectivement le coefficient de diffusion et le taux de la réaction. Pour une condition initiale $\rho_0(x, t)$ donnée, la solution $\rho(x, t)$ est complètement déterminée.

Or, $\rho(x, t)$ doit être vue comme la moyenne du nombre de particules sur un petit élément de volume de l'espace, assez grand pour que les fluctuations par rapport à cette moyenne soient négligeables. On peut espérer arriver à décrire ce phénomène physique plus en détail en rajoutant à l'équation déterministe (113) un bruit $\xi(x, t)$, ce qui donne

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \Delta \rho - \kappa \rho^2 + \xi(x, t) \quad (114)$$

où l'on supposera que

$$\langle \xi(x, t) \xi(x', t') \rangle = \Gamma(\rho) \delta^d(x - x') \delta(t - t') \quad (115)$$

Note 1. Une dépendance de $\Gamma \geq 0$ en ρ est nécessaire : quand $\rho = 0$, on ne veut pas que le bruit crée une densité non nulle, et donc on exigera que $\Gamma(0) = 0$.

Note 2. On peut faire apparaître $\Gamma(\rho)$ explicitement dans l'équation (114) en posant $\xi(x, t) = \Gamma^{\frac{1}{2}}(\rho) \eta(x, t)$ avec $\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = \delta^d(x - x') \delta(t - t')$.

Exercice 22. La transformation de $\xi(x, t)$ vers $\eta(x, t)$ rend évident qu'on a affaire à une équation de Langevin non linéaire (dans le sens habituel, c'est-à-dire celui du paragraphe **5.4a**). Pour qu'elle ait un sens, on doit donc spécifier son paramètre de discrétisation α . Quelle valeur faut-il lui attribuer ici ? Expliquer.

7.11 *Introduction de l'intégrale de chemin.* Afin d'alléger la notation on considérera (114) avec $D = 0$, si bien qu'on peut supprimer la dépendance en x de toutes les variables. Cette simplification ne change rien aux principes.

Supposons maintenant que l'on veuille calculer la moyenne d'une grandeur physique $F[\rho]$, fonctionnelle de $\rho(t)$ sur un intervalle $0 \leq t \leq T$, par rapport aux solutions de (114) obéissant à une condition initiale $\rho(t) = \rho_0$. On part alors de l'équation (109) appliquée à ce problème et puis transforme (voir les explications après),

$$\begin{aligned}
 \langle F[\rho] \rangle &= \int \mathcal{D}\rho(t) \int \mathcal{D}\xi(t) F[\rho] \prod_t \delta \left(\frac{d\rho}{dt} + \kappa\rho^2(t) - \xi(t) \right) \\
 &= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\lambda(t) \int \mathcal{D}\rho(t) \int \mathcal{D}\xi(t) F[\rho] e^{\sum_t i\lambda(t) \left[\frac{d\rho}{dt} + \kappa\rho^2(t) - \xi(t) \right]} \\
 &= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\lambda(t) \int \mathcal{D}\rho(t) F[\rho] \\
 &\quad \times \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_t \Gamma(\rho) \lambda^2(t) + \sum_t i\lambda(t) \left[\frac{d\rho}{dt} + \kappa\rho^2(t) \right] \right) \\
 &= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\bar{\rho}(t) \int \mathcal{D}\rho(t) F[\rho] \\
 &\quad \times \exp \left(-\int_0^T dt \left[\bar{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \kappa\bar{\rho}\rho^2 - \frac{1}{2}\Gamma(\rho)\bar{\rho}^2 \right] \right) \quad (116)
 \end{aligned}$$

Pour passer de la première à la seconde ligne de (116) on a utilisé pour chaque valeur de t la représentation

$$\delta(X) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{i\lambda X} \quad (117)$$

Pour passer à la troisième ligne on a utilisé

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\frac{1}{2}\Gamma^{-1}\xi^2 + i\lambda\xi} = (2\pi\Gamma)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\Gamma\xi^2} \quad (118)$$

Pour passer à la quatrième ligne on a posé $-i\lambda = \bar{\rho}$. Finalement, \mathcal{N} représente une constante sans importance qui à chaque étape peut être différente.

7.12 La dernière ligne de (116) contient l'exponentielle de moins l'action. On adopte maintenant le choix simple $\Gamma(\rho) = \frac{1}{2}\Gamma_0\rho^2$ (avec $\Gamma_0 > 0$ une constante), qui rend le bruit linéaire en ρ . Si en plus on restitue le terme diffusif, l'action prend la forme

$$\mathcal{S}[\rho, \bar{\rho}] = \int_0^T dt \left[\bar{\rho} \frac{d\rho}{dt} + D\bar{\rho}\Delta\rho + \kappa\bar{\rho}\rho^2 - \frac{1}{2}\Gamma_0\rho^2\bar{\rho}^2 \right] \quad (119)$$

On a donc représenté le problème de la réaction $A + A \rightarrow 0$ par une action faisant intervenir deux champs ρ et $\bar{\rho}$. Sa dérivation à partir de (114) peut être rendue mathématiquement rigoureuse. S'il y a un véritable doute, celui-ci doit concerner la justification physique du remplacement initial de (113) par (114). On reviendra sur cette question au chapitre **11**.

8 Équation maîtresse représentée par un opérateur

A. Formalisme général

8.1 Formalisme. Le formalisme de ce paragraphe apparaît pour la première fois en 1968 chez Kadanoff et Swift [KS68]. Il a été perfectionné par Felderhof [Fe71], qui était le premier à se servir d'opérateurs fermioniques. Doi [Do76] fut le premier à introduire dans ce contexte des opérateurs bosoniques. Puis après une période de relative hibernation ce formalisme a commencé à se répandre dans les années 90. Il permet de manipuler l'équation maîtresse et ses conséquences sous une forme compacte. La notation a été empruntée à la mécanique quantique, bien qu'on ne traite que des systèmes classiques.

a. Équation maîtresse. Soit $\{s\}$ l'ensemble des états accessibles à une variable aléatoire $s(t)$. On associe aux s une base orthonormée de kets $|s\rangle$, et à la loi de probabilité $P(s, t)$ un ket

$$|P(t)\rangle = \sum_s P(s, t)|s\rangle \quad (120)$$

L'équation maîtresse (11) s'exprime alors sous la forme

$$\frac{d}{dt}|P(t)\rangle = \hat{W}|P(t)\rangle \quad (121)$$

où \hat{W} est l'opérateur correspondant à la matrice \mathcal{W} du chapitre 2. La solution formelle de cette équation, pour un état initial donné, est

$$|P(t)\rangle = e^{\hat{W}t}|P(0)\rangle \quad (122)$$

On dénotera encore par $|P^{\text{st}}\rangle$ l'état stationnaire, pour lequel donc

$$\hat{W}|P^{\text{st}}\rangle = 0 \quad (123)$$

Exercice 23. Montrer que

$$\hat{W}|s\rangle = \sum_{s'} \mathcal{W}_{s's}|s'\rangle \quad (124)$$

où les $\mathcal{W}_{s's}$ sont définis par (17).

Solution 23. Il faut montrer que l'opérateur défini par (121) agit sur un état de base $|s\rangle$ selon (124). Or, en combinant (121) et (120) on a d'une part

$$\hat{W}|P(t)\rangle = \sum_s P(s, t)\hat{W}|s\rangle \quad (125)$$

Puis d'autre part

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|P(t)\rangle &= \sum_{s'} \frac{dP(s', t)}{dt}|s'\rangle \\ &= \sum_{s'} \sum_s \mathcal{W}_{s's} P(s, t)|s\rangle \end{aligned} \quad (126)$$

où pour passer à la dernière ligne on a utilisé l'équation maîtresse pour $P(s, t)$. Au vu de (121), les expressions finales dans (125) et (126) doivent être égales, et cela pour toute $P(s, t)$. En prenant $P(s, t) = \delta_{ss_0}$ on arrive à (124). Note : on serait justifié d'écrire $\mathcal{W}_{s's} = \hat{\mathcal{W}}_{ss'}$, mais on évitera cette dernière notation, qui est superflue.

Exercice 24. Soit $|x\rangle$ l'état correspondant à un marcheur aléatoire qui se trouve au site x d'un réseau hypercubique de dimension d . Soit w_δ le taux de transition pour que le marcheur saute vers un site proche voisin $x + \delta$. Soit \hat{E}_δ l'opérateur défini par son action $\hat{E}_\delta|x\rangle = |x + \delta\rangle$. Montrer que pour ce problème

$$\hat{\mathcal{W}} = \sum_{\delta} (\hat{E}_\delta - 1) w_\delta \quad (127)$$

Exercice 25. Soient $|\pm 1\rangle$ les deux états d'un spin, et soit σ^x l'opérateur défini par son action $\sigma^x|\pm 1\rangle = |\mp 1\rangle$. Soit γ le taux auquel le spin saute entre ces deux états.

a. Montrer que pour ce problème

$$\hat{\mathcal{W}} = (\sigma^x - 1)\gamma \quad (128)$$

On considère ensuite le cas, plus général, où le spin se trouve dans un champ magnétique H , si bien que le facteur de Boltzmann de l'état $|\pm 1\rangle$ est $\exp(\pm\beta\mu H)$, avec β la température inverse.

b. Écrire une équation maîtresse pour les sauts du spin entre les deux états. Exprimer l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ correspondant. *Indication :* Introduire σ^z défini par $\sigma^z|\pm 1\rangle = \pm|\pm 1\rangle$.

b. Moyennes. Soit F une grandeur physique ayant la valeur $F(s)$ dans l'état s . On associe à F un opérateur \hat{F} défini par son action sur la base,

$$\hat{F}|s\rangle = F(s)|s\rangle \quad (129)$$

L'opérateur \hat{F} est donc *diagonal* sur la base des $|s\rangle$. Afin d'exprimer la moyenne de F par rapport à la loi $P(s, t)$, on a encore besoin de l'état de projection

$$\langle O| = \sum_s \langle s| \quad (130)$$

À l'aide de celui-ci on peut écrire une moyenne comme

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_t &= \sum_s F(s)P(s, t) \\ &= \langle O|\hat{F}e^{\hat{\mathcal{W}}t}|P(0)\rangle \end{aligned} \quad (131)$$

et une fonction d'autocorrélation à l'équilibre comme

$$\langle F(t)F(0) \rangle_{st} = \langle O|\hat{F}e^{\hat{\mathcal{W}}t}\hat{F}|P^{st}\rangle \quad (132)$$

La normalisation de la loi de probabilité et la conservation de probabilité sont exprimées respectivement par

$$\langle O|P(t) \rangle = 1, \quad \langle O|\hat{W} = 0 \quad (133)$$

On rappelle qu'en général \hat{W} est non symétrique ; ses vecteurs propres de gauche sont différents de ceux de droite.

Exercice 26. Montrer que

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle_t = \langle [\hat{F}, \hat{W}] \rangle_t \quad (134)$$

Exercice 27. Montrer que si \hat{W} est symétrique ou symétrisable, la décroissance de la fonction d'autocorrélation (132) est monotone. *Indication* : vous servir des états propres.

8.2 Avantages. Ce formalisme, au-delà d'être compact, montre ses avantages dans les cas où l'on sait exprimer \hat{W} en termes d'opérateurs habituels en physique théorique : opérateurs de bosons, de fermions, de moment angulaire, etc. On peut alors appliquer au problème toutes les techniques existantes pour la manipulation de ces opérateurs. Dans les deux paragraphes suivants on donnera deux exemples où les opérateurs utilisés sont respectivement les opérateurs de spin $\frac{1}{2}$, représentés par des matrices de Pauli, et des opérateurs de moment angulaire. Toutefois, les systèmes que l'on décrit sont classiques, et non quantiques.

B. Opérateurs de spin et fermioniques

8.3 Exemples.

a. Modèle d'Ising cinétique sur un réseau unidimensionnel. Dans le modèle d'Ising unidimensionnel une configuration de spins $s = (s_1, s_2, \dots, s_N)$, où $s_i = \pm 1$, a une énergie

$$E_s = -J \sum_{j=1}^N s_j s_{j+1} \quad (135)$$

où l'on admet des conditions aux bords périodiques. En 1963, Glauber [Gl63] a muni ce modèle d'une cinétique markovienne (souvent appelée "dynamique") permettant aux spins de se renverser un à la fois. Soit $s^{(j)} \equiv (s_1, \dots, s_{j-1}, -s_j, s_{j+1}, \dots, s_N)$. Pour le taux de la transition $s \mapsto s^{(j)}$ il choisit

$$W(s^{(j)}|s) = \frac{1}{2} [1 - \frac{1}{2} s_j (s_{j-1} + s_{j+1}) \tanh 2\beta J] \quad (136)$$

(taux de transition "de Glauber") où $\beta = 1/k_B T$ est la température inverse ; cette expression obéit aux relations de bilan détaillé.

En 1971 Felderhof [Fe71] a exprimé l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ du modèle de Glauber en termes d'opérateurs de spin de Pauli :

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j^x - 1) \left[1 - \frac{1}{2} \gamma \sigma_j^z (\sigma_{j-1}^z + \sigma_{j+1}^z) \right] \quad (137)$$

où $\gamma = \tanh 2\beta J$. Il s'avère possible ensuite [Fe71], après une série de transformations, d'exprimer $\hat{\mathcal{W}}$ en termes d'opérateurs fermioniques, puis de trouver toutes ses valeurs et tous ses vecteurs propres.

b. Modèle d'Ising cinétique en champ moyen. Ruijgrok et Tjon [RT73] expriment l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ en termes d'opérateurs de moment angulaire. Leur travail est présenté dans l'appendice sous forme d'un exercice. En étudiant le spectre des temps de relaxation de ce problème, en particulier au voisinage du point critique, vous rencontrerez le phénomène du *ralentissement critique*.

Exercice 28. Vérifier que les taux (136) obéissent aux relations du bilan détaillé.

Exercice 29. *Étude du modèle de Glauber.*

a. À l'aide de (134) trouver un système d'équations fermé pour l'évolution temporelle de l'aimantation moyenne locale $m_j(t) \equiv \langle \sigma_j^z \rangle_t$, où $j = 1, \dots, N$. Moyennant une transformation de Fourier, trouver le spectre des temps de relaxation.

b. Trouver un système d'équations fermé pour l'évolution temporelle de la corrélation de paires $g_{jk}(t) \equiv \langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle_t$, où $j, k = 1, \dots, N$.

c. Pour le cas particulier où $P(s, 0)$, et donc $P(s, t)$, est invariant par translation, on peut écrire $g_{jk}(t) = g_{|j-k|}(t)$ avec $r = 0, 1, 2, \dots$ après passage à la limite $N \rightarrow \infty$. Déduire des équations trouvées au b un système fermé d'équations pour les $g_r(t)$. Trouver $\lim_{t \rightarrow \infty} g_r(t)$ et comparer ce résultat avec ce que vous savez sur la base de l'étude de l'équilibre de ce modèle.

d. Vous convaincre que l'évolution des moyennes à p spins du type $\langle \sigma_{j_1}^z \dots \sigma_{j_p}^z \rangle_t$ est couplée seulement à celle des moyennes à $p, p-2, p-4, \dots$ spins, et que ceci permet en principe de calculer toutes ces quantités récursivement.

Exercice 30. Au lieu d'étudier les fonctions de corrélation à la manière de l'exercice ci-dessus, on peut aussi directement diagonaliser l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ de (137). L'idée clé ici est de lui appliquer la *transformation de Jordan-Wigner* [JW28], définie par

$$c^\dagger = i \left[\prod_{j=1}^{n-1} \sigma_j^x \right] \sigma_n^+, \quad c = -i \left[\prod_{j=1}^{n-1} \sigma_j^x \right] \sigma_n^- \quad (138)$$

où

$$\sigma^\pm = \frac{1}{2} (\sigma_n^y \pm i \sigma_n^z) \quad (139)$$

- a. Montrer que les c_j et c_j^\dagger ont des relations de commutation fermioniques.
- b. Montrer que $\hat{\mathcal{W}}$ donné par (137) est bilinéaire en termes des c_j et c_j^\dagger .

On achève ensuite la diagonalisation moyennant une transformation unitaire (mais non triviale) des c_j et c_j^\dagger , qui laisse leurs relations de commutation invariantes.

Remarque. La bilinéarité n'est pas stricte, car à cause des conditions aux bords périodiques il apparaît un facteur $(-1)^{\hat{N}}$, où $\hat{N} = \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j$ est l'opérateur pour le nombre total de fermions.

Indication. Vous rappeler que $\sigma_j^\alpha \sigma_j^\beta = i\sigma_j^\gamma$ où α, β, γ est une permutation cyclique de x, y, z .

Exercice 31. Le modèle *XY quantique* (en une dimension) a pour hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_j (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y) \quad (140)$$

Ce type de hamiltonien, où les composantes z des spins n'interagissent pas, peut résulter, par exemple, d'une anisotropie cristalline. Montrer qu'après une transformation de Jordan-Wigner ce hamiltonien devient bilinéaire en termes des opérateurs fermioniques, et qu'il est donc diagonalisable.

Exercice 32. Exprimer l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ pour le modèle de Glauber sur un réseau carré en termes d'opérateurs de spin. Personne n'a su diagonaliser cet opérateur.

Exercice 33. Un réseau unidimensionnel de N sites est occupé par des particules à "cœur dur", c'est-à-dire dont deux ne peuvent pas occuper le même site. Une particule peut sauter vers un site voisin vide avec un taux γ .

a. Introduire des variables s_j et faire correspondre $s_j = 1$ et $s_j = -1$ à respectivement la présence et l'absence d'une particule au site j . Exprimer l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ de l'équation maîtresse en termes d'opérateurs de spin de Pauli.

b. Montrer qu'à une constante additive près $\hat{\mathcal{W}}$ est égal à

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -J \sum_j (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z) \\ &= -J \sum_j \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} \end{aligned} \quad (141)$$

c'est-à-dire au hamiltonien de Heisenberg quantique en une dimension. Établir la relation entre γ et J .

Note. La chaîne de Heisenberg est étudiée aussi en physique des hautes énergies. Voir [DKM01] et des articles ultérieurs.

c. Pourquoi la transformation de Jordan-Wigner ne peut-elle pas aider ici à diagonaliser \mathcal{H} ?

d. Montrer que \mathcal{H} laisse le sous-espace d'aimantation $M = \sum_j \sigma_j^z$ invariant. Pourquoi est-ce qu'il fallait s'y attendre ? On peut donc diagonaliser \mathcal{H} séparément dans chaque sous-espace.

Soit $|\downarrow\rangle$ la configuration avec tous les spins vers le bas, et $|n_1, n_2, \dots, n_k\rangle$ la configuration avec les spins aux sites n_1, \dots, n_k renversés par rapport à $|\downarrow\rangle$.

e. Relier k à M . Diagonaliser \mathcal{H} dans le sous-espace $k = 1$.

f. Écrire le problème de la diagonalisation dans le sous-espace $k = 2$ pour des conditions de bord périodiques. Quel est la dimension de ce problème ? Indiquer pourquoi il n'est pas totalement trivial.

On ne poursuivra pas ce problème ici. Dans un sous-espace de k arbitraire, la résolution passe par l'*ansatz de Bethe*, qui remonte à 1931 et qui postule que les solutions propres sont des produits de k ondes planes ayant des déphasages particuliers entre elles. Voir par exemple [Th72]. Cet exercice a fourni un exemple de relation entre un modèle quantique intégrable et l'équation maîtresse d'un problème de diffusion de particules classiques avec interaction. Récemment un article de revue [HOS97] sur de telles relations est paru. Une revue antérieure [ADHR94] est plus difficile à lire.

C. Opérateurs bosoniques

8.4 Opérateurs bosoniques. L'exploitation, dans ce contexte, d'opérateurs bosoniques apparaît dans les travaux de Doi [Do76], Peliti [Pe85], Cardy, et autres. Voir Lee et Cardy [LC95] pour un exposé récent, ou encore Cardy [Ca96] pour une introduction élémentaire.

a. États et opérateurs habituels. Soit $\{|n\rangle\}$, où $n = 0, 1, 2, \dots$, la base orthonormée habituelle des états propres de l'oscillateur harmonique. Ces états seront appelés aussi des "*états nombres*", pour les distinguer de ce qui va suivre. L'action des opérateurs de création et d'annihilation, a^\dagger et a , est, également comme d'habitude, donnée par

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle & n &= 1, 2, \dots \\ a|0\rangle &= 0 \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle & n &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (142)$$

si bien que ces états et opérateurs possèdent toutes les propriétés dont on se sert habituellement en mécanique quantique.

Pour tout nombre complexe z on définit un *état cohérent* $|z\rangle$ par

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (143)$$

L'ensemble $\{|z\rangle \mid z \in \mathbb{C}\}$ constitue une base redondante.

Note. Le n des états nombres est nécessairement un entier. Si z est entier, ou pourrait l'être, on lève l'ambiguïté en notant l'état cohérent $|\underline{z}\rangle$.

b. Redéfinition. La redéfinition suivante des états nombres est mieux adaptée aux lois de probabilité classiques du paragraphe 8.1. On définit séparément les bras et les kets

$$|\hat{n}\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle, \quad \langle \tilde{n}| = \langle n| \frac{1}{\sqrt{n!}} \quad (144)$$

Mise en garde : on ne se servira jamais de $\langle \hat{n}|$, bra conjugué de $|\hat{n}\rangle$, qui n'est pas égal à $\langle \tilde{n}|$ (sauf accidentellement pour $n = 0, 1$). Puis, comme on n'utilisera plus jamais, non plus, les états habituels du **a**, on supprimera désormais les accents :

$$|\hat{n}\rangle \Rightarrow |n\rangle, \quad \langle \tilde{n}| \Rightarrow \langle n| \quad (145)$$

Les propriétés de ces nouveaux états découlent de celles des états habituels.

8.5 Propriétés. On a les relations d'orthonormalité et de complétude

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \quad \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \hat{1} \quad (146)$$

Les définitions de a^\dagger et de a n'ont pas été modifiées. Il s'ensuit que

$$a a^\dagger - a^\dagger a = \hat{1} \quad (147)$$

L'action de ces opérateurs sur les kets est résumée par

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= n|n-1\rangle & n = 1, 2, \dots \\ a^\dagger|n\rangle &= |n+1\rangle & n = 0, 1, \dots \\ a|0\rangle &= 0 \\ (a^\dagger)^n|0\rangle &= |n\rangle \end{aligned} \quad (148)$$

et leur action sur les bras par

$$\begin{aligned} \langle n|a &= \langle n+1|(n+1) & n = 0, 1, \dots \\ \langle n|a^\dagger &= \langle n-1| & n = 1, 2, \dots \\ \langle 0|a^\dagger &= 0 \\ \langle 0|a^n &= \langle n|n! \end{aligned} \quad (149)$$

Par conséquent a^\dagger n'est plus le transposé de a . La définition (143) des états cohérents n'est pas modifiée, si bien qu'en termes des nouveaux états nombres on a maintenant

$$\begin{aligned} |z\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} |n\rangle \\ \langle z| &= e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} z^{*n} \langle n| \end{aligned} \quad (150)$$

où z^* dénote le conjugué complexe de z . Inversement les états nombres s'expriment en termes des états cohérents. En posant $z = x + iy$ on a

$$\begin{aligned} |n\rangle &= \int \int \frac{dx dy}{\pi} z^{*n} e^{-\frac{1}{2}|z|^2} |z\rangle \\ \langle n| &= \int \int \frac{dx dy}{\pi} \frac{z^n}{n!} e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \langle z| \end{aligned}$$

où les deux intégrations s'étendent de $-\infty$ à $+\infty$. Le produit scalaire de deux états cohérents est

$$\begin{aligned} \langle z|z\rangle &= 1, & \langle w|z\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|w|^2 + w^*z} \\ & & &= e^{-\frac{1}{2}|z-w|^2 + i \operatorname{Im} w^*z} \end{aligned} \quad (151)$$

Ces états obéissent à la relation de complétude

$$\int \int \frac{dx dy}{\pi} |z\rangle \langle z| = \hat{1} \quad (152)$$

comme on peut le démontrer à l'aide de l'identité mathématique

$$\int \int \frac{dx dy}{\pi} z^{*n} z^m e^{-|z|^2} = n! \delta_{mn} \quad (153)$$

L'action de a^\dagger et de a sur les états cohérents s'exprime par

$$\begin{aligned} a|z\rangle &= z|z\rangle \\ |z\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|z|^2 + za^\dagger} |0\rangle \\ \langle z|a^\dagger &= \langle z|z^* \\ \langle z| &= \langle 0|e^{-\frac{1}{2}|z|^2 + z^*a} \end{aligned} \quad (154)$$

Ce sont ces dernières relations qui confèrent aux états cohérents tout leur intérêt.

8.6 Lois de probabilité classiques.

a. Soit un système *classique* dont les états sont indexés par un nombre d'occupation n . Le "système" peut être le site d'un réseau. Il sera facile d'étendre les considérations à un réseau de sites. À une loi de probabilité classique p_n on associe le ket

$$|p\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} p_n |n\rangle \quad (155)$$

D'après l'équation (130) du paragraphe 8.1, l'état de projection qu'il faut utiliser est donc

$$\begin{aligned} \langle 0| &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n| \\ &= \langle 0|e^a \\ &= e^{\frac{1}{2}} \langle \underline{1}| \end{aligned} \quad (156)$$

c'est-à-dire un état cohérent particulier. Car si \hat{F} est l'opérateur d'une grandeur physique qui vaut F_n dans l'état n , on vérifie que la moyenne de \hat{F} par rapport à la loi p s'écrit

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_n p_n F_n = \langle O | \hat{F} | p \rangle \quad (157)$$

b. Relations utiles. On a les produits scalaires

$$\langle O | p \rangle = 1, \quad \langle O | n \rangle = 1, \quad \langle n | p \rangle = p_n \quad (158)$$

dont le premier exprime la normalisation de la loi p_n . Dans le cas particulier d'une loi *poissonnienne* de paramètre ν ,

$$p_n = e^{-\nu} \frac{\nu^n}{n!} \quad (159)$$

on a

$$\begin{aligned} |p\rangle &= e^{-\nu} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\nu^n}{n!} |n\rangle \\ &= e^{-\nu + \frac{1}{2}\nu^2} |\underline{\nu}\rangle \\ &= e^{\nu(a^\dagger - 1)} |0\rangle \end{aligned} \quad (160)$$

Finalement, l'état de projection obéit à une relation qui sera souvent invoquée,

$$\langle O | a^\dagger = \langle O |, \quad \langle O | (a^\dagger - 1) = 0 \quad (161)$$

Exercice 34. Soient deux variables aléatoires poissonniennes n_1 et n_2 . Montrer que leur somme $n = n_1 + n_2$ est aussi poissonnienne. Exprimer le paramètre de la loi de n en termes de ceux des lois de n_1 et de n_2 .

Exercice 35. M particules sont distribuées aléatoirement sur N sites. Soit n_i leur nombre sur le site i . Montrer qu'à la limite $N, M \rightarrow \infty$ avec $M/N = \mu$ fixe, les n_i sont des variables aléatoires poissonniennes indépendantes.

Exercice 36. M points sont distribués aléatoirement dans un volume V . On considère la limite $M, V \rightarrow \infty$ avec $M/V = \rho$ fixe. Trouver la loi $P_v(m)$ pour le nombre m de points dans un sous-volume v .

Exercice 37. Soient deux états cohérents $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$, où ν_1 et ν_2 sont réels. Calculer le produit scalaire $\langle \nu_2 | \nu_1 \rangle$ en insérant le système complet de l'équation (152). Il en résulte une intégrale bidimensionnelle sur les variables $x = \text{Re } z$ et $y = \text{Im } z$. Trouver les valeurs $x = x_0$ et $y = y_0$ pour lesquelles l'intégrand est maximum, et constater que celles-ci *ne sont pas nécessairement réelles*.

Exercice 38. États non poissonniens. Soit une distribution p_n du nombre n des particules présentes sur le site d'un réseau, et soit $|p\rangle$ le ket associé. Pour un état cohérent $|\psi\rangle$ montrer que, avec $\psi^* = 1 + \psi$,

$$\langle \psi | p \rangle = cte \times \exp \left[-\frac{1}{2}(1 + \bar{\psi})\psi + c_1\bar{\psi} + \frac{1}{2}c_2\bar{\psi}^2 + \mathcal{O}(\bar{\psi}^3) \right] \quad (162)$$

et exprimer c_1 et c_2 en termes des cumulants de n . L'écriture (162) permet de traiter perturbativement des lois p_n non poissoniennes dans le cadre de la théorie des champs des chapitres suivants.

8.7 Exemples d'opérateurs \hat{W} .

a. Désintégration radioactive. Soit une collection de particules dont chacune peut se désintégrer spontanément, indépendamment des autres, à un taux k . La probabilité $P(n, t)$ pour qu'à l'instant t il reste encore n particules, obéit à une équation maîtresse. L'opérateur \hat{W} associé est

$$\hat{W} = k(1 - a^\dagger) a \quad (163)$$

b. Réaction chimique. On considère la réaction $A + A \rightarrow 0$. Plus précisément, chaque paire de particules, dans une collection de n particules, peut s'annihiler à un taux k . La probabilité $P(n, t)$ d'avoir n particules à l'instant t obéit à une équation maîtresse qui a comme opérateur

$$\hat{W} = \frac{1}{2}k(1 - a^{\dagger 2}) a^2 \quad (164)$$

Exercice 39. Montrer que $\frac{1}{2}a^{\dagger 2}a^2$ est l'opérateur du nombre de paires de particules. Vérifier que l'opérateur (164) assure que le nombre d'annihilations de paire par unité de temps est de $\frac{1}{2}n(n-1)k$, comme il faut.

c. Croissance biologique. Chaque individu d'une population biologique peut se diviser en deux à un taux k . La probabilité $P(n, t)$ pour qu'il y ait n individus à l'instant t satisfait à une équation maîtresse d'opérateur

$$\hat{W} = k(a^{\dagger 2} - a^\dagger) a \quad (165)$$

En termes chimiques, cet opérateur décrit évidemment la "réaction" $A \rightarrow 2A$.

d. Réaction entre deux espèces. On considère une collection de deux types de particules, A et B , avec les réactions $B \rightarrow A$ et $A + B \rightarrow 2B$, dont les taux sont respectivement k_1 et k_2 . Remarquer que ces réactions conservent le nombre total de particules. La probabilité $P(n_A, n_B, t)$ pour qu'à l'instant t il y ait n_A particules de type A et n_B particules de type B obéit à une équation maîtresse. L'opérateur correspondant est

$$\hat{W} = k_1(a^\dagger - b^\dagger)b + k_2(b^{\dagger 2} - a^\dagger b^\dagger)ab \quad (166)$$

Cette réaction a été considérée dans la littérature avec l'interprétation suivante. Les A et les B représentent respectivement des individus sains et malades ; les réactions $B \rightarrow A$ et $A + B \rightarrow 2B$ correspondent à une guérison spontanée et une contamination. On a donc un modèle de propagation d'une maladie contagieuse.

Exercice 40. Quel est l'état stationnaire de ce problème ?

e. *Diffusion.* On considère une collection de particules indépendantes sur un réseau. Chaque particule y effectue une marche aléatoire moyennant des sauts à un taux γ entre sites voisins. On notera n_j le nombre de particules au site j , et $P(\{n_i\}, t)$ la probabilité d'avoir à l'instant t les nombres d'occupation $\{n_i\}$. Cette probabilité obéit à une équation maîtresse. Pour en construire l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}_D$ correspondant, il est nécessaire d'introduire des opérateurs de création et d'annihilation a_j^\dagger et a_j pour chaque site j . Puis on trouve, en notant $j + \delta$ un site voisin de j ,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{W}}_D &= \gamma \sum_j \sum_\delta (a_{j+\delta}^\dagger - a_j^\dagger) a_j \\ &= \gamma \sum_j (\Delta a_j^\dagger) a_j \\ &= \gamma \sum_j a_j^\dagger \Delta a_j \end{aligned} \tag{167}$$

où Δ dénote le laplacien sur réseau.

Il est évident qu'il est possible de construire de très nombreux autres exemples. Remarquer que les $\hat{\mathcal{W}}$ trouvés dans les exemples **a** et **e** sont quadratiques, et que ceux des autres exemples sont d'ordre supérieur en termes des opérateurs de création et d'annihilation. Les $\hat{\mathcal{W}}$ quartiques correspondent à des problèmes facilement solubles par des méthodes élémentaires ; les termes cubiques, quartiques, *etc.*, toutefois, nécessitent un recours à une théorie de perturbation, de renormalisation, ou autre.

Exercice 41. Vérifier que dans tous les exemples ci-dessus l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ conserve la probabilité.

Exercice 42. Interpréter l'opérateur $\hat{\mathcal{W}} = \gamma \sum_j (a_{j+1}^\dagger - a_j^\dagger) a_j$.

Exercice 43. Écrire l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ pour la réaction $A + B \rightarrow 0$ à un taux k , pour deux espèces A et B qui diffusent sur un réseau à des taux de transition γ entre sites voisins. Que pouvez-vous dire de l'état stationnaire de ce système en fonction des densités initiales n_A et n_B ?

8.8 Problèmes de réaction-diffusion. Les problèmes de réaction–diffusion auxquels on s'intéressera dans la suite concernent tous des systèmes de particules d'une ou de plusieurs espèces, A, B, \dots , diffusant sur un réseau d -dimensionnel et pouvant subir un ensemble spécifié de réactions. Dans la description habituelle on note n_j^A, n_j^B, \dots le nombre de particules de chaque espèce occupant le site j , et l'on écrit une équation maîtresse pour la loi $P(\{n_j^A\}, \{n_j^B\}, \dots, t)$.

$$\hat{\mathcal{W}} = \hat{\mathcal{W}}_D + \hat{\mathcal{W}}_R \tag{168}$$

où $\hat{\mathcal{W}}_D$ est l'opérateur de diffusion (167), éventuellement généralisé à plusieurs espèces de particules, et $\hat{\mathcal{W}}_R$ est l'opérateur qui effectue localement les réactions

pouvant se produire dans le système ; $\hat{\mathcal{W}}_R$ est donc une somme sur tous les sites d'opérateurs $\hat{\mathcal{W}}$ du type (163)–(166). Dans le cas particulier de l'exemple **b**, les équations (164) et (167) conduisent donc à

$$\hat{\mathcal{W}} = \gamma \sum_j a_j^\dagger \Delta a_j + k \sum_j \frac{1}{2} (1 - a_j^{\dagger 2}) a_j^2 \quad (169)$$

expression qui nous servira encore d'exemple par la suite.

9 Passage à une théorie de champs

9.1 Intégrale de chemin. Soit un système décrit par une équation maîtresse dont l'opérateur est \hat{W} ; et soit une grandeur physique F . Pour un état initial $|P(0)\rangle$ donné, on s'intéresse à la moyenne $\langle F \rangle_T$ de F à l'instant T . Pour $T \rightarrow \infty$ celle-ci devient la moyenne dans l'état stationnaire qui se sera établi. On pose $T \equiv S\Delta t$ et écrit l'opérateur d'évolution $e^{\hat{W}T}$ comme le produit de S facteurs $e^{\hat{W}\Delta t}$. Soit finalement des états $|\phi\rangle$, dont on spécifie seulement qu'ils constituent un système complet,

$$\sum_{\phi} |\phi\rangle\langle\phi| = \hat{1} \quad (170)$$

Plus tard on attachera à ϕ un index de site de réseau; le développement ci-dessous s'applique à chaque site individuellement.

Une expression pour $\langle F \rangle_T$ est donnée par (131). On y insère $S + 1$ fois ce système complet, si bien que la moyenne d'intérêt s'exprime comme

$$\langle F \rangle_T = \sum_{\phi_S} \sum_{\phi_{S-1}} \dots \sum_{\phi_0} \langle O|\hat{F}|\phi_S\rangle \langle\phi_S|e^{\hat{W}\Delta t}|\phi_{S-1}\rangle \dots \langle\phi_1|e^{\hat{W}\Delta t}|\phi_0\rangle \langle\phi_0|P(0)\rangle \quad (171)$$

À la limite $\Delta t \rightarrow 0$ on développe

$$\langle\phi_s|e^{\hat{W}\Delta t}|\phi_{s-1}\rangle = \langle\phi_s|\phi_{s-1}\rangle \left[1 + \Delta t \frac{\langle\phi_s|\hat{W}|\phi_{s-1}\rangle}{\langle\phi_s|\phi_{s-1}\rangle} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right] \quad (172)$$

et on a donc après réexponentiation

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_T &= \sum_{\phi_S} \sum_{\phi_{S-1}} \dots \sum_{\phi_0} \langle O|\hat{F}|\phi_S\rangle \prod_{s=1}^S \langle\phi_s|\phi_{s-1}\rangle \\ &\times \exp \left[\Delta t \sum_{s=1}^S \frac{\langle\phi_s|\hat{W}|\phi_{s-1}\rangle}{\langle\phi_s|\phi_{s-1}\rangle} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right] \langle\phi_0|P(0)\rangle \end{aligned} \quad (173)$$

La suite dépend de la nature de l'opérateur \hat{W} et du choix du système complet.

9.2 Utilisation des états cohérents. Soit maintenant ϕ un nombre complexe et $|\phi\rangle$ l'état cohérent associé, si bien qu'en invoquant (152) on peut écrire l'équation de complétude (170) comme

$$\int \frac{d^2\phi}{\pi} |\phi\rangle\langle\phi| = \hat{1} \quad (174)$$

où $\int d^2\phi \equiv \int d\text{Re}\phi \int d\text{Im}\phi$. L'équation (151) donne

$$\begin{aligned} \langle\phi_s|\phi_{s-1}\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\phi_s|^2 - \frac{1}{2}|\phi_{s-1}|^2 + \phi_s^* \phi_{s-1}} \\ &= e^{\frac{1}{2}|\phi_s|^2 - \frac{1}{2}|\phi_{s-1}|^2 - \phi_s^* (\phi_s - \phi_{s-1})} \end{aligned} \quad (175)$$

Si l'on admet que $\phi_s - \phi_{s-1} = \mathcal{O}(\Delta t)$, on voit que $\langle \phi_s | \phi_{s-1} \rangle = 1 + \mathcal{O}(\Delta t)$. Prenons, ensuite, pour $P(0)$ la distribution poissonnienne de paramètre n_0 . En combinant (151) et (160) on trouve que

$$\langle \phi_0 | P(0) \rangle = e^{-\frac{1}{2}|\phi_0|^2 - (1-\phi_0^*)n_0} \quad (176)$$

L'élément de matrice $\langle O | \hat{F} | \phi_S \rangle$ qui apparaît dans (173) nécessite un commentaire. L'opérateur \hat{F} s'exprime en fonction de a et de a^\dagger . En commutant les a^\dagger vers la gauche et en les éliminant à l'aide des relations (161), on peut écrire $\langle O | \hat{F} | a^\dagger, a \rangle = \langle O | \tilde{F}(a) \rangle$, où \tilde{F} est une fonction déterminée par \hat{F} . Avec ceci, et en utilisant en plus que selon (154) on a $a|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle$, il vient

$$\langle O | \hat{F} | \phi_S \rangle = \tilde{F}(\phi_S) e^{-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}|\phi_S|^2 + \phi_S} \quad (177)$$

Considérons finalement l'élément de matrice $\langle \phi_s | \hat{\mathcal{W}} | \phi_{s-1} \rangle$. L'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$, comme \hat{F} , dépend de a et de a^\dagger , et on peut encore une fois les commuter tel que les a^\dagger se trouvent tous à gauche des a . Appelons $\tilde{\mathcal{W}}(a^\dagger, a)$ la fonction de a^\dagger et de a ainsi obtenue. En se souvenant de (154) on trouve ensuite l'élément de matrice en question par les simples substitutions $a^\dagger \mapsto \phi_s^*$ et $a \mapsto \phi_{s-1}$. Ces deux remarques seront illustrées par des exemples au paragraphe suivant.

On substitue maintenant (175)–(177) dans (173) et l'on trouve

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_T = & e^{-n_0} \int \prod_{s=0}^S \frac{d^2 \phi_s}{\pi} \tilde{F}(\phi_S) \\ & \times \exp \left[\phi_S - \sum_{s=1}^S \phi_s^* (\phi_s - \phi_{s-1}) + \Delta t \sum_{s=1}^S \tilde{\mathcal{W}}(\phi_s^*, \phi_{s-1}) \right. \\ & \left. - |\phi_0|^2 + n_0 \phi_0^* \right] \end{aligned} \quad (178)$$

où l'on a supprimé les termes qui s'annulent pour $\Delta t \rightarrow 0$. On a donc réussi à écrire la moyenne comme une intégrale sur les deux champs classiques $\phi_s(t)$ et $\phi_s^*(t)$.

9.3 Exemples de fonctions \tilde{F} et \tilde{W} . On retourne aux exemples du paragraphe 8.7. Si les observables d'intérêt sont le nombre de particules de type A , et les carré et cube de ce nombre, on prendra respectivement $\hat{F}_1 = a^\dagger a$, $\hat{F}_2 = (a^\dagger a)^2$ et $\hat{F}_3 = (a^\dagger a)^3$. Suivant la procédure du paragraphe précédent on trouve facilement que

$$\begin{aligned} \hat{F}_1 = a^\dagger a & \quad \Rightarrow \quad \tilde{F}_1(\phi) = \phi \\ \hat{F}_2 = (a^\dagger a)^2 & \quad \Rightarrow \quad \tilde{F}_2(\phi) = \phi^2 + \phi \\ \hat{F}_3 = (a^\dagger a)^3 & \quad \Rightarrow \quad \tilde{F}_3(\phi) = \phi^3 + 3\phi^2 + \phi \end{aligned} \quad (179)$$

Remarquer qu'on a $\hat{F}_m = (\hat{F}_1)^m$ pour les opérateurs ci-dessus, mais $\tilde{F}_m \neq (\tilde{F}_1)^m$ pour les fonctions dès que $m = 2, 3, \dots$

Les expressions des opérateurs \hat{W} du paragraphe 8.7 sont telles que les créations se trouvent déjà toutes à gauche des annihilations. On trouve donc par simple substitution à partir de l'équation (164),

$$\tilde{W}(\phi_s^*, \phi_{s-1}) = \frac{1}{2}k(1 - \phi_s^{*2})\phi_{s-1}^2 \quad (180)$$

Dans le cas de l'équation (166), si on dénote par ψ et ψ^* les champs associés aux particules B , on trouve

$$\tilde{W}(\phi_s^*, \psi_s^*, \phi_{s-1}, \psi_{s-1}) = k_1(\phi_s^* - \psi_s^*)\psi_{s-1} + k_2(\psi_s^{*2} - \psi_s^*\phi_s^*)\phi_{s-1}\psi_{s-1} \quad (181)$$

Dans le cas de l'expression (167) il est nécessaire d'introduire des champs ϕ_j et ϕ_j^* sur chaque site j . Elle donne alors

$$\tilde{W}_D(\{\phi_j^*\}_s, \{\phi_j\}_{s-1}) = \gamma \sum_j \phi_{j,s}^* \Delta \phi_{j,s-1} \quad (182)$$

Finalement, l'opérateur \mathcal{W}_R de l'équation (169) conduit à

$$\tilde{W}_R = \frac{1}{2}k \sum_j (1 - \phi_{j,s}^{*2}) \phi_{j,s-1}^2 \quad (183)$$

9.4 Limite $\Delta t \rightarrow 0$. Cette limite est quelque peu délicate, comme on le verra encore après. Il est bon de garder à l'esprit, désormais, que chaque fois que surgit une question relative au temps continu, on peut la résoudre en revenant à la formulation discrétisée.

Pour l'instant on ne s'interroge pas trop sur le bien-fondé mathématique de ce qui va suivre, et l'on prendra la limite $\Delta t \rightarrow 0$ en remplaçant

$$\begin{aligned} \phi_s &\mapsto \phi(t) \quad \text{où } t = s\Delta t \\ \phi_s^* &\mapsto \phi^*(t) \\ \phi_s - \phi_{s-1} &\mapsto \Delta t \frac{d\phi(t)}{dt} \\ \prod_{s=1}^S \frac{d^2\phi_s}{\pi} &\mapsto \mathcal{N} \mathcal{D}\phi(t) \mathcal{D}\phi^*(t) \\ \sum_{s=1}^S &\mapsto \frac{1}{\Delta t} \int_0^T dt \end{aligned} \quad (184)$$

Ici \mathcal{N} est un facteur de normalisation que l'on n'explicitera pas ; en cas de besoin on peut toujours trouver sa valeur à partir de la condition $\langle 1 \rangle_T = 1$; et, même s'il est singulier, ses apparitions au numérateur et au dénominateur s'annihileront.

L'équation (173) devient donc à la limite $\Delta t \rightarrow 0$

$$\langle F \rangle_T = \mathcal{N} e^{-n_0} \int \mathcal{D}\phi(t) \mathcal{D}\phi^*(t) \tilde{F}(\phi(T)) e^{-S[\phi, \phi^*]} \quad (185)$$

où l'action $\mathcal{S}[\phi, \phi^*]$ est donnée par

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\phi, \phi^*] = \int_0^T dt \left[\phi^*(t) \frac{d\phi(t)}{dt} - \tilde{\mathcal{W}}(\phi^*(t), \phi(t)) \right] \\ - \phi(T) + |\phi(0)|^2 - n_0 \phi^*(0) \end{aligned} \quad (186)$$

La distinction entre les indices s et $s-1$ des arguments de $\tilde{\mathcal{W}}$ a disparu, l'effet n'étant que d'ordre Δt . Si les champs ϕ et ϕ^* portent un indice de site j , la limite de ce paragraphe s'applique indépendamment à chaque site.

9.5 Limite d'espace continu. Contrairement à la limite du temps continu, celle de l'espace continu ne pose pas de problème majeur. On effectuera cette limite explicitement pour le cas où $\hat{\mathcal{W}} = \hat{\mathcal{W}}_D + \hat{\mathcal{W}}_R$ avec $\hat{\mathcal{W}}_D$ et $\hat{\mathcal{W}}_R$ donnés par respectivement (182) et (183). Les symboles j et x dénoteront des vecteurs d -dimensionnels. En choisissant la maille du réseau égale à une longueur a_0 que l'on fait tendre vers zéro, on remplace

$$\begin{aligned} \phi_j(t) &\mapsto \phi(x, t) a_0^d & \text{où } x = ja_0 \\ \phi_j^*(t) &\mapsto \phi^*(x, t) \\ \Delta \phi_j(t) &\mapsto \Delta \phi(x, t) a_0^{d+2} \\ \prod_j \mathcal{D} \phi_j(t) &\mapsto \mathcal{D} \phi(x, t) \\ \sum_i &\mapsto a_0^{-d} \int d^d x \\ n_0 &\mapsto \rho_0 a_0^d \\ \gamma &\mapsto D a_0^{-2} \\ k &\mapsto \kappa a_0^{-d} \end{aligned} \quad (187)$$

Dans la colonne de droite ci-dessus on a introduit le laplacien Δ habituel, le coefficient de diffusion D et la densité (= nombre par unité de volume) des particules ρ_0 ; le coefficient κ est le *taux de réaction par unité de volume et par unité de densité au carré*.

Remarquer qu'à la suite de cette opération $\phi(x, t)$ a acquis la dimension d'un volume inverse, alors que $\phi^*(x, t)$ est resté sans dimension. Le changement d'élément d'intégration est évidemment accompagné d'un jacobien, que l'on absorbera dans une redéfinition de la constante \mathcal{N} .

9.6 Réaction et diffusion d'une seule espèce. On considère une collection de particules d'une espèce A régie par l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ de l'équation (169), c'est-à-dire pouvant diffuser et, sur un même site, s'annihiler selon $A + A \rightarrow 0$. On prend un état initial avec des distributions poissoniennes indépendantes de

paramètres n_{0j} sur les sites. L'action \mathcal{S} qui décrit ce système est

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\phi, \phi^*] = & \int_0^T dt \int d^d x \left[\phi^*(x, t) \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} - D\phi^*(x, t) \Delta \phi(x, t) \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \kappa [1 - \phi^{*2}(x, t)] \phi^2(x, t) \right] \\ & + \int d^d x \left[-\phi(x, T) + |\phi(x, 0)|^2 - \rho_0(x) \phi^*(x, 0) \right] \end{aligned} \quad (188)$$

où l'on a remplacé $n_{0j} \mapsto \rho_0(x) a_0^d$ à la limite d'espace continu.

9.7 *Le champ $\bar{\phi}$.* On fera un dernier changement de variable, qui aurait aussi pu précéder les limites $\Delta t \rightarrow 0$ et $a_0 \rightarrow 0$. On pose

$$\phi^*(x, t) = 1 + \bar{\phi}(x, t) \quad (189)$$

En l'appliquant à (188) on trouve

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}] = & \int_0^T dt \int d^d x \left[\bar{\phi}(x, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta \right) \phi(x, t) \right. \\ & \left. + \kappa \bar{\phi}(x, t) \phi^2(x, t) + \frac{1}{2} \kappa \bar{\phi}^2(x, t) \phi^2(x, t) \right] \\ & + \int d^d x \left[\bar{\phi}(x, 0) \phi(x, 0) - \rho_0(x) \bar{\phi}(x, 0) \right] \end{aligned} \quad (190)$$

On s'est servi du fait que $\int d^d x \Delta \phi = 0$, relation valable du moins dans le cas de conditions aux bords périodiques. Remarquer que l'action (190) ne contient plus de terme particulier à l'instant $t = T$.

Il mérite d'être souligné que cette action est *exacte*. Elle découle de l'équation maîtresse de départ sans aucune approximation. La limite du continuum, $a_0 \rightarrow 0$, a été prise, mais elle n'est pas essentielle.

Exercice 44. a. Exprimer l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ de l'équation maîtresse pour un système de particules d'une espèce A tel que

– les particules effectuent des marches aléatoires indépendantes à un taux de transition γ entre sites voisins ;

– deux A sur le même site subissent la réaction $A + A \rightarrow 0$ à un taux k_{20} ;

– un A peut se diviser en deux ($A \rightarrow A + A$) à un taux k_{12} .

b. Écrire l'action $\mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}]$ correspondante. Vérifier que l'action est minimisée par l'équation d'évolution de champ moyen pour ce problème. Trouver la solution stationnaire uniforme stable de ces équations.

c. Rajouter à ce système le processus d'une désintégration spontanée $A \rightarrow 0$ à un taux k_{10} . Comment l'action est-elle modifiée ? Quelle est la nouvelle équation de champ moyen ? Conclure que – en théorie de champ moyen – l'état stationnaire de ce système subit une transition de phase quand la différence $\Delta k = k_{12} - k_{10}$ change de signe.

Exercice 45. Écrire l'action $\mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}]$ pour la diffusion libre d'une collection de particules identiques, dont la m ème a pour position $\mathbf{r}_m(t)$. L'invariance par renversement du temps nous dit que les deux trajectoires dans l'espace des phases, $\Gamma(t) = \{\mathbf{r}_1(t), \mathbf{r}_2(t), \dots\}$ et $\Gamma(-t) = \{\mathbf{r}_1(-t), \mathbf{r}_2(-t), \dots\}$, sont équiprobables. Quelle symétrie de S correspond à cette invariance ?

Exercice 46. Écrire l'action \mathcal{S} pour la réaction $A + B \rightarrow 0$, puis pour le système de réactions $A + B \rightarrow 2B$ et $B \rightarrow A$. Les espèces diffusent moyennant des sauts à un taux γ , et les taux des réactions sont respectivement k_0 , k_2 et k_1 (l'indice indiquant le nombre de molécules produit par la réaction).

Exercice 47. Une collection de particules indépendantes se trouve répartie sur un "réseau" de deux sites, 1 et 2. Chaque particule saute à un taux γ entre les sites. A l'instant initial, $t = 0$, les deux nombres d'occupation, n_1 et n_2 , sont distribués indépendamment selon des lois poissoniennes de paramètres respectivement ν_1 et ν_2 .

a. Écrire l'équation maîtresse pour ce système. En déduire une paire d'équations pour $\langle n_1 \rangle_t$ et $\langle n_2 \rangle_t$. Les résoudre pour la condition initiale donnée.

b. Écrire l'opérateur \hat{W} de ce système.

c. Exprimer l'état initial en termes d'états cohérents.

d. Exprimer l'action \mathcal{S} de ce système dans l'intervalle de temps $[0, T]$, avec un pas de discrétisation $\Delta t = T/S$. Négliger les termes qui à la limite $\Delta t \rightarrow 0$ ne contribuent pas, mais *ne pas prendre cette limite*. L'action \mathcal{S} dépendra donc des variables $\phi_{1,s}$, $\phi_{2,s}$, $\phi_{1,s}^*$ et $\phi_{2,s}^*$ pour $s = 0, 1, \dots, S$.

e. Exprimer $\langle n_1 \rangle_T$ comme une moyenne avec le poids $e^{-\mathcal{S}}$. Exprimer aussi $\langle n_1 \rangle_t$, où $t = s\Delta t$ et $0 \leq t < T$. Vérifier que $\langle n_1 \rangle_0$ calculé de cette manière est égal à ν_1 .

f. On cherche maintenant à maximiser \mathcal{S} , c'est-à-dire à trouver la trajectoire la plus probable. Ecrire explicitement les conditions $\delta\mathcal{S}/\delta\phi_{j,s} = 0$ et $\delta\mathcal{S}/\delta\phi_{j,s}^* = 0$ pour $j = 1, 2$ et $s = 0, 1, \dots, S$. Est-il possible, en principe, de les résoudre ? On appellera les solutions $\{\phi_{j,s}^{\text{cl}}, \phi_{j,s}^{*\text{cl}}\}$.

g. Remarquer qu'au vu de l'équation (455), les équations que vous avez trouvées en f sont en fait *exactes*.

10 Équations de Langevin déduites de l'action

10.1 Introduction. Dans ce chapitre on considère quelques propriétés générales de l'action $\mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}]$ qui décrit un processus de réaction–diffusion faisant intervenir une seule espèce de particules. L'action est donc celle de l'équation (190), mais avec un terme de réaction général représenté par la fonction $\tilde{\mathcal{W}}_R$,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}] = & \int_0^T dt \int d^d x \left[\bar{\phi} \left(\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta \right) \phi - \tilde{\mathcal{W}}_R(\phi, \bar{\phi}) \right] \\ & + \int d^d x \left[\bar{\phi}(x, 0) \phi(x, 0) - \rho_0(x) \bar{\phi}(x, 0) \right] \end{aligned} \quad (191)$$

où dans la première ligne les arguments (x, t) ont été supprimés. Le terme diffusif est bilinéaire en ϕ et $\bar{\phi}$; le terme de réaction n'aura pas, en général, cette propriété.

10.2 Action \mathcal{S} linéaire en $\bar{\phi}$. Considérons le cas particulier où $\tilde{\mathcal{W}}_R$ est de la forme $\tilde{\mathcal{W}}_R(\phi, \bar{\phi}) = \bar{\phi} V(\phi)$. En s'appuyant sur l'équation (455) de l'appendice (chapitre **23**), on peut alors effectuer l'intégration sur le champ $\bar{\phi}$ exactement. Pour chaque t et chaque x l'intégration sur $\bar{\phi}(x, t)$ introduit une fonction δ dont l'argument dépend de $\phi(x, t)$, si bien que l'intégration restante, celle sur ϕ , n'a de contributions qu'en provenance des champs $\phi(x, t)$ qui satisfont à

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= D\Delta\phi + V(\phi) & 0 < t < T \\ \phi(x, 0) &= \rho_0(x) \end{aligned} \quad (192)$$

la deuxième de ces équations provenant de l'intégration sur $\bar{\phi}(x, 0)$. Il s'ensuit que les moments de ϕ sont donnés par $\langle \phi^m(x, t) \rangle = \phi^m(x, t)$ pour tout entier m . On a donc trouvé une *équation exacte pour la densité moyenne* des particules.

Remarque. Le fait que $\phi(x, t)$ soit sûre (= non aléatoire) à tout instant t en tout lieu x n'implique aucunement la même chose pour le nombre $n_j(t)$ des particules sur un site j . En fait, si $x = ja_0$ on déduit de ce qui précède et de l'équation (179) que

$$\begin{aligned} \langle n_j \rangle_t &= \phi \\ \langle n_j^2 \rangle_t &= \phi^2 + \phi \\ \langle n_j^2 \rangle_t - \langle n_j \rangle_t^2 &= \phi \end{aligned} \quad (193)$$

où ϕ est une abréviation pour $a_0^d \phi(x, t)$. Ceci montre que la densité des particules fluctue.

Exemples.

a. Diffusion sans réaction : $V(\phi) = 0$. L'équation (192) devient $\partial_t \phi = D\Delta\phi$.

b. Diffusion avec désintégration $A \rightarrow 0$ à un taux k : $V(\phi) = -\kappa\phi$, avec la définition (187) de κ . L'équation (192) devient $\partial_t \phi = D\Delta\phi - \kappa\phi$.

On voit que ces exemples sont triviaux. Ils concernent des particules sans interaction. Il est néanmoins important de les comprendre dans ce nouveau cadre.

10.3 Équation de Langevin avec bruit imaginaire. On considère maintenant l'action (190), qui a $\tilde{\mathcal{W}}_R = -\kappa\bar{\phi}\phi^2 - \frac{1}{2}\kappa\bar{\phi}^2\phi^2$, et est donc non linéaire en $\bar{\phi}$. Ce qui suit est basé sur Cardy [Ca96] ; une méthode antérieure due à Gardiner [Ga83] permet d'arriver aux mêmes conclusions.

a. Désenchevêtrement de $\bar{\phi}^2$. On peut ramener l'action (190) à une action linéaire en $\bar{\phi}$ par l'introduction d'un champ supplémentaire, que l'on appellera $\eta(x, t)$. On utilise, pour chaque x et chaque t , la relation

$$e^{-\frac{1}{2}\kappa\bar{\phi}^2\phi^2} = \int_{-\infty}^{\infty} d\eta p(\eta) e^{-i\sqrt{\kappa}\eta\phi\bar{\phi}} \quad (194)$$

où

$$p(\eta) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\eta^2) \quad (195)$$

qui “désenchevêtre” le $\bar{\phi}^2$ dans l'exponentielle du membre de gauche. On notera $\mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}, \eta]$ l'action (190) avec le terme $\frac{1}{2}\kappa\bar{\phi}^2\phi^2$ remplacé par $-i\sqrt{\kappa}\eta\phi\bar{\phi} - \frac{1}{2}\eta^2$.

b. Le champ $\eta(x, t)$. La fonction $p(\eta)$ s'interprète comme une loi de probabilité de η . L'indépendance des η à différents endroits et temps a pour conséquence que

$$\langle \eta(x, t)\eta(x', t') \rangle = \delta^d(x - x')\delta(t - t') \quad (196)$$

c. Équation pour $\phi(x, t)$. Les moyennes $\langle \tilde{F}[\phi] \rangle$ s'expriment maintenant

$$\langle \tilde{F}[\phi] \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} \mathcal{D}\eta \tilde{F}[\phi] e^{-\mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}, \eta]} \quad (197)$$

Mais, \mathcal{S} étant linéaire en $\bar{\phi}$, on conclut comme au paragraphe 10.2 que $\phi(x, t)$ est solution de l'équation stochastique

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D\Delta\phi - \kappa\phi^2 + i\sqrt{\kappa}\phi\eta \quad (198)$$

où les arguments (x, t) ont été supprimés. Cette équation est exacte : aucune approximation n'a été faite. Il s'agit ici, en réalité, d'une redécouverte, car la même équation, pour le même processus, apparaît déjà chez Gardiner [Ga83], qui la déduit en passant par une “représentation de Poisson” de la loi de probabilité $P(\{n_i\}, t)$.

d. Commentaires.

– L'équation (198), avec le “bruit” gaussien $\eta(x, t)$ autocorrélé selon (196), est une équation de Langevin, comme on en a rencontré au paragraphe 5.4. Il y a cependant des différences.

– Le terme de bruit a un coefficient imaginaire. La solution de (198) est donc complexe, même pour une condition initiale réelle. Ceci est tellement inhabituel qu'une vérification de tous les signes au long du calcul s'impose ; mais ils sont corrects ! C'est dire qu'on a trouvé une représentation très inusuelle de ce processus de réaction–diffusion.

– Au paragraphe 5.4 on a vu qu'une telle équation doit être assortie d'une règle de lecture. Dans le cas présent c'est la règle de lecture d'Itô qui s'applique

à (198). Pour le voir, il faut retourner à l'action discrétisée en temps, où l'on voit que dans le produit $\bar{\phi}^2 \phi^2$ le champ $\bar{\phi}$ porte l'indice temporelle $s+1$ quand ϕ porte l'indice s . Or, $\bar{\phi}_{s+1}$ n'intervient pas dans les relations qui relient ϕ_s au champ initial ϕ_0 , et ceci est précisément la caractéristique de la lecture d'Itô.

– L'équation (198) étant stochastique, sa solution $\phi(x, t)$ – à la différence de la solution de (192) – est à tout instant caractérisée par une loi de probabilité. On ne peut toutefois identifier cette loi à celle de la densité des particules, ne serait-ce parce que ϕ est complexe. La relation entre ϕ et n se limite à des relations entre leurs moments ; on déduit de ce qui précède et de l'équation (179) que

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \langle \phi \rangle \\ \langle n^2 \rangle &= \langle \phi^2 \rangle + \langle \phi \rangle \\ \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 &= \langle \phi^2 \rangle - \langle \phi \rangle^2 + \langle \phi \rangle \end{aligned} \tag{199}$$

où $\langle n \rangle$ et ϕ sont des abréviations pour $\langle n_j \rangle_t$ et $a_0^d \phi(x, t)$.

– L'amplitude du terme de bruit est proportionnelle à ϕ , ce qui est satisfaisant : quand il n'y a pas de particules, il ne peut y avoir de bruit.

– L'amplitude du bruit est proportionnelle également au taux de réaction κ . On a déjà vu qu'en l'absence de réactions entre particules, $\phi(x, t)$ obéit à l'équation déterministe (192). Aussi η ne représente-t-il que la partie du bruit physique qui provient de la nature discrète de la réaction.

– Il y a sans doute d'autres observations intéressantes à faire. Ce type d'équation a été peu étudié.

Exercice 48. a. Trouver l'équation de Stratonovitch équivalente à (198).

b. Considérer l'équation (198) sans le terme en laplacien. Poser $\phi = u + iv$ et trouver l'équation de Fokker–Planck pour $P(u, v, t)$.

11 Renormalisation de $A + A \rightarrow 0$

11.1 *L'action.* Dans ce chapitre on étudie un exemple spécifique, à savoir la réaction $A + A \rightarrow 0$, avec diffusion des particules A . Ce problème est décrit par l'action

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}] = & \int_0^T dt \int d^d x \left[\bar{\phi} \left(\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta \right) \phi + \kappa \bar{\phi} \phi^2 + \frac{1}{2} \kappa \bar{\phi}^2 \phi^2 \right] \\ & + \int d^d x \left[\bar{\phi}(x, 0) \phi(x, 0) - \rho_0 \bar{\phi}(x, 0) \right] \end{aligned} \quad (200)$$

où dans la première ligne les arguments (x, t) ont été supprimés.

La question. La densité des particules A en un point $x_0 = j_0 a_0$ à l'instant t_0 est donnée par $\langle n_{j_0} \rangle_{t_0} a_0^{-d} = \langle \phi(x_0, t_0) \rangle$, où

$$\langle \phi(x, t) \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} \phi(x, t) e^{-\mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}]} \quad (201)$$

est une moyenne sur toutes les évolutions temporelles possibles. Une question d'intérêt est de savoir comment cette densité décroît vers zéro aux grands temps t . Il s'avérera que cette décroissance est en loi de puissance, $\sim t^{-p}$, où p est analogue à un exposant critique. En particulier, on trouvera pour p une valeur "classique", valable au-dessus d'une dimension critique supérieure d_c , et des valeurs non classiques, affectées par les fluctuations du système, dans les dimensions inférieures à d_c .

A. Théorie classique

11.2 *Équations d'évolution classiques.* On cherche les "trajectoires classiques" $\phi^{\text{cl}}(x, t)$ et $\bar{\phi}^{\text{cl}}(x, t)$, c'est-à-dire celles qui ont le plus grand poids. En prenant la dérivée fonctionnelle de l'action (190) on trouve à partir de $\delta\mathcal{S}/\delta\bar{\phi} = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= D\Delta\phi - \kappa(1 + \bar{\phi})\phi^2 & 0 < t < T \\ \phi(x, 0) &= \rho_0 \end{aligned} \quad (202)$$

puis à partir de $\delta\mathcal{S}/\delta\phi = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} &= -D\Delta\bar{\phi} + \kappa(2 + \bar{\phi})\bar{\phi}\phi & 0 < t < T \\ \bar{\phi}(x, T) &= 0 \end{aligned} \quad (203)$$

Noter que le signe $-$, inhabituel devant un terme diffusif, en combinaison avec la condition "finale" en $t = T$, donne un problème mathématiquement bien posé. La deuxième équation a pour solution $\bar{\phi}^{\text{cl}}(x, t) = 0$ pour tout $0 \leq t \leq T$. En substituant celle-ci dans la première on retrouve pour $\phi(x, t)$ l'équation d'évolution classique (113), à savoir

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= D\Delta\phi - \kappa\phi^2 \\ \phi(x, 0) &= \rho_0 \end{aligned} \quad (204)$$

Une solution particulière, uniforme dans l'espace, de cette équation est

$$\phi^{\text{cl}}(t) = \frac{\rho_0}{1 + \rho_0 \kappa t} \quad (205)$$

Cette formule rétablit le contact avec la réalité observable si on identifie ϕ^{cl} avec la densité moyenne $\langle n \rangle a_0^{-d}$. On voit que pour $t \rightarrow \infty$ on a $\phi^{\text{cl}}(t) \sim 1/\kappa t$, quelle que soit la dimension d de l'espace. L'exposant p a donc en approximation de champ moyen la valeur $p = 1$.

11.3 *Rôle de la condition initiale.* L'uniformité spatiale de la solution (205) est une conséquence de l'uniformité de la condition initiale $\phi(x, 0) = \rho_0$. On peut se demander si le comportement asymptotique trouvé ci-dessus change si la condition initiale est $\phi(x, 0) = \rho(x)$, où $\rho(x)$ est arbitraire (et, par exemple, aléatoire). En fait, il n'en est rien : toute fonction $\phi^{\text{cl}}(x, t)$ solution de (204) et initialement bornée décroît avec t au moins en $1/t$, et cela en toute dimension d d'espace.

La démonstration mathématique repose sur un théorème de comparaison. Soient $u(x, t)$ et $v(x, t)$ des solutions positives de (204) avec $u(x, 0) = u_0(x)$ et $v(x, 0) = v_0(x)$, où $u_0(x) > v_0(x)$ pour tout x . La différence $u - v$ obéit à

$$\partial_t(u - v) = D\Delta(u - v) - \kappa(u^2 - v^2) \quad (206)$$

Il s'ensuit que $u(x, t) > v(x, t)$ pour tout x et t . Car, si t_* est le premier instant auquel une valeur de $u(x, t_*)$ coïncide avec une valeur de $v(x, t_*)$, disons en $x = x_*$, on a

$$\partial_t(u - v)|_{x_*, t_*} = \Delta(u - v)|_{x_*, t_*} \quad (207)$$

Or la dérivée seconde dans le membre de droite doit être positive, comme au cas particulier de la dimension $d = 1$ on le voit aisément à l'aide d'une figure. Donc dès que $t > t_*$ on aura de nouveau $u > v$. Si v est une solution classique $\phi^{\text{cl}}(x, t)$ quelconque, initialement bornée par C , on prendra pour u la solution classique uniforme $\phi^{\text{cl}}(t)$ avec $\phi^{\text{cl}}(0) = C$ et on conclut que $\phi^{\text{cl}}(x, t)$ décroît au moins en $1/t$.

B. Considérations dimensionnelles

11.4 *Argument heuristique en $d = 1$.* L'argument suivant fournit une indication que la valeur $p = 1$ prédite par le champ moyen n'est pas correcte, pour le moins en dimension d'espace $d = 1$. Pendant une durée de temps t une particule A "balaye", en une dimension, un région spatiale type de volume $S(t) \sim \sqrt{\gamma t}$. Toutes les particules à l'intérieur d'un tel volume ont une chance de se rencontrer, si bien qu'il y restera typiquement *une* particule. Au temps t la densité est donc $\phi(t) \sim 1/\sqrt{t}$, c'est-à-dire la décroissance est beaucoup plus lente que prévu par l'équation classique. Cet argument montre donc qu'en-dessous d'une certaine dimension critique supérieure les lois de puissance de la théorie de champ moyen doivent être modifiées.

La dimension critique supérieure. On peut essayer de généraliser cet argument aux dimensions $d > 1$. Le volume $S(t)$ de sites visités après γt pas par une marche aléatoire en dimension d est

$$S(t) \sim \begin{cases} t^{d/2} & 1 \leq d < 2 \\ t/\log t & d = 2 \\ t & d > 2 \end{cases} \quad (208)$$

Le même argument conduit donc à la conclusion que $\phi(t) \sim \phi^{\text{cl}}(t)$ seulement en dimension $d > 2$, et que $d_c = 2$ est la dimension critique supérieure. L'analyse du paragraphe suivant confirmera cette conclusion. Notons toutefois que, bien que les facteurs logarithmiques correctifs soient caractéristiques des dimensions critiques, l'argument utilisé est trop grossier pour qu'en $d = 2$ on puisse croire au résultat $\phi(t) \sim t/\log t$ sans passer par un calcul détaillé.

11.5 *Les dimensions physiques.* On incorpore le coefficient de diffusion D dans $\tau \equiv Dt$ et $g \equiv D^{-1}\kappa$. L'action \mathcal{S} de l'équation (190) s'écrit alors

$$\mathcal{S} = \int_0^{DT} d\tau \int d^d x \left[\bar{\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \Delta \right) \phi + g \bar{\phi} \phi^2 + \frac{1}{2} g \bar{\phi}^2 \phi^2 \right] \quad (209)$$

où l'on a supprimé le terme initial. Celui-ci ne jouera plus de rôle pour l'instant, mais son importance sera mise en lumière plus tard. L'équation (209) contient comme seul paramètre la *constante de couplage* g , qui représente le taux de la réaction $A + A \rightarrow 0$.

Notons $[X]$ la dimension d'une grandeur X , et écrivons ℓ pour une longueur et t pour un temps. Comme $[D] = \ell^2 t^{-1}$ et $[\kappa] = \ell^d t^{-1}$, les grandeurs intervenant dans (209) ont les dimensions physiques ou *dimensions nues* données par

$$\begin{aligned} [\tau] &= \ell^2 & [\phi] &= \ell^{-d} \\ [x] &= \ell & [\bar{\phi}] &= 1 \\ & & [g] &= \ell^{d-2} \end{aligned} \quad (210)$$

Remarquer que celles-ci sont compatibles avec la nécessaire condition $[\mathcal{S}] = 1$.

11.6 *Argument de changement d'échelle.* La dernière des équations (210) montre que la dimension critique supérieure est égale à $d_c = 2$. On répète ici l'argument habituel. Supposons que l'on introduise une nouvelle échelle de longueur, b fois plus grande que l'ancienne, et que l'on note $\tilde{x} = x/b$ et $\tilde{\tau} = \tau/b^2$ les valeurs des coordonnées exprimées par rapport à cette nouvelle échelle. On pose alors

$$\tilde{\phi}(\tilde{x}, \tilde{t}) = b^d \phi(x, t) \quad \tilde{\bar{\phi}}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \bar{\phi}(x, t) \quad (211)$$

Avec ce changement d'échelle l'action \mathcal{S} devient

$$\mathcal{S} = \int_0^{D\tilde{T}} d\tilde{\tau} \int d^d \tilde{x} \left[\tilde{\bar{\phi}} \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{\tau}} - \tilde{\Delta} \right) \tilde{\phi} + b^{2-d} g (\tilde{\bar{\phi}} \tilde{\phi}^2 + \frac{1}{2} \tilde{\bar{\phi}}^2 \tilde{\phi}^2) \right] \quad (212)$$

Cette nouvelle action décrit le même phénomène physique, mais à une échelle b fois plus grande d'espace et b^2 fois plus grande de temps. On voit qu'à ces échelles la réaction procède à un nouveau taux \tilde{g} , donnée en termes de l'ancienne par

$$\tilde{g} = b^{2-d}g \quad (213)$$

On en tire les conclusions suivantes.

- En dimension spatiale $d > 2$ la diffusion est, pour $b \rightarrow \infty$, infiniment rapide par rapport à la réaction. La réaction intervient donc dans un système que la diffusion a rendu pratiquement uniforme, avec une densité $\phi(x, t)$ partout égale à la densité moyenne ϕ^{cl} .

- En dimension spatiale $d < 2$ la diffusion devient, pour b grand, très lente par rapport à la réaction. Cette dernière ne peut, toutefois, conduire à un état d'équilibre (= densité de particules nulle) sans diffusion, d'où il résulte un couplage non trivial entre réaction et diffusion. Pour décrire l'effet combiné des deux, il faut une théorie qui aille au-delà du champ moyen. Cette théorie devra établir, en particulier, une nouvelle échelle de temps commune à la réaction et la diffusion.

Exercice 49. Déterminer la dimension critique supérieure des problèmes de réaction–diffusion suivants :

- (i) $m A \rightarrow 0 \quad m = 2, 3, \dots$
- (ii) $A + B \rightarrow 0$

Exercice 50. On considère l'action

$$\mathcal{S}[\psi, \bar{\psi}] = \int dt \int d^d x [\bar{\psi}(\partial_t + \mu - \Delta)\psi + g \bar{\psi}\psi(\psi - \bar{\psi})] \quad (214)$$

qui a un point critique pour $\mu = 0$.

Remarque. Cette action – que l'on a énoncée ici sans la déduire d'une quelconque équation maîtresse – a commencé à apparaître dans la littérature de la physique des particules dans les années 70. On se limite ici à mentionner qu'elle représente le problème de la *percolation dirigée* de la physique statistique [CS80]. Elle sera discutée plus en détail au chapitre **14**.

- a. Déterminer la dimension critique supérieure d_c de cette action.
- b. Comparer votre résultat à la dimension critique supérieure d'une théorie ϕ^3 en physique statistique d'équilibre ; la fonctionnelle d'énergie libre $\mathcal{F}[\phi]$ de cette théorie joue le rôle d'une action et est donnée par

$$\mathcal{F}[\phi] = \int d^d x [\frac{1}{2}|\nabla\phi|^2 + r\phi^2 + s\phi^3 + \dots] \quad (215)$$

- c. Écrire le propagateur et définir des diagrammes pour le problème (214).

- d. Analyser les diagrammes d'ordre g^2 et déterminer lesquels d'entre eux donnent des contributions non nulles à la renormalisation du propagateur.

- e. Quels sont les diagrammes qui renormalisent le couplage g ?

f. On rajoute à l'action (214) un terme

$$g_4 \int dt \int d^d x \bar{\psi}^2 \psi^2 \quad (216)$$

Quel en est l'effet sur un développement en ϵ pour dimension $d = d_c - \epsilon$?

C. Propagateur

11.7 *L'action gaussienne et son propagateur.* On calcule au préalable le propagateur, c'est-à-dire la fonction de corrélation $\langle \bar{\phi}(x', t') \phi(x, t) \rangle_G$ de l'action gaussienne \mathcal{S}_G , qui ne sera rien d'autre que la fonction de Green de l'équation de la diffusion. On considère l'action gaussienne

$$\mathcal{S}_G = \int dt \int d^d x \bar{\phi}(x, t) (\partial_t - \Delta) \phi(x, t) \quad (217)$$

Soit q un vecteur d -dimensionnel. On définit les transformées de Fourier

$$\begin{aligned} \phi_q(t) &= \int d^d x e^{-iqx} \phi(x, t) \\ \phi_{q\omega} &= \int dt e^{i\omega t} \phi_q(t) \end{aligned} \quad (218)$$

Les transformées $\bar{\phi}_q(t)$ et $\bar{\phi}_{q\omega}$ sont définies par les mêmes formules, *sans* conjugaison complexe des exponentielles. L'inverse de la première relation de (218) sera notée

$$\phi(x, t) = \int_q e^{iqx} \phi_q(t) \equiv \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} e^{iqx} \phi_q(t) \quad (219)$$

où, tant que le domaine spatial est fini, l'intégrale est en fait une somme sur des q discrets.

Exercice 51. a. Montrer qu'avec cette définition on obtient

$$\mathcal{S}_G = \int_q \int_\omega (q^2 - i\omega) \bar{\phi}_{-q, -\omega} \phi_{q\omega} \quad (220)$$

b. Puis montrer successivement

$$\langle \bar{\phi}_{q'\omega'} \phi_{q\omega} \rangle_G = (2\pi)^{d+1} \delta^d(q + q') \delta(\omega + \omega') \frac{1}{q^2 - i\omega} \quad (221)$$

$$\begin{aligned} \langle \bar{\phi}_{q'}(t') \phi_q(t) \rangle_G &= -(2\pi)^d \delta^d(q + q') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + iq^2} \\ &= (2\pi)^d \delta^d(q + q') \begin{cases} e^{-q^2(t-t')} & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases} \end{aligned} \quad (222)$$

où $\langle \dots \rangle_G$ indique une moyenne par rapport à $\exp(-\mathcal{S}_G)$. Remarquer que ce calcul laisse le cas $t = t'$ indéterminé.

c. Trouver finalement l'expression explicite

$$\langle \bar{\phi}(x', t') \phi(x, t) \rangle_G = \begin{cases} [4\pi(t - t')]^{-d/2} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4(t-t')}\right) & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases} \quad (223)$$

d. Pourquoi a-t-on $\langle \bar{\phi}(x', t') \bar{\phi}(x, t) \rangle_G = \langle \phi(x', t') \phi(x, t) \rangle_G = 0$ quels que soient les arguments x, t, x', t' ?

11.8 *Interprétation des moyennes de $\bar{\phi}$.* On a vu dans l'équation (179) du paragraphe **9.3** que les moments de ϕ sont reliés aux moments de la densité de particules. Toutefois, jusqu'ici on n'a pas tenté d'interpréter des moyennes faisant intervenir des champs barrés $\bar{\phi}$. Suite au calcul du paragraphe **11.7** on voit se dessiner l'interprétation suivante. Le champ $\bar{\phi}(x', t')$ crée une perturbation unitaire en x' à l'instant t' , dont le champ $\phi(x, t)$ mesure la réponse en x à un instant t ultérieur. Le champ $\bar{\phi}$ est appelé un *champ de réponse* parce qu'il *provoque* une réponse. Cette interprétation sera justifiée plus tard.

11.9 *Le propagateur à temps égaux.* Le calcul du paragraphe **11.7** laisse le cas $t = t'$ indéterminé, l'intégrale dans l'équation (222) n'étant alors pas bien définie. Ce cas pourrait paraître sans intérêt pratique, mais il s'avérera, au contraire, indispensable de comprendre ce qui se passe pour $t = t'$. Pour trancher cette question, il est nécessaire de retourner à la formulation originale de l'action où le temps était discrétisé. On affirme ici sans le démontrer que l'on trouve alors que

$$\langle \bar{\phi}(q', t') \phi(q, t) \rangle_G = 0 \quad \text{pour } t = t' \quad (224)$$

Donc : le propagateur à temps égaux est nul. On peut exprimer les équations (222) et (223) à l'aide d'une fonction $\theta(t - t')$ de Heaviside à condition de définir $\theta(0) = 0$.

11.10 *L'action.* On fait une transformation de Fourier seulement par rapport à l'espace. On remplace provisoirement les constantes de couplage g et $\frac{1}{2}g$ des termes cubique et quartique par respectivement g_1 et g_2 . L'action \mathcal{S} devient

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = & \int_0^T dt \int_q \bar{\phi}_{-q}(t) (\partial_t + q^2) \phi_q(t) \\ & + g_1 \int_0^T dt \int_q \int_{q''} \int_{q'''} (2\pi)^d \delta^d(q + q'' + q''') \bar{\phi}_q(t) \phi_{q''}(t) \phi_{q'''}(t) \\ & + g_2 \int_0^T dt \int_q \int_{q'} \int_{q''} \int_{q'''} (2\pi)^d \delta^d(q + q' + q'' + q''') \bar{\phi}_q(t) \bar{\phi}_{q'}(t) \phi_{q''}(t) \phi_{q'''}(t) \\ & - \rho_0 \phi_0(0) \end{aligned} \quad (225)$$

La première ligne représente l'action gaussienne \mathcal{S}_G , dans laquelle on inclura désormais aussi le dernier terme, ce qui n'aura aucune incidence sur la suite des calculs. Les deuxième et troisième lignes représentent les termes d'interaction, que l'on notera \mathcal{S}_{int} . Ainsi $\mathcal{S} = \mathcal{S}_G + \mathcal{S}_{\text{int}}$.

D. Renormalisation à la Wilson : le principe

11.11 Voir Wilson et Kogut [WK74], qui expliquent cette méthode appliquée au calcul de la fonction de partition d'un système à l'équilibre. Voir aussi Hinrichsen [HH00] pour une discussion quelque peu similaire à la nôtre.

Dans l'espace d -dimensionnel des indices q on approxime la zone de Brillouin par une sphère de rayon Λ , en supposant que cette modification de l'action à petites échelles spatiales ne modifiera pas son comportement aux grandes échelles qui nous intéressent. On divise cette zone de Brillouin en une zone intérieure "ZI" de rayon Λ/b et une coquille \mathcal{C} comprenant les q tels que $\Lambda/b < |q| < \Lambda$. On prend $b = \exp \Delta s \simeq 1 + \Delta s$ avec Δs infinitésimal.

On cherche à effectuer l'intégration sur les champs ϕ et $\bar{\phi}$ requise dans (201) par étapes successives, chacune d'elle consistant en une intégration sur une partie des ϕ_q et $\bar{\phi}_q$. La première étape sera l'intégration sur tous les ϕ_q et $\bar{\phi}_q$ dont l'indice se trouve dans la coquille \mathcal{C} . Dans ce but on écrit

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}^< + \mathcal{S}_G^> + \mathcal{S}_{\text{int}}^> \quad (226)$$

définis de la manière suivante.

$\mathcal{S}^<$ contient l'ensemble des termes de \mathcal{S} où n'interviennent que des champs ϕ ou $\bar{\phi}$ d'indices $\in \text{ZI}$, que l'on notera $\phi^<$ et $\bar{\phi}^<$; ces termes proviennent en partie de \mathcal{S}_G et en partie de \mathcal{S}_{int} .

$\mathcal{S}_G^>$ contient les termes de l'action gaussienne dont les indices q se trouvent dans la coquille \mathcal{C} .

$\mathcal{S}_{\text{int}}^>$ contient tous les termes de \mathcal{S}_{int} où intervient au moins *un* champ d'indice dans la coquille. Noter que \mathcal{S}_{int} contient des termes "mixtes". Abrégeons encore

$$\int \mathcal{D}\phi \int \mathcal{D}\bar{\phi} = \int \mathcal{D}\phi^< \mathcal{D}\bar{\phi}^< \int \mathcal{D}\phi^> \mathcal{D}\bar{\phi}^> = \int_{<} \int_{>} \quad (227)$$

Le symbole $\langle \dots \rangle$ dénotera désormais la moyenne par rapport à $\exp(-\mathcal{S}_G^>)$. Le facteur de normalisation correspondant est

$$\mathcal{N} = \int_{>} \exp \left(-\mathcal{S}_G^>[\phi^>, \bar{\phi}^>] \right) \quad (228)$$

Une simplification est due au fait que $\langle \mathcal{S}_{\text{int}} \rangle = 0$ (pourquoi ?). Après tous ces préalables on peut finalement écrire pour l'intégrale à évaluer le développement en cumulants

$$\int_{>} \exp \left(-\mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}] \right) = \exp \left(-\mathcal{S}^<[\phi^<, \bar{\phi}^<] - \Delta \mathcal{S}[\phi^<, \bar{\phi}^<] \right) \quad (229)$$

où

$$\begin{aligned} & \exp \left(-\Delta \mathcal{S}[\phi^<, \bar{\phi}^<] \right) \\ &= \int_{>} \exp \left(-\mathcal{S}_G^>[\phi^>, \bar{\phi}^>] \right) \left[1 - \mathcal{S}_{\text{int}}^>[\phi, \bar{\phi}] + \frac{1}{2} \mathcal{S}_{\text{int}}^>2[\phi, \bar{\phi}] + \dots \right] \\ &= \mathcal{N} \exp \left(\frac{1}{2} \langle \mathcal{S}_{\text{int}}^>2[\phi, \bar{\phi}] \rangle - \frac{1}{6} \langle \mathcal{S}_{\text{int}}^>3[\phi, \bar{\phi}] \rangle \dots \right) \end{aligned} \quad (230)$$

On notera $-\mathcal{S}_{\text{eff}}$ l'argument de l'exponentielle dans la dernière ligne de (229), obtenu après intégration sur toutes les variables d'indice $\in \mathcal{C}$. Cette action ne dépend donc plus que des champs ϕ et $\bar{\phi}$ d'indices $\in \text{ZI}$. Il s'agira dans la suite de calculer \mathcal{S}_{eff} explicitement.

E. Action renormalisée à l'ordre ϵ

11.12 On calculera la première moyenne dans le développement (230), puis montrera qu'en dimension spatiale $d = 2 - \epsilon$ les autres termes sont d'ordre supérieur en ϵ . Écrivons

$$\mathcal{S}_{\text{int}}^> = \int_0^T dt [g_1 S_3(t) + g_2 S_4(t)] \quad (231)$$

où $S_3(t)$ et $S_4(t)$ regroupent respectivement les contributions cubiques et quartiques à \mathcal{S}_{int} .

Produit de deux S_4 . En substituant (231) dans $\frac{1}{2}\langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>2} \rangle$ on trouve que le produit des deux S_4 contribue à cette quantité

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>2} \rangle_{44} &= g_2^2 \int_0^T dt \int_t^T dt_1 \int_{q,q',q'',q'''} \int_{q_1,q'_1,q''_1,q'''_1} (2\pi)^{2d} \delta^d(q + q' + q'' + q''') \\ &\quad \times \delta^d(q_1 + q'_1 + q''_1 + q'''_1) \langle \bar{\phi}_q \bar{\phi}_{q'} \phi_{q''} \phi_{q'''} \bar{\phi}_{q_1} \bar{\phi}_{q'_1} \phi_{q''_1} \phi_{q'''_1} \rangle \end{aligned} \quad (232)$$

où les champs d'indices q, q', \dots sont à évaluer au temps t et ceux d'indices q_1, q'_1, \dots au temps t_1 , et l'on s'est arrangé pour avoir $t < t_1$. Parmi les huit ϕ et $\bar{\phi}$ dont le produit figure entre les $\langle \dots \rangle$ dans l'équation (232), ceux dont l'indice se trouve $\in \text{ZI}$ peuvent être sortis de la moyenne. Leur nombre est au maximum de six. Le produit des champs restant doit être moyenné (on dit que ces champs doivent être *contractés*), ce qui donne zéro si la moyenne contient un nombre inégal de ϕ et de $\bar{\phi}$. Les seules possibilités de contribution non nulle sont donc, a priori,

- (i) un ϕ et un $\bar{\phi}$;
- (ii) deux ϕ et deux $\bar{\phi}$;
- (iii) trois ϕ et trois $\bar{\phi}$.

Analysons d'abord le cas (ii). Comme un $\bar{\phi}$ ne peut être contracté qu'avec un ϕ à un instant ultérieur, il faut que ce soient les deux $\bar{\phi}$ à l'instant t et les deux ϕ à l'instant t_1 qui restent dans la moyenne. Le théorème de Wick réduit cette moyenne à une somme de deux termes, dont on voit, après que l'on échange dans l'un d'entre eux les variables d'intégration $\phi_{q''}$ et $\phi_{q'''}$, qu'ils conduisent au même résultat. Explicitement,

$$\begin{aligned} \langle \bar{\phi}_q \bar{\phi}_{q'} \phi_{q''} \phi_{q'''} \bar{\phi}_{q_1} \bar{\phi}_{q'_1} \phi_{q''_1} \phi_{q'''_1} \rangle &= \phi_{q''} \phi_{q'''} \bar{\phi}_{q_1} \bar{\phi}_{q'_1} \langle \bar{\phi}_q \bar{\phi}_{q'} \phi_{q''_1} \phi_{q'''_1} \rangle \\ &= 2 \phi_{q''} \phi_{q'''} \bar{\phi}_{q_1} \bar{\phi}_{q'_1} \langle \bar{\phi}_q \phi_{q''_1} \rangle \langle \bar{\phi}_{q'} \phi_{q'''_1} \rangle \end{aligned} \quad (233)$$

où les moyennes sont explicitement données par (222).

Diagrammes. On associe au terme de couplage $g_2 \bar{\phi} \bar{\phi} \phi \phi$ un vertex à quatre pattes. À chaque vertex est associé un temps t et à chaque patte un vecteur

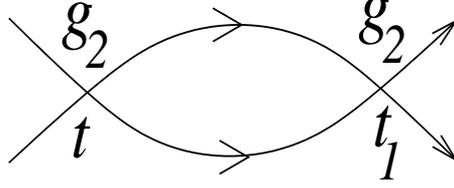


Figure 6: Diagramme correspondant au produit de deux vertex g_2 .

d'onde q . Les deux pattes correspondant aux $\bar{\phi}$ se distingueront par une flèche sortante et seront appelées des “pattes sortantes”, alors que celles sans flèches seront appelées “entrantes”. Une contraction $\langle \bar{\phi}\phi \rangle$ non nulle correspondra à connecter une patte sortante à une patte entrante de telle manière que la flèche va dans le sens du temps croissant. Il est donc clair qu'en suivant des flèches on ne peut pas parcourir de boucle. La moyenne qu'on vient de calculer ci-dessus correspond aux deux contractions symbolisées par le diagramme de la figure 6. Les deux contributions résultant du théorème de Wick correspondent aux deux façons différentes de connecter les deux pattes sortantes aux deux entrantes.

On considère maintenant la possibilité (i) ci-dessus. Elle correspond au diagramme de la figure 1b. En langage de la théorie des champs, ce diagramme n'est pas *une particule irréductible* (1PI). Ici il est éliminé par le raisonnement suivant. On observe que, puisque $b = 1 + \Delta s$ les vecteurs d'onde internes des diagrammes doivent être grands, c'est-à-dire être de module proche de Λ . Or, conservation de vecteur d'onde aux vertex implique alors pour le diagramme 1b que les impulsions des pattes extérieures ne peuvent pas toutes être petites. Ce diagramme ne contribue donc pas directement à la renormalisation de l'action aux plus grandes échelles.

Exercice 52. Analyser le cas (iii). Quel est le diagramme qui correspond à trois contractions ? Conclure encore une fois qu'il est nul.

On en conclut que le diagramme de la figure 1a est le seul qui contribue à $\langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>2} \rangle_{44}$ et on va maintenant déterminer les intégrales qu'il reste à faire.

Dans l'équation (232), on substitue pour la moyenne l'expression (233), puis pour les corrélations de paire leurs expressions explicites données par (222). Ceci introduit un facteur $\delta(q + q_1'')\delta(q' + q_1''')$. Après les intégrations sur q_1'' et q_1''' il vient

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>2} \rangle_{44} &= 2g_2^2 \int_0^T dt \int_{q'', q''', q_1, q_1'} (2\pi)^d \delta^d(q_1 + q_1' + q'' + q''') \\ &\times \left[\int_t^T dt_1 \int_{q, q'} (2\pi)^d \delta^d(q_1 + q_1' - q - q') \exp\left(- (q^2 + q'^2)(t_1 - t)\right) \bar{\phi}_{q_1}(t_1) \bar{\phi}_{q_1'}(t_1) \right] \\ &\times \phi_{q''}(t) \phi_{q'''}(t) \end{aligned} \quad (234)$$

où l'on rappelle que $q, q' \in \mathcal{C}$ et $q'', q''', q_1, q_1' \in \text{ZI}$. L'expression que l'on vient

de trouver ressemble au terme quartique de l'action originale, mais n'a pas tout à fait une forme identique. Cependant, on peut s'y ramener en développant les deux champs $\bar{\phi}_{q_1}(t_1)$ et $\bar{\phi}_{q'_1}(t_1)$ autour de $t_1 = t$ selon

$$\bar{\phi}(t_1) = \bar{\phi}(t) + (t_1 - t) \frac{\partial}{\partial t} \bar{\phi}(t) + \dots \quad (235)$$

On peut alors effectuer l'intégration sur t_1 terme par terme. Après avoir encore intégré sur q' on obtient pour l'expression entre les crochets

$$\left[\dots \right] = \int_q \frac{1}{q^2 + (q_1 + q'_1 - q)^2} \bar{\phi}_{q_1}(t) \bar{\phi}_{q'_1}(t) + \dots \quad (236)$$

On verra un peu plus loin que les termes ... dans cette expression sont négligeables. La raison en est déjà apparente dans un changement d'échelle naïf : ces termes contiennent des dérivées temporelles, qui acquièrent des facteurs b^{-2} supplémentaires. On notera $I(q_1 + q'_1)$ l'intégrale qui multiplie le produit des deux $\bar{\phi}$ dans (236), et rappelle que puisque $q \in \mathcal{C}$ cette variable doit être intégrée sur la coquille $\Lambda/b < |q| < \Lambda$ d'épaisseur $\Lambda \Delta s$. Comme on s'intéresse aux petits vecteurs d'onde, on développe

$$\begin{aligned} I(q_1 + q'_1) &= \int_{\Lambda/b < |q| < \Lambda} \frac{1}{2q^2} [1 + \mathcal{O}((q_1 + q'_1)^2)] \\ &= \frac{1}{2\Lambda^2} \cdot \Delta s \cdot K_d \Lambda^d \\ &= \frac{1}{2} K_d \Lambda^{d-2} \Delta s \end{aligned} \quad (237)$$

où K_d est l'aire de la sphère unité en d dimensions divisée par $(2\pi)^d$. Les termes d'ordre $(q_1 + q'_1)^2$, quand ils sont transformés dans l'espace réel, contiennent des gradients supplémentaires et sont pour cette raison négligeables. On substitue (237) dans (236), puis (236) dans (234). Il vient, après un changement des noms des variables d'intégration,

$$\langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>2} \rangle_{44} = g_2^2 K_d \Lambda^{d-2} \Delta s \int_0^T dt \int_{q, q', q'', q''' \in \text{ZI}} (2\pi)^d \delta^d(q + q' + q'' + q''') \bar{\phi}_q \bar{\phi}_{q'} \phi_{q''} \phi_{q'''} \quad (238)$$

où l'on a explicitement indiqué que q, q', q'', q''' sont intégrés sur la zone intérieure ZI.

Produit d'un S_3 par un S_4 . Il faut considérer les moyennes de $S_3(t)S_4(t_1)$ et de $S_4(t)S_3(t_1)$, où $t < t_1$. La dernière possibilité ne permet pas de construire un diagramme 1PI respectant la règle du temps croissant pour les flèches. Pour la première, la seule contribution vient du diagramme de la figure 7 et contient deux contractions.

Sa contribution à \mathcal{S}_{eff} est calculée exactement de la même manière que celle du diagramme de la figure 1a, avec le résultat

$$\langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>2} \rangle_{34} = g_1 g_2 K_d \Lambda^{d-2} \Delta s \int_0^T dt \int_{q, q'', q'''} \in \text{ZI} (2\pi)^d \delta^d(q + q'' + q''') \bar{\phi}_q \phi_{q''} \phi_{q'''} \quad (239)$$

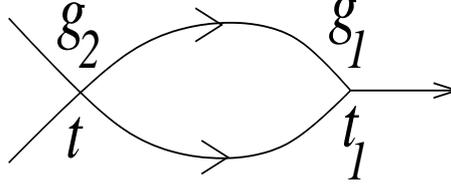


Figure 7: Diagramme correspondant au produit d'un vertex g_2 et un vertex g_1 .

où q, q'', q''' sont intégrés sur la zone intérieure ZI.

Produit de deux S_3 . La règle du temps croissant ne permet qu'une seule contraction, mais le diagramme correspondant n'est pas 1PI.

Exercice 53. Quels sont les diagrammes respectant la règle du temps croissant mais non 1PI dont il fut question ci-dessus ? Exhiber aussi des diagrammes pour ces cas qui sont 1PI mais ne respectent pas la règle du temps croissant.

Exercice 54. Aux ordres supérieurs du développement en cumulants (230) il est nécessaire de calculer les moyennes $\langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>n} \rangle$ pour $n \geq 3$. Exhiber les deux diagrammes qui seuls contribuent à cette moyenne. Quels sont leurs ordres en g_1 et en g_2 ? Montrer que, de plus, ces contributions sont d'ordre Δs^2 ; cette propriété constitue une raison indépendante permettant de les négliger, mais elle est atypique et on n'y fera pas appel.

11.13 Bilan intermédiaire. La partie calculatoire du travail étant terminée, le bilan des opérations, à ce stade, est le suivant. On a remplacé $\mathcal{S} \mapsto \mathcal{S}_{\text{eff}}$ avec

$$\mathcal{S}_{\text{eff}} = \mathcal{S}^< - \frac{1}{2} \langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>2} \rangle_{34} - \frac{1}{2} \langle \mathcal{S}_{\text{int}}^{>2} \rangle_{44} \quad (240)$$

où les deux derniers termes sont explicitement donnés par respectivement (239) et (238). L'action \mathcal{S}_{eff} a la même forme que l'action originale \mathcal{S} à deux différences près :

- les intégrations s'effectuent sur les vecteurs d'onde de modules inférieurs à Λ/b (au lieu de Λ) ;
- les constantes de couplage g_1 et g_2 de \mathcal{S} ont été remplacées selon

$$\begin{aligned} g_1 &\mapsto g_1 - g_1 g_2 K_d \Lambda^{d-2} \Delta s \\ g_2 &\mapsto g_2 - g_2^2 K_d \Lambda^{d-2} \Delta s \end{aligned} \quad (241)$$

11.14 Changement d'échelle des q et de t . Afin de rétablir le domaine d'intégration original on change l'échelle des vecteurs d'onde en posant $\tilde{q} = bq$ où $b = 1 + \Delta s$. On change également l'échelle du temps selon $\tilde{t} = t/b^2$, choix imposé par la condition que le propagateur soit invariant. Les nouveaux champs seront donc

$$\tilde{\phi}_{\tilde{q}}(\tilde{t}) = \phi_q(t) \quad \tilde{\bar{\phi}}_{\tilde{q}}(\tilde{t}) = b^{-d} \bar{\phi}_q(t) \quad (242)$$

Après ce changement d'échelle on supprime les tildes. L'action \mathcal{S}_{eff} devient alors *identique* à l'action originale \mathcal{S} , aux valeurs des deux couplages près. Ceux-ci ont été remplacés par

$$g_i \mapsto g_i(1 - (d-2)\Delta s - g_2 K_d \Lambda^{d-2} \Delta s) + \mathcal{O}(\Delta s^2) \quad (i = 1, 2) \quad (243)$$

Exercice 55. Effectuer ce changement d'échelle et vérifier le résultat énoncé. Vérifier également que si on avait retenu des termes avec des dérivées spatiales ou temporelles supplémentaires, ce changement d'échelle en aurait confirmé la non pertinence.

11.15 Développement en ϵ . Ces nouveaux couplages n'incluent pas d'éventuelles contributions en provenance des ordres supérieurs du développement en cumulants (230). On sait toutefois (voir l'un des exercices précédents) que ces contributions ont toutes au moins soit un facteur g_2^3 soit un facteur $g_1 g_2^2$.

Si on pose $d = 2 - \epsilon$, puis admet que ϵ est petit et que g_2 est de l'ordre ϵ , les termes en Δs dans (243) incluent toutes les contributions d'ordre ϵ . En passant à la limite $\Delta s \rightarrow 0$ on trouve les *équations du flot de renormalisation* à l'ordre ϵ ,

$$\frac{dg_i}{ds} = g_i(\epsilon - K_2 g_2) \quad (i = 1, 2) \quad (244)$$

On avait initialement $g_1 = 2g_2$ et l'on voit que les équations (244) conservent cette propriété. Il suffit donc de considérer l'équation pour $g_2(s)$. Celle-ci possède, pour $\epsilon > 0$, un point fixe instable $g_2 = 0$ et un point fixe stable $g_2 = g_2^* \equiv \epsilon/K_2$. En linéarisant autour du point fixe stable on a

$$\frac{d(g_2 - g_2^*)}{ds} = -\epsilon(g_2 - g_2^*) \quad (245)$$

où le coefficient $-\epsilon$ est la valeur propre de la transformation de renormalisation. La stabilité garantit que $g_2(s) \rightarrow g_2^*$ sous renormalisation.

Comme sous renormalisation g_1 et g_2 deviennent d'ordre ϵ , on est maintenant à même de conclure que les contributions des cumulants supérieurs sont négligeables devant celles retenues. Les équations de renormalisation (244) constituent donc l'ordre le plus bas d'un développement systématique en puissances de ϵ ; elles sont exactes à l'ordre ϵ .

F. Terme initial

11.16 On retourne à la question initiale, posée au paragraphe **11.1**, qui était de savoir quel est l'exposant p qui régit la décroissance de la densité des particules aux grands temps.

Considérons un système dont à l'instant initial $t = 0$ les particules sont distribuées indépendamment avec une densité ρ_0 . Il est d'abord nécessaire de savoir comment le terme initial dans l'action,

$$\mathcal{S}_{\text{in}} = -\rho_0 \int d^d x \bar{\phi}(x, 0) + \int d^d x \bar{\phi}(x, 0) \phi(x, 0) \quad (246)$$

se comporte sous renormalisation. Par simple scaling on trouve que la “constante de couplage” $\rho_0(s)$ du premier terme de \mathcal{S}_{in} obéit à $d\rho_0(s)/ds = d\rho_0(s)$, donc $\rho_0(s) = e^{ds}\rho_0$. Le second terme de \mathcal{S}_{in} est invariant et sans intérêt.

La densité à l'origine, $\langle n_0(t) \rangle = a_0^d \langle \phi(0, t) \rangle$, s'écrit en notation auto-évidente

$$\begin{aligned} \langle n_0(t) \rangle &= \frac{a_0^d \int \phi(0, t) \exp(-\mathcal{S}[0])}{\int \exp(-\mathcal{S}[0])} \\ &= e^{-ds} \frac{a_0^d \int \phi(0, t) \exp(-\mathcal{S}[s])}{\int \exp(-\mathcal{S}[s])} \\ &= e^{-ds} f(g_1(s), g_2(s), e^{ds}\rho_0, e^{-2s}t) \end{aligned} \quad (247)$$

où la seconde ligne est obtenue de la première par renormalisation de $s = 0$ à s , le facteur e^{-ds} provient de la renormalisation de $\phi(0, t)$, et où la dernière ligne définit la fonction f . Comme cette relation est vraie pour tout s , on a le droit de prendre $e^s = t^{1/2}$, si bien que

$$\begin{aligned} \langle n_0(t) \rangle &= t^{-d/2} f(g_1(\tfrac{1}{2} \log t), g_2(\tfrac{1}{2} \log t), \rho_0 t^{d/2}, 1) \\ &\simeq t^{-d/2} f(g_1^*, g_2^*, \rho_0 t^{d/2}, 1) \\ &= t^{-d/2} F^*(\rho_0 t^{d/2}) \quad (t \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (248)$$

Ici l'on a exploité l'existence d'un point fixe attractif (g_1^*, g_2^*) . donc le fait que $g_i(s) \rightarrow g_i^*$ pour $s \rightarrow \infty$; et la dernière ligne de (248) définit la fonction d'échelle F^* , qui dépend des g_i^* .

$F^*(\rho_0 t^{d/2})$ a l'interprétation de la densité à l'instant $t = 1$ d'un système de particules qui avait la densité $\rho(0) = \rho_0 t^{d/2}$ à l'instant initial $t = 0$. Si on admet que cette densité est une constante, indépendante de la densité initiale quand celle-ci tend vers l'infini (ce qui est en conformité avec ce qu'indique l'argument de balayage du paragraphe 11.4 appliqué à l'intervalle de temps $0 \leq t \leq 1$), on peut donc écrire $\lim_{t \rightarrow \infty} F^*(\rho_0 t^{d/2}) = F_0^*$ et l'on a

$$\langle n_0(t) \rangle \sim \frac{F_0^*}{(Dt)^{d/2}} \quad (t \rightarrow \infty) \quad (249)$$

où l'on a réintroduit le coefficient de diffusion D .

Remarques.

– L'exposant $d/2$ a été obtenu ici de façon quasi-triviale, dans la mesure qu'aucun diagramme n'y contribue. Le calcul diagrammatique a servi uniquement à montrer qu'au voisinage de la dimension $d = 2$, il existe des équations de renormalisation ayant un point fixe, ce qui nous a permis ci-dessus de conclure que sous renormalisation la fonction f tend vers une limite F^* bien définie. Le seul exposant non trivial qui est apparu est l'exposant $-\epsilon$ de l'équation (245), qui détermine la stabilité du point fixe.

– On a fait appel dans la présentation ci-dessus à une hypothèse sur l'évolution du système dans un intervalle de temps initial $0 \leq t \leq 1$. Comme l'a montré Lee [Le94], on n'a pas besoin de cette hypothèse, mais il faut alors

faire nettement plus de travail : le calcul de l'amplitude F_0^* nécessite la sommation d'un ensemble infini de diagrammes où la densité initiale ρ_0 intervient à tous les ordres.

Lee montre que l'exposant $d/2$ de l'équation (249) est *exact* pour toute dimension $d < 2$. Il montre aussi que l'amplitude F_0^* est non triviale et que pour $d = 2 - \epsilon$ on a le développement

$$F_0^*(d) = \frac{1}{4\pi\epsilon} + \frac{2 \ln 8\pi - 5}{16\pi} + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (250)$$

– Sur la base de solutions exactes en dimension $d = 1$ [Lu87] on sait par ailleurs que $F_0^*(1) = (8\pi)^{-1/2} = 0.199\dots$. En posant $\epsilon = 1$ dans (250) on obtient $F_0^*(1) = (8\pi)^{-1/2} = 0.109\dots$, ce qui montre que le développement en ϵ n'est pas très précis en $d = 1$.

12 Percolation dirigée

A. Introduction

On considère dans ce chapitre un système de réaction-diffusion qui, contrairement à la réaction $A + A \rightarrow 0$ du chapitre **11**, permet un état stationnaire actif (c'est-à-dire, non vide) ainsi qu'un état stationnaire absorbant (vide). L'intérêt se focalise sur la transition entre ces deux états stationnaires. On commence par considérer des particules d'une unique espèce à pouvant sauter entre les sites voisins d'un réseau à un taux γ et telles que sur chaque site du réseau les réactions suivantes peuvent se produire,



L'essentiel de la compétition se joue entre les deux premières de ces interactions. Seulement quand la première gagne et des particules sont créées en grand nombre, la troisième interaction intervient pour plafonner la densité des particules.

Si le réseau est d -dimensionnel de sites i , on peut imaginer qu'au cours du temps t les particules tracent des trajectoires dans un espace à $d+1$ dimensions de sites (i, t) . La question de savoir s'il va y avoir un état stationnaire actif peut être reformulée comme celle de savoir s'il y a un chemin (trajectoire) qui relie le plan initial (pour $t = 0$) à un plan final (pour $t = T$), à la limite $T \rightarrow \infty$; ou encore de savoir si l'espace $(d + 1)$ -dimensionnel admet une percolation *dirigée*, ce dernier adjectif exprimant par rapport à la percolation ordinaire la particularité que les trajectoires ne peuvent être parcourues que dans le sens de t croissant.

Littérature : Voir, par exemple, l'article de revue de Hinrichsen [HH00], <http://xxx.uni-augsburg.de/abs/cond-mat/0001070>. On y trouve aussi de nombreuses références à des travaux antérieurs à 2000.

B. L'action

Par les méthodes du chapitre **8** on trouve facilement l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}$ régissant la diffusion des particules A , ainsi que l'ensemble de leurs réactions (251). Par les méthodes du chapitre **9** on passe ensuite à l'action \mathcal{S} correspondante, qui s'avère être donnée par

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}] = \int dt \int d^d x & \left[\bar{\phi}(\partial_t + \kappa_{10} - \kappa_{12} - \Delta)\phi \right. \\ & \left. + \kappa_{20}\bar{\phi}\phi^2 - \kappa_{12}\bar{\phi}^2\phi + \frac{1}{2}\kappa_{20}\bar{\phi}^2\phi^2 \right] \end{aligned} \tag{252}$$

où toutes les notations sont analogues à celles déjà utilisées. Cette action \mathcal{S} représente *exactement* l'équation maîtresse définie implicitement dans l'introduction.

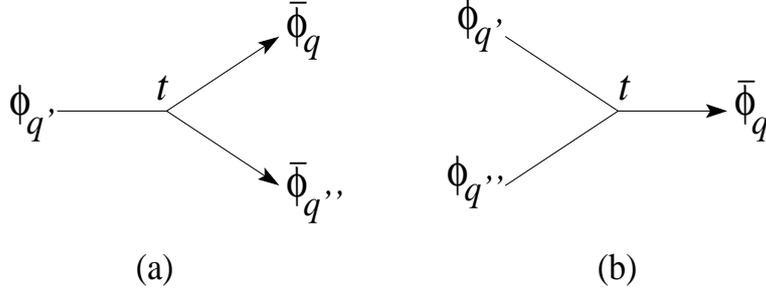


Figure 8: Les deux vertex de l'action de la percolation.

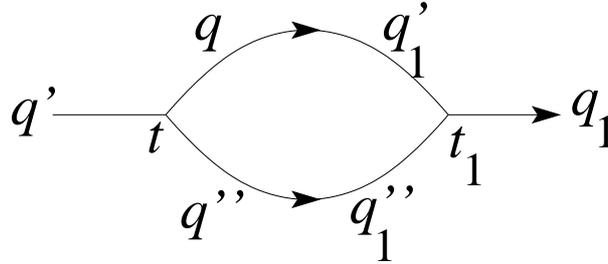


Figure 9: La contribution à la renormalisation du propagateur. Au lieu des champs ϕ et $\bar{\phi}$, seulement leurs indices ont été indiqués.

Moyennant un changement de variables $\phi \mapsto \lambda\phi$ et $\bar{\phi} \mapsto \bar{\lambda}\bar{\phi}$ on peut modifier les coefficients des termes cubiques dans (252) tel qu'ils prennent une valeur commune $\bar{\lambda}\lambda^2\kappa_{20} = \bar{\lambda}^2\lambda\kappa_{12} \equiv g$. À ce stade on supprime le terme quartique, dont on pourra démontrer *a posteriori* qu'au voisinage du point critique il ne joue pas de rôle pertinent. On posera encore $\mu = \kappa_{10} - \kappa_{12}$ et choisira les unités telles que $D = 1$. L'expression (252) devient alors

$$\mathcal{S}[\phi, \bar{\phi}] = \int dt \int d^d x [\bar{\phi}(\partial_t + \mu - \Delta)\phi + g\bar{\phi}\phi(\phi - \bar{\phi})] \quad (253)$$

expression qui s'appelle l'*action de la percolation dirigée*. On note qu'elle est invariante par l'échange $\phi \leftrightarrow -\bar{\phi}$. Elle a un point critique pour $\mu = 0$. On a vu dans l'exercice 50 que sa dimension critique est $d_c = 4$.

C. Renormalisation : les diagrammes

Les termes d'interaction dans l'action (253) peuvent être représentée par les deux diagrammes à trois pattes de la figure 8, dont l'expression mathématique comporte un facteur $\delta^d(q + q' + q'')$. Contrairement au cas de la réaction $A + A \rightarrow 0$, le propagateur est maintenant renormalisé. Comme le montre la figure 9, le diagramme qui en est responsable s'obtient à partir des deux diagrammes (a) et (b) de la figure 8, étant entendu que le temps t de (a) doit précéder le temps t_1 de (b). Ce diagramme comporte des intégrations sur les quatre vecteurs d'onde internes q, q_1', q'' et q_1'' . L'intégrand contient le produit

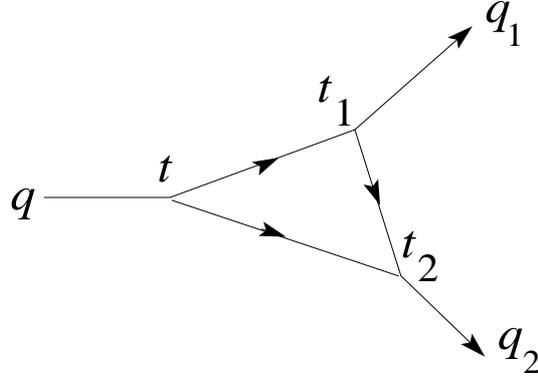


Figure 10: Le diagramme renormalisant le vertex (a). Il est obtenu à partir de deux vertex de type (a) et un de type (b).

de quatre fonctions delta : deux en provenance des vertex comme mentionné ci-dessus, et deux autres en provenance des deux contractions, à savoir $\delta^d(q + q'_1)$ et $\delta^d(q'' + q''_1)$. L'une de ces fonctions delta peut s'écrire $\delta^d(q' + q_1)$ et reste hors de l'intégrale. On note encore que les contributions renormalisées aux termes en ∂_t et en Δ dans le propagateur ne sont pas nécessairement égales.

La figure 10 montre le diagramme qui renormalise le vertex (a), obtenu à partir de trois vertex. Les temps doivent être ordonnés selon $t < t_1 < t_2$. Un diagramme analogue renormalise le vertex (b). Dans ces diagrammes on intègre sur six vecteurs d'onde internes avec un produit de six fonctions delta, trois en provenance des vertex et trois autres des contractions. L'une de ces fonctions delta peut s'écrire $\delta^d(q + q_1 + q_2)$ et reste hors de l'intégrale.

D. Apparition des exposants η et z

Après le calcul des diagrammes, mais avant le changement d'échelle, on aura une expression effective pour l'action

$$\mathcal{S}_{\text{eff}} = \int dt \int d^d x \left[\bar{\phi} \partial_t \phi \overbrace{\{1 + \Delta s(\dots)\}}^{b^\eta} - \bar{\phi} \Delta \phi \overbrace{\{1 + \Delta s(\dots)\}}^{b^{\eta-z+2}} + \dots \right] \quad (254)$$

où les derniers points indiquent les termes d'ordre supérieur à deux. L'expression (254) se situe au même plan que l'équation (240) [avec (238) et (239)] dans le cas du chapitre précédent. Ici les deux expressions $\Delta s(\dots)$ n'ont pas été explicitées ; elles sont le résultat du calcul des diagrammes. Toutefois, comme elles sont proches de 1 et que $b = 1 + \Delta s$, on pourra appeler la première de ces expressions b^η , ce qui définit η , et la deuxième $b^{\eta-z+2}$, ce qui définit z . En l'absence de renormalisation du propagateur on a $\eta = 0$ et $z = 2$.

Suivant la même ligne de raisonnement qu'auparavant, on veut appliquer aux variables x , t , ϕ et $\bar{\phi}$ de ce problème des changements d'échelle choisis tels que les deux premiers termes de \mathcal{S}_{eff} , ceux en ∂_t et en Δ , restent invariants. Il est facile à vérifier que le changement d'échelle opéré au chapitre précédent

ne satisfait pas ici. En considérant d'abord le terme en ∂_t on observe qu'il est insensible au facteur d'échelle b appliqué à t et qu'il reste invariant si on choisit

$$\tilde{x} = b^{-1}x \quad (255)$$

ainsi que

$$\tilde{\phi}(\tilde{x}, \tilde{t}) = b^{\frac{d+\eta}{2}} \phi(x, t) \quad \tilde{\bar{\phi}}(\tilde{x}, \tilde{t}) = b^{\frac{d+\eta}{2}} \bar{\phi}(x, t) \quad (256)$$

En considérant ensuite le terme en Δ on trouve que lui aussi reste invariant pourvu qu'on change l'échelle de t suivant

$$\tilde{t} = b^{-z}t \quad (257)$$

On a donc démontré comment deux nouveaux exposants interviennent dans cette renormalisation. L'exposant z est caractéristique pour les systèmes avec une dépendance en temps.

Remarque 1. À propos de (256), il eût suffi en fait d'assurer que $\tilde{\phi}\tilde{\bar{\phi}} = b^{d+\eta}\phi\bar{\phi}$. Cependant, au vu de l'invariance de \mathcal{S} par échange $\phi \leftrightarrow -\bar{\phi}$, on souhaite ici changer les échelles de ϕ et de $\bar{\phi}$ de la même manière, ce qui explique la différence entre (256) et (211). Comme avant, cette procédure se trouvera justifiée si elle nous permet de construire une transformation de renormalisation qui possède un point fixe.

Remarque 2. La renormalisation du propagateur conduit à $\eta \neq 0$ et $z \neq 2$. Les relations (255) et (257) montrent que pour $z \neq 2$ la relation familière entre temps et distance de diffusion est modifiée : en un temps $\sim t$ il y aura diffusion sur une échelle spatiale $x \sim t^{1/z}$.

Remarque 3. Le terme $\mu\phi\bar{\phi}$ dans (253), dont on n'a pas parlé ci-dessus, renormalisera selon $\tilde{\mu} = b^{1/\nu}\mu$, ce qui définit l'exposant ν . Ce terme est donc toujours pertinent : il éloigne l'action de son point critique à moins que sa valeur initiale soit nulle. En l'absence de contributions renormalisées on aurait $\nu = \frac{1}{2}$. Évidemment, μ est analogue à la distance à la température critique, habituellement notée $T - T_c$, dans les systèmes à l'équilibre thermodynamique.

E. Relations faisant intervenir η et z

Soit un système décrit par une action $\mathcal{S}[\psi, \bar{\psi}]$ et pour lequel $\Delta\mu \equiv \mu - \mu_c$ représente la distance au point critique. On peut s'intéresser au paramètre d'ordre en fonction de $\Delta\mu$, dont on suppose qu'à l'approche du point critique il tend vers zéro selon une loi de puissance,

$$\langle \psi \rangle_{\Delta\mu} = \Psi(\Delta\mu) \sim \Delta\mu^\beta, \quad \Delta\mu \rightarrow 0 \quad (258)$$

Ici Ψ est une fonction inconnue dont on admettra seulement qu'elle se comporte en $\Psi(x) \sim x^\beta$ pour $x \rightarrow 0$. Changeons l'échelle spatiale par un facteur b , si bien que

$$\psi \mapsto b^{-\frac{d+\eta}{2}} \tilde{\psi}, \quad \Delta\mu \mapsto b^{-\frac{1}{\nu}} \Delta\tilde{\mu} \quad (259)$$

d'où

$$\langle \psi \rangle_{\Delta\mu} = b^{-\frac{d+\eta}{2}} \langle \tilde{\psi} \rangle_{\Delta\tilde{\mu}} \quad (260)$$

Faisant appel maintenant à (258) et au développement admis pour Ψ , on trouve que $\Delta\mu^\beta = b^{-\frac{d+\eta}{2} + \frac{\beta}{\nu}} \Delta\mu^\beta$, ce qui n'est possible que si la relation

$$\beta = \frac{(d + \eta)\nu}{2} \quad (261)$$

entre les exposants est satisfaite.

Soit $G(x) = \langle \psi(0)\psi(x) \rangle_c$ la fonction de corrélation spatiale au point critique. Puisqu'on reste critique par changement d'échelle $x = b\tilde{x}$, on a

$$\langle \psi(0)\psi(x) \rangle_c = b^{-(d+\eta)} \langle \tilde{\psi}(0)\tilde{\psi}(\tilde{x}) \rangle_c \quad (262)$$

où encore

$$G(x) = b^{-(d+\eta)} G(b^{-1}x) \quad (263)$$

dont la solution est

$$G(x) \sim x^{-(d+\eta)} \quad (264)$$

On a donc trouvé l'exposant qui décrit la décroissance de la corrélation critique.

Exercice 56. Trouver les relations analogues bien connues de (261) et de (264) pour un système à l'équilibre.

F. Classe d'universalité

On donne ici sans démonstration une liste d'exposants critiques pour la percolation dirigée, calculés jusqu'à l'ordre ϵ ,

$$\begin{aligned} \beta &= 1 - \frac{\epsilon}{6} & \eta &= -\frac{\epsilon}{6} \\ \nu &= \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{6} & z &= 2 - \frac{\epsilon}{12} \end{aligned}$$

Pour $\epsilon = 0$ on récupère les valeurs de champ moyen de ces exposants. À noter que pour les systèmes dynamiques on a $\beta = 1$ en champ moyen.

Cet ensemble d'exposants définit une classe d'universalité de systèmes physiques, souvent appelée la classe des systèmes DP (Directed Percolation). Pour les systèmes à l'équilibre, la classe d'universalité du modèle d'Ising est probablement celle la plus étudiée. Elle est réalisée par bon nombre de phénomènes physiques, dont la transition vapeur-liquide. Pour les systèmes hors d'équilibre c'est la classe DP qui est la plus étudiée. Cependant, à ce jour il y a encore peu de confirmation expérimentale de son importance pour la physique.

13 La réaction $A + B \rightarrow 0$

13.1 Introduction.

a. *La réaction.* On étudiera dans ce chapitre la réaction à deux espèces



Si les densités initiales $\rho_A(0)$ et $\rho_B(0)$ des deux espèces sont égales, l'état final sera l'état vide (ou : état absorbant). Si $\rho_A(0) > \rho_B(0)$, la conservation de la différence $\rho_A(t) - \rho_B(t)$ implique que $\rho_B(\infty) = 0$ et $\rho_A(\infty) = \rho_A(0) - \rho_B(0)$. Dans ce dernier cas, l'état final est constitué de particules d'une seule espèce sans interaction.

b. *Historical.* **1976 Doi**

Path integral formulation of reaction–diffusion processes.

1978 Ovchinnikov and Zeldovich

Considers $A + B \rightarrow 0$. Point out the importance of initial fluctuations. Finds the $t^{-3/4}$ law in $d = 3$ (and an erroneous exponential decay with $t^{3/5}$).

1983 Toussaint and Wilczek

Considers $A + B \rightarrow 0$. Do not refer to Ovchinnikov and Zeldovich. Point out that there is a difference from mean field due to initial fluctuations. Finds the law $\rho(t) \sim t^{-d/4}$. Knows that species segregate. Also knows the exact decay laws for $A + A \rightarrow 0$.

1986 Ben-Avraham and Redner

Introduce the MAM (they credit Kang). Find $\alpha(q) = d(2q - 3)/[4(q - 1)]$ and $d_{\text{seg}} = 4(q - 1)/(2q - 3)$. Analysis of the mean field equations including fluctuations.

1988 Gálfi and Rácz

Scaling laws from mean field theory for reaction fronts in $A + B \rightarrow 0$. Followed by other authors studying fronts in more complicated reactions, in the presence of external sources, imposed fixed external currents, long range hops, etc.

1992 Leyvraz and Redner

Spatial structure in $A + B \rightarrow 0$.

1995 Lee and Cardy

Field theory for $A + B \rightarrow 0$. Corrected after a remark by Oerding (1996) in a 1997 paper.

1995 Howard and Cardy

$A + B \rightarrow 0$ with fixed currents.

2004 Hilhorst, Deloubrière, Washenberger, and Täuber

Find $d_{\text{seg}} = 4/(q - 1)$. Full article on SMAM. Nonlinear equations with arbitrary initial conditions.

13.2 Équations du champ moyen.

a. Les équations du champ moyen pour la réaction (265) sont

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} &= D\Delta\rho_A - \kappa\rho_A\rho_B \\ \frac{\partial \rho_B}{\partial t} &= D\Delta\rho_B - \kappa\rho_A\rho_B \end{aligned} \quad (266)$$

où l'on a posé $\kappa = ka_0^d$.

b. On peut résoudre ces équations dans le cas particulier de densités uniformes dans l'espace. Pour la condition initiale $\rho_A(x, 0) = \rho_{A0}$ et $\rho_B(x, 0) = \rho_{B0}$ on a, dans la limite $t \rightarrow \infty$,

$$\rho_A(t) = \rho_B(t) \sim \begin{cases} 1/\kappa t & \Delta\rho_0 = 0 \\ \exp(-\kappa|\Delta\rho|t) & \Delta\rho_0 \neq 0 \end{cases} \quad (267)$$

Le temps de relaxation vers l'état d'équilibre final est donc $\tau = 1/\kappa|\Delta\rho_0|$. Il diverge quand la différence des densités initiales s'annule.

13.3 Action et dimension critique. En procédant comme aux chapitres précédents on introduit deux espèces d'opérateur de création et d'annihilation, a_i, a_i^\dagger et b_i, b_i^\dagger , puis deux paires de champs classiques α, α^* et β, β^* fonctions de x et de t . L'action $\mathcal{S}[\alpha, \bar{\alpha}, \beta, \bar{\beta}]$ s'écrit ensuite facilement. Une analyse dimensionnelle montre que les termes de réaction dans \mathcal{S} sont pertinents pour $d = d_c$, avec $d_c = 2$ comme au cas de la réaction $A + A \rightarrow 0$. Voir les exercices 46 et 49. On verra ci-dessous, cependant, qu'une analyse un peu plus poussée révélera un nouveau phénomène, aussi bien pour $d > d_c$ que pour $d < d_c$, qui n'était pas présent dans le cas de $A + A \rightarrow 0$.

13.4 Approche heuristique. De nombreux travaux ont été consacrés à cette réaction. On adoptera ci-dessous une approche heuristique. Les résultats auxquels on arrivera sont confirmés par des calculs de renormalisation et/ou des approches mathématiquement exactes.

13.5 Apparition de domaines. On considère la réaction $A + B \rightarrow 0$ en dimension d'espace d . Il est commode d'imaginer les particules sur un réseau de maille a_0 . Elles sautent indépendamment les unes des autres à un taux γ entre les sites voisins du réseau. À la limite d'un espace continu (qui ici pas plus que précédemment n'est essentielle) elles ont donc un coefficient de diffusion $D = \gamma a_0^2$. Il est commode, également, d'imaginer que toute paire d'une A et une B qui se rencontrent, s'annihilent immédiatement. Ceci correspond à poser $k = \infty$; on admet généralement (mais il n'y a pas de preuve) que ce choix ne change pas les conclusions qui vont suivre.

On se place maintenant dans le cas où les particules sont distribuées initialement selon une loi uniforme avec des densités $\rho_{A0} = \rho_{B0} = \frac{1}{2}\rho_0$. La question est de savoir comment les densités ρ_A et ρ_B vont évoluer avec le temps, en particulier dans la limite des temps asymptotiquement grands.

Divisons mentalement l'espace en blocs (= volumes hypercubiques) de taille L^d , où L est suffisamment grand pour qu'au temps initial $t = 0$ chaque bloc contienne un nombre $\gg 1$ de particules. Le choix de L sera fait plus tard. Considérons un bloc spécifique, par exemple celui contenant l'origine. Initialement, les nombres N_{A0} des A et N_{B0} des B dans ce bloc sont des variables aléatoires gaussiennes que l'on peut écrire comme

$$\begin{aligned} N_{A0} &= \frac{1}{2}\rho_0 L^d \pm \sqrt{\frac{1}{2}\rho_0 L^d} \\ N_{B0} &= \frac{1}{2}\rho_0 L^d \pm \sqrt{\frac{1}{2}\rho_0 L^d} \end{aligned} \quad (268)$$

où le terme en \pm indique l'écart type. La différence de ces deux nombres,

$$\Delta N \equiv N_A - N_B = \pm \sqrt{\rho_0 L^d} \quad (269)$$

est un nombre aléatoire qui est (quasiment) conservé à l'intérieur du bloc en question tant que celui-ci n'aura pas échangé trop de particules avec ses blocs voisins. Fixons maintenant un temps t . Au temps t , les particules se seront déplacées typiquement sur une distance $L_t \sim a_0(\gamma t)^{\frac{1}{2}}$. Choisissons donc $L = L_t$.

Au temps t les particules à l'intérieur de chaque bloc se seront bien mélangées, mais il n'y aura pas eu beaucoup d'interaction entre blocs voisins.

Si les particules à l'intérieur de ce bloc se rencontrent et s'annihilent au maximum, leur nombre restant à l'instant t ne peut pas être plus petit que $|\Delta N|$ de l'équation (269), pris pour $L = L_t$, qui est de l'ordre de $\langle \Delta N^2 \rangle^{\frac{1}{2}} = (\rho_0 L^d)^{\frac{1}{2}}$. Ceci conduit à

$$\rho(t) \geq \frac{(\rho_0 L_t^d)^{\frac{1}{2}}}{L_t^d} = \left(\frac{\rho_0}{a_0} \right)^{\frac{1}{2}} (\gamma t)^{-d/4} \quad (270)$$

On compare maintenant (270) au résultat (267) du champ moyen. Il s'ensuit immédiatement que la théorie du champ moyen telle que présentée au paragraphe 13.2 ne peut pas être valable en dimension $d < 4$.

L'annihilation prévue par cette théorie est freinée par la disparition, à l'intérieur d'un domaine de taille linéaire L_t (d'un "bloc"), de l'une des deux espèces, A ou B , qui y était initialement minoritaire à cause de fluctuations.

Par conséquent, il se forme des domaines riches en A et d'autres domaines riches en B , et la réaction $A + B \rightarrow 0$ ne peut se produire qu'aux interfaces de ces régions. On a donc trouvé qu'en-dessous de la dimension 4 il y a ségrégation des espèces : on écrira $d_{\text{seg}} = 4$. Ce phénomène s'accompagne d'un ralentissement de l'annihilation par rapport à la théorie du champ moyen.

13.6 Dimension de ségrégation.

On peut dire qu'en dessous de $d = d_{\text{seg}}$ les conditions initiales deviennent "pertinentes". Toutefois, pour $d_c < d < d_{\text{seg}}$ il n'est pas nécessaire de renormaliser le taux de réaction κ . Dans cet intervalle de dimensions, les équations du champ moyen (266) devraient donner le comportement correct en $t^{-d/4}$ si on les résout avec la condition initiale $\rho_A(x, t) = \rho_{A0}(x)$ et $\rho_B(x, t) = \rho_{B0}(x)$ où ρ_{A0} et ρ_{B0} sont des fonctions aléatoires correspondant à une répartition uniforme et indépendante des particules.

Pour $d < d_c$ la théorie de la renormalisation pour ce système n'est encore pas bien établie. Tout indique que la relation $\rho(t) \sim t^{-d/4}$ reste valable pour $d < d_c$. On peut donc résumer que pour $A + B \rightarrow 0$ avec initialement $\rho_{A0} = \rho_{B0} = \frac{1}{2}\rho_0$ la décroissance asymptotique de la densité est donnée par

$$\rho(t) \sim t^{-d/4}, \quad t \rightarrow \infty, \quad d < 4 \quad (271)$$

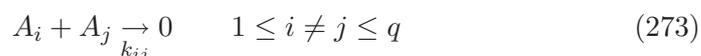
13.7 Condition initiale $\rho_{A0} \neq \rho_{B0}$.

13.8 *Le cas particulier de la dimension $d = 1$.* En dimension $d = 1$ on peut pousser l'analyse heuristique un peu plus loin [LR92].

En élevant la différence de ces deux équations au carré on trouve

$$\langle (N_A - N_B)^2 \rangle^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\rho_0 L^d} \quad (272)$$

13.9 *Un processus d'annihilation à q espèces.* Voir Hilhorst *et al.* [Hi04a, Hi04b] On peut généraliser l'équation (265) à un système à n espèces A_1, \dots, A_n subissant les réactions



a. *Tous les k_{ij} égaux.* Le cas particulier avec $k_{ij} = k$ a été d'abord considéré par Ben-Avraham et Redner [BAR86] en 1986. Même s'il n'y a pas d'applications connues de ce système multi-espèce, son étude revêt un intérêt théorique certain. Deux cas particuliers sont déjà connus :

(i) $q = 2$ donne la réaction $A + B \rightarrow 0$

(ii) pour $q = \infty$ deux particules qui se rencontrent appartiennent avec une probabilité 1 à des espèces différentes et peuvent donc s'annihiler ; ce qui fait que ce cas limite correspond à la réaction $A + A \rightarrow 0$.

$$\rho(t) \sim t^{-p}, \quad p > 0 \quad (274)$$

b. *Les k_{ij} pas tous égaux.*

14 Réseaux de neurones

Voir D. Amit, *Modeling Brain Function*, Cambridge UP, 1989.

14.1 La modélisation du cerveau

- cerveau : $N = 10^{10}$ à 10^{11} neurones
- chacun connecté à $\sim 10^4$ autres neurones par des *axones* et des *synapses*
- à travers une connection un neurone i peut faire parvenir un signal électrique à un neurone j (ou à son arbre dendritique) ; la connection est caractérisée par une *efficacité synaptique* J_{ji}
- les connections sont non symétriques
- on fait une correspondance entre le neurone i et une variable binaire $s_i = \pm 1$, tel que
 - pour $s_i = 1$ le neurone i est actif (anglais : *firing*), c'est-à-dire il envoie un signal électrique ; et
 - pour $s_i = -1$ le neurone i est au repos
- le neurone j intègre les signaux qui arrivent dans sa partie centrale (le *soma*) pour former un potentiel local h_j ,

$$h_j = \sum_i J_{ji} s_i, \quad (275)$$

sachant qu'une efficacité synaptique peut être excitatoire ($J_{ij} > 0$) ou inhibitoire ($J_{ij} < 0$) [voir Note 1 en fin de chapitre]

- si le potentiel h_j dépasse un certain seuil θ_j à un instant t , le neurone i enverra un signal à l'instant $t + 1$
- délai type entre t et $t + 1$: de quelques ms à quelques dizaines de ms (la variabilité est importante)
- signal envoyé : quelques dizaines de mV au départ, mais de l'ordre de 1 mV à l'arrivée dans le soma du neurone receveur
- seuils θ_j : quelques dizaines de mV

La discussion ci-dessus contient beaucoup de simplifications. Même si elle est globalement applicable à tous les neurones, il existe de nombreux types de neurones différents, chacun avec ses propres spécificités.

14.2 Évolution temporelle

On a tous les éléments en main pour écrire un système d'équations d'évolution pour les états des neurones. On discrétisera le temps $t = 0, 1, 2, \dots$ et écrira $s_i(t), h_i(t)$, etc. La dynamique décrite ci-dessus conduit à la règle d'actualisation

$$s_j(t + 1) = \operatorname{sgn} \left(\underbrace{\sum_i J_{ji} s_i(t)}_{h_j(t)} - \theta_j \right), \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (276)$$

Ce sont les équations du mouvement pour un réseau de neurones formels. Elles sont déterministes. Pour un état initial $s(0) \equiv (s_1(0), s_2(0), \dots, s_N(0))$ donné, elles peuvent être résolues directement par ordinateur. On peut espérer qu'elles ont une pertinence pour

- (i) le cerveau
- (ii) l'informatique, l'intelligence artificielle, les sciences cognitives, ...

14.3 Simplifications

Afin de pouvoir procéder à une analyse théorique de ces équations, on apporte encore les simplifications suivantes.

- (a) Tous les neurones sont connectés entre eux : $J_{ij} \neq 0 \forall i, j$ [voir Note 2 en fin de chapitre].
- (b) Symétrie des couplages, $J_{ij} = J_{ji}$.
- (c) Actualisation asynchrone : on applique la règle d'actualisation à des spins un par un dans ordre aléatoire.

Avec ces modifications on parle du *modèle de Hopfield* (1982).

On observe maintenant que la règle d'actualisation est aussi celle qu'on adopterait dans une simulation Monte Carlo à température $T = 0$ d'un verre de spin de type Sherrington–Kirkpatrick ayant pour hamiltonien

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j + \sum \theta_j s_j. \quad (277)$$

[Ici $-\theta_j$ a l'interprétation d'un champ magnétique aléatoire.] Cette observation nous conduit à généraliser ce modèle à des températures $T = 1/\beta$ non nulles. L'équation (276) est alors remplacée par une règle d'actualisation qui devient *probabiliste*,

$$s_j(t+1) = \begin{cases} 1 & \text{avec la probabilité } p_j, \\ -1 & 1 - p_j, \end{cases} \quad (278a)$$

où

$$p_j = \frac{1}{1 + \exp[-2\beta(h_j(t) - \theta_j(t))]}, \quad (278b)$$

cette dernière expression provenant de la condition de bilan détaillé. Ici T , bien sûr, n'est pas la température physique du cerveau mais un paramètre qui contrôle l'importance du bruit aléatoire dans son fonctionnement. Dans la suite on posera $\theta_j = 0$; il serait possible mais un peu plus encombrant de garder ces variables.

On va étudier ce modèle de Hopfield : non pas sa thermodynamique (qui est celle du modèle SK) mais son comportement sous les règles dynamiques (276) ou (278). On va s'intéresser en particulier aux états *stationnaires* $s^* \equiv (s_1^*, s_2^*, \dots, s_N^*)$, en admettant que ceux-ci sont des attracteurs sous la dynamique, soit de façon exacte en cas de (276), soit à des fluctuations près dans le cas de (278).

Or, sachant que le modèle SK possède un très grand nombre de phases pour $T < T_c$, on s'attend également à un très grand nombre d'états stationnaires

(avec peut-être une vague correspondance entre les deux). L'espace des phases des états $s = (s_1, \dots, s_N)$ sera réparti en autant de bassins d'attraction qu'il y aura d'attracteurs. On adopte maintenant l'interprétation suivante.

- Chaque état stationnaire s^* est une image mentale interne au cerveau.
- Un état initial $s(0)$ est un état imprimé sur le cerveau, soit par un signal sensoriel venu de l'extérieur, soit par un processus interne).
- Un état initial est une image imparfaite (ou inconsciente, ou...) de l'attracteur du bassin où il se trouve.
- Le passage de l'état initial à l'état stationnaire est le processus effectué par le cerveau afin d'arriver à reconnaître l'état imprimé.

Remarques.

1. Les s^* sont appelés aussi des *motifs* (anglais : *patterns*) stockés par le cerveau. On dit aussi qu'ils sont *mémorisés*. Nous ne connaissons pas le codage qui relie le monde extérieur aux motifs dans le cerveau, mais admettons qu'il y en a. [Et c'est sans parler du codage d'idées abstraites, voire de sentiments.]

2. Dans le cas des équations (278) l'attracteur s^* est remplacé par une distribution de probabilité autour de s^* ; pour mériter le nom d'attracteur, cette distribution doit être suffisamment étroite.

La propriété importante à noter est que le passage de l'état initial à l'état attracteur se fait non pas sous l'action d'un programme chargé dans un quelconque CPU, mais que le programme incorporé dans les propriétés physiques J_{ij} du système lui-même.

14.4 La règle de Hebb

L'une des questions considérées comme un défi théorique est de savoir combien d'attracteurs un modèle comme celui-ci peut avoir. Afin de pouvoir faire du progrès sur cette question, il faut préciser davantage le modèle. À titre d'exemple, soit d'abord

$$s^* = \xi \equiv (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \quad (279)$$

un motif qu'on souhaite stocker dans le système. On y arrive facilement si l'on choisit les couplages J_{ij} comme

$$J_{ij} = \text{cte} \times \xi_i \xi_j. \quad (280)$$

Exercice. Montrer la stabilité de (279) dans le modèle de Hopfield avec la dynamique (276) [et pour $\theta_j = 0$].

Soit maintenant un jeu de p motifs, étiqueté par un indice supérieur μ ,

$$\xi^\mu = (\xi_1^\mu, \xi_2^\mu, \dots, \xi_N^\mu), \quad \mu = 1, 2, \dots, p, \quad (281)$$

que l'on souhaite tous stocker. En généralisant (280) on essaie d'y arriver en choisissant

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu. \quad (282)$$

Ce choix s'appelle la *règle de Hebb*. Le préfacteur $1/N$ est habituel et comode, mais pas essentiel. Notez que sauf accident tous les J_{ij} sont non nuls.

Autres règles. Les J_{ij} donnés par la règle de Hebb ne sont pas les seuls possibles, ni forcément les mieux adaptés pour tous les jeux de ξ^1, \dots, ξ^p . On appelle *apprentissage* tout algorithme numérique visant à trouver, le plus souvent par un processus itératif, les J_{ij} optimaux (selon un critère à définir) pour un jeu de ξ^μ donné.

Le choix des ξ^μ . Finalement, à défaut d'une connaissance spécifique sur les ξ_i^μ , nous les choisirons ci-dessous indépendants les uns des autres et aléatoirement égaux à ± 1 avec probabilités $\frac{1}{2}$.

Les considérations qui vont suivre s'appliqueront aux règles d'actualisation (276) ou (278) avec $\theta_j = 0$, avec les simplifications (a),(b),(c), avec des J_{ij} donnés par la règle de Hebb et des ξ^μ aléatoires et indépendants. Avec toutes ces spécifications on a un modèle au sein duquel on peut commencer à répondre à des questions précises.

14.5 Les motifs ξ^μ sont-ils stables ?

Il est utile, au préalable, de remarquer que les motifs sélectionnés sont orthonormaux à une fluctuation d'ordre $1/\sqrt{N}$ près,

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i^\mu \xi_i^{\mu'} = \begin{cases} 1 & \mu = \mu', \\ c_{\mu\mu'} N^{-1/2} & \mu \neq \mu', \end{cases} \quad (283)$$

où $c_{\mu\mu'}$ est un coefficient aléatoire d'ordre 1 quand $N \rightarrow \infty$.

Supposons maintenant qu'à un instant t le système soit dans l'état $s(t) = \xi^\nu$, donc $s_i(t) = \xi_i^\nu$ pour $i = 1, 2, \dots, N$. On calcule l'état $s(t+1)$ produit par la dynamique (276). On trouve d'abord

$$\begin{aligned} h_i(t) &= \sum_j J_{ij} \xi_j^\nu \\ &= \underbrace{\sum_j \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mu=1 \\ (\neq \nu)}}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \xi_j^\nu}_{\rightarrow 1} + \sum_j \frac{1}{N} \xi_i^\nu \underbrace{\xi_j^\nu \xi_j^\nu}_{=1} \\ &= \xi_i^\nu + \frac{1}{\sqrt{N}} \underbrace{\sum_{\substack{\mu=1 \\ (\neq \nu)}}^p c_{\mu\nu} \xi_i^\mu}_{\sim \sqrt{p-1} \text{ pour } p \gg 1} \end{aligned} \quad (284)$$

d'où

$$h_i(t) = \xi_i^\nu + \mathcal{O}\left(\sqrt{\frac{p-1}{N}}\right). \quad (285)$$

On voit donc que si $N \gg p$,

$$s_i(t+1) = \text{sgn } h_i(t) = \text{sgn } \xi_i^\nu = \xi_i^\nu = s_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (286)$$

c'est-à-dire que pour N suffisamment grand on peut stocker (=mémoriser) un nombre p arbitraire de motifs. *Note* : si ξ_i^μ est un motif stocké, $-\xi_i^\mu$ l'est aussi.

Comparaison avec les verres de spin. Les motifs ξ^μ sont orthonormaux, choisis à l'avance, et les J_{ij} ont été construits en fonction de l'exigence que ces ξ^μ soient stockés. Pour les verres de spin, à l'inverse, on donne les J_{ij} et l'on doit trouver les "phases" α caractérisées par $\langle s_i \rangle^\alpha$ (on avait aussi appelé ces grandeurs μ_i^α ; elles jouent le rôle des ξ_i^μ de ce chapitre). L'ensemble de ces phases a une structure avec une distribution non triviale des recouvrements $q^{\alpha\beta} = N^{-1} \sum_{i=1}^N \langle s_i \rangle^\alpha \langle s_i \rangle^\beta$.

14.6 Y a-t-il d'autres motifs stables ?

Réponse : oui. Ce sont des états fantôme (anglais : *spurious states*). Voir le livre d'Amit. Voici un exemple d'état fantôme. On se place à $T = 0$, ce qui est le plus commode. Soient ξ^1, ξ^2 et ξ^3 trois motifs arbitraires parmi les p motifs appris. Construisons l'état

$$s_i(t) = \text{sgn} (\xi_i^1 + \xi_i^2 + \xi_i^3) \quad (287)$$

et calculons le potentiel $h_i(t)$,

$$\begin{aligned} h_i(t) &= \sum_j J_{ij} s_j(t) \\ &= \sum_j \frac{1}{N} \sum_{\mu=1,2,3} \xi_i^\mu \xi_j^\mu \text{sgn} (\xi_j^1 + \xi_j^2 + \xi_j^3) + \underbrace{\dots}_{\sim \sqrt{(p-1)/N}} \\ &= \sum_{\mu=1,2,3} \xi_i^\mu \underbrace{\frac{1}{N} \sum_j \xi_j^\mu \text{sgn} (\xi_j^1 + \xi_j^2 + \xi_j^3)}_{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2} (\xi_i^1 + \xi_i^2 + \xi_i^3). \end{aligned} \quad (288)$$

Il s'ensuit que pour tout $i = 1, 2, \dots, N$,

$$s_i(t+1) = \text{sgn } h_i(t) = \text{sgn} (\xi_i^1 + \xi_i^2 + \xi_i^3) = s_i(t), \quad (289)$$

c'est-à-dire que l'état (287) est stationnaire.

Exercice. Comment évolue l'état $s_i(t) = \text{sgn} (\alpha \xi_i^1 + \beta \xi_i^2 + \gamma \xi_i^3)$ où $\alpha, \beta, \gamma > 0$?

14.7 Est-ce que les ξ^μ sont toujours stables en présence d'un bruit ?

Autrement dit, on se demande ce qui se passe sous la dynamique des équations (278). Maintenant $s(t)$ est remplacé par une distribution sur les états s à l'instant t . On considérera les moyennes $\langle s_i(t) \rangle$ par rapport à cette distribution. Supposons qu'on ait

$$\langle s_i(t) \rangle = m\xi_i^\nu, \quad (290)$$

où m est un coefficient en $[0, 1]$. On a alors pour le potentiel $h_i(t)$ d'un neurone i

$$\begin{aligned} h_i(t) &= \sum_j J_{ij} s_j(t) \\ &= \sum_j J_{ij} \langle s_j(t) \rangle \\ &= \dots \text{(comme dans le cas } T = 0) \\ &= m\xi_i^\nu. \end{aligned} \quad (291)$$

Dans ce calcul la deuxième égalité constitue une approximation de type champ moyen : on remplace la valeur de chaque spin $s_j(t)$ par sa moyenne par rapport à la distribution. On effectue ensuite le calcul de $s_i(t+1)$ en moyennant sur les deux possibilités de l'équation (278a) avec p_j donné par substitution de (291) dans (278b). Ceci donne

$$\begin{aligned} \langle s_i(t+1) \rangle &= \langle 1 \times p + (-1) \times (1-p) \rangle = \langle 2p - 1 \rangle \\ &= \langle \tanh \beta h_i^\nu \rangle \\ &= \tanh \beta m \xi_i^\nu, \end{aligned} \quad (292)$$

où la dernière égalité repose à nouveau sur une approximation de type champ moyen : la moyenne d'une fonction est remplacée par la fonction de la moyenne.

On compare maintenant (292) et (290). En cas de stationnarité on doit avoir $\langle s_i(t+1) \rangle = \langle s_i(t) \rangle$, ce qui conduit à la condition

$$m = \tanh \beta m, \quad (293)$$

bien connue de la théorie du ferromagnétisme. On conclut qu'il existe une température critique $T_c = 1$ au-dessus de laquelle le système ne peut pas mémoriser les ξ^μ . Pour $T < T_c$ ils peuvent l'être, mais avec des défauts. [Ceci veut dire que la fraction des neurones dont après actualisation répétée les valeurs coïncident avec celles d'un état cible ξ^ν sera de l'ordre de $\frac{1}{2}(1-m)$, conduisant ainsi à $\langle s_i \rangle = m\xi_i^\nu$.]

14.8 Et si p devient de l'ordre de N ?

Ce cas n'est pas aussi facile à étudier et l'on ne le fera pas dans le contexte de ce cours. Voir le livre d'Amit. On se limite ici à énoncer un résultat : Posons

$$p = \alpha N, \quad (294)$$

où α est un coefficient qui reste fixe quand $p, N \rightarrow \infty$. Alors on peut stocker les p motifs

- à $T = 0$ pourvu que $\alpha < \alpha_c(0) \approx 0.14$;
- à $T > 0$, nécessairement avec les défauts, pourvu que $\alpha < \alpha_c(T)$.

La courbe $\alpha_c(T)$ est décroissante avec T et atteint zéro pour $T = T_c$.

Notes

1. L'équation (275) semble indiquer qu'un neurone i dans l'état $s_i = -1$, donc au repos, contribue néanmoins au potentiel h_j . En fait, on a brûlé une étape dans le raisonnement. Dénotons par $\tilde{s}_i = 1$ et $\tilde{s}_i = 0$ un neurone respectivement actif et au repos et par \tilde{J}_{ji} les efficacités synaptiques. Formons le potentiel \tilde{h}_j par

$$\tilde{h}_j = \sum_i \tilde{J}_{ji} \tilde{s}_i. \quad (295)$$

Ces efficacités sont excitatoires et inhibitoires pour respectivement $\tilde{J}_{ji} > 0$ et $\tilde{J}_{ji} < 0$.

Posons maintenant $s_i = 2\tilde{s}_i - 1$ (si bien que $s_i = \pm 1$) et $J_{ij} = \frac{1}{2}\tilde{J}_{ji}$. L'équation (295) devient alors

$$\tilde{h}_j = \underbrace{\sum_i J_{ji} s_i}_{\equiv h_j} + \sum_i J_{ji}. \quad (296)$$

Le dernier terme dans cette équation est une constante qui est indépendante de j quand $N \rightarrow \infty$ et que tous les J_{ji} ont la même statistique. On peut la faire disparaître par une translation de l'échelle des potentiels, puis on arrive à (275).

2. La symétrisation des J_{ij} est une simplification qui ne correspond certainement pas à la réalité biologique. L'une de ses conséquences est que les cycles limites disparaissent. La symétrisation est néanmoins justifiée *a posteriori* par l'argument que les grandeurs que l'on étudie, telles que la capacité de stockage, et pour lesquelles on a également fait des calculs numériques dans des systèmes non symétriques, s'avèrent être *grosso modo* indépendantes de cette symétrisation.

Exercice : un réseau de neurones

Un ensemble de N neurones formels $s_i = \pm 1$, où $i = 1, 2, \dots, N$, est caractérisé par deux jeux de constantes de couplage

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \quad \text{et} \quad J_{ij}^+ = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^{\mu+1} \xi_j^\mu,$$

où les ξ_i^μ sont des variables aléatoires indépendantes, fixes, chacune valant ± 1 avec probabilités $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Par convention $\xi_i^{p+1} \equiv \xi_i^1$. On dénotera par $s_i(t)$ la

valeur de s_i à l'instant t . Ces neurones obéissent à une règle d'actualisation plus compliquée qu'on n'a vue en cours, à savoir

$$s_i(t+1) = \operatorname{sgn} h_i(t),$$
$$h_i(t) = \sum_{j=1}^N J_{ij} s_j(t) + \lambda \sum_{j=1}^N J_{ij}^+ s_j(t-\tau),$$

où $\lambda > 0$ (réel) et $\tau \gg 1$ (entier) sont ds paramètres. Pour $\lambda = 0$ la dynamique se réduit à celle du cours, sous laquelle chaque état donné rejoint un attracteur après seulement quelques itérations.

Question. Analyser qualitativement et/ou quantitativement la dynamique pour $\lambda > 0$ à partir d'un état initial $s_i(0) = \xi_i^1$ et tel que pour $t < 0$ les $s_i(t)$ sont aléatoires et non corrélés avec les ξ_i^μ .

Remarque. Voir *D.J. Amit, chapitre 5.3.2.*

15 Le modèle XY bidimensionnel

15.1 Introduction

Soit un réseau de dimension d arbitraire dont chaque site i est occupé par un vecteur

$$\vec{S}_i = (S_{i1}, S_{i2}, \dots, S_{in}), \quad |\vec{S}_i| = 1, \quad (297)$$

qui est une variable de spin à n composantes¹ astringé à une hypersphère. Le modèle $O(n)$ est défini par le hamiltonien

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (298)$$

et doit son nom au fait qu'il est invariant par rotation simultanée de tous les spins. [En anglais on l'appelle aussi le *n-vector model*.] Pour $n = 1$ le hamiltonien (298) est celui du modèle d'Ising. Pour $n = 2$ on l'appelle le modèle XY (*classique*) et pour $n = 3$ le modèle de Heisenberg (*classique*).

Remarque. Dans certains calculs sur le modèle $O(n)$ on peut faire tendre $n \rightarrow 0$. De Gennes [DG72] a montré que dans cette limite il existe une équivalence entre les diagrammes représentant le modèle $O(n)$ et ceux d'une marche auto-évitante [anglais : *self-avoiding walk* (SAW)]. Voir ailleurs.

Dans ce chapitre on étudiera le modèle $O(2)$ [= le modèle XY, $n = 2$] en dimension $d = 2$. La raison de l'attention apportée à ce qui pourrait ne sembler qu'un cas particulier réside dans

- (i) la nature très spéciale de la transition de phase subie par ce modèle ;
- (ii) ses connections avec des phénomènes physiques très variés.

On résume en section 15.2 quelques généralités qui serviront de toile de fond à la suite du chapitre et qui concernent le concept de la "dimension critique inférieure".

15.2 Généralités sur la dimension critique inférieure

- *La dimension critique inférieure.*

On considère le modèle $O(n)$ en dimension d d'espace. Pour d suffisamment élevée, il a une transition de phase à une température critique $T_c(d)$; en dessous de celle-ci sa symétrie est brisée et il exhibe une aimantation spontanée. On va imaginer qu'on peut varier la dimension d de façon continue. Sur un réseau hypercubique, chaque spin est entouré de $2d$ proches voisins. Quand d diminue, la création d'une aimantation spontanée devient plus difficile et fait baisser $T_c(d)$. Dans les cas génériques il existe une *dimension critique inférieure* notée $d = d_\ell$ tel que $T_c(d) \rightarrow 0$ $d \rightarrow d_\ell^+$. Pour $d \leq d_\ell$ il n'y a plus de transition de phase.

¹Certains auteurs appellent n la "dimension" du spin. Dans ce cas, ne pas le confondre avec la dimension d du réseau.

- *La longueur de corrélation.*

À une température $T > T_c$ le système de spins est composé de “blocs” (dans un sens très approximatif) tels que les spins à l’intérieur d’un même bloc ont majoritairement la même orientation. La taille type de ces blocs, notée $\xi(T)$, est la longueur de corrélation. On appelle un bloc aussi un *volume de corrélation*.

À une température $T < T_c$, les spins ont partout dans le système une seule orientation préférée : la symétrie $O(n)$ de \mathcal{H} est brisée. Toutefois, dans ce fond de spins alignés dans la direction dominante, on trouve des “îlots” de spins qui y ont majoritairement une orientation différente [opposée, dans le cas $n = 1$]. La taille type de ces îlots est la longueur de corrélation $\xi(T)$.

Pour $T \rightarrow T_c$, que ce soit par valeurs inférieures ou supérieures, $\xi(T)$ diverge selon

$$\xi(T) \simeq \frac{A_{\pm}}{|T - T_c|^{\nu}}, \quad T \rightarrow T_c^{\pm}, \quad (299)$$

où les deux amplitudes A_{\pm} sont en général inégales et où l’exposant ν dépend de la dimension d .

Remarque. Tout comme les autres exposants critiques, ν ne dépend pas de la structure du réseau (il ne change pas, par exemple, quand on passe d’un réseau carré à un réseau triangulaire) ; ni de la portée des interactions tant que celle-ci reste courte (il ne change pas, par exemple, quand on rajoute aux interactions entre proches voisins une interaction entre deuxièmes voisins). On appelle cette invariance une *universalité*. Cependant, les exposants changent quand la portée de l’interaction devient longue (dans un sens approprié), quand on change le “ n ” du modèle $O(n)$, ou (ce qui nous intéresse ici) quand on change la dimension d de l’espace.

- *Le couplage effectif à une échelle donnée.*

a. Soit J l’énergie d’interaction entre spins voisins, séparés par la maille du réseau a_0 . La fonction de partition ainsi que toutes les grandeurs physiques qu’on en déduit ne dépendra que du produit $K(0) \equiv J/k_B T$, qui est sans dimension et que l’on appellera la *constante de couplage*.

b. Le fait que les spins soient fortement corrélés à l’intérieur d’un bloc de taille linéaire ξ suggère qu’il existe un “couplage effectif” fort aux échelles spatiales $r \lesssim \xi$. Ceci nous conduit au concept de *couplage effectif à une échelle donnée*. Il est utile d’introduire un paramètre sans dimension $\ell \geq 0$ tel que

$$r = a_0 e^{\ell}. \quad (300)$$

On notera $K(\ell)$ le couplage effectif à l’échelle r , la relation (300) entre ℓ et r étant sousentendue. Par un léger abus de langage on appellera parfois ℓ l’“échelle”. On dit aussi que $K(0)$ est le “couplage physique” et que $K(\ell)$ pour $\ell > 0$ est un “couplage renormalisé”. La définition précise, voire l’existence même, d’un couplage effectif doit être montrée dans chaque cas concret.

- *Exemple : le couplage effectif pour la chaîne d’Ising.*

Pour le modèle d’Ising en une dimension il s’avère possible de trouver une expression explicite pour $K(\ell)$, comme on le montrera ci-dessous.

a. *Un pas de renormalisation.* Le hamiltonien du modèle d'Ising est

$$\mathcal{H} = -J \sum_j s_j s_{j+1}, \quad (301)$$

où les s_j prennent les valeurs ± 1 et j mesure la distance en multiples de a_0 . À la température T la fonction de partition canonique s'écrit

$$Z(\beta J) = \sum_{\{s_j = \pm 1\}} \exp \left(\beta J \sum_j s_j s_{j+1} \right). \quad (302)$$

On écrira ici $\beta J \equiv K^{(0)}$. Il a été montré ailleurs (dans le cours) qu'après sommation sur tous les spins s_j d'indice $j = 2i + 1$ impair, l'équation (302) devient

$$\begin{aligned} Z(\beta J) &= G(K^{(0)}) \sum_{\{s_j = \pm 1 \mid j=2i\}} \exp \left(K^{(1)} \sum_i s_{2i} s_{2i+2} \right) \\ &= G(K^{(0)}) \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \exp \left(K^{(1)} \sum_i s_i s_{i+1} \right), \end{aligned} \quad (303)$$

où, pour le passage à la deuxième ligne, on a posé $s_{2i} = s'_i$, puis supprimé les primes ; où $G(K)$ est une fonction connue que l'on trouve facilement ; et où $K^{(1)}$ est le couplage renormalisé à l'échelle $r = 2a_0$, donné par

$$\tanh K^{(1)} = \left(\tanh K^{(0)} \right)^2. \quad (304)$$

À noter que la somme dans la dernière ligne de (303) est identique à celle dans (302), à une renormalisation de la constante de couplage près.

b. *Itération.* En itérant n fois on trouve $\tanh K^{(n)} = (\tanh K)^{2^n}$ pour le couplage effectif $k^{(0)}$ à l'échelle $r = 2^n a_0$. En comparant cette équation à (300) on choisit ℓ tel que $2^n = e^\ell$, donc $\ell = n \log 2$. Après le changement de notation $K^{(n)} \equiv K(n \log 2)$ on trouve

$$\tanh K(\ell) = \left(\tanh K(0) \right)^{e^\ell}. \quad (305)$$

On peut interpoler (305) entre les valeurs discrètes de ℓ pour lesquelles elle a été déduite *stricto sensu* et prendre ℓ égal à un réel quelconque. On a donc trouvé un exemple de couplage effectif bien défini et explicitement calculé à toute échelle $\ell > 0$.

Exercice 57. Expliquer pourquoi ce procédé de renormalisation ne marche pas pour le modèle d'Ising sur un réseau carré.

c. On déduit de (305) que $K(\ell)$ satisfait à l'équation

$$\frac{dK}{d\ell} = f(K), \quad (306)$$

qui détermine $K(\ell)$ à partir de la condition initiale $K(0) = J/k_B T$. On peut la réécrire sous la forme équivalente

$$\frac{dK^{-1}}{d\ell} = F(K^{-1}) \quad (307)$$

avec $F(K^{-1}) = -K^{-2}f(K)$, l'avantage étant que maintenant la condition initiale $K^{-1}(0) = k_B T/J$ est proportionnelle à la température. Les deux points fixes de (306) [ou de (307)] sont $K^{-1} = 0$, qui est instable, et $K^{-1} = \infty$, qui est stable. Tout couplage initial $K(0)$ tend donc vers zéro sous renormalisation, en conformité avec l'absence bien connue d'une transition de phase dans le modèle d'Ising unidimensionnel.

Exercice 58. Montrer que dans l'équation (306) ci-dessus

$$f(K) = \frac{(\tanh K) \log \tanh K}{1 - \tanh^2 K}. \quad (308)$$

- *Flot de renormalisation et dimension critique inférieure.*

On admet que pour un modèle générique dont on peut varier la dimension d et qui peut être décrit par un couplage effectif $K(\ell)$, il existe encore une équation de renormalisation de type (307), mais avec une fonction F spécifique pour ce modèle. Admettons que pour $K^{-1} \ll 1$ la fonction F a un développement en série de puissance de K^{-1} , si bien que

$$\frac{dK^{-1}}{d\ell} = -y_T K^{-1} + y_2 K^{-2} + \dots, \quad (309)$$

ce qu'on peut réécrire comme

$$\frac{dK}{d\ell} = y_T K - y_2 + \dots. \quad (310)$$

La stabilité ou non du point fixe $K_*^{-1} = 0$ est donc régie par le signe du coefficient y_T .

a. *Le cas $d < d_\ell$.* En résolvant (310) d'abord pour $d < d_\ell$, donc $y_T < 0$, on trouve à l'ordre dominant

$$\begin{aligned} K(\ell) &= K(0) e^{-|y_T|\ell} \\ &= \frac{J}{k_B T} \left(\frac{r}{a_0} \right)^{-|y_T|\ell}. \end{aligned} \quad (311)$$

La longueur de corrélation est l'échelle à laquelle $K(\ell)$ passe de "grand" à "petit", donc où $K(\log(\xi/a_0)) \approx 1$. Quand on y substitue (311), cette condition donne

$$\xi(T) \approx a_0 \left(\frac{J}{k_B T} \right)^\nu, \quad \nu = \frac{1}{|y_T|}. \quad (312)$$

valable pour $T \rightarrow 0$, ce qui montre que dans cette limite la longueur de corrélation diverge en loi de puissance. On peut considérer $T = 0$ comme la température critique de ce système. Pour l'exposant critique ν on a donc

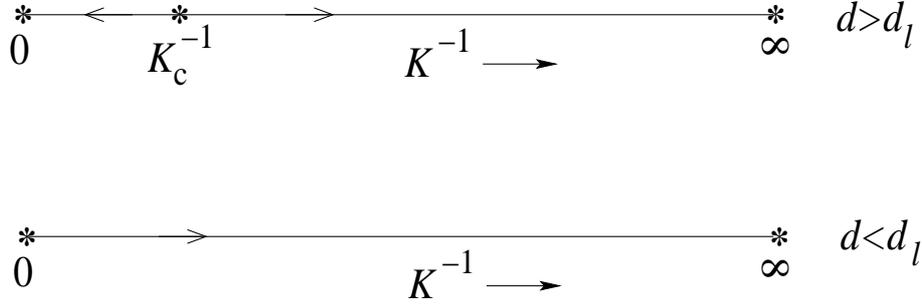


Figure 11: Flot de renormalisation pour un système décrit par un seul couplage effectif $K(\ell)$, au-dessus et en-dessous de sa dimension critique inférieure $d = d_\ell$. Les points fixes sont indiqués par des astérisques, la direction du flot par des flèches.

trouvé ici une expression en termes du coefficient y_T de la transformation de renormalisation *linéarisée autour de son point fixe*².

b. *Le cas $d = d_\ell$.* En résolvant ensuite (310) pour $d = d_\ell$, donc pour $y_T = 0$, on trouve

$$K(\ell) = K(0) - y_2 \ell + \dots \quad (313)$$

L'attractivité du point fixe $K^{-1} = \infty$ implique que $y_2 > 0$. Sachant que $K(0) \gg 1$ on trouve à partir de la même condition $K(\log(\xi/a_0)) \approx 1$ que

$$\xi(T) \approx a_0 \exp\left(\frac{J}{y_2 k_B T}\right) \quad (314)$$

On a donc trouvé que *quand $T \rightarrow 0$ à la dimension critique inférieure, la longueur de corrélation diverge exponentiellement en T^{-1}* . Inversement, quand on voit une divergence de ce type, on peut y voir le signal qu'on est à $d = d_\ell$. Ce point constitue le message principal de cette introduction.

c. *Le cas $d > d_\ell$.* Pour $d > d_\ell$ les coefficients y_T et y_2 dans l'équation (310) sont positifs et cette équation possède un point fixe non trivial $0 < K_c^{-1} < \infty$ divisant l'axe des K en deux parties. [Si d est très peu au-dessus de d_ℓ on peut se limiter aux deux termes du développement de F exhibés dans (310) et l'on trouve $K_c^{-1} = y_T/y_2$.] Les deux points fixes $K_*^{-1} = 0$ et $K_*^{-1} = \infty$ sont stables, alors que le point fixe dit "critique" $K^{-1} = K_c^{-1}$ est instable. Pour une condition initiale $K^{-1}(0) = k_B T/J > K_c^{-1}$, un système physique renormalise vers $K^{-1}(\infty) = \infty$, c'est-à-dire vers couplage zéro, et n'a donc pas d'ordre spontané, alors que pour une condition initiale $K^{-1}(0) = k_B T/J < K_c^{-1}$ il renormalise vers $K^{-1}(\infty) = 0$, c'est-à-dire vers un couplage infini garantissant l'alignement entre eux de blocs voisins de spins même quand leur taille augmente sans limite.

[Rajouter : calcul de $\xi(T)$ dans ce cas.]

²Dans le cas général la transformation linéarisée est représentée par une matrice dont les valeurs propres sont reliées à différents exposants critiques.

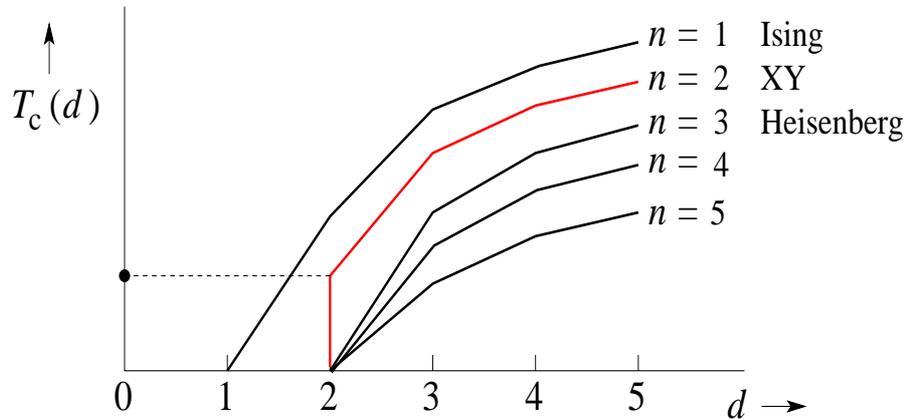


Figure 12: La température critique T_c représentée schématiquement en fonction de la dimension d pour les différents modèles $O(n)$. Le caractère exceptionnel du modèle XY en $d = 2$ apparaît.

- *Le cas exceptionnel du modèle XY.*

Pour le modèle d'Ising on a $d_\ell = 1$, alors que pour les modèles $O(n)$ avec $n \geq 2$ on a $d_\ell = 2$. Les remarques précédentes servent surtout à mieux faire ressortir le caractère exceptionnel du modèle XY. Alors que dans le cas générique $\lim_{d \rightarrow d_\ell^+} T_c(d) = 0$, ceci n'est pas le cas pour le modèle XY, comme le montre la figure 12.

Cette figure suggère, en fait, qu'en dimension $d = 2$ le modèle XY a non pas une seule température critique, mais un intervalle entier de températures que l'on peut considérer comme "critiques". Le reste de ce chapitre donnera un sens à cette affirmation.

15.3 Le modèle XY bidimensionnel

On considère le hamiltonien

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) \tag{315}$$

sur un réseau carré. S'il est besoin de conditions aux bords, on les prendra périodiques dans les deux directions (= toroïdales). On aimerait pouvoir calculer sa fonction de partition canonique à température inverse $\beta = 1/k_B T$,

$$Z_{XY}(\beta) = \int_0^{2\pi} \prod_i d\phi_i e^{-\beta \mathcal{H}_{XY}}, \tag{316}$$

afin de déterminer si oui ou non ce modèle subit une transition de phase. Le calcul de $Z_{XY}(\beta)$ cependant, s'avère impossible sans approximations. Il s'agit alors de trouver celles qui retiennent l'essentiel du problème.

Pertinent pour la question de la transition de phase est – ou semble être à première vue – le théorème de Mermin et Wagner (1966 [MW66], 1967 [Me67]),

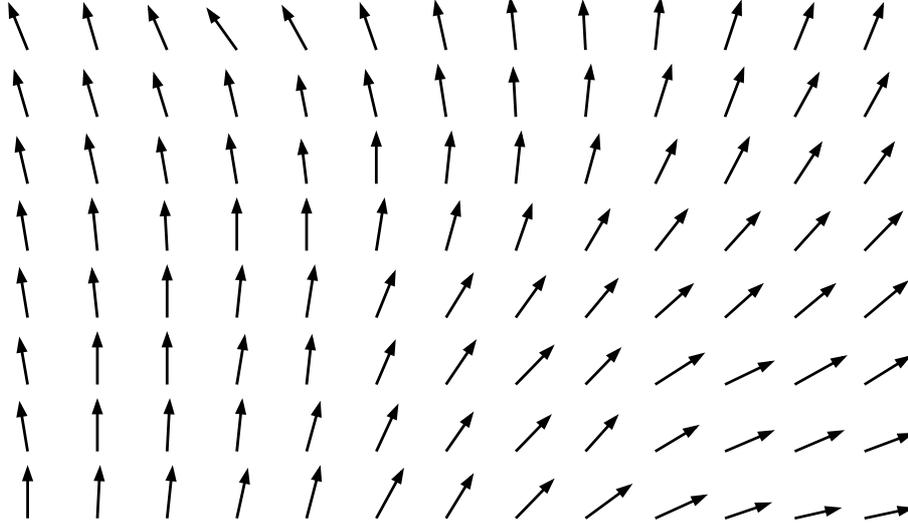


Figure 13: Une configuration XY à basse température, dominée par les ondes de spin.

qui est en fait une preuve rigoureuse de l'“argument des ondes de spins” dû à Bloch (1930 [Bl30]). Ce théorème dit qu'un système bidimensionnel ayant une symétrie continue ne peut avoir d'ordre spontané à aucune température $T > 0$. Il ne faut toutefois pas confondre l'absence d'ordre spontané avec l'absence d'une transition de phase.

15.4 L'approximation par ondes de spin

L'approximation “ondes de spin” est basée sur l'idée qu'à basse température, $\beta J \gg 1$, deux spins voisins sur le réseau auront typiquement des orientations peu différentes. On développe alors le cosinus jusqu'à l'ordre quadratique et de néglige les termes d'ordre supérieur,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{XY}^{\text{ods}} &= \frac{1}{2}J \sum_{\langle i,j \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 + \dots \\ &\simeq \frac{1}{2}J \int d\vec{r} |\vec{\nabla} \phi(\vec{r})|^2. \end{aligned} \tag{317}$$

En approximation ondes de spin \mathcal{H}_{XY} est gaussien et on peut donc calculer la fonction de partition Z_{XY}^{ods} correspondante ainsi que toutes les moyennes d'intérêt.

Le calcul de la fonction de corrélation en approximation ondes de spin donne

$$g(r) \equiv \langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_{\vec{r}} \rangle \sim \frac{1}{r^{k_B T / 2\pi J}} \equiv \frac{1}{r^{\eta(T)}}, \quad r \rightarrow \infty. \tag{318}$$

On rappelle que dans les modèles les plus courants (ferromagnétiques dont Ising, vapeur-liquide, ...) la fonction de corrélation décroît en loi de puissance uniquement à la température critique. Ici on a une loi de puissance pour toute

température, avec un exposant η qui dépend de T ! On dit parfois que l'axe de la température est une "ligne critique".

Exercice. Montrer que pour un réseau carré de $N = L \times L$ sites let aux conditions aux bords périodiques, la fonction de partition (316), calculée en approximation onde de spin, est donnée par

$$Z_{XY}^{\text{ods}}(\beta) = \prod_{\substack{\kappa_x, \kappa_y=0 \\ \vec{\kappa} \neq 0}}^{L-1} \left(\frac{\pi}{\beta J [2 - \cos(\frac{2\pi\kappa_x}{L}) - \cos(\frac{2\pi\kappa_y}{L})]} \right)^{1/2} \quad (319)$$

[*** vérifier les coefficients] Déduire ensuite le résultat (318).

Remarque. Cet exercice devrait être fait par chaque étudiant de physique théorique. Une version à pas guidés est disponible en session de TD.

On peut d'ores et déjà affirmer que le comportement asymptotique (318) *ne peut pas être correct* à toute température. En fait, par un développement haute température (que l'on n'exhibera pas ici) il est facile à démontrer qu'à une température suffisamment élevée la décroissance avec r doit être exponentielle. Si donc (318) est vrai à basse température, il doit y avoir un point critique marquant la transition de la loi de puissance asymptotique (318) vers une loi exponentielle.

15.5 Les vortex

On cherche à comprendre le mécanisme à l'origine d'une telle transition. On se place à basse température Pour un contour fermé Γ on considère l'intégrale

$$\oint_{\Gamma} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}) \cdot d\vec{\ell} = 2\pi q, \quad q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (320)$$

Si $q \neq 0$ on dit que le contour enferme un vortex de vorticité q .

Exercice 59. Déterminer la vorticité à l'intérieur de chacun des contours exhibés sur la figure 14. Déterminer également la vorticité de la portion du réseau montée par la figure entière.

L'énergie d'un seul vortex dans un domaine de taille $\sim L^2$, comme en montre la figure 15, se calcule aisément,

$$\begin{aligned} E_{1v} &\simeq \frac{1}{2} J \int d\vec{r} |\vec{\nabla} \phi|^2 \\ &\simeq \frac{1}{2} \cdot 2\pi \int_{\sim a}^{\sim L} r dr \left(\frac{1}{r} \right)^2 \\ &\simeq \pi J \log L + E_c + o(1), \quad L \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (321)$$

L'entropie et l'énergie libre d'un seul vortex peuvent être estimées heuristiquement comme

$$S_{1v} \simeq k_B \log L^2, \quad (322)$$

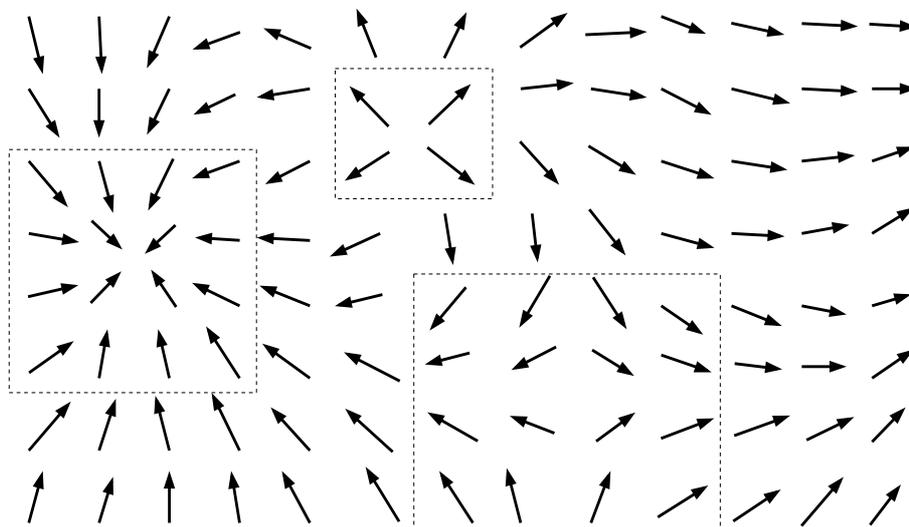


Figure 14: Une configuration XY à une température basse mais plus élevée que celle de la figure 13. Les vortex sont entourés par des contours pointillés.

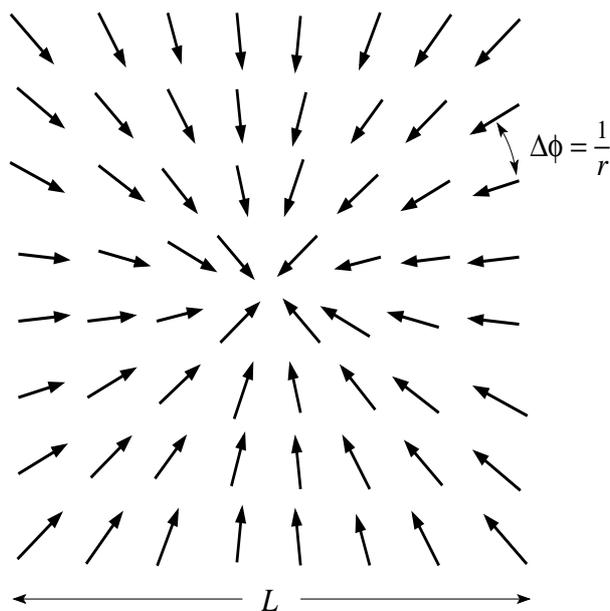


Figure 15: Un vortex dans un domaine de taille L .

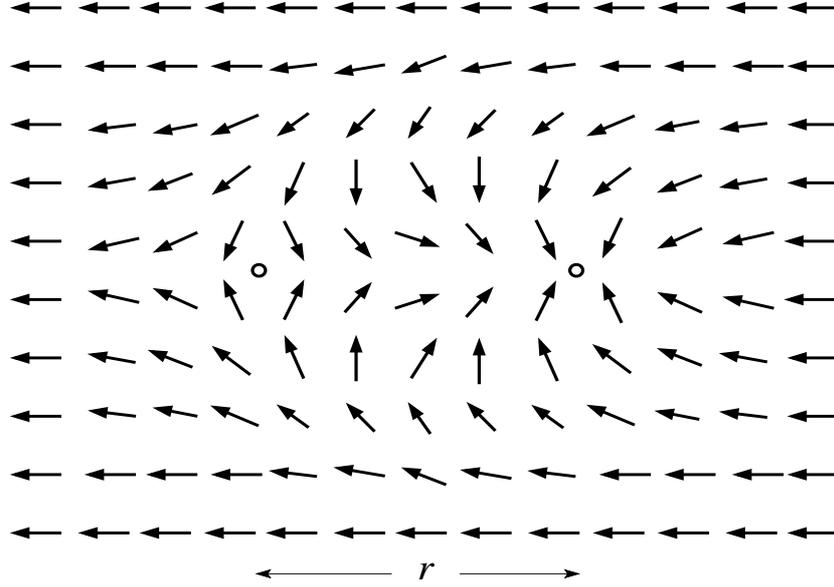


Figure 16: Une paire de vortex opposés à distance r .

$$\begin{aligned} F_{1v} &\simeq E_{1v} - TS_{1v} \\ &\simeq (\pi J - 2k_B T) \log L, \end{aligned} \quad (323)$$

les deux dans la limite $L \rightarrow \infty$. On voit que F_{1v} tend vers l'infini quand $L \rightarrow \infty$, mais avec un signe qui dépend de la température. On en conclut que des vortex isolés ne peuvent exister que pour $T > T_c$ où

$$k_B T_c = \frac{1}{2} \pi J. \quad (*) \quad (324)$$

[(*) Cet argument est cependant trop grossier ; le T_c réel n'est pas connu.] La valeur de l'exposant $\eta(T)$ au point critique est

$$\eta(T_c) = \frac{1}{4}. \quad (325)$$

L'énergie de deux vortex séparés d'une distance r , comme en montre la figure 16 sera

$$E_{2v} \simeq 2\pi J \log r + 2E_c, \quad (326)$$

ce qui ne dépend pas de L . Il s'ensuit que des paires de vortex de signes opposés peuvent exister à toute température.

Sur la base de ces considérations, et dans l'idée que les vortex constituent le mécanisme de la transition de phase recherchée, on décompose le hamiltonien \mathcal{H}_{XY} selon

$$\mathcal{H}_{XY} = \mathcal{H}_{\text{ods}} + \mathcal{H}_{\text{vortex}}, \quad (327)$$

où $\mathcal{H}_{\text{vortex}}$ décrit l'interaction entre un nombre arbitraire de vortex,

$$\mathcal{H}_{\text{vortex}} = -2\pi J \sum_{k < \ell} q_k q_\ell \log |\vec{r}_k - \vec{r}_\ell| + E_c \sum_{k=1}^N q_k^2. \quad (328)$$

Pour la même raison qu'auparavant (le comportement en $\log L$ de l'énergie libre d'un vortex non nul) on doit rajouter au hamiltonien $\mathcal{H}_{\text{vortex}}$ la condition que le système total soit neutre, $\sum_{k=1}^N q_k = 0$.

Remarque. Cette décomposition telle qu'elle est présentée ici a l'air d'introduire des degrés de liberté supplémentaires. On verra plus exactement ce qu'il en est au chapitre suivant.

Pour les fonctions de partition et les énergies libres correspondantes on a

$$Z_{XY} = Z_{\text{ods}} Z_{\text{vortex}} = e^{-\beta F_{\text{ods}}} e^{-\beta F_{\text{vortex}}}. \quad (329)$$

On définit la *fugacité* y d'un vortex par

$$y = e^{\log y} \equiv e^{-\beta E_c}. \quad (330)$$

À basse température on aura $y \ll 1$, ce qui ouvrira dans la suite la possibilité d'un développement en puissances de y .

Analogie avec l'électrostatique. Le potentiel $V(r)$ d'une charge électrique égale à $+1$ en dimension d'espace $d = 2$ est déterminé par l'équation de Poisson,

$$\Delta V(r) = -4\pi\delta(\vec{r}), \quad (331)$$

ce qui donne

$$V(r) = -2 \log \frac{r}{r_0}. \quad (332)$$

On posera $r_0 = 1$ dans la suite. On voit donc que $\mathcal{H}_{\text{vortex}}$ représente l'énergie électrostatique d'un système de charges bidimensionnelles égales à $\sqrt{\pi J} q_k$.

15.6 Analyse par renormalisation

La force électrostatique $F(r)$ entre deux charges q_i et q_j à distance $r \gg 1$ est

$$F(r) = 2\pi J \frac{q_i q_j}{r}. \quad (333)$$

Dans un milieu polarisé, caractérisé par une constante diélectrique $\epsilon(r)$ dépendante de la distance, cette force devient

$$F(r) = 2\pi J \frac{q_i q_j}{\epsilon(r)r}. \quad (334)$$

À basse température les charges seront appariées en dipôles électriques, comme le montre la figure 17 La distance entre les deux charges opposées composant un dipôle sera appelée la 'taille' de ce dipôle. Soit $\rho(r')$ la densité des dipôles de taille r' . Alors

$$\int_1^r dr' \rho(r') = \text{la densité totale des dipôles contribuant à } \epsilon(r)$$

On sait que $\epsilon(1) = 1$ et $\epsilon(r) > 1$ pour $r > 1$, où $a = 1$ est la maille du réseau, qui est aussi la distance minimale d'approche de deux charges. La grandeur

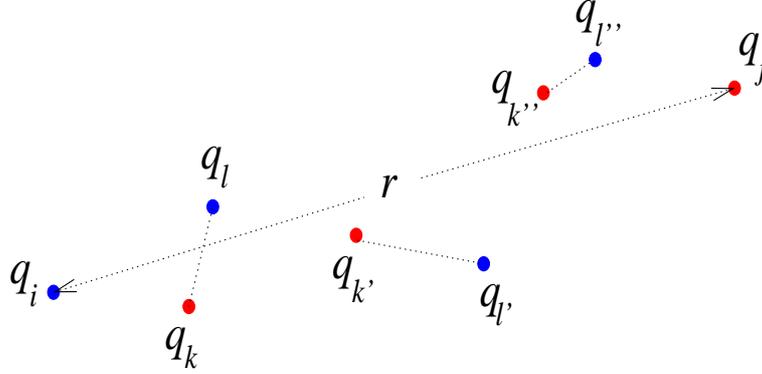


Figure 17: Un vortex de taille r est composé des charges q_i et q_j (avec $q_i = -q_j$). La force entre ces charges est renormalisé par la présence de dipôles de taille plus petites.

$\epsilon(\infty)$ est la constante diélectrique telle qu'on la mesure dans un échantillon macroscopique. Il y a deux possibilités,

- (i) $\epsilon(\infty) < \infty$: on a un diélectrique ;
- (ii) $\epsilon(\infty) = \infty$: on a un conducteur.

Dans ce dernier cas, la force de Coulomb ne se fait plus ressentir à grande distance à cause de l'écrantage de Debye. En électrostatique on pose

$$\epsilon(r) = 1 + 4\pi\chi(r), \quad (335)$$

où $\chi(r)$ est la susceptibilité électrique de tous les dipôles qui contribuent à $\epsilon(r)$. On peut donc écrire

$$\chi(r) = \int_1^r dr' \rho(r')\alpha(r'), \quad (336)$$

où $\alpha(r')$ est la polarisabilité d'un dipôle de taille r' (à r' fixe).

Il faut maintenant trouver des expressions pour $\rho(r)$ et $\alpha(r)$. Si on considère les dipôles comme indépendants les uns des autres, leur densité $\rho(r)$ sera déterminée par leur facteur de Boltzmann,

$$\rho(r) = 2\pi r y^2 e^{-W(r)/k_B T}, \quad (337)$$

où le facteur $2\pi r$ tient compte de toutes les orientations d'un dipôle, le facteur y^2 de l'énergie des deux centres, et où $W(r)$ est le potentiel effectif entre les deux charges, donc

$$F(r) = -\frac{dW(r)}{dr}. \quad (338)$$

Note. Il existera aussi des dipôles 'non élémentaires' composés de paires de charges $\pm 2\sqrt{\pi J}$ ou $\pm 3\sqrt{\pi J}$ etc. L'équation (337) montre que l'effet de ces types de dipôle sera accompagné de puissances supérieures de y . [*** mention plus haut].

Afin de déterminer $\alpha(r)$, considérons un dipôle de taille r , composé de deux charges $\pm q$, dans un champ électrique E . Soit $p \equiv qr \cos \theta$ la composante du moment dipolaire le long de la direction de E . La polarisabilité est alors $\alpha(r) = [\partial \langle p \rangle / \partial E]_{E=0}$ où $\langle \dots \rangle$ est une moyenne avec le poids $\exp(\beta E q r \cos \theta)$. En effectuant la moyenne et la dérivée par rapport à E on trouve

$$\alpha(r) = qr \frac{\partial}{\partial E} \langle \cos \theta \rangle |_{E=0} = \frac{1}{2} \beta q^2 r^2. \quad (339)$$

En appliquant cette relation dans la suite il faudra se rappeler que dans le modèle XY les dipôles élémentaires sont composés de charges $q = \pm \sqrt{\pi J}$.

Résolution des équations (334)-(339). Les équations (334)-(339) constituent un système fermé de six équations pour six inconnues. On les résout comme suit. Définissons d'abord

$$\ell = \log r, \quad (340)$$

$$K(\ell) = \frac{J}{k_B T \epsilon(r)}, \quad (341)$$

$$y(\ell) = yr^2 e^{-W(r)/2k_B T}. \quad (342)$$

On indique quelques étapes intermédiaires du calcul. On peut réécrire (337) comme

$$\rho(r) = 2\pi r y^2 e^{-W(r)/k_B T} = 2\pi r^{-3} y^2(\ell) \quad (343)$$

et (338) comme

$$\frac{W(r)}{k_B T} = 2\pi \int_0^{\ln r} d\ell' K(\ell'). \quad (344)$$

Substitution de (344) dans (342) donne

$$y(\ell) = y(0) e^{2\ell - \pi \int_0^\ell d\ell' K(\ell')}. \quad (345)$$

On substitue (339) et (343) dans (336), (336) dans (335), puis (335) dans (341), ce qui conduit à

$$K^{-1}(\ell) = K^{-1}(0) + 4\pi^3 \int_0^\ell d\ell' y^2(\ell'). \quad (346)$$

À partir de (345) et (346) on obtient les équations finales,

$$\frac{dK^{-1}}{d\ell} = 4\pi^3 y^2(\ell), \quad (347a)$$

$$\frac{dy(\ell)}{d\ell} = [2 - \pi K(\ell)] y(\ell). \quad (347b)$$

Ce sont les équations du flot de renormalisation pour le modèle XY bidimensionnel. Le flot de renormalisation qui résulte de ces équations est montré sur la figure 18.

Remarques.

1. Le raisonnement ci-dessus, qui suit le travail original de Kosterlitz [KT73,

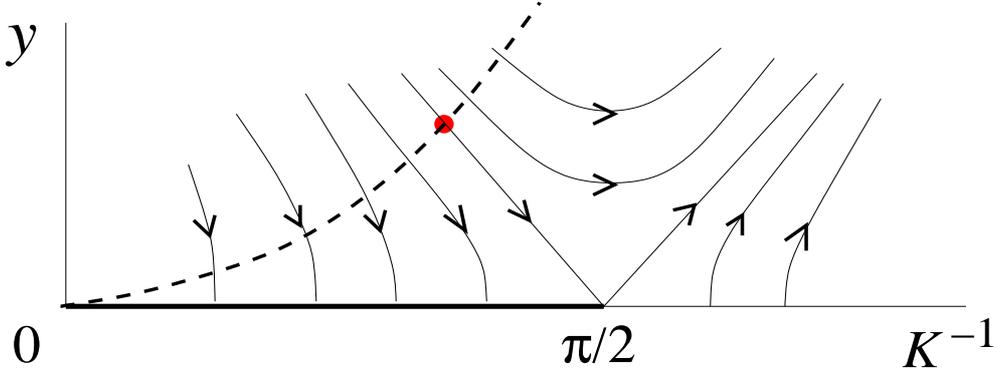


Figure 18: Flot de renormalisation du modèle XY dans le plan $K^{-1}y$. Le pointillé représente le système initial (= non renormalisé, donc ayant $\ell = 0$) et est paramétré par sa température T . [*** rajouter des commentaires]

Ko74, Yo78], a pu paraître approximatif. Néanmoins, les équations (347) constituent les premiers termes dans un développement exact en puissances de la fugacité y . On renvoie le lecteur à la littérature pour des dérivations plus exactes [JKKN77, AGG80] et même rigoureuses [].

2. Il n'était aucunement évident *a priori* ni (a) qu'il existerait des équations de renormalisation pour ce modèle, ni (b) que le nombre de variables impliquées serait de deux.

3. Ces équations ont été déduites dans "l'espace réel", par opposition à l'espace de Fourier utilisé pour quasiment tous les développements en ϵ .

4. L'aimantation moyenne $m = N^{-1} \sum_{i=1}^N \langle \cos \phi_i \rangle$ est nulle à toute température. On a ici affaire à une transition de phase sans paramètre d'ordre, ce qui fut une nouveauté quand elle a été découverte. À cause du rôle des vortex on parle aussi d'une transition *topologique*. Pour un article de revue sur les transition topologiques voir Nelson [Ne83].

5. Dans l'état fondamental du modèle XY, où tous les spins sont alignés, une symétrie continue est brisée spontanément. Les "ondes de spin" sont des excitations au-dessus de cet état fondamental. Leur énergie d'excitation peut être arbitrairement basse. Dans d'autres contextes, des excitations de ce type sont appelées des "modes de Goldstone" et sont dites "sans masse". 6. zzz

7. On peut rajouter à \mathcal{H}_{XY} un champ magnétique sous la forme d'un terme $H \sum_{i=1}^N \cos \phi_i$. La susceptibilité magnétique $\partial m / \partial H$ est infinie pour tout $T \leq T_c$.

15.7 Discussion

Les équations (347) décrivent des trajectoires dans le plan $K^{-1}y$, paramétrées par ℓ , et représentant le comportement effectif du système aux échelles spatiales $r = e^\ell$ avec $\ell > 0$. Ces équations doivent être résolues avec une condition 'initiale' $(K^{-1}(0), y(0))$ à $\ell = 0$. On rappelle les valeurs initiales,

$$K^{-1}(0) = k_B T / J, \tag{348a}$$

$$y(0) = e^{-E_c/k_B T}. \quad (348b)$$

Elles définissent une courbe dans le plan $K^{-1}y$ (le pointillé sur la figure 18), paramétrée par la température T .

La question importante est : pour $K^{-1}(0)$ et $y(0)$ donnés, quelles seront leurs valeurs complètement renormalisées $K^{-1}(\infty)$ et $y(\infty)$? Pour un échantillon macroscopique ce sont ces valeurs qui sont, en principe, observables. On peut répondre à cette question en traçant les trajectoires, comme cela a été fait sur la figure 18. L'axe $y = 0$ est un *axe fixe*. Ceci tranche avec la situation habituelle, où un flot de renormalisation possède seulement des points fixes. Ceci confirme l'existence de la "ligne de points critiques" à laquelle on avait conclu sur la base de l'équation (318). Toutefois, il apparaît maintenant que cette ligne n'est stable que pour $K^{-1} = k_B T/J < \pi/2$. La courbe qui aboutit en $(K^{-1}, 0) = (\pi/2, 0)$ intersecte la ligne des conditions initiales en un point qui définit la température critique du modèle.

Chaque point $K^{-1}(0), y(0)$ du pointillé ayant $T \leq T_c$ aboutit sous renormalisation sur l'axe $y = 0$ en un point que l'on pourra noter $K^{-1}(\infty; T)$ et qui est représenté sur la figure (18). Les points initiaux $K^{-1}(0), y(0)$ ayant $T > T_c$, même si sous renormalisation ils s'approchent d'abord de la ligne $y = 0$, finissent par s'en éloigner vers une région du plan $K^{-1}y$ où y n'est pas petit. Même si les équations de renormalisation ne sont plus exactes dans cette région, on peut l'interpréter comme appartenant à la phase haute température.

Saut universel. La conclusion la plus remarquable que l'on peut tirer des équations (348) est qu'à la température critique T_c , elle-même inconnue, le couplage $K^{-1}(\infty; T)$ totalement renormalisé saute de la valeur $\pi/2$ vers zéro : il s'agit d'un saut *universel*, car il apparaît quelle que soit la trajectoire précise du pointillé. Par exemple, le même modèle XY sur un réseau triangulaire serait décrit par une autre ligne de conditions initiales, aurait un autre T_c , mais son couplage renormalisé exhiberait le même saut universel.

En ce qui concerne le comportement de la fonction de corrélation aux grands r , la prise en compte des vortex revient à remplacer $K(0)$ par $K(\infty)$ dans l'expression (318), On peut donc affirmer sans calcul supplémentaire que

$$g(r) \sim \frac{1}{r^{1/2\pi K(\infty; T)}}. \quad (349)$$

Au point critique $T = T_c$ ceci donne $g(r) \sim \frac{1}{r^{1/2\pi K(\infty; T_c)}} = \frac{1}{r^{1/4}}$, où comme par miracle l'exposant $\eta(T_c) = \frac{1}{4}$ trouvé en (325) est resté inchangé ! Toutefois, la prise en compte de termes d'ordre supérieur dans les équations de renormalisation (347) donne lieu à un facteur correctif. Le résultat, qu'on ne démontrera pas ici, est alors

$$g(r) \sim \frac{(\log r)^{1/8}}{r^{1/4}} \quad r \rightarrow \infty, \quad T = T_c. \quad (350)$$

(Voir [AGG80], qui emploie les techniques de la théorie des champs.

Exercice.

a. Poser $t = T - T_c$. Montrer qu'au voisinage du point critique $(\pi/2, 0)$ les trajectoires du flot de renormalisation sont des branches d'hyperbole.

b. Montrer que dans la phase haute température la longueur de corrélation du modèle XY diverge comme

$$\xi(T) \sim e^{c/(T-T_c)^{1/2}}, \quad T \rightarrow T_c^+. \quad (351)$$

où c est une constante positive.

On énonce sans démonstration encore les résultats suivants.

1. Pour $T < T_c$ on peut définir une longueur de corrélation comme la distance type entre deux vortex libres.
2. Au voisinage de la température critique l'énergie libre par spin $f(T)$ du modèle XY s'écrit comme

$$f(T) = \text{partie analytique} + C_{\pm} e^{-c_{\pm}/|T-T_c|^{1/2}}, \quad T \rightarrow T_c. \quad (352)$$

où C_{\pm} et c_{\pm} sont des constantes. Ce type de non analyticité ne laisse aucun effect détectable dans la chaleur spécifique, que ce soit dans des expériences ou des simulations Monte Carlo.

15.8 Notes historiques sur le modèle XY

Pour indiquer le hamiltonien (315) nous avons employé le terme "modèle XY", conformément à l'usage de nos jours. Cependant, jusqu'au début des années 70 ce terme était réservé à l'analogie quantique de (315), à savoir

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) \quad (353)$$

où $\vec{\sigma}_j = (\sigma_j^x, \sigma_j^y, \sigma_j^z)$. Celui-ci est une version anisotrope du célèbre hamiltonien de Heisenberg,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j. \quad (354)$$

Le hamiltonien (315) fut introduit par Vaks et Larkin (1965) pour décrire la fonction d'onde de couches minces d'hélium superfluide. Son nom original était "modèle de rotateurs plans" (anglais : *plane rotator model*). En vue d'en déterminer une éventuelle transition de phase, le hamiltonien quantique (354) avait été étudié depuis les années 30, sa version anisotrope (353) depuis les années 50. La méthode principale de ces jours-là – et d'ailleurs jusque dans les années 70 – était le développement en série haute température, appliquée par exemple à la susceptibilité magnétique. En extrapolant une série (relativement courte : de quatre à dix termes) on cherchait à déterminer si la fonction représentée divergeait ou non à une température finie.

Un rôle important fut joué par le *théorème de Mermin et Wagner* [MW66], publié en 1966, qui montre mathématiquement rigoureusement qu'un système bidimensionnel ayant une symétrie continue ne peut pas avoir d'ordre spontané. Une adaptation de ce théorème au modèle XY est due à Mermin [Me67]. Cependant, dans les années suivantes on se rendait compte que l'absence d'un ordre spontané n'excluait pas une transition de phase d'un autre type, encore mal cerné.

Malgré beaucoup de travaux de recherche, il régnait au début des années 70 toujours une grande confusion quant à l'existence ou non d'une transition de phase en deux ou en trois dimensions d'espace, pour les modèles XY et Heisenberg. Cette confusion fut dissipée par la théorie de Kosterlitz et Thouless (1972-1974). C'est seulement depuis ces travaux qu'on a les idées claires sur la différence entre les modèles classiques de XY et de Heisenberg [$O(2)$ et $O(3)$].

Kosterlitz et Thouless furent précédés de peu par Berezinskii [Br71, Br70], qui publia en 1970-1971 en russe (traduction 1971-1972) une version incomplète de la même théorie.

Voir [Hi87] pour une version plus élaborée (en néerlandais) de ces notes historiques.

16 La transition rugueuse

16.1 Les modèles SOS et DG

On s'intéresse à la surface d'un cristal. Soit un cristal cubique dont on veut considérer la surface 001 (celle vue de la direction Oz). Le cristal est modélisé comme un ensemble de N colonnes juxtaposées, supposées composées des atomes du cristal, chacune placée sur le site i d'un réseau carré situé dans un plan de référence perpendiculaire à Oz . On dénote la hauteur de ces colonnes par des entiers $h_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. L'énergie de la surface cristalline sera minimale pour une surface plate, c'est-à-dire si tous les h_i ont la même valeur, et puis chaque différence de hauteur entre deux colonnes voisines i et j fournira une contribution positive à l'énergie totale \mathcal{H} ,

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} V(h_i - h_j), \quad (355)$$

où $V(h) = V(-h)$ et l'on pourra poser $V(0) = 0$. On appelle le modèle ainsi défini un modèle SOS (anglais : *solid on solid*, ce qui fait référence au fait que dans ce modèle il n'y a ni lacunes ni surplombs).

Deux choix de $V(h)$ sont particulièrement populaires, à savoir

$$\mathcal{H}_{\text{DG}} = \frac{1}{2}J \sum_{\langle i,j \rangle} (h_i - h_j)^2, \quad (356)$$

que l'on appelle le modèle Discret Gaussien, et

$$\mathcal{H}_{\text{SOS}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} |h_i - h_j|, \quad (357)$$

que l'on appelle le modèle SOS (dans un sens plus restreint). La fonction de partition canonique de ces modèles s'écrit

$$Z_{\text{DG,SOS}}(\beta) = \sum'_{\{h_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{DG,SOS}}} \quad (358)$$

où la prime sur le signe de sommation indique que l'on doit "ancrer" la surface, par exemple par la condition $h_1 = 0$. Sans une telle condition Z_{SOS} et Z_{DG} seraient infinies à cause de l'invariance de l'énergie (355 par la translation simultanée de toute les hauteurs, $h_i \mapsto h_i + h$).

16.2 La transition rugueuse

L'état fondamental de la surface étant l'état complètement plat, on comprend aisément qu'au fur et à mesure que la température augmente, les écarts de cet état plat deviendront plus importants. Une fonction de corrélation qui mesure cet écart est

$$G(r) \equiv \langle (h_i - h_{i+r})^2 \rangle, \quad (359)$$

où $\langle \dots \rangle$ indique une moyenne par rapport au poids de Boltzmann qui figure dans (358). On annonce (les arguments suivront) qu'il existe une température

critique T_R à laquelle ces modèles SOS subissent une transition de phase. Celle-ci se manifeste, entre autres, dans le comportement asymptotique de $G(r)$ aux grands r ,

$$G(r) \simeq \begin{cases} \text{cte} < 0 & T < T_R, \\ \log r & T \geq T_R. \end{cases} \quad (360)$$

On dit que pour $T < T_R$ la surface est *lisse*, alors que pour $T \geq T_R$ elle est *rugueuse*. La transition est appelée la *transition rugueuse*. On verra par la suite

- (1) comment la transition rugueuse est reliée à la transition du modèle XY ;
- (2) quelques conséquences expérimentales.

16.3 Du modèle XY de Villain au modèle Discret Gaussien

16.3.1 Le modèle XY de Villain

On se place sur un réseau carré de $N = L \times L$ sites avec des conditions aux bords périodiques dans les deux directions. Un hamiltonien plus général que (315), mais pour lequel on n'introduira pas de nouvelle notation, est

$$\mathcal{H}_{XY} = \sum_{\langle i,j \rangle} U(\phi_i - \phi_j), \quad (361)$$

où $U(\phi)$ est 2π -périodique. Le facteur de Boltzmann correspondant est

$$e^{-\beta \mathcal{H}_{XY}} = \prod_{\langle i,j \rangle} e^{-\beta U(\phi_i - \phi_j)}. \quad (362)$$

On fera le choix particulier dû à Villain (1975),

$$\mathcal{H}_{XY}^{\text{Vill}} = \sum_{\langle i,j \rangle} U^{\text{Vill}}(\phi_i - \phi_j), \quad (363)$$

avec

$$e^{-\beta U^{\text{Vill}}(\phi)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\beta J(\phi - \phi_j - 2\pi n)^2}. \quad (364)$$

On vérifie aisément que (364) conduit à des fonctions $e^{-\beta U(\phi)}$ et $U(\phi)$ qui sont 2π -périodiques, symétriques par échange $\phi - \phi$, et ont leurs extrêmes en $\phi = 0 \bmod 2\pi$ et $\phi = \pi \bmod 2\pi$. La représentation (364) d'une fonction périodique a des avantages qui seront pleinement exploités dans la suite.

16.3.2 La transformation

On substitue U^{Vill} pour U dans (362) et introduit un indice de sommation n_{ij} pour chaque lien $\langle i, j \rangle$ du réseau. La fonction de partition $Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta)$ du

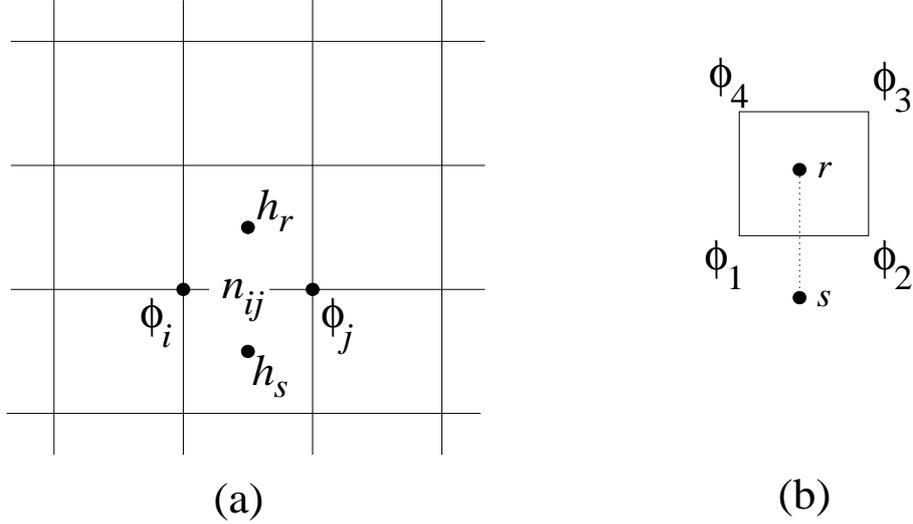


Figure 19: (a) Un réseau carré avec des spins ϕ_i, ϕ_j, \dots , et son réseau dual avec des variables de hauteur h_r, h_s, \dots (b) Arrangement de quatre spins autour d'une plaquette étiquetée r .

hamiltonien de Villain prend alors la forme

$$Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) = \int_0^{2\pi} \prod_i d\phi_i \underbrace{\sum_{\{n_{ij}\}} e^{-\frac{1}{2}\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \overbrace{(\phi_i - \phi_j - 2\pi n_{ij})^2}^{\phi_{ij}}}}_{\exp[-\beta \mathcal{H}_{XY}^{\text{Vill}}]} \quad (365)$$

Pour chaque lien $\langle i, j \rangle$ du réseau on définit

$$\phi_{ij} \equiv \phi_i - \phi_j, \quad (366)$$

étant entendu que dans cette relation on prendra toujours le site i soit à gauche de j , soit en-dessous de j (voir la figure). On veut maintenant passer des variables d'intégrations $\{\phi_i\}$ à des nouvelles variables $\{\phi_{ij}\}$. Or, comme les ϕ_i sont au nombre de N et les ϕ_{ij} au nombre de $2N$, il doit y avoir N relations de dépendance entre les ϕ_{ij} . Il y en a effectivement une par plaquette (= carré élémentaire) du réseau (mais voir la Note en fin de cette section). Pour la plaquette de centre r de la figure 19 elle s'écrit

$$\sum^{(r)} \phi_{ij} \equiv \phi_{12} + \phi_{23} - \phi_{43} - \phi_{14} = 0. \quad (367)$$

On incorpore donc dans le changement de variables un delta de Dirac pour chaque relation, ce qui donne

$$\begin{aligned} Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) &= \int_0^{2\pi} \prod_{\langle i,j \rangle} d\phi_{ij} \sum_{\{n_{ij}\}} e^{-\frac{1}{2}\beta J(\phi_{ij}-2\pi n_{ij})^2} \prod_r \delta\left(\sum^{(r)} \phi_{ij} \bmod 2\pi\right). \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\langle i,j \rangle} d\phi_{ij} e^{-\frac{1}{2}\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \phi_{ij}^2} \prod_r \delta\left(\sum^{(r)} \phi_{ij} \bmod 2\pi\right). \end{aligned} \quad (368)$$

[Dans la première ligne le " mod 2π " s'introduit quand on ramène le domaine d'intégration de chaque ϕ_{ij} à $[0, 2\pi]$; on n'élaborera pas ce point.]

Le pas suivant consiste à éliminer les fonctions delta à l'aide de l'identité

$$\delta(x \bmod 2\pi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(x - 2\pi k) = \frac{1}{2\pi} \sum_{h=-\infty}^{\infty} e^{ihx}. \quad (369)$$

La première égalité est triviale ; la seconde ne l'est aucunement et s'appelle la *formule de sommation de Poisson*. Voir ailleurs pour sa démonstration. En introduisant une variable h_r pour chaque plaquette on trouve

$$Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) = \frac{1}{(2\pi)^N} \sum_{\{h_r\}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\langle i,j \rangle} d\phi_{ij} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \phi_{ij}^2 + \sum_r \left[ih_r \sum^{(r)} \phi_{ij}\right]\right). \quad (370)$$

L'exponentielle dans (370) contient un terme linéaire en h et en ϕ où chaque ϕ_{ij} intervient multiplié par $i(h_r - h_s)$, avec la convention que les centres de plaquette r et s sont situés par rapport aux sites de réseau i et j comme indiqué sur la figure 19. Les $2N$ intégrations sur les ϕ_{ij} sont donc devenues gaussiennes et découplées. On les effectue et, en écrivant $\prod_{\langle r,s \rangle}$ au lieu de $\prod_{\langle i,j \rangle}$, on obtient

$$Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) = \frac{1}{(2\pi)^N} \sum_{\{h_r\}} \prod_{\langle r,s \rangle} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\phi e^{(-\frac{1}{2}\beta J \phi^2 + i(h_r - h_s)\phi)}}_{\left(\frac{2\pi}{\beta J}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2\beta J}(h_r - h_s)^2}} \quad (371)$$

d'où

$$Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) = (\beta J)^{-N} \sum_{\{h_r\}} e^{-\frac{1}{2\beta J} \sum_{\langle r,s \rangle} (h_r - h_s)^2} \quad (372)$$

En comparant (372) avec (358) et (356) on voit que

$$Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) = Z_0(\beta) Z_{\text{DG}}(\tilde{\beta}) \quad (373)$$

si on pose

$$Z_0(\beta) = (\beta J)^{-N}, \quad \tilde{\beta} = \frac{1}{\beta J^2}. \quad (374)$$

En prenant le logarithme de (373) et insérant (374) on trouve la relation

$$\beta F_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) - N \log \beta J = \frac{1}{\beta J^2} F_{\text{DG}}\left(\frac{1}{\beta J^2}\right) \quad (375)$$

entre les énergies libres des modèles Discret Gaussien et XY de Villain.

16.4 Commentaires

Il s'agit d'une relation de *dualité*. D'une part, elle relie un modèle sur un réseau donné (le réseau *primal*) à un autre modèle sur son réseau *dual*, c'est-à-dire obtenu à partir des bisecteurs perpendiculaires des liens du réseau donné. D'autre part, elle relie le comportement haute température du modèle sur le réseau primal (le XY) au comportement basse température du modèle sur le réseau dual (le DG) et *vice versa*. La conclusion la plus importante à tirer de cette relation est que si en fonction de β l'énergie libre $F_{XY}^{\text{Vill}}(\beta)$ exhibe une non-analyticité (donc une transition de phase) pour un certain $\beta = \beta_c$, $F_{DG}(\beta)$ aura une transition de phase pour $\beta = 1/\beta_c J^2$. Or, comme la transition de phase du modèle XY est bien établie, on conclut à la transition de phase du modèle Discret Gaussien. On peut ensuite convertir les moyennes d'intérêt du modèle XY en quantités relatives au modèle DG et *vice versa* en passant par la transformation ci-dessus *mutatis mutandis*. Comme l'une des conséquences, on trouve le comportement asymptotique (360) de la fonction de corrélation $G(r)$.

Note. La fonction de partition $Z_{DG}(\beta)$ de l'équation (358) contient une somme $\sum'_{\{h_r\}}$ alors qu'en (372) nous avons abouti sur une somme $\sum_{\{h_r\}}$ sans prime, et cette dernière est infinie ... Où est l'erreur ?

Afin de simplifier la présentation, on a passé sous silence un détail important. Parmi les N relations (367), il n'y en a (sur un tore) que $N - 1$ qui soient indépendantes : la dernière est la somme des $N - 1$ autres. Si on modifie le calcul pour tenir compte de ce fait, on tombe sur la somme $\sum'_{\{h_r\}}$ avec prime. Pour les détails du calcul voir Ney-Nifle et Hilhorst [NNH95].

16.5 Expériences

Il n'existe guère de matériaux magnétiques qui soient de bonnes réalisations du modèle XY bidimensionnel. [On sait fabriquer, toutefois, des réseaux de jonctions de Josephson qui peuvent être vus comme des modèles XY.] Il en est autrement pour la transition rugueuse. Au premier abord il y a le problème que les cristaux habituels que l'on rencontre couramment dans la vie pratique ne sont pas à l'équilibre à la température ambiante, comme la théorie l'exige. Des expériences ont donc été faites en avec des cristaux métalliques chauffés à plusieurs centaines de degrés. Celles-ci n'ont pas été très concluantes.

Cependant, une toute autre possibilité se présente, à savoir avec des cristaux de ^4He en coexistence avec de l'hélium superfluide. La superfluidité facilite grandement le transport de l'hélium liquide, si bien que le cristal prend très rapidement sa forme d'équilibre.

Ces expériences ont été réalisées à l'ENS de Paris. Voir P.E. Wolf *et al.* [Wetal85] ainsi que l'article de revue de Balibar *et al.* [BAP05].

Afin d'établir la connection entre les expériences et la théorie, une extension de cette dernière est nécessaire au-delà des résultats décrits ci-dessus. Il faut savoir qu'à une température type, la surface d'un cristal montre plusieurs facettes d'orientations différentes, séparées par des parties de surface arrondies.

Ces facettes n'ont pas toutes la même T_R . Quand la température monte, une facette spécifique peut diminuer de taille, puis à une température précise disparaître et laisser la place à une surface arrondie ; inversement, quand la température baisse, il se peut qu'à une température précise une facette plate commence à apparaître en un point précis sur une partie arrondie de la surface. À ce moment, la courbure locale de la surface en ce point tombe brusquement d'une valeur positive vers zéro ; *or, il s'agit encore* (en unités appropriées) *du saut universel de $\pi/2$!* Voir C. Jayaprakash *et al.* [JST83].

C'est ce saut universel qui (parmi d'autres résultats) a été observé avec une très bonne précision à l'ENS.

17 Le gaz de Coulomb sur réseau

17.1 Du modèle DG au gaz de Coulomb sur réseau

Pour une fonction $f(h)$ d'un entier h la somme sur h peut être représentée comme

$$\sum_{h=-\infty}^{\infty} f(h) = \int d\gamma f(\gamma) \underbrace{\sum_{h=-\infty}^{\infty} \delta(\gamma - h)}_{\sum_{q=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i q \gamma}}^{\delta(\gamma \bmod 1)}. \quad (376)$$

On applique cette identité à la somme multiple sur les h_r dans (372) en introduisant autant de variables q_r et γ_r . Ceci donne

$$Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) = Z_0(\beta) \sum_{\{q_r\}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_r d\gamma_r e^{-\frac{1}{2\beta J} \sum_{\langle r,s \rangle} (\gamma_r - \gamma_s)^2 + \sum_r 2\pi i q_r \gamma_r}. \quad (377)$$

L'argument de l'exponentielle, vu comme une fonction des γ_r , est une gaussienne qui est invariante par translation. On peut donc la diagonaliser par transformation de Fourier. On pose, en notant \vec{r}_s les coordonnées du centre de plaquette s ,

$$\hat{\gamma}_{\vec{k}} = N^{-1/2} \sum_s e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_s} \gamma_s, \quad (378)$$

ainsi qu'une définition analogue de $\hat{q}_{\vec{k}}$, où $\vec{k} \equiv (k_x, k_y)$ est un vecteur d'onde compatible avec les conditions aux bords toroïdales,

$$(k_x, k_y) = 2\pi(\kappa_x, \kappa_y)/L, \quad \kappa_x, \kappa_y = 0, 1, 2, \dots, L-1. \quad (379)$$

On trouve

$$Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) = Z_0(\beta) \sum_{\{q_r\}} \int \prod_{\vec{k}} d\hat{\gamma}_{\vec{k}} e^{-\frac{1}{2\beta J} \sum_{\vec{k} \neq 0} \lambda_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{-\vec{k}} + 2\pi i \sum_{\vec{k}} \hat{q}_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{-\vec{k}}} \quad (380)$$

où

$$\begin{aligned} \lambda_{\vec{k}} &= 4(\sin^2 \frac{1}{2} k_x + \sin^2 \frac{1}{2} k_y) \\ &= 2[2 - \cos k_x - \cos k_y] \\ &\simeq k^2, \quad \vec{k} \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (381)$$

Les variables $\hat{\gamma}_{\vec{k}}$ sont maintenant découplées les unes des autres et l'on peut effectuer les intégrations sur elles. Le résultat des intégrations s'écrit

$$\begin{aligned} Z_{XY}^{\text{Vill}}(\beta) &= Z_1(\beta) \sum_{\{q_r\}} e^{-2\pi^2 \beta J \sum_{\vec{k} \neq 0} \lambda_{\vec{k}}^{-1} \hat{q}_{\vec{k}} \hat{q}_{-\vec{k}}} \\ &= Z_1(\beta) \underbrace{\sum_{\{q_r\}} e^{-2\pi^2 \beta J \sum_s \sum_{s'} U_C(\vec{r}_s - \vec{r}_{s'}) q_s q_{s'}}_{Z_C(\beta)}. \end{aligned} \quad (382)$$

où

$$Z_1(\beta) = Z_0(\beta) \prod_{\vec{k} \neq 0} \left(\frac{2\pi\beta J}{\lambda_{\vec{k}}} \right)^{1/2} \quad (383)$$

Ici le potentiel $U_C(\vec{r})$ est donné par

$$\begin{aligned} U_C(\vec{r}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} - 1}{\lambda_{\vec{k}}} \\ &\simeq \frac{1}{\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y \frac{\cos \vec{k} \cdot \vec{r} - 1}{\sin^2 \frac{1}{2} k_x + \sin^2 \frac{1}{2} k_y}. \end{aligned} \quad (384)$$

Il a le développement asymptotique

$$U_C(\vec{r}) = -\frac{1}{2\pi} \log r - \tilde{E}_c + o(1), \quad r \rightarrow \infty, \quad (385)$$

avec \tilde{E}_c donné par

$$\tilde{E}_c = (4\pi)^{-1} \log(8e^{2\gamma}), \quad (386)$$

où $\gamma = 0.57721\dots$ est la constante d'Euler. [Le terme logarithmique dans le développement (385) est facile à trouver, la constante exige plus de travail.] Le logarithme dominant est le potentiel de Coulomb en deux dimensions et la somme sur les q_r dans (382) représente donc la fonction de partition $Z_C(\beta)$ d'un système de charges bidimensionnelles : on a trouvé un 'gaz de Coulomb sur réseau'. On complétera cette conclusion par d'autres commentaires après une analyse un peu plus poussée.

On voit que, selon (384), on a $U_C(0) = 0$, et il semblerait donc que la fonction de partition ne contienne pas de terme de fugacité comme il en apparaît dans (328). Toutefois, si on tient compte du terme constant dans le développement (385) et du fait que le système doit être neutre, on peut réécrire l'interaction comme

$$\sum_s \sum_{s'(\neq s)} U(\vec{r}_s - \vec{r}_{s'}) q_s q_{s'} \simeq -\frac{1}{2\pi} \sum_s \sum_{s'(\neq s)} \log |\vec{r}_s - \vec{r}_{s'}| - \tilde{E}_c \sum_s \sum_{s'(\neq s)} q_s q_{s'}. \quad (387)$$

Puisque $\sum_s q_s = 0$ (neutralité, voir la Note en fin de section), on a aussi $q_s = -\sum_{s'(\neq s)} q'_{s'}$ et donc le deuxième terme à droite dans l'expression (387) peut se mettre sous la forme

$$-\tilde{E}_c \sum_s \sum_{s'(\neq s)} q_s q_{s'} = \tilde{E}_c \sum_s q_s^2, \quad (388)$$

ce qui fait que le poids de Boltzmann contient en fait un facteur fugacité

$$y^{\sum_s q_s^2} = e^{-\beta E_c \sum_s q_s^2}, \quad (389)$$

où, quand on utilise (386),

$$E_c = 2\pi^2 J \tilde{E}_c = \frac{\pi J}{2} \log(8e^{2\gamma}) = 3.4919\dots J. \quad (390)$$

17.2 Commentaires

1. Remarquer que chaque paire (s, s') intervient deux fois dans la double somme dans l'exponentielle de (382). Le coefficient de l'interaction logarithmique est donc ici exactement le même que celui trouvé plus heuristiquement dans (328).

2. On a réussi ici à isoler exactement les degrés de liberté des vortex, chose qui avait été faite au chapitre **15** moyennant une approximation de validité difficile à cerner.

3. On peut encore aller un peu plus loin, comme le montre l'exercice suivant.

Exercice. [à compléter] Montrer que l'expression $Z_1(\beta) = (\beta J)^{-N}$ qui apparaît ci-dessus est exactement égale à la fonction de partition du modèle XY en approximation ondes de spin.

4. On a trouvé une expression explicite pour l'énergie E_c du coeur d'un vortex dans le modèle XY de Villain.

5. Les charges du gaz de Coulomb sont situées sur les mêmes sites de réseau que les variables de hauteur du modèle DG. Cependant, la transformation de ce chapitre inverse encore une fois la température, si bien que la température du gaz de Coulomb est égale à celle du modèle XY de Villain qu'on avait initialement.

Note. L'équation (377) qui était le point de départ de ce chapitre, vient de (372) du chapitre précédent, dans laquelle la somme sur $\{h_r\}$ aurait dû être marquée par une prime comme condition d'ancrage. Si on apporte les modifications nécessaires, on trouve que cette condition d'ancrage conduit à la condition de neutralité pour les charges $\{q_r\}$. Nous avons opté pour cette présentation simplifiée. Voir par exemple [JKKN77, NNH95] pour les détails.

18 La fusion bidimensionnelle

19 La transition superfluide de couches de ^4He

Voir : D.R. Nelson, *Defect-mediated phase transitions*, in : Domb & Lebowitz, *Phase transitions and critical phenomena*, Vol. 7.

Pour une couche superfluide de ^4He on peut écrire le hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\rho_s(T) \int d^2\vec{r} \vec{v}_s^2(\vec{r}) \quad (391)$$

où ρ_s est la densité surfacique du superfluide et \vec{v}_s est sa vitesse. Cette expression ne représente autre chose que la densité de l'énergie cinétique $\frac{1}{2}\rho_s v^2$ intégrée sur le plan. Le condensat superfluide est décrit par une fonction d'onde contenant un facteur de phase $e^{i\theta(\vec{r})}$. La mécanique quantique nous apprend alors que la vitesse est donnée par

$$\vec{v}_s(\vec{r}) = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla}\theta(\vec{r}), \quad (392)$$

où m est la masse d'un atome de ^4He . Il s'ensuit que

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}J \int d^2\vec{r} |\vec{\nabla}\theta|^2, \quad (393)$$

avec $J = (\hbar^2/m^2)\rho_s(T)$. Cette expression est identique à l'expression (317) du modèle XY en approximation ondes de spin.

Si \vec{v}_s était donnée par $(\hbar/m)\vec{\nabla}\theta$ en tout point, on aurait $\vec{\nabla} \times \vec{v}_s = 0$ et l'écoulement du superfluide serait irrotationnel. Cependant, autour de points isolés, $\theta(\vec{r})$ peut être singulier de telle manière que l'on a

$$\oint \vec{v}_s \cdot d\vec{\ell} = \frac{2\pi\hbar}{m} q, \quad q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (394)$$

donc des vortex ! Il s'ensuit qu'on peut appliquer à ces couches de ^4He la théorie du modèle XY avec le remplacement

$$K \mapsto \frac{\hbar^2 \rho_s(T)}{m^2 k_B T}. \quad (395)$$

On décompose $\theta(\vec{r})$ en une phase $\phi(\vec{r})$ non singulière et des vortex, et ainsi de suite. La densité superfluide mesurée dans les expériences, que l'on notera $\rho_s^R(T)$ ("R" pour "renormalisée") est déterminée par le couplage $K(\infty)$. Celui-ci subit, selon la théorie du modèle XY, un saut universel égal à $2/\pi$ au passage de la température critique T_c . Donc la prédiction pour le modèle XY est que

$$\lim_{T \rightarrow T_c^-} \frac{\hbar^2 \rho_s^R(T)}{m^2 k_B T} = \frac{2}{\pi} \quad (396)$$

ou encore

$$\frac{\rho_s^R(T_c^-)}{T_c^-} = \frac{2m^2 k_B}{\pi \hbar^2} = 3.491 \times 10^{-9} \text{ g cm}^{-2} \text{ K}^{-1}. \quad (397)$$

Il est à noter que dans les expériences la température critique T_c dépend du substrat et de l'épaisseur de la couche. Néanmoins, dans tous les cas la relation (397) s'avère vérifiée avec une bonne précision. Il s'agit d'une triomphe de la théorie.

Voir I. Rudnick, *Phys. Rev. Lett.* 40 (1978) 1454 ; D.J. Bishop and J.D. Reppy, *Phys. Rev. Lett.* 40 (1978) 1727.

20 Moteurs moléculaires

Ce chapitre traite de quelques aspects des moteurs moléculaires que l'on peut comprendre à l'aide de l'équation de Fokker–Planck introduite au chapitre 4.

20.1 Introduction

Smoluchowski 1912. Feynman 1963.

Articles:

P. Reimann and P. Hänggi, *Appl. Phys. A* **75** (2002) 169.

C. van den Broeck *et al.*, *New. J. Physics* **7** (2005) 10.

On considère, à titre d'introduction, deux situations physiques.

1. *La roue à rochet.* Une roue à rochet (anglais : *ratchet*) peut tourner sans frottement autour d'un axe perpendiculaire au papier (voir la figure xxx). On l'équipe d'un cliquet (anglais : *pawl*). On enferme maintenant la roue dans un récipient que l'on remplit avec un gaz (on peut imaginer un gaz parfait) qui est à l'équilibre à une température T . Les molécules du gaz exerceront une force fluctuante sur la roue et sur le cliquet.

Question : la roue va-t-elle tourner dans le sens de la flèche ?

Réponse : non ! les principes de la thermodynamique l'interdisent.

Le premier raisonnement qui permet de le voir est le suivant. L'ensemble roue+cliquet+gaz est à l'équilibre. Imaginez que la roue tournerait à une vitesse angulaire moyenne de ω_0 ; elle pourrait alors faire remonter une masse m (certes moyennant une réduction de sa vitesse angulaire) et on aurait un système à l'équilibre qui fournirait du travail ; ce qui constituerait une contradiction avec le deuxième principe de la thermodynamique³.

Dans la littérature on trouve des extensions de ces considérations : on prolonge l'axe de la roue, y attache un autre dispositif (deuxième roue,...), que l'on plonge dans un réservoir à une température T' , *etc.* On ne poursuivra pas ici ces idées.

2. *L'épi de blé.* Cet exemple remonte aux souvenirs de jeunesse de l'auteur. Un promeneur à la campagne cueille un épi de blé et l'introduit, tête de l'épi vers le haut, entre les manchettes de son pull et de son manteau. Au cours de la promenade, l'épi va monter en direction de l'épaule à la suite des mouvements aléatoires du bras du promeneur.

Quelles sont les différences avec le cas précédent ? Les voici :

- il y a un déplacement net dans une direction privilégiée
- le système bras+épi n'est pas à l'équilibre
- le mouvement du bras cause une force extérieure sur l'épi ; cette force est aléatoirement fluctuante

³*Rappel.* Le deuxième principe se formule de plusieurs manières différentes, dont : *On ne peut pas faire du travail à un système à l'équilibre dont le seul résultat serait une baisse de sa température.* Sousentendu : la température d'un système quelque part ailleurs doit augmenter.

- cependant, ses fluctuations sont *rectifiées* : l'épi ne profite que de la partie de la force qui le pousse vers le haut
- cette rectification n'est possible qu'à cause de l'asymétrie de l'épi, qui a une tête et une queue
- la force extérieure fournit du travail contre la pesanteur (évidemment l'épi se déplacerait également si le "promeneur" était allongé et bougeait son bras aléatoirement dans un plan horizontal).

Ces deux exemples nous amènent à la question suivante :

Dans quelles conditions peut-on faire faire du travail à une force fluctuante (de moyenne nulle) par rectification ?

Pertinent pour répondre à cette question est le *principe de Curie* (Pierre Curie, 1984) :

Si un phénomène physique n'est pas interdit par une symétrie, il sera réalisé dans la nature.

On ne s'interrogera pas sur le bien-fondé philosophique de ce principe, mais l'appliquera aux deux exemples exposés ci-dessus.

D'abord, l'*épi de blé* n'étant pas symétrique, on peut affirmer que son déplacement dans une direction privilégiée était attendu sur la base du principe de Curie. Mais, la *roue à rochet* n'étant pas symétrique non plus, ne devrait-elle pas tourner dans un sens privilégié selon le même principe ? La réponse est négative, et ceci à cause de l'existence d'une symétrie un peu cachée : il s'agit de la réversibilité (= invariance par renversement du temps) des équations microscopiques du mouvement, combinée avec le fait que le système est à l'équilibre. Cette symétrie interdit à la roue de tourner.

Nous nous étendons un peu plus sur ce point. On peut tenter de décrire le mouvement de la roue à un niveau mésoscopique, par exemple moyennant une équation maîtresse ou une équation de Langevin pour son angle de rotation. La réversibilité du mouvement se manifeste alors dans les relations de bilan détaillé que doit satisfaire ce système ; et celles-ci conduiront à nouveau à la conclusion qu'en moyenne la roue ne tourne pas.

Le principe de Curie est donc le deuxième raisonnement permettant de voir ce que disait déjà la thermodynamique : la roue ne tournera pas.

Cependant, également selon ce principe, dès qu'on force un système dans un état stationnaire qui n'est pas un état d'équilibre, et qu'il n'y a plus de symétrie restante, la rectification de fluctuations devient non seulement possible, mais il faut s'y attendre.

20.2 Mouvement brownien dans un potentiel

Dans de nombreux textes théoriques sur les moteurs moléculaires on trouve un exposé du même type qu'on va donner ici. On considère une particule brownienne dans un potentiel $V(x)$ qui est L -périodique et asymétrique. Un exemple en est le potentiel en dents de scie (anglais : *sawtooth potential*) exhibé sur la figure 20 ; on peut imaginer que ce potentiel représente les dents de la roue à rochet et la particule la position du cliquet, où encore qu'il

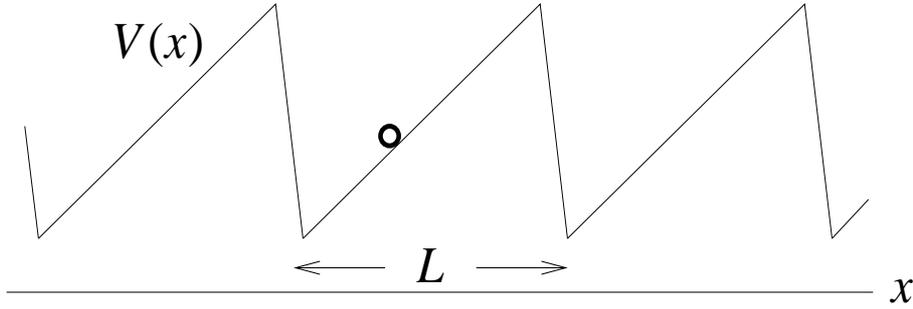


Figure 20: Le potentiel en dents de scie comme exemple d'un potentiel périodique et asymétrique.

représente la répétition périodique des unités chimiques le long d'une chaîne macromoléculaire. Mais le cadre de la discussion ci-dessous est plus général.

Soit $p(x)$ la loi de probabilité de la position x de la particule. Son mouvement brownien est décrit par une équation de Fokker-Planck qui incorpore les relations de bilan détaillé,

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} V'(x)p + k_B T \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (398)$$

On cherche l'état stationnaire $p^{\text{st}}(x)$, qui doit satisfaire à

$$\frac{\partial p^{\text{st}}(x)}{\partial t} = 0, \quad (399a)$$

$$p^{\text{st}}(x + L) = p^{\text{st}}(x). \quad (399b)$$

De (398) et (399) on déduit

$$V'(x)p^{\text{st}}(x) + k_B T \frac{dp^{\text{st}}(x)}{dx} = -J^{\text{st}}, \quad (400)$$

où J^{st} est une constante d'intégration représentant le courant de probabilité. La solution de (400) est

$$p^{\text{st}}(x) = e^{-\beta V(x)} \left[p^{\text{st}}(0)e^{\beta V(0)} - \beta J^{\text{st}} \int_0^x d\xi e^{\beta V'(\xi)} \right], \quad (401)$$

où $\beta = 1/k_B T$ et où une nouvelle constante d'intégration $p^{\text{st}}(0)$ apparaît. Celle-ci est déterminée par une condition de normalisation arbitraire,

$$\int_0^L dx p^{\text{st}}(x) = \mathcal{N}. \quad (402)$$

Si l'on impose à (401) la condition de périodicité (399b), on est conduit à

$$J^{\text{st}} = 0, \quad p^{\text{st}}(x) = \frac{e^{-\beta V(x)}}{Z}, \quad Z = \frac{\mathcal{N}}{\int_0^L d\xi e^{-\beta V(\xi)}}. \quad (403)$$

On a donc montré que l'état stationnaire est un état d'équilibre, malgré l'asymétrie du potentiel, et que le courant J^{st} y est nul.

Exercice 60. Dédurre toutes ces relations de (398) et (399).

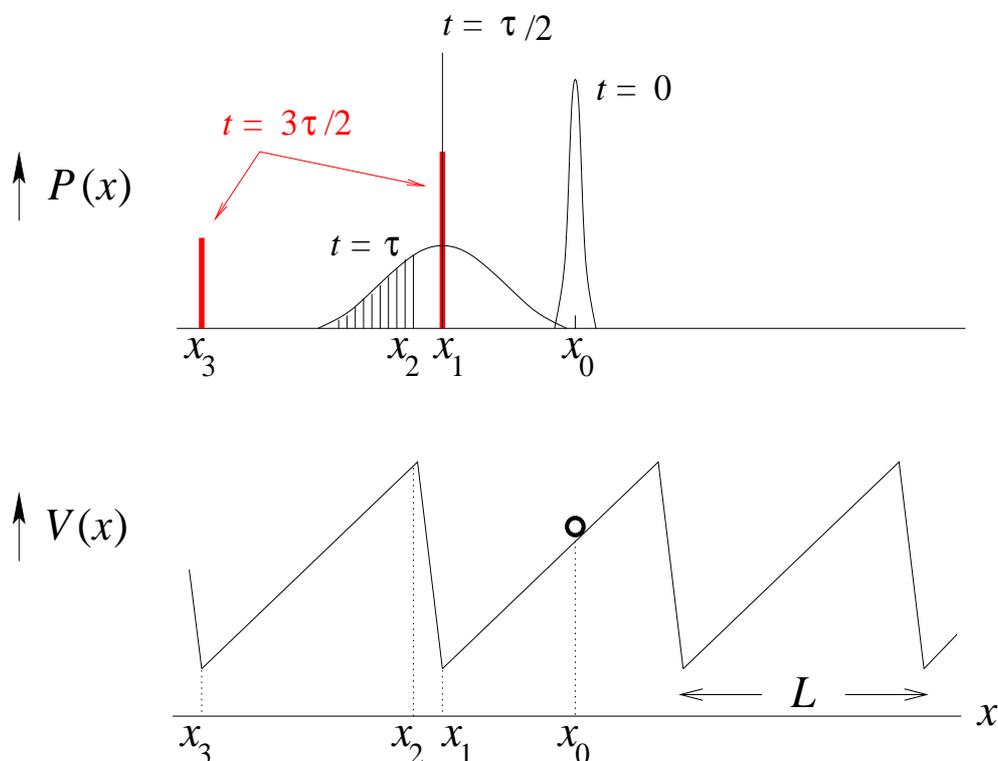


Figure 21: Le potentiel en dents de scie comme exemple d'un potentiel périodique et asymétrique.

20.3 Un mouvement brownien hors d'équilibre

On s'intéresse maintenant au courant dans un système composé d'une particule brownienne, qui est maintenu hors de son état d'équilibre. On notera ce courant J_* , où l'indice inférieur indique l'une quelconque parmi une multitude de façons d'empêcher l'installation de l'équilibre.

On considérera ci-dessous le cas spécifique où l'on impose au système de la section précédente une température qui varie périodiquement avec le temps,

$$T \mapsto T(t) = T_0 - T_1 \cos^2 \frac{\pi t}{\tau}. \quad (404)$$

On appellera J_* le courant dans ce nouvel état. Il est à noter que la variation temporelle de la température $T(t)$ ne favorise *a priori* aucune des deux directions spatiales. Il est assez difficile de deviner intuitivement que l'équation de Fokker–Planck (398) avec la température (404) [et avec les conditions (399a), (399b) et (402) comme avant] donne lieu à un courant $J_* \neq 0$. C'est pourtant le cas, en accord avec le principe de Curie. Mais même si on admet ce principe, il n'est nullement évident de prévoir intuitivement le signe du courant J_* .

On ne sait pas résoudre analytiquement l'équation de Fokker–Planck (398) avec (404). Nous nous limiterons donc à exhiber l'origine du courant non nul sur le cas suivant très simplifié dans lequel la température saute périodiquement

entre $T = 0$ et $T = T_0$,

$$T(t) = \begin{cases} 0 & 0 < t < \frac{1}{2}\tau, \\ T_0 & \frac{1}{2}\tau < t < \tau, \end{cases}$$

$$T(t + \tau) = T(t), \quad (405)$$

où l'on prendra $k_B T$ grand devant l'amplitude du potentiel. On peut alors analyser le mouvement de la particule brownienne comme suit (voir la figure 21).

$t = 0$ La particule se trouve localisée autour de $x = x_0$.

$t = \frac{1}{2}\tau$ Après une demi-période à la température $T = 0$, et si on admet que τ est suffisamment longue, la particule se trouve en $x = x_1$, soit au minimum du potentiel qu'elle est capable d'atteindre à partir de $x = x_0$.

$t = \tau$ Pendant une demi-période à $T = T_0$ la particule exécute un mouvement brownien dont le coefficient de diffusion est $D = k_B T_0$ et qui en bonne approximation est indépendante de la présence du potentiel ; par conséquent sa position se trouve distribuée selon une gaussienne de largeur $2k_B T_0 \tau$ centrée en $x = x_1$.

$t = \frac{3}{2}\tau$ Pendant une nouvelle demi-période à $T = 0$, la particule descend la pente où elle se trouve jusqu'à atteindre un minimum de $V(x)$. Ce minimum sera celui en $x = x_3$ si à $t = \tau$ la particule se trouvait à gauche de x_2 , et celui en $x = x_1$ si elle se trouvait à droite de x_2 (on néglige ici les queues de la distribution qui peupleraient des minima plus éloignés).

Quand on compare les situations à $t = \frac{1}{2}\tau$ et à $t = \frac{3}{2}\tau$, on voit qu'un transport de probabilité vers la gauche a eu lieu, donc $J_* \neq 0$.

On affirme maintenant sans démonstration qu'il y aura toujours un courant de probabilité même si

- la température varie selon (404) au lieu de (405) ;
- la température varie aléatoirement ;
- ... ;

le tout en accord avec le principe de Curie : les fluctuations du mouvement brownien sont rectifiées.

Exercice 61. Une approximation draconienne consiste à admettre que sous l'effet de la diffusion à la température T_0 , une particule initialement en $x = 0$ a après un temps t une distribution uniforme dans un interval $(-k_B T_0, k_B T_0)$. Dans cette approximation, trouver une expression pour le courant J_* . Quelle relation devez-vous admettre entre la période L du potentiel et la distance $k_B T_0 \tau$? [*Réponse: $J_* = **$*]

20.4 Travail contre une force : le moteur

On modifie maintenant le problème étudié dans la section 20.2 d'une autre façon. On soumet le mouvement brownien à une force extérieure constante F ,

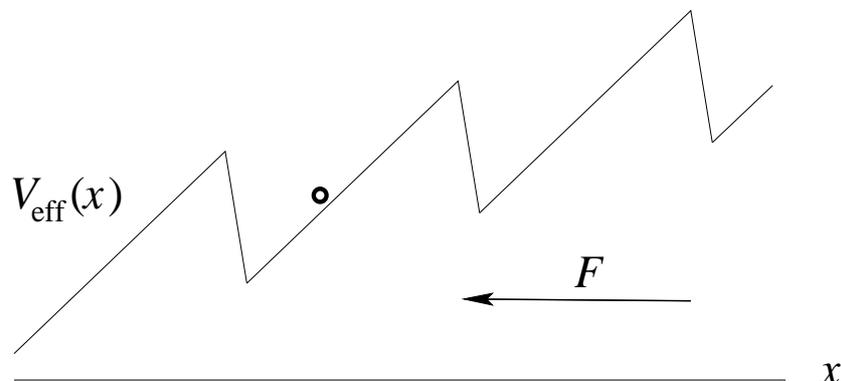


Figure 22: Le potentiel en dents de scie $V_{\text{eff}}(x) = V(x) - xF$ comme exemple d'un potentiel périodique et asymétrique.

si bien que la particule brownienne se trouve dans un potentiel effectif $V_{\text{eff}}(x)$ donné par

$$V_{\text{eff}}(x) = V(x) - xF. \quad (406)$$

Dans ce contexte on appelle F la xxx (anglais : *load force*). La figure 22, où $F < 0$, montre $V_{\text{eff}}(x)$ pour le cas particulier où $V(x)$ est le potentiel en dents de scie de la figure 20.

On se place d'abord dans le cas d'une température constante, $T(t) = T_0$. L'équation du mouvement est alors l'équation de Fokker-Planck (398) avec $V'(x)$ remplacé par $V'_{\text{eff}}(x) = V'(x) - F$. La solution stationnaire $p_F^{\text{st}}(x)$, que l'on peut trouver par la méthode de la section 20.2, fait apparaître un courant

$$J^{\text{st}}(F) = \text{cte} \times F. \quad (407)$$

Exercice 62. Trouver explicitement les expressions de $p_F^{\text{st}}(x)$ et de $J^{\text{st}}(F)$.

On en arrive maintenant au point essentiel. Sur la figure 23, le courant $J_{\text{eq}}(F)$ de l'équation (407) est représenté par la ligne pleine, valable pour $T = T_0$, et passant par l'origine du plan FJ . En présence d'une température *non constante* (ou plus généralement d'une cause quelconque forçant le système hors de son état d'équilibre), on avait trouvé [en section 20.3] que même si $F = 0$, il y aura un courant J_* non nul ; or, on a représenté celui-ci sur la figure 23 par le point marqué $J_*(0)$. Si maintenant, alors que le système *n'est pas* à l'équilibre, on impose la force extérieure F , la fonction $J_*(F)$, par continuité, doit avoir l'air qualitativement comme le pointillé sur la figure. C'est dire qu'un régime $F_* < F < 0$ apparaît où le courant $J_*(F)$ est opposé à la force F .

Autrement dit, à cause de son état hors d'équilibre, le système fournit un travail contre la force extérieure : ceci est le moteur moléculaire.

Remarque. Au lieu des équations de Fokker-Planck de cette section et des précédentes, on peut alternativement étudier les équations de Langevin équivalentes.

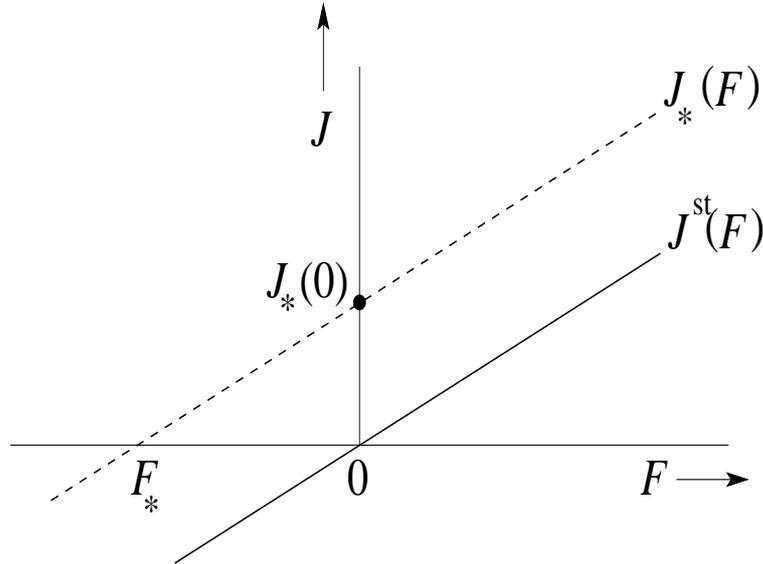


Figure 23: Le courant J en fonction de la force F appliquée à un système à l'équilibre [$J^{\text{st}}(F)$] et à un système qui n'est pas à l'équilibre [$J_*(F)$].

20.5 Un modèle à trois états

Voir : Lee *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 220601. Ces auteurs ont conçu le modèle le plus simple sur lequel on peut illustrer, moyennant un calcul analytique, le phénomène d'un courant non nul causé par des fluctuations de moyenne nulle.

20.5.1 États stationnaires et états d'équilibre

On considère un réseau de sites unidimensionnel de périodicité 3, sur lequel une "particule" effectue, à chaque instant $t = 1, 2, \dots$, un pas vers la gauche ou vers la droite avec des probabilités définies par le schéma de la figure 24. On note $P_n(t)$ la probabilité pour qu'à l'instant t la particule se trouve sur le site $n = 1, 2, 3$ modulo 3. On a alors la chaîne de Markov

$$P_n(t+1) = \sum_{n'} M_{nn'} P_{n'}(t), \quad t = 0, 1, 2, \dots \quad (408)$$

avec, si on pose $\tilde{p} = 1 - p$, $\tilde{q} = 1 - q$, $\tilde{r} = 1 - r$,

$$M = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{q} & r \\ p & 0 & \tilde{r} \\ \tilde{p} & q & 0 \end{pmatrix}. \quad (409)$$

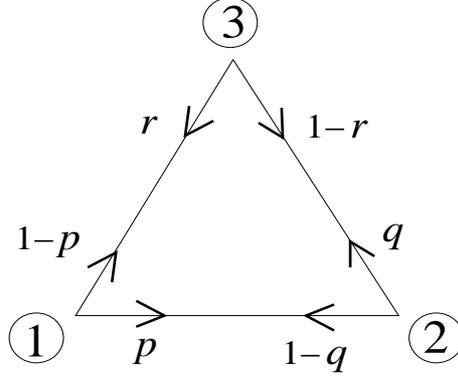


Figure 24: Les probabilités de transition sur une chaîne de sites unidimensionnelle 3-périodique.

Pour trouver l'état stationnaire P_n^{st} on résout $P^{\text{st}} = MP^{\text{st}}$, ce qui donne

$$\begin{aligned} P_1^{\text{st}} &= \tilde{q} + rq, \\ P_2^{\text{st}} &= \tilde{r} + pr, \\ P_3^{\text{st}} &= \tilde{p} + qp, \end{aligned} \tag{410}$$

où

$$D = 2 + pqr + \tilde{p}\tilde{q}\tilde{r}. \tag{411}$$

Pour calculer le courant de probabilité J dans cet état, on soustrait les flots de probabilité dans les deux sens entre deux sites voisins arbitraires, par exemple

$$J = P_1^{\text{st}}p - P_2^{\text{st}}q. \tag{412}$$

Après substitution de (410) dans (412) on trouve

$$J(p, q, r) = \frac{pqr - \tilde{p}\tilde{q}\tilde{r}}{2 + pqr + \tilde{p}\tilde{q}\tilde{r}}, \tag{413}$$

ce qui est effectivement indépendant de la paire (1, 2) des sites choisie. Selon l'équation (413), il y a dans l'espace des paramètres (p, q, r) un sous-espace bidimensionnel défini par

$$pqr = (1 - p)(1 - q)(1 - r) \tag{414}$$

où le courant J s'annule. Dans ce modèle la condition $J = 0$ est automatiquement accompagnée de bilan détaillé, comme le montre (412). Par conséquent nous avons ici la correspondance

$$\begin{aligned} J = 0 &\Leftrightarrow \text{équilibre ;} \\ J \neq 0 &\Leftrightarrow \text{une force } F \text{ maintient un courant,} \end{aligned}$$

la force F étant définie implicitement en termes des paramètres p, q et r . Ce modèle combine donc les effets discutés dans les sections 20.2 et 20.3. [***]

20.5.2 Rectification de fluctuations

On se place dans un état stationnaire avec un courant J . On applique maintenant au système un bruit supplémentaire, de moyenne nulle, selon la règle suivante qui dépend d'un paramètre γ . À chaque instant de temps $t = 1, 2, \dots$

- avec la probabilité $1 - \gamma$, on applique la règle de la section 20.5.1 ;
- avec la probabilité γ , on déplace la particule aléatoirement et avec probabilités égales à gauche ou à droite.

Il est à noter que la “perturbation γ ” est de moyenne nulle et donc, tout comme la température $T(t)$ dans la section 20.3, ne favorise *a priori* aucune des deux directions spatiales. Que va-t-il se passer ? Afin de répondre à cette question, on note que la prescription ci-dessus équivaut à ce qu'on se donne une nouvelle matrice M , que l'on appellera M_γ , à savoir

$$M_\gamma = \begin{pmatrix} 0 & (1 - \gamma)\tilde{q} + \frac{1}{2}\gamma & (1 - \gamma)r + \frac{1}{2}\gamma \\ (1 - \gamma)p + \frac{1}{2}\gamma & 0 & (1 - \gamma)\tilde{r} + \frac{1}{2}\gamma \\ (1 - \gamma)\tilde{p} + \frac{1}{2}\gamma & (1 - \gamma)q + \frac{1}{2}\gamma & 0 \end{pmatrix}. \quad (415)$$

Pour trouver le courant $J_\gamma(p, q, r)$ correspondant, on peut directement faire les substitutions nécessaires dans l'expression (413). Toutefois, afin de simplifier l'algèbre et de rendre le résultat plus transparent, plaçons-nous dans le cas particulier où

$$p, q, r \text{ tels que } J_\gamma \sim \gamma \ll 1.$$

En développant J_γ dans ces conditions on trouve

$$\begin{aligned} J_\gamma(p, q, r) &= \frac{\overbrace{pqr - \tilde{p}\tilde{q}\tilde{r}}^{\mathcal{O}(\gamma)} + \frac{1}{2}\gamma(p + q + r - \tilde{p} - \tilde{q} - \tilde{r})}{D} + \mathcal{O}(\gamma^2) \\ &= J_0(p, q, r) + \frac{\gamma}{2D}(p + q + r - \tilde{p} - \tilde{q} - \tilde{r}) + \mathcal{O}(\gamma^2). \end{aligned} \quad (416)$$

On voit que

– si p, q, r sont tels que $J_0 = 0$, c'est-à-dire que le système est à l'équilibre, la perturbation γ fera apparaître un courant $J_\gamma \neq 0$; cette perturbation a donc le même type d'effet que la variation temporelle de la température en section 20.3 ;

– si $J_0 \neq 0$, la perturbation γ causera une contribution supplémentaire au courant qui, dans un régime approprié des paramètres, peut être de signe opposé et pour un γ suffisamment grand même renverser la direction du courant. On retrouve donc ici le même phénomène qu'en section 20.3.

Exemple numérique. On prend $p = q = \frac{3}{4}$ et laisse r libre. Cette dernière variable joue alors le rôle de la force F et on note le courant $J_\gamma(r)$. Par substitution dans (416) et (411) on trouve

$$J_\gamma(r) = \frac{-1 + 10r}{33 + 8r} + \gamma \frac{16(1 - r)}{33 + 8r} + \mathcal{O}(\gamma^2). \quad (417)$$

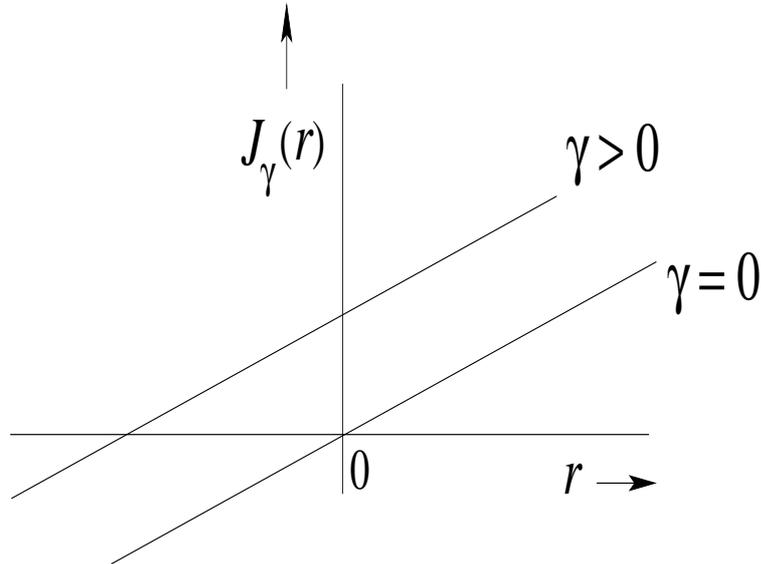


Figure 25: Le courant J_γ en fonction de la force r appliquée à un système à l'équilibre [$\gamma = 0$] et à un système qui n'est pas à l'équilibre [$\gamma > 0$].

Écrivons maintenant

$$r = \frac{1}{10} + \Delta r \quad (418)$$

où Δr est petit et du même ordre que γ . Avec (418) il vient

$$J_\gamma(r) = \frac{5\Delta r + 72\gamma}{169} + \mathcal{O}(\gamma^2). \quad (419)$$

Les fonctions $J_0(r)$ et $J_\gamma(r)$ de cette section sont analogues à respectivement $J^{\text{st}}(F)$ et $J_*(F)$ de la section 20.4 et ont un comportement qualitativement identique. En particulier, on voit que pour un γ donné il existe un régime $-\frac{72}{5}\gamma < \Delta r < 0$ où le courant $J_\gamma(r)$ est opposé à la “force” Δr . Voir la figure 25.

20.5.3 Les jeux de Parrondo

21 Géométrie aléatoire : les cellules de Voronoi

22 Solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel

22.1 Introduction.

N.V. Vdovichenko (1964 en russe) *JETP* **20** (1965) 477

et (1965 en russe) *JETP* **21** (1965) 350.

Le travail de Vdovichenko est résumé dans H.E. Stanley, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, (Clarendon Press 1971), Appendix B.

Ici nous en présentons une version "grand détail".

22.2 Le problème. On considère le hamiltonien d'Ising \mathcal{H}_N sur un réseau arbitraire de N sites distingués par des indices i, j, \dots ,

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad (420)$$

où les $s_i = \pm 1$ sont des spins d'Ising. Soit T la température et notons $K = J/k_B T = \beta J$.

La fonction de partition $Z_N(K)$ correspondant à \mathcal{H}_N est

$$Z_N(K) = \sum_{\{s_k = \pm 1\}} e^{K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j}. \quad (421)$$

On en déduit l'énergie libre par site dans la limite thermodynamique, $f(K)$, qui est définie par

$$-\beta f(\beta J) = \lim_{N \rightarrow \infty} \log Z_N(\beta J), \quad (422)$$

et la question de ce chapitre est : comment calculer $f(K)$ explicitement ?

Remarque. On peut poser $J = 1$ et $k_B = 1$, ce qui laisse $K = \beta = 1/T$ comme seul paramètre du problème.

22.3 Transformation en un problème de comptage de diagrammes "pairs" de liens. On sait que pour toute variable binaire $\xi = \pm 1$ on a

$$\begin{aligned} e^{K\xi} &= \cosh K + \xi \sinh K \\ &= \cosh K (1 + \underbrace{\xi \tanh K}_{\equiv v}). \end{aligned} \quad (423)$$

En employant (423) dans (421) on obtient, si P est le nombre de paires $\langle i, j \rangle$,

$$\begin{aligned} Z_N(K) &= \sum_{\{s_k\}} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{K s_i s_j} \\ &= (\cosh K)^P \sum_{\{s_k\}} \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + v s_i s_j). \end{aligned} \quad (424)$$

Dans cette expression, l'expansion du produit $\prod_{\langle i,j \rangle}$ conduit à une somme de 2^P termes dont chacun peut être représenté par un diagramme de liens sur le réseau tel que

$$\begin{aligned} \text{lien } \langle i, j \rangle \text{ absent} &\Leftrightarrow \text{facteur } 1 ; \\ \text{lien } \langle i, j \rangle \text{ présent} &\Leftrightarrow \text{facteur } v s_i s_j . \end{aligned} \quad (425)$$

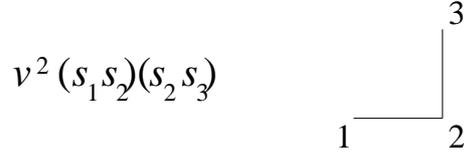


Figure 26: Un diagramme de deux liens.

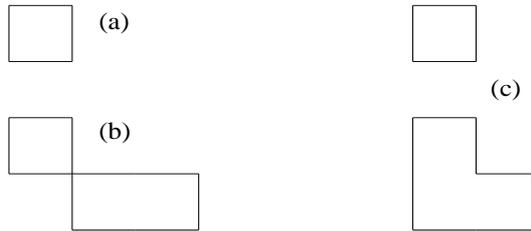


Figure 27: Exemples de diagrammes pairs. (a) Une boucle, (b) une boucle avec intersection, (c) un diagramme composé de deux boucles.

Exemple. Voir la figure 26.

Comme

$$\sum_{s_k=\pm 1} s_k^n = \begin{cases} 2 & n \text{ pair,} \\ 0 & n \text{ impair,} \end{cases} \quad (426)$$

ne survivront à la somme sur $\{s_k\}$ que les diagrammes dont tous les vortex sont pairs (= ont un nombre pair de liens) ; on les appellera les *diagrammes pairs*. Des exemples de diagrammes pairs sont montés sur la figure 27.

Exemple. Dans l'expansion du produit, un diagramme pair de ℓ liens donne, après la sommation sur $\{s_k\}$, une contribution $2^N v^\ell$. Soit $g(\ell)$ le nombre de diagrammes pairs de ℓ liens existant sur le réseau ; formellement

$$g(\ell) = \sum_{\substack{\text{diag pairs} \\ \text{à } \ell \text{ liens}}} 1. \quad (427)$$

On a en particulier $g(0) = 1$. On peut alors réécrire (424) comme

$$Z_N(K) = 2^N (\cosh K)^P \sum_{\ell=0}^P g(\ell) v^\ell. \quad (428)$$

Remarque. Dans la somme sur ℓ , on peut remplacer la borne supérieure P par ∞ , sachant que $g(\ell) = 0$ pour $\ell > P$.

Exemple. Pour le réseau carré avec des conditions aux bords périodiques

(toroïdales) on a $g(\ell) = 0$ pour tout ℓ impair, et puis

$$\begin{aligned} g(0) &= 1, & g(6) &= 2N, \\ g(2) &= 0, & g(8) &= \frac{1}{2}N^2 + \frac{7}{2}N. \\ g(4) &= N, \end{aligned} \tag{429}$$

Exercice 63. Dédurre (429) en trouvant les diagrammes qui contribuent à chacun des $g(\ell)$.

Remarque. Jusqu'ici le réseau pouvait être de dimension arbitraire. Cependant, personne ne sait calculer $g(\ell)$ pour un réseau en dimension supérieure à deux. Désormais on considérera un réseau carré avec des conditions aux bords périodiques, donc $P = 2N$.

22.4 Remplacement des diagrammes pairs par des diagrammes de boucles. Certains diagrammes sont déjà des boucles ou des collections de boucles. C'est le cas des diagrammes (a) et (c) de la figure 27. De façon générale, c'est le cas pour tous les diagrammes qui ne contiennent aucun 4-vertex. Pour les diagrammes qui ont des 4-vertex on remplacera chaque 4-vertex séparément par les trois topologies locales différentes montrées sur la figure 28. On note que (c) se distingue des deux autres par la présence d'une intersection. Un diagramme à Q 4-vertex sera ainsi remplacé par au total 3^Q topologies distinctes. Ces 3^Q diagrammes sont entièrement composés de boucles et on les désignera donc dans la suite comme des *diagrammes de boucles*.

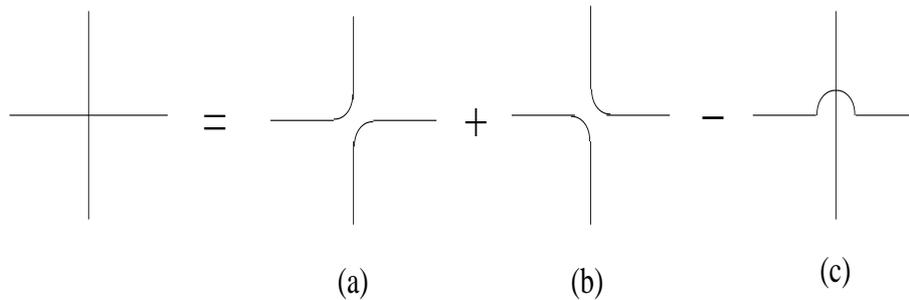


Figure 28: Les trois topologies locales que l'on peut associer à une intersection.

Aux trois topologies locales (a), (b), (c) de la figure 28 on associera respectivement les poids locaux 1, 1, -1 . Le poids d'un diagramme de boucles est le produit de ses poids locaux, qui est égal à $(-1)^\nu$, où ν est le nombre total d'intersections dans le diagramme.

On voit maintenant que le remplacement d'un diagramme pair par un ensemble de diagrammes de boucles se justifie par l'identité

$$\begin{aligned} &\text{poids d'un diagramme pair à } Q \text{ 4-vertex} \\ &\equiv \text{somme des poids des diagrammes de boucles} \end{aligned}$$

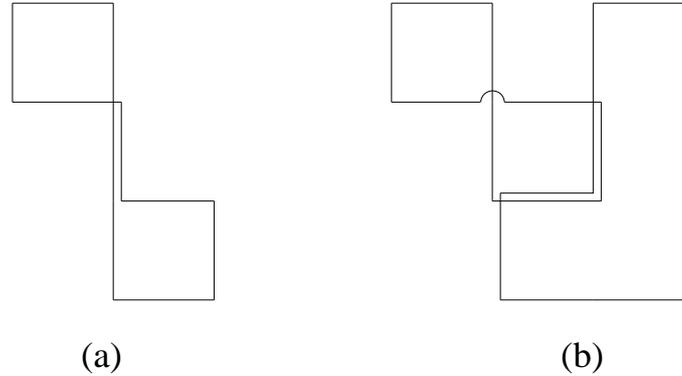


Figure 29: Exemples de “BNCI” : (a) Une boucle non contrainte, (b) deux boucles non contraintes et indépendantes.

$$\begin{aligned} & \text{par lesquels il a été remplacé} \\ & = (1 + 1 - 1)^Q \\ & = 1. \end{aligned}$$

Puis on a

$$g(\ell) = \sum_{\substack{\text{diag pairs} \\ \text{\textit{à} } \ell \text{ liens}}} 1 \quad (430)$$

$$= \sum_{\substack{\text{diag de boucles} \\ \text{\textit{à} } \ell \text{ liens}}} (-1)^\nu, \quad (431)$$

où il est entendu que ν est le nombre d’intersections du diagramme qui est la variable de sommation. Les diagrammes de boucles sur lesquels il faut sommer ci-dessus, peuvent contenir un nombre arbitraire de boucles. Cependant, dans ces diagrammes aucun lien n’est traversé plus d’une fois. Par conséquent,

- (i) les liens appartenant à une même boucle ne sont pas indépendants mais soumis à des contraintes ; et
- (ii) quand il y a plusieurs boucles, elles ne sont pas indépendantes entre elles.

22.5 *Passage aux diagrammes de boucles sans contraintes et indépendantes (BNCI).* On va montrer que dans l’expression (431) pour $g(\ell)$ on peut sommer sur une classe plus grande de diagrammes composés de boucles non contraintes et indépendantes (BNCI), les diagrammes que l’on rajoute ainsi ayant une contribution totale nulle. Les boucles en question sont toutes celles que l’on peut obtenir par des pas successifs entre sites voisins du réseau à l’exclusion des demi-tours.

La figure 29(a) montre une boucle “sans contraintes” : elle peut passer plus d’une fois par le même lien. La figure 29(b) montre deux boucles indépendantes : elles ont des liens traversés en commun et donc s’interpénètrent.

Pour voir que les diagrammes rajoutés ne contribuent pas, il suffit de considérer un lien traversé plus d’une fois, comme sur la figure 30. Ici les

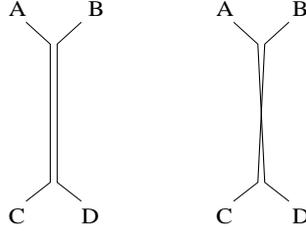


Figure 30: Deux connectivités à travers d'un lien dont les deux poids s'annulent.

extrémités A, B, C, D représentent les connections au reste du diagramme. Au diagramme avec la topologie locale (a) en correspond un autre avec la topologie locale (b), mais dont la contribution est de signe opposé, car due à une intersection de plus.

Donc au lieu de (431) on peut écrire

$$g(\ell) = \sum_{\substack{\text{diag de BNCI} \\ \text{à } \ell \text{ liens}}} (-1)^\nu. \tag{432}$$

On va maintenant attribuer une orientation à chaque boucle dans un diagramme de BNCI. Celui-ci devient ainsi un diagramme de BNCIO, avec "O" pour "orientées". Pour un diagramme de BNCI ayant n boucles il y a donc 2^n diagrammes de BNCIO différents. Écrivons

$$g(\ell) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\overset{\downarrow}{n}}}{2^n} g(\ell, n), \tag{433}$$

où $g(\ell, n)$ est la contribution à $g(\ell)$ des diagrammes de BNCIO ayant exactement ℓ liens et n boucles. On a donc

$$g(\ell, n) = \sum_{\substack{\text{diag de BNCIO} \\ \text{à } \ell \text{ liens} \\ \text{et } n \text{ boucles}}} \prod_{b=1}^n (-1)^{\nu_b \overset{\downarrow}{+1}} \tag{434}$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_{\ell_1} \dots \sum_{\ell_n} D(\ell_1) \dots D(\ell_n) \delta_{\ell_1 + \dots + \ell_n, \ell} \tag{435}$$

où ν_b est le nombre d'intersections de la b ème boucle (avec elle-même ; pourquoi n'a-t-on pas besoin de parler de ses intersections avec les autres boucles ?), ℓ_b est le nombre de liens de celle-ci, et

$$D(\ell_1) = \sum_{\substack{\text{diag de BNCO} \\ \text{à } \ell_1 \text{ liens}}} (-1)^{\nu_1 + 1}, \tag{436}$$

où, par extension de la notation précédente, BNCO veut dire "boucle non contrainte orientée".

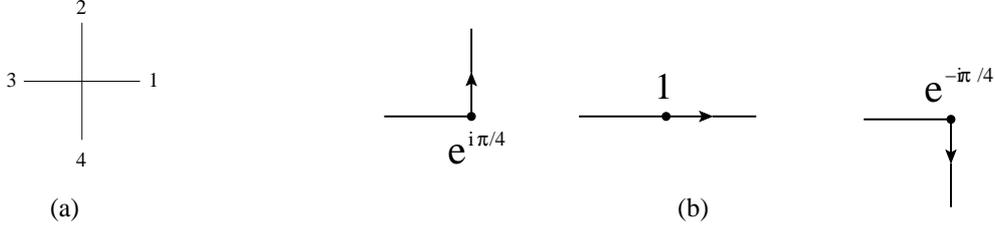


Figure 31: (a) Étiquetage des quatre directions α . (b) Les trois angles de rotation possibles pour une marche arrivant sur un site.

Remarques.

1. Le “ n ” et le “+1” marqués par des flèches se compensent et ont été introduits pour des raisons de commodité.
2. Avec la dernière ligne de (435) on achève une factorisation, puisque les $D(\ell_b)$ portent chacun sur une seule boucle.

Il reste donc le calcul de $D(\ell)$. Mais en supposant qu’il soit fait, on montrera d’abord l’expression de $Z_N(K)$ en termes de $D(\ell)$. En fait, par substitution de (435) dans (432), puis de (432) dans (428), on trouve

$$\begin{aligned}
 Z_N(K) &= 2^N \cosh^{2N} K \left[1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\frac{1}{2})^n}{n!} \sum_{\ell_1, \dots, \ell_n} D(\ell_1) \dots D(\ell_n) v^{\ell_1 + \dots + \ell_n} \delta_{\ell_1 + \dots + \ell_n, \ell} \right] \\
 &= 2^N \cosh^{2N} K \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\frac{1}{2})^n}{n!} \left(\sum_{\ell_1}^{\infty} D(\ell_1) v^{\ell_1} \right)^n \right] \\
 &= 2^N \cosh^{2N} K \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^{\infty} D(\ell) v^{\ell} \right].
 \end{aligned} \tag{437}$$

22.6 Calcul de $D(\ell)$ et de $Z_N(K)$. On rappelle que $D(\ell)$ est donné par (436), dont le calcul requiert une somme sur les BNCO. Une BNCO est un chemin orienté fermé que l’on peut construire en rajoutant des pas successif en excluant les demi-tours. L’expression (436) indique qu’il faut sommer sur toutes les BNCO en les pondérant par $(-1)^{\nu+1}$, où ν est le nombre d’intersections. L’astuce suivante convertit la détermination de ν , qui semble *a priori* une propriété topologique globale, en une somme de contributions locales calculées le long du chemin. Dans le poids du chemin on incorpore pour chaque site k visité un facteur $e^{i\theta_k/2}$, où θ_k est l’angle de rotation du sens du chemin sur ce site. La figure 31 montre les trois cas qui peuvent se produire.

Il est maintenant utile de remplacer la notation i, j, \dots pour les sites du réseau par $\vec{r}_i, \vec{r}_j, \dots$. On introduit en plus un indice $\alpha = 1, 2, 3, 4$ qui dénote les quatre directions possibles d’un pas du chemin. Soit une suite de ℓ sites visité

$$(\vec{r}_0, \alpha_0), (\vec{r}_1, \alpha_1), \dots, (\vec{r}_\ell, \alpha_\ell), \tag{438}$$

où évidemment α_m est déterminé par \vec{r}_m et \vec{r}_{m+1} ($m = 0, 1, \dots, \ell - 1$). On peut associer au chemin (438) un produit de ℓ facteurs, à savoir les mêmes pour chacun des sites $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_\ell$ que l'on avait définis ci-dessus pour un chemin fermé. Noter que le facteur associé au site \vec{r}_0 n'est pas défini.

Soit $\mathbb{M}_\ell^{\alpha'\alpha}(\vec{r}', \vec{r})$ la somme des poids ainsi obtenus pour tous les chemins à ℓ pas commençant par (\vec{r}, α) et terminant par (\vec{r}', α') . Il est clair que

$$\mathbb{M}_\ell^{\alpha'\alpha}(\vec{r}', \vec{r}) \text{ est l'élément d'une matrice } 4N \times 4N. \quad (439)$$

Dans le cas particulier où $\vec{r}' = \vec{r}$ et $\alpha' = \alpha$ la suite (438) se réduit à une BNCO dont $\mathbb{M}_\ell^{\alpha\alpha}(\vec{r}, \vec{r})$ donne correctement le poids qu'il faut dans (436). Donc

$$\begin{aligned} D(\ell) &= \frac{1}{\ell} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{r}} \mathbb{M}_\ell^{\alpha\alpha}(\vec{r}, \vec{r}) \\ &= \frac{1}{\ell} \text{tr } \mathbb{M}_\ell, \end{aligned} \quad (440)$$

où "tr" dénote la trace et où le facteur $1/\ell$ apparaît à cause du fait que chaque chemin fermé de ℓ pas peut être commencé dans chacun de ses ℓ sites visités.

Tous les CNCO [*** maintenir ?] à ℓ pas peuvent être obtenus à partir de ceux à $\ell - 1$ pas. Comme les poids des angles de rotation se multiplient, on a la récurrence

$$\mathbb{M}_\ell = \mathbb{M}_1 \mathbb{M}_{\ell-1} = \dots = \mathbb{M}_1^\ell, \quad (441)$$

d'où

$$\begin{aligned} D(\ell) &= \frac{1}{\ell} \text{tr } \mathbb{M}_1^\ell \\ &= \frac{1}{\ell} \sum_{\sigma=1}^{4N} \lambda_\sigma^\ell, \end{aligned} \quad (442)$$

avec $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{4N}$ les valeurs propres de \mathbb{M}_1 .

Sans encore connaître les λ_σ on peut d'ores et déjà substituer (442) dans (437), ce qui donne

$$\begin{aligned} Z_N(K) &= 2^N \cosh^{2N} K \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{v^\ell}{\ell} \sum_{\sigma=1}^{4N} \lambda_\sigma^\ell \right] \\ &= 2^N \cosh^{2N} K \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\sigma=1}^{4N} \log(1 - v\lambda_\sigma) \right] \\ &= 2^N \cosh^{2N} K \left[\prod_{\sigma=1}^{4N} (1 - v\lambda_\sigma) \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= 2^N \cosh^{2N} K [\det(1 - v\mathbb{M}_1)]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (443)$$

Afin de trouver les λ_σ , on diagonalise \mathbb{M}_1 moyennant une transformation de Fourier. Soit $\vec{q} = (q_x, q_y)$ un vecteur d'onde discrétisé comme il convient en

présence de conditions aux bords périodiques. L'invariance par translation donne le résultat simple

$$\hat{\mathbb{M}}_1^{\alpha'\alpha}(\vec{q}, \vec{q}') = \delta_{\vec{q}+\vec{q}',0} \hat{\mathbb{M}}_{\alpha'\alpha}(\vec{q}), \quad (444)$$

où, dans le sous-espace avec un \vec{q} déterminé, $\hat{\mathbb{M}}(\vec{q})$ est donné par la matrice 4×4

$$\hat{\mathbb{M}}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} e^{-iq_x} & i^{-\frac{1}{2}}e^{-iq_y} & 0 & i^{\frac{1}{2}}e^{iq_y} \\ i^{\frac{1}{2}}e^{-iq_x} & e^{-iq_y} & i^{-\frac{1}{2}}e^{iq_x} & 0 \\ 0 & i^{\frac{1}{2}}e^{-iq_y} & e^{iq_x} & i^{-\frac{1}{2}}e^{iq_y} \\ i^{-\frac{1}{2}}e^{-iq_x} & 0 & i^{\frac{1}{2}}e^{iq_x} & e^{iq_y} \end{pmatrix}. \quad (445)$$

Pour ce bloc

$$\begin{aligned} \det[1 - v\hat{\mathbb{M}}(\vec{q})] &= (1 + v^2)^2 - 2v(1 - v^2)(\cos q_x + \cos q_y) \\ &\equiv d(\vec{q}), \end{aligned} \quad (446)$$

et l'on voit que $d(\vec{q}) \geq 0$. Substitution de (446) dans (443) donne l'expression

$$Z_N(K) = 2^N \cosh^{2N} K \left[\prod_{\vec{q}} d(\vec{q}) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (447)$$

qui est le résultat final pour $Z_N(K)$, obtenu pour la première fois par Onsager en 1944. En prenant le logarithme de (447), puis la limite $N \rightarrow \infty$, on obtient pour l'énergie libre par site

$$-\beta f(K) = \log 2 + \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dq_x \int_{-\pi}^{\pi} dq_y \log [\cosh^2 2K - 2(\cos q_x + \cos q_y) \sinh 2K]. \quad (448)$$

Une transition de phase est signalée par une non analyticit  de f en fonction de $K = J/k_B T$. Une singularit  ne peut provenir que de ce que l'argument du logarithme dans (448) s'annule. Or, cet argument est strictement positif pour tout $\vec{q} \neq 0$; cependant, pour $\vec{q} = 0$ il peut  tre  crit comme $(1 - \sinh K)^2$, ce qui nous fournit le point critique $K = K_c$ comme la solution de

$$\sinh K_c = \sinh \frac{J}{k_B T_c} = 1 \quad \Rightarrow \quad T_c = \frac{2J}{k_B \log(\sqrt{2} - 1)}. \quad (449)$$

La divergence logarithmique de la chaleur sp cifique est obtenue en d rivant (449) deux fois par rapport   la temp rature.

23 Appendice

A. Intégrales gaussiennes

23.1 *Intégrales gaussiennes.* Voir, par exemple [ZJ89]. Dans les formules de ce paragraphe on adoptera la convention de sommation d'Einstein.

a. *Un groupe de variables.* Soit A une matrice $n \times n$, symétrique, de valeurs propres à parties réelles positives, et soit b un vecteur quelconque à n composantes. L'intégrale gaussienne

$$\int dx_1 \dots \int dx_n \exp(-\frac{1}{2}x_i A_{ij} x_j + b_i x_i) = \frac{(2\pi)^{n/2}}{(\det A)^{1/2}} \exp(\frac{1}{2}b_i A_{ij}^{-1} b_j) \quad (450)$$

est bien connue. Notons $\langle \dots \rangle$ la moyenne par rapport au poids $\exp(-\frac{1}{2}x_i A_{ij} x_j)$. On a

$$\langle x_i x_j \rangle = A_{ij}^{-1} \quad (451)$$

$$\langle x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_{2\ell}} \rangle = \sum_{\text{appariements}} \prod_{\text{paires } (k, k')} A_{kk'}^{-1} \quad (452)$$

La deuxième équation s'appelle le *théorème de Wick* ; cette décomposition en produit de paires est à la base de toute la diagrammatique des théories des champs.

b. *Deux groupes de variables.* Soit A une matrice $n \times n$ complexe de déterminant non nul, et soient b et \bar{b} des vecteurs n -dimensionnels quelconques. Soient deux groupes de variables, x_1, \dots, x_n et y_1, \dots, y_n . On introduit les combinaisons linéaires $z_j = (x_j + iy_j)/\sqrt{2}$ et $\bar{z}_j = (x_j - iy_j)/\sqrt{2}$. On a alors les intégrales

$$\int dz d\bar{z} \exp(-\bar{z}Az + \bar{b}z + b\bar{z}) = \frac{2\pi i}{A} \exp(\frac{\bar{b}b}{A}) \quad (453)$$

$$\int dz_1 d\bar{z}_1 \dots \int dz_n d\bar{z}_n \exp(-\bar{z}_i A_{ij} z_j + \bar{b}_i z_i + b_i \bar{z}_i) = \frac{(2\pi i)^n}{\det A} \exp(\bar{b}_i A_{ij}^{-1} b_j) \quad (454)$$

La première est le cas particulier $n = 1$ de la seconde. L'expression $\bar{z}_i A_{ij} z_j$ est la forme quadratique la plus générale qui soit invariante par rotation simultanée d'un même angle dans tous les plans (x_j, y_j) , et c'est une telle expression qui apparaît assez souvent dans les applications.

Remarquer finalement l'intégrale

$$\int dz \exp \bar{b}z = 2\pi i \delta(\bar{b}) \quad (455)$$

On considère des moyennes par rapport au poids $\exp(-\bar{z}_i A_{ij} z_j)$. Pour $n = 1$,

$$\langle \bar{z}z \rangle = A^{-1} \quad \langle z^2 \rangle = \langle \bar{z}^2 \rangle = 0 \quad (456)$$

Pour n général les moyennes avec le même nombre de z_j que de \bar{z}_j sont seules non nulles. Elles sont encore données par un théorème de Wick. Dans ce cas, l'ensemble des appariements des deux types de variables est égal à l'ensemble des permutations \mathcal{P} des unes par rapport aux autres, d'où

$$\langle \bar{z}_{j_1} z_{k_1} \dots \bar{z}_{j_\ell} z_{k_\ell} \rangle = \sum_{\text{permutations } \mathcal{P}} \prod_{i=1}^{\ell} A_{k_i j_{\mathcal{P}i}}^{-1} \quad (457)$$

c. Exemples. Remarquer qu'en particulier $\langle z_j^m \rangle = \langle \bar{z}_j^m \rangle = 0$ pour $m = 1, 2, \dots$. La moyenne non nulle d'ordre quatre est

$$\langle \bar{z}_1 z_2 \bar{z}_3 z_4 \rangle = \langle \bar{z}_1 z_2 \rangle \langle \bar{z}_3 z_4 \rangle + \langle \bar{z}_1 z_4 \rangle \langle \bar{z}_3 z_2 \rangle \quad (458)$$

d. Démonstration. Pour $n = 1$ et $n = 2$, toutes ces relations sont faciles à vérifier explicitement par un passage à des intégrations sur x_i et y_i .

24 Appendice. Exercices supplémentaires

Exercice 64. On considère la version champ moyen du modèle d'Ising décrit par le hamiltonien

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (459)$$

A. *Équilibre à une température T donnée.* On pose $\beta = 1/k_B T$, $K = \beta J$, $H = \beta h$ et $M = Nm = \sum_i s_i$. Soit encore $F(M)$ l'énergie libre à M donnée. Montrer les propriétés suivantes.

a. $F(M)$ est extremum pour M solution de

$$m = \tanh(Km + H) \quad (460)$$

b. Le système a une température critique à $K = K_c = 1$. Au-dessus de cette température l'équation pour m possède une solution unique m_+ , qui correspond à l'état d'équilibre stable. En-dessous de la température critique il existe une valeur critique du champ magnétique

$$H_c = [K(K-1)]^{1/2} - \log[K^{1/2} + (K-1)^{1/2}] \quad (461)$$

tel que pour $0 < H < H_c$ l'équation pour M possède deux solutions supplémentaires, m_- et m_0 , qui correspondent respectivement à un état d'équilibre métastable et à un état instable.

B. *Équation maîtresse.* On dote ce système d'une cinétique markovienne en spécifiant les taux de transitions

$$W(s^j, s) = \exp[-s_j (KN^{-1} \sum_i s_i + H)] \quad (462)$$

c. Ces taux obéissent aux relations du bilan détaillé.

d. Exprimer l'opérateur \mathcal{W} en termes de matrices de Pauli.

On définit les opérateurs de moment angulaire

$$J_\alpha = \frac{1}{2} \sum_i \sigma_i^\alpha \quad (\alpha = x, y, z) \quad (463)$$

e. Exprimer \mathcal{W} en termes des J_α .

f. Trouver l'opérateur symétrisé \mathcal{W}^s .

g. Remarquer que \mathcal{W}^s commute avec J^2 et interpréter la restriction de \mathcal{W}^s au sous-espace de moment angulaire $\frac{1}{2}N$.

C. *Le spectre de \mathcal{W}^s .* Il n'existe pas de façon connue de diagonaliser \mathcal{W}^s analytiquement. Toutefois, il est possible de trouver perturbativement les valeurs propres les plus basses, qui sont aussi les plus intéressantes, car elles correspondent aux temps de relaxation les plus longs.

Au préalable on applique une rotation d'angle μ encore à fixer autour de l'axe Oy , en sorte que les J_α deviennent

$$J_y = L_y, \quad J_x = -L_x \cos \mu - L_z \sin \mu, \quad J_z = L_x \sin \mu - L_z \cos \mu \quad (464)$$

Ensuite, la transformation de Holstein–Primakoff donne une représentation des opérateurs du moment angulaire en termes d'opérateurs bosoniques a^\dagger et a . Pour un moment angulaire total de nombre quantique $\frac{1}{2}N$ cette transformation s'écrit

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{1}{2}N^{1/2} \left[a^\dagger \left(1 - \frac{a^\dagger a}{N}\right)^{1/2} + \left(1 - \frac{a^\dagger a}{N}\right)^{1/2} a \right] \\ L_y &= \frac{1}{2i}N^{1/2} \left[a^\dagger \left(1 - \frac{a^\dagger a}{N}\right)^{1/2} - \left(1 - \frac{a^\dagger a}{N}\right)^{1/2} a \right] \\ L_z &= N(a^\dagger a - \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

h. Vérifier qu'un calcul du moment angulaire total donne $L^2 = \frac{1}{2}N(\frac{1}{2}N + 1)$, et que les relations de commutation habituelles sont satisfaites (tant que le nombre quantique l_z est dans l'intervalle $0 \leq l_z \leq \frac{1}{2}N$).

i. À partir des relations précédentes on peut exprimer \mathcal{W}^s en termes des opérateurs bosoniques. Développer cette expression en une série de puissances de $N^{-1/2}$ et montrer qu'il est possible de choisir μ tel que les termes d'ordre N et d'ordre $N^{1/2}$ s'annulent. [Solution : $\cos \mu = m$ avec $0 \leq \mu \leq \pi$, où m est l'une des solutions de l'équation donnée plus haut ; il y a ainsi soit une possibilité μ_+ , soit trois possibilités μ_+ , μ_- et μ_0 .] Démontrer le résultat final

$$\mathcal{W}^s = -A_i a^\dagger a - \frac{1}{2}B_i(a^\dagger a^\dagger + aa) - D_i + \mathcal{O}(N^{-1/2}) \quad (465)$$

où $i = +, -, 0$ et

$$\begin{aligned} A_i &= 2K \sin \mu_i \left[\frac{1}{2}K \sin^2 \mu_i - 1 \right] + 2/\sin \mu_i \\ B_i &= 2K \sin \mu_i \left[\frac{1}{2}K \sin^2 \mu_i - 1 \right] \\ D_i &= \frac{1}{2}K \sin^3 \mu_i \end{aligned}$$

j. Montrer qu'après une transformation de Bogolioubov

$$c = a^\dagger \sinh \chi_i + a \cosh \chi_i \quad (466)$$

avec χ_i convenablement choisi, l'opérateur \mathcal{W}^s prend la forme diagonale

$$\mathcal{W}^s = -\lambda_i a^\dagger a - \Delta_i \quad (467)$$

Déterminer les λ_i et Δ_i .

k. Établir les conditions de validité de cette dernière transformation et interpréter vos résultats. Que se passe-t-il au point critique?

Dans une analyse plus poussée, que l'on ne tentera pas de faire ici, il faudrait s'interroger sur la nature des états propres de \mathcal{W}^s et calculer par exemple la susceptibilité magnétique dynamique.

Exercice 65. La fonction de corrélation en approximation onde de spins

Cet exercice ne fait intervenir que des opérations mathématiques élémentaires qui reviennent souvent en physique théorique. Il est conseillé d'en étudier tous les détails.

On prend pour point de départ le hamiltonien du modèle XY sur un réseau hypercubique d -dimensionnel de N^d sites à conditions aux bords périodiques. Sur chaque site n de ce réseau se trouve un spin classique \mathbf{S}_n à deux composantes, de longueur $S = 1$, faisant un angle ϕ_n avec un axe de référence. Le hamiltonien est alors

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{XY} &= -J \sum_{n=1}^N \sum_{\delta} \mathbf{S}_{n-\delta} \cdot \mathbf{S}_n \\ &= -J \sum_{n=1}^N \sum_{\delta} \cos(\phi_n - \phi_{n-\delta}) \end{aligned} \quad (468)$$

où δ parcourt les d vecteurs de base du réseau. A basse température les différences $|\phi_{n-\delta} - \phi_n|$ seront petites devant 2π , si bien qu'on peut développer le cosinus et ne retenir que les termes quadratiques. En supprimant une constante additive on arrive ainsi à

$$\mathcal{H}_{XY}^{\text{ods}} = \frac{1}{2} J \sum_{n=1}^N \sum_{\delta} (\phi_n - \phi_{n-\delta})^2 \quad (469)$$

A la limite des basses températures on peut prendre $-\infty < \phi_n < \infty$, sachant que l'intégrand sera effectivement nul si ϕ_n s'éloigne trop des valeurs des $\phi_{n-\delta}$. Remarquer que l'expression (469) est aussi le hamiltonien d'un cristal harmonique dont les atomes sont astreints à se déplacer le long d'une seule direction.

On cherchera à calculer, en approximation onde de spins,

- (i) la fonction de partition canonique associée au hamiltonien (469) ;
- (ii) la fonction de corrélation $\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle = \langle \cos(\phi_0 - \phi_r) \rangle$ pour deux spins à distance $1 \ll r \ll N$.

a. On se limitera dans un premier temps au cas unidimensionnel, $d = 1$. Les composantes de Fourier du champ ϕ_n seront définies par

$$\hat{\phi}_q = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{n=1}^N e^{iqn} \phi_n \quad (470)$$

où l'on admettra les nombres d'onde

$$q = \frac{2\pi k}{N} \quad \text{avec } k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (471)$$

Montrer que le changement de variable inverse est

$$\phi_n = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_q e^{-iqn} \hat{\phi}_q \quad (472)$$

et qu'avec (471) on a automatiquement $\phi_n = \phi_{n\pm N}$, ce qui confère un sens à ϕ_n pour tout $n = \dots - 1, 0, 1, \dots$

b. Vérifier les énoncés suivants.

– La relation (470) donne le même ensemble $\{\hat{\phi}_q\}$ pour toute autre suite de N entiers relatifs k consécutifs.

Remarque. Il est souvent commode de supposer que N est pair et de prendre

$$k = -\frac{N}{2} + 1, -\frac{N}{2} + 2, \dots, \frac{N}{2} \quad (473)$$

Pour $N \rightarrow \infty$ ce choix donne $-\pi < q \leq \pi$, c'est-à-dire q dans la première zone de Brillouin.

– L'équation (470) s'écrit sous forme matricielle $\hat{\phi} = U\phi$, où U est unitaire.

– On a $\hat{\phi}_{-q} = \hat{\phi}_q^*$ et $\hat{\phi}_0$ et $\hat{\phi}_\pi$ sont réels.

Remarque. Le point $q = \pi$ se trouve sur le bord de la zone de Brillouin et est de ce fait un peu exceptionnel.

c. Montrer que, pour N pair,

$$\mathcal{H}_{XY}^{\text{ods}} = J \sum_q (1 - \cos q) \hat{\phi}_q \hat{\phi}_{-q} \quad (474)$$

où q parcourt la première zone de Brillouin, ou encore

$$\mathcal{H}_{XY}^{\text{ods}} = 2J \sum_{0 < q < \pi} (1 - \cos q) |\hat{\phi}_q|^2 + 2J \hat{\phi}_\pi^2 \quad (475)$$

On considère (475) comme la forme *diagonale* de $\mathcal{H}_{XY}^{\text{ods}}$, bien qu'elle couple encore les variables $\hat{\phi}_q$ et $\hat{\phi}_{-q}$.

d. Exprimer $\mathcal{H}_{XY}^{\text{ods}}$ en termes des variables

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_q &= R_q + iI_q \\ \hat{\phi}_{-q} &= R_q - iI_q \end{aligned} \quad (476)$$

Intégrer les R_q et I_q de $-\infty$ à $+\infty$ et montrer qu'à la température inverse $\beta = 1/k_B T$ la fonction de partition de ce système est donnée par

$$Z(\beta) = \prod_{q \neq 0} \left[\frac{\pi}{\beta J (1 - \cos q)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (477)$$

Soit $F(\beta)$ l'énergie libre par site à la limite thermodynamique. Montrer que

$$f(\beta) = -\frac{1}{2} k_B T \log \frac{2\pi k_B T}{J} \quad (478)$$

e. On s'intéresse maintenant à la fonction de corrélation. Sachant que les cumulants d'une loi gaussienne au-delà du second s'annulent, montrer que

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_n \rangle = e^{-\frac{1}{2} \langle (\phi_0 - \phi_n)^2 \rangle} \quad (479)$$

f. Montrer successivement que

$$\begin{aligned}\langle \hat{\phi}_q \hat{\phi}_{-q} \rangle &= \frac{1}{2\beta J(1 - \cos q)} \delta_{q+q',0} \\ \langle (\phi_0 - \phi_n)^2 \rangle &= \frac{1}{N\beta J} \sum_{q \neq 0} \frac{1 - \cos nq}{1 - \cos q}\end{aligned}\quad (480)$$

Prendre la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$, n fixe) de ce résultat.

g. Montrer que

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_n \rangle = e^{-|n|k_B T/2J} \quad (N \rightarrow \infty, n \text{ fixe}) \quad (481)$$

Conclure que, aussi basse que soit la température,

- la chaîne XY n'a pas d'ordre magnétique à longue portée ;
- la chaîne harmonique n'a pas de structure cristalline.

Dans la suite on considère les dimensions $d > 1$. Les variables n et q sont alors des vecteurs $n = (n_1, \dots, n_d)$ et $q = (q_1, \dots, q_d)$.

h. Parcourir les calculs précédents et indiquer ce qui change pour dimension d arbitraire. Montrer que

$$\langle (\phi_0 - \phi_n)^2 \rangle = \frac{1}{N^d \beta J} \sum_{q \neq 0} \frac{1 - \cos n \cdot q}{d - \cos q_1 - \dots - \cos q_d} \quad (482)$$

et écrire cette expression à la limite thermodynamique.

i. Considérer d'abord le cas $d = 3$. Montrer que l'écart quadratique moyen (482) reste borné pour $|n| \rightarrow \infty$. Esquisser $\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_n \rangle$ en fonction de $|n|$. Conclure. Que pouvez-vous dire des dimensions $d = 4, 5, \dots$?

j. Pour $d = 2$ on a un cas particulier. Déterminer le comportement asymptotique dominant de (482) pour $|n| \rightarrow \infty$. En déduire le comportement asymptotique de $\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_n \rangle$ aux grandes distances.

Bibliographie

References

- [ADHR94] F.C. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel, and V. Rittenberg, *Ann. of Phys.* **230** (1994) 250.
- [AGG80] D.J. Amit, Y.Y.Goldschmidt, and G. Grinstein, *J. Phys. A* **13** (1980) 585.
- [BAP05] S. Balibar, H. Alles et A.Ya. Parshin, *Rev. Mod. Phys.* **47** (2005) 317.
- [BAR86] D. Ben-Avraham and S. Redner, *Phys. Rev. A* **34** (1986) 501.
- [Be31] H.A. Bethe, *Z. Physik* **71** (1931) 205.
- [Br71] V.L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **32** (1971) 493 [= *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **59** (1970) 1907 (en russe)].
- [Br70] V.L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **34** (1972) 610 [= *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **61** (1971) 1144 (en russe)].
- [Bl30] F. Bloch, *Z. Physik.* **61** (1930) 206.
- [Ca96] J.L. Cardy, *preprint cond-mat/9607163*.
- [CS80] J.L. Cardy and R.L. Sugar, *J. Phys. A* **13** (1980) L423.
- [DG72] P.G. De Gennes, *Phys. Lett. A* **38** (1972) 339.
- [DKM01] S.E.Derkachov, G.P.Korchemsky, A.N.Manashov, *Nucl. Phys. B* **617** (2001) 375-440.
- [Do76] M. Doi, *J. Phys. A* **9** (1976) 1465; 1479.
- [DP78] C. De Dominicis and L. Peliti, *Phys. Rev. B* **18** (1978) 353.
- [DS93] M. Droz and L. Sasvári, *Phys. Rev. E* **48** (1993) R2343.
- [Fe71] B.U. Felderhof, *Rep. Math. Phys.* **1** (1971) 215; **2** (1971) 151.
- [Ga83] C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, Springer (Berlin 1983).
- [Gl63] R.J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4** (1963) 294.
- [Ha83] H. Haken, *Synergetics* Springer (Berlin 1983).
- [HHM72] B.I. Halperin, P.C. Hohenberg, and S.-k. Ma, *Phys. Rev. Lett.* **29** (1972) 1548.
- [Hi87] H.J. Hilhorst, *Een reeks van misvattingen...*, Inaugural speech, University of Leyden, 1987 (en néerlandais).

- [Hi04a] H.J. Hilhorst, O. Deloubrière, M.J. Washenberger, and U.C. Täuber, *J. Phys. A* **37** (2004) 7063.
- [Hi04b] H.J. Hilhorst, M.J. Washenberger, and U.C. Täuber, *J. Stat. Mech.* P10002 (2004).
- [HH77] P.C. Hohenberg and B.I. Halperin, *Rev. Mod. Phys.* **49** (1977) 435.
- [HOS97] M. Henkel, E. Orlandini, and J. Santos, *Ann. of Phys.* **259** (1997) 163.
- [HH00] H. Hinrichsen, [arXiv:cond-mat/0001070v2](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0001070v2) [cond-mat.stat-mech].
- [HT97] M.J. Howard and U.C. Täuber, *J. Phys. A* **30** (1997) 7721.
- [Hu96] B.D. Hughes, *Random Walks and Random Environments: Random Walks*, Vol. 1, Clarendon Press (Oxford 1996).
- [Ja92] H.K. Janssen, in: *From Phase Transitions to Chaos*, ed. G. György, I. Kondor, L. Sasvári, and T. Tél, World Scientific (Singapore 1992).
- [JST83] C. Jayaprakash, W.F. Saam, and S. Teitel, *Physical Review Letters* **50** (1983) 2017.
- [JKKN77] J.V. José, L.P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D.R. Nelson, *Phys. Rev. B* **16** (1977) 1217.
- [JW28] P. Jordan and E. Wigner, *Z. für Physik* **47** (1928) 631.
- [KS68] L.P. Kadanoff and J. Swift, *Phys. Rev.* **165** (1968) 310.
- [Ko74] J.M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **7** (1974) 1046.
- [KT73] J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, *J. Phys. C* **6** (1973) 1181.
- [Le94] B.P. Lee, *J. Phys. A* **27** (1994) 2633.
- [LC95] B.P. Lee and J. Cardy, *J. Stat. Phys.* **80** (1995) 971.
- [LR92] F. Leyvraz et S. Redner, *Phys. Rev. A* **46** (1992) 3132.
- [Lu87] A.A. Lushnikov, *Phys. Lett. A* **120** (1987) 135.
- [MSR73] P.C. Martin, E.D. Siggia, and H.H. Rose, *Phys. Rev. A* **8** (1973) 423.
- [MW66] N.D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17** (1966) 1133, 1307.
- [Me67] N.D. Mermin, *J. Math. Phys.* **8** (1967) 1061.

- [Ne83] D.R. Nelson, in *Phase transitions and critical phenomena* Vol. 7, C. Domb and J.L. Lebowitz eds., Academic Press (London 1983).
- [NNH95] M. Ney-Nifle and H.J. Hilhorst, *Phys. Rev. B* **51** (1995) 8357.
- [Pe85] L. Peliti, *J. de Physique* **46** (1985) 1469.
- [Ri89] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Springer (Berlin 1989).
- [RT73] Th. W. Ruijgrok and J.A. Tjon, *Physica* **65** (1973) 539.
- [Th72] C.J. Thompson, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 1, C. Domb and M.S. Green eds., Academic Press (London 1972).
- [vK92] N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, Elsevier (Amsterdam 1992).
- [We94] G.H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walk*, North-Holland (Amsterdam 1994).
- [Wi75] K.G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47** (1975) 773.
- [WK74] K.G. Wilson and J. Kogut, *Phys. Rep. C* **12** (1974) 75.
- [Wetal85] P.E. Wolf, F. Gallet, S. Balibar, E. Rolley, and P. Nozières, *J. Physique* **46** (1985) 1987.
- [WOH98] F. van Wijland, K. Oerding, and H.J. Hilhorst, *Physica A* **251** (1998) 179.
- [Yo78] A.P. Young, *J. Phys. C* **11** (1978) L453.
- [ZJ89] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press (Oxford 1989).
- [Zw60] R. W. Zwanzig, *J. Chem. Phys.* **33** (1960) 1338.