

# Systemes hors d'equilibre

Bernard Derrida

Notes de cours rédigées par Vivien Lecomte

18 décembre 2007

Cours donné au Service de Physique Théorique du CEN Saclay au printemps 2004

## Table des matières

<b>I</b>	<b>Introduction</b>	<b>4</b>
<b>1</b>	<b>Quelques exemples de systèmes hors d'équilibre</b>	<b>4</b>
1.1	Séparation de phase . . . . .	4
1.2	Système en contact thermique avec deux thermostats . . . . .	5
1.3	Modèle d'exclusion . . . . .	6
1.4	Modèle de déposition . . . . .	6
1.5	Un modèle d'évolution d'une population de bactéries . . . . .	7
1.6	Processus de contact . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Équilibre et non-équilibre</b>	<b>8</b>
2.1	Système isolé en équilibre thermodynamique . . . . .	8
2.2	Système en équilibre thermodynamique avec un thermostat . . . . .	9
2.2.1	Dynamique d'équilibre thermique pour un gaz (1) . . . . .	9
2.2.2	Dynamique d'équilibre thermique pour un gaz (2) . . . . .	9
2.2.3	Couplage d'un solide avec des thermostats . . . . .	10
2.2.4	Dynamique non-stochastique pour l'équilibre thermique . . . . .	10
<b>II</b>	<b>États stationnaires en l'absence de bilan détaillé</b>	<b>12</b>
<b>3</b>	<b>Évolution Markovienne</b>	<b>12</b>
3.1	Équation maîtresse . . . . .	12
3.2	Bilan détaillé et symétrie par renversement du temps . . . . .	13
3.3	Généralisation de l'équation maîtresse aux systèmes en interaction avec un réservoir	14
<b>4</b>	<b>Relations de Gallavotti-Cohen, d'Onsager, de fluctuation-dissipation</b>	<b>16</b>
4.1	Relations de Gallavotti-Cohen . . . . .	16
4.1.1	Fonction de grandes déviations du courant . . . . .	16

4.1.2	Petites fluctuations et relation d'Einstein . . . . .	18
4.1.3	La propriété de Gallavotti-Cohen : première approche . . . . .	18
4.1.4	La propriété de Gallavotti-Cohen : seconde approche et lien à $\mu(\lambda)$ . . . . .	19
4.2	Théorème de fluctuation-dissipation . . . . .	20
4.3	Relations d'Onsager . . . . .	21
4.4	Remarques . . . . .	22
4.5	La forme dynamique du théorème de fluctuation-dissipation . . . . .	23
<b>III</b>	<b>Fluctuations de courant entre deux réservoirs</b>	<b>26</b>
<b>5</b>	<b>Quelques exemples</b>	<b>26</b>
5.1	Transport de chaleur dans les gaz . . . . .	26
5.2	Diffusion d'énergie thermique dans les solides . . . . .	27
<b>6</b>	<b>Fluctuations de courant</b>	<b>28</b>
6.1	Bruit de Johnson-Nyquist (1928) . . . . .	28
6.2	Bruit Schottky . . . . .	30
<b>7</b>	<b>Transport quantique</b>	<b>31</b>
<b>8</b>	<b>Fluctuations de courant dans le modèle d'exclusion symétrique</b>	<b>32</b>
8.1	Cas du transport entre un réservoir plein et un réservoir vide . . . . .	32
8.2	Cas de réservoirs à densités arbitraires . . . . .	36
<b>9</b>	<b>Principe d'additivité et distribution du courant</b>	<b>37</b>
9.1	Principe d'additivité . . . . .	38
9.2	Distribution du courant moyen . . . . .	38
9.3	Application au modèle d'exclusion symétrique . . . . .	41
9.4	Remarques . . . . .	42
<b>IV</b>	<b>Fonction de grandes déviations pour la densité</b>	<b>44</b>
<b>10</b>	<b>Définition de la fonction de grandes déviations</b>	<b>44</b>
10.1	Cas des systèmes à l'équilibre . . . . .	44
10.2	Remarques . . . . .	46
<b>11</b>	<b>Systèmes diffusifs, corrélations à longue portée</b>	<b>46</b>
11.1	Le modèle d'exclusion symétrique . . . . .	47
11.2	Méthode matricielle pour le modèle d'exclusion symétrique . . . . .	49
11.3	Méthode matricielle et fonction de grandes déviations de la densité : approche directe	53
11.4	Méthode matricielle et fonction de grandes déviations de la densité : approche par l'additivité	55
11.5	Remarques . . . . .	57
<b>12</b>	<b>Modèle d'exclusion asymétrique</b>	<b>58</b>

12.1	Le modèle d'exclusion totalement asymétrique (TASEP) . . . . .	58
12.2	Le diagramme des phases . . . . .	60
12.3	Méthode matricielle pour le modèle d'exclusion totalement asymétrique . . . . .	61
12.4	Corrélations et lien aux excursions browniennes . . . . .	63
12.5	Additivité et fonction de grandes déviations de la densité pour le TASEP . . . . .	65
<b>13</b>	<b>Modèle totalement asymétrique, front d'onde, et équation de Burgers</b>	<b>66</b>
13.1	La méthode des caractéristiques . . . . .	66
13.2	Ondes de choc . . . . .	67
13.3	Vitesse d'une onde de choc . . . . .	68
	<b>Bibliographie</b>	<b>70</b>

# Première partie

## Introduction

Le but de la physique statistique est d'extraire les propriétés à grande échelle (l'échelle macroscopique) de systèmes formés d'un grand nombre de constituants élémentaires dont on connaît les interactions à l'échelle microscopique.

Les systèmes les plus simples et les mieux compris en physique statistique sont des systèmes à l'équilibre, isolés (dont l'énergie est fixée) ou en contact thermique avec un thermostat (dont la température est fixée). Les propriétés de tels systèmes sont décrites par la théorie de Boltzmann-Gibbs qui donne la probabilité d'observer à l'équilibre chaque configuration microscopique du système (ensembles microcanonique et canonique). Lorsqu'en revanche un système est loin de l'équilibre, dans un régime transitoire, dans un régime stationnaire maintenu hors d'équilibre en étant par exemple en contact avec des thermostats à des températures différentes, ou lorsque sa dynamique n'est pas définie par une fonction énergie, on ne connaît pas la probabilité de chaque configuration microscopique. De tels types de systèmes se rencontrent tant dans l'étude de modèles abstraits de la mécanique statistique que dans celle inspirée de situations physiques ou biologiques. Le but de ce cours est de donner un aperçu de certaines méthodes qui permettent d'analyser les situations hors d'équilibre.

## 1 Quelques exemples de systèmes hors d'équilibre

### 1.1 Séparation de phase

Un système placé loin d'un équilibre présente, avant de l'atteindre asymptotiquement, un régime transitoire hors de l'équilibre.

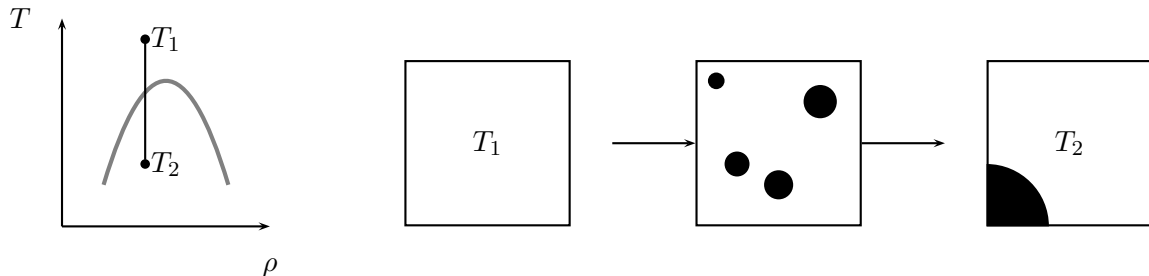


FIG. 1: Diagramme de phase du corps ; évolution entre deux états d'équilibre distincts

On peut par exemple considérer un corps qui, au-dessous d'une certaine température  $T(\rho)$  fonction de sa densité moyenne  $\rho$ , possède un phase où coexistent deux états d'équilibre : liquide et gazeux, et dont le diagramme de phase est schématisé sur la figure 1. S'il est brusquement trempé d'une température  $T_1$ , où le système est homogène, à une température  $T_2$  située sous la ligne de coexistence, on observe un régime transitoire vers son état d'équilibre final, mélange entre gaz et liquide. On assiste au cours du temps à une évolution irréversible : la séparation entre les phases liquide et gazeuse se fait d'abord par l'apparition de nombreuses gouttes ou bulles très petites qui, au cours du temps, grossissent tout en devenant moins nombreuses.

## 1.2 Système en contact thermique avec deux thermostats

L'ensemble canonique donne pour un système en équilibre thermique avec un ou plusieurs thermostats à la même température  $T$ , la probabilité  $P(\mathcal{C})$  d'une configuration  $\mathcal{C}$  :

$$P(\mathcal{C}) \propto \exp(-E(\mathcal{C})/T),$$

en fonction de l'énergie  $E(\mathcal{C})$  de cette configuration.

Si en revanche un système est mis en contact avec deux thermostats de températures distinctes  $T_1$  et  $T_2$  (figure 2), il atteint, après un temps suffisamment long, un régime *stationnaire*, dans lequel il est traversé par un flux de chaleur  $Q$ . On ne dispose pas d'une expression pour  $P(\mathcal{C})$  dans ce régime.

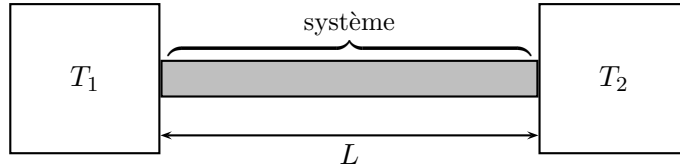


FIG. 2: Système en contact thermique avec deux thermostats

Dans ce régime stationnaire, on peut chercher à analyser les caractéristiques du flux de chaleur  $Q$  en déterminant :

- sa valeur moyenne  $\langle Q \rangle$ ,
- sa distribution de probabilité  $P(Q)$ ,
- sa dépendance en fonction de la longueur  $L$  du système, des températures  $T_1$  et  $T_2$ , et des interactions à l'échelle microscopique,
- et si, aux temps longs, il satisfait la loi de Fourier :

$$Q = \lambda(T_1 - T_2)/L,$$

où le coefficient  $\lambda$  représente la conductivité thermique du système.

Un exemple célèbre de système en contact avec deux thermostats est le problème de Rayleigh-Bénard. Il s'agit d'un fluide dont la densité dépend de la température, placé dans un champ de pesanteur, et chauffé par le bas (figure 3).

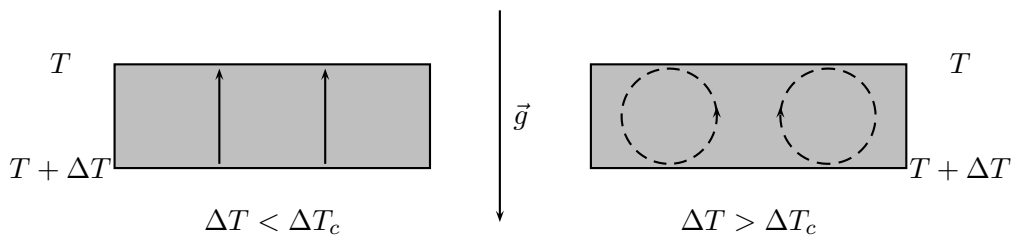


FIG. 3: L'instabilité de Rayleigh-Bénard

Le régime stationnaire possède une physique très riche : tant que la différence de température  $\Delta T$  est inférieure à une valeur critique  $\Delta T_c$ , un courant thermique stationnaire s'installe, tandis qu'au delà ( $\Delta T > \Delta T_c$ ), on observe des phénomènes de convection avec formation de rouleaux, d'abord stationnaires, puis dépendant du temps avec une dynamique de plus en plus complexe à mesure que  $\Delta T$  augmente.

### 1.3 Modèle d'exclusion

C'est l'analogie discret d'un système mis en contact avec deux thermostats. Sur un réseau, chaque site est occupé par au plus une particule, et les particules diffusent : pendant un intervalle de temps  $dt$  infinitésimal, chaque particule saute avec une probabilité  $dt$  vers chacun de ses voisins inoccupés. Aux deux extrémités du système, les conditions aux limites sont fixées par des réservoirs de particules de densités  $\rho_1$  et  $\rho_2$  (figure 4).

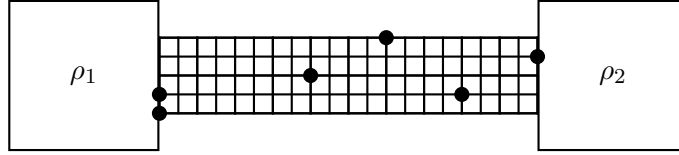


FIG. 4: Diffusion de particules entre deux réservoirs

Lorsque  $\rho_1 \neq \rho_2$ , on peut, comme précédemment, se demander s'il existe un courant de particules entre les deux réservoirs, tenter de déterminer sa valeur, ses fluctuations, et voir si on obtient à grande échelle la loi de Fick (exact analogue de la loi de Fourier, qui, elle concerne les transferts thermiques). Dans le modèle d'exclusion, c'est le nombre de particules transférées par unité de temps d'un réservoir à l'autre qui joue le rôle du flux de chaleur. (En fait, si on identifie une particule à un quantum d'énergie, cela redevient un problème de transfert de chaleur.)

### 1.4 Modèle de déposition

Certains modèles sont définis uniquement par des règles dynamiques [20], sans référence à une énergie. Dans le modèle de déposition, des particules qui tombent dans des colonnes choisies au hasard s'empilent à un taux donné dans une boîte (figure 5), et l'on peut chercher à étudier la vitesse de croissance, et la distribution de la hauteur de ces amas de particules, et les fonctions de corrélation de cette hauteur.

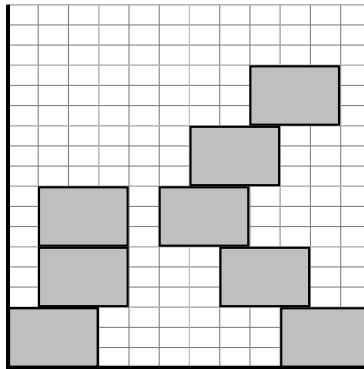


FIG. 5: Modèle de déposition

## 1.5 Un modèle d'évolution d'une population de bactéries

Une population de taille constante  $N$  évolue au fil des générations. À chaque nouvelle génération, tous les individus disparaissent et sont remplacés par leurs descendants. Le modèle le plus simple consiste à prendre, pour chaque individu à la génération  $g$ , un parent choisi au hasard à la génération  $g - 1$ , de sorte que chaque individu de la nouvelle génération a exactement un parent (figure 6).

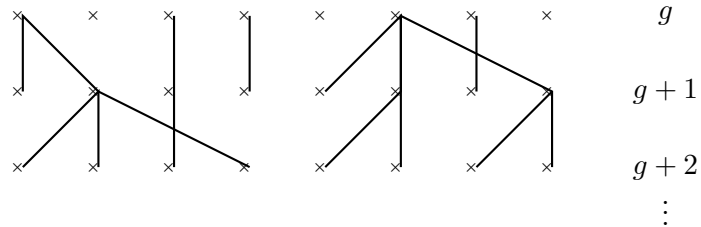


FIG. 6: Modèle d'évolution d'une population de  $N = 8$  individus

On peut ainsi suivre l'arbre de descendance de chaque individu fondateur, et caractériser sa taille. En introduisant une probabilité de mutation à chaque saut de génération, on peut étudier la diversité génétique des individus, et dans le régime stationnaire, la distribution des temps de coalescence (le nombre de générations qu'il faut remonter pour trouver le premier ancêtre commun à toute la population).

## 1.6 Processus de contact

On dispose des particules sur un réseau dont les sites sont soit vides, soit occupés par une particule au plus, et dont la dynamique est schématisée sur la figure 7. Ce modèle représente par exemple une dynamique locale d'évolution qui correspond à la propagation d'une infection, les probabilités de guérison et de contamination étant proportionnelles à l'intervalle de temps infinitésimal  $dt$  qui sépare deux pas de temps successifs.

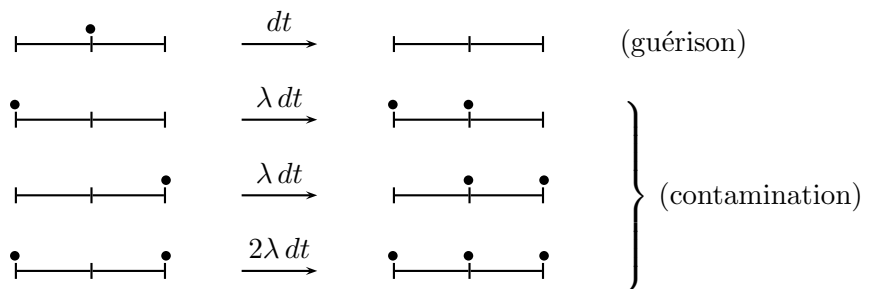


FIG. 7: Dynamique locale du processus de contact

Il y a plusieurs types de régimes stationnaires. Si le taux de contamination  $\lambda$  est faible, la densité  $\rho(t)$  d'individus contaminés décroît rapidement vers 0. Au dessus d'un taux critique  $\lambda_c$  (figure 8), on assiste, pour un système de  $L$  sites, à l'apparition d'une phase pseudo-stationnaire longue, au cours de laquelle la densité reste proche d'une constante.

Pour un tel système, la durée  $\tau_L$  de cette phase est de la forme :

$$\tau_L \sim \exp(L\sigma(\lambda)),$$

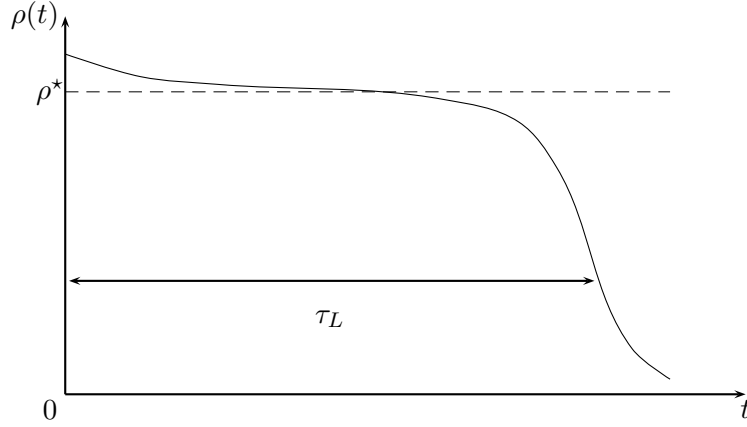


FIG. 8: Densité du processus de contact pour un système fini de taille  $L$  (pour  $\lambda > \lambda_c$ ). Le temps de vie  $\tau_L$  diverge quand  $L \rightarrow \infty$ .

où  $\sigma(\lambda)$  est une fonction indépendante de la longueur  $L$  du système. Cette phase pseudo-stationnaire est donc d'autant plus longue que  $L$  est grand, et devient stable dans la limite thermodynamique.

## 2 Équilibre et non-équilibre

### 2.1 Système isolé en équilibre thermodynamique

On considère un système isolé décrit par un hamiltonien  $H(p, q)$ . Les équations de Hamilton :

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \end{cases} \quad (1)$$

donnent l'évolution d'une configuration  $\mathcal{C} = \{p, q\}$  sous la forme :

$$\frac{d\mathcal{C}}{dt} = F(\mathcal{C}). \quad (2)$$

Cette évolution conserve l'énergie du système ( $E = H(p, q)$  reste constante au cours du temps). La probabilité d'équilibre  $P_{\text{eq}}(\mathcal{C})$  est une mesure sur l'espace des configurations, laissée invariante par la dynamique (1-2), qui conserve :

- l'énergie totale  $E$  (le système est isolé),
- l'élément de volume de l'espace des phases (théorème de Liouville, déduit des équations de Hamilton).

Si  $\Omega(E)$  est le volume des configurations d'énergie  $E$  dans l'espace des phases, la mesure microcanonique :

$$P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) = \frac{1}{\Omega(E)}, \quad (3)$$

qui attribue à toutes les configurations de même énergie un poids égal, est un invariant de cette dynamique. Il est bien-sûr beaucoup plus difficile de montrer que presque toutes les trajectoires sont denses dans l'espace des phases et qu'une moyenne sur le temps le long d'une trajectoire équivaut à la moyenne microcanonique : il faut être capable de montrer que la dynamique définie par  $F(\mathcal{C})$  est ergodique.



## 2.2 Système en équilibre thermodynamique avec un thermostat

L'ensemble canonique permet de décrire les propriétés d'un système en équilibre à une température constante  $T$ . Celui-ci est vu comme interagissant avec un autre système, le thermostat, beaucoup plus grand. La probabilité d'une configuration  $\mathcal{C}$  est alors donnée par :

$$P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) \propto \exp\left(-\frac{E(\mathcal{C})}{kT}\right), \quad (4)$$

où  $k$  est la constante de Boltzmann. Une façon d'obtenir (4) est de considérer que l'ensemble formé par le système étudié et le thermostat forme un système isolé (décrit par l'ensemble microcanonique) et de définir la température  $T$  du thermostat comme :

$$\frac{1}{kT} = \frac{d \log \Omega(E_{\text{thermostat}})}{dE_{\text{thermostat}}}.$$

Il existe d'autres façons d'obtenir (4) : on peut par exemple modéliser l'interaction avec le thermostat en imposant une *dynamique stochastique* au système. Ces méthodes peuvent servir de point de départ pour examiner des situations de dynamique hors d'équilibre (en regardant quels changements sont induits par une modification de cette interaction). Voici quelques exemples :

### 2.2.1 Dynamique d'équilibre thermique pour un gaz (1)

On considère une enceinte contenant un gaz en contact avec un thermostat (figure 9). À chaque fois qu'une particule heurte la paroi de l'enceinte, elle est réfléchiée avec une vitesse donnée par la distribution maxwellienne de vitesse [5] :

$$f(\mathbf{v}) = \frac{m^2}{2\pi(kT)^2} |v_{\perp}| \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT}\right) d\mathbf{v}, \quad (5)$$

où  $v_{\perp}$  est la composante normale de la particule au point d'impact avec la paroi.

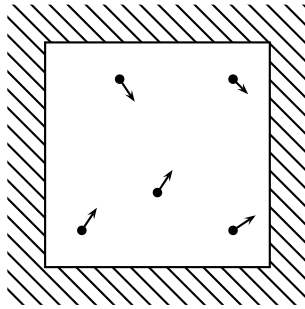


FIG. 9: Dynamique pour un gaz en équilibre thermodynamique

Cette dynamique, dont l'interaction avec le thermostat n'a lieu qu'à la frontière du système, donne asymptotiquement la distribution d'équilibre de Boltzmann [5].

### 2.2.2 Dynamique d'équilibre thermique pour un gaz (2)

On considère un gaz dans lequel chaque particule est soumise à une dynamique de Langevin : la vitesse  $v$  d'une particule vérifie, dans un potentiel  $U$  qui dépend *a priori* de la position de toutes

les particules :

$$m \frac{dv}{dt} = -\lambda v - \frac{\partial U}{\partial x} + \sqrt{2\lambda kT} \xi(t), \quad (6)$$

où  $\xi$  est un bruit blanc Gaussien :

$$\begin{cases} \langle \xi(t) \rangle = 0 \\ \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t'), \end{cases}$$

$\lambda$  représente l'intensité du couplage au thermostat, et  $T$  est la température imposée.

En l'absence de potentiel, l'équation de Langevin s'intègre directement, ce qui permet de calculer aux temps longs  $m\langle v^2 \rangle \rightarrow k_B T$ , et donc d'interpréter  $T$  comme la température du système. En effet, l'expression de  $v$  est :

$$v(t) = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^t ds \sqrt{2\lambda kT} \xi(s) e^{-\lambda(t-s)/m},$$

et elle permet de calculer  $\langle v^2 \rangle$ . De plus la distribution de  $v$  est gaussienne, de variance  $kT/m$  comme le prévoit la distribution d'équilibre à la température  $T$ .

Pour le cas général où  $U$  est quelconque, on peut déduire l'équation de Fokker-Planck de celle de Langevin et obtenir la même interprétation pour  $T$  (voir par exemple le livre de van Kampen [30]).

Cette évolution garantit (dans les cas usuels où l'espace des phases est connecté) que le système tend vers un état d'équilibre à la température  $T$ .

### 2.2.3 Couplage d'un solide avec des thermostats

Au lieu d'imposer une dynamique de Langevin à l'ensemble d'un système, on peut l'imposer seulement aux bords (figure 10, où des atomes sont présents en chaque site du réseau représenté). Les atomes présents à l'intérieur des thermostats sont soumis à une force de Langevin en plus de leurs interactions mutuelles, tandis que les autres atomes ne sont soumis qu'aux seules interactions avec les autres atomes. Cette situation peut s'appliquer par exemple au cas des solides.

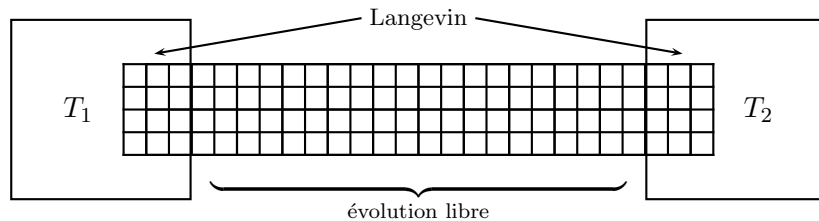


FIG. 10: Une dynamique pour l'équilibre thermique d'un solide

On peut de la même façon imposer des températures distinctes  $T_1$  et  $T_2$  aux extrémités du système pour décrire des situations hors d'équilibre.

### 2.2.4 Dynamique non-stochastique pour l'équilibre thermique

Une dynamique de Langevin dy type (6) est stochastique, en raison du bruit blanc Gaussien. On peut également utiliser des dynamiques complètement déterministes, par exemple celle de Nosé-

Hoover [5], où chaque particule d'un système évolue selon les relations

$$\left\{ \begin{array}{l} m \frac{dv_i}{dt} = -\lambda(t) v_i - \frac{\partial U}{\partial x_i} \\ \frac{d\lambda}{dt} = \frac{1}{\Theta^2} \sum_i (mv_i^2 - k_B T) . \end{array} \right.$$

Le paramètre  $\lambda(t)$ , qui représente une force de freinage fluide variable, évolue dans le temps sous l'effet de deux tendances. Le terme cinétique  $\sum_i \frac{1}{2} m v_i^2$ , positif, tend à faire croître  $\lambda(t)$ , et empêche les particules d'acquérir une énergie trop importante, tandis que la constante  $-k_B T$ , négative, laisse la possibilité d'une certaine agitation dans le système, fixant ainsi sa température. La constante  $\Theta$  permet de jouer sur le temps de réponse du thermostat aux variations de température du système. Avec cette dynamique, le système tend asymptotiquement vers un état d'équilibre à la température  $T$ .

## Deuxième partie

# États stationnaires en l'absence de bilan détaillé

Le cadre des chaînes de Markov permet d'obtenir de manière assez simple des résultats généraux sur des systèmes dont la dynamique est stochastique, comme dans les exemples précédents. Il permet, sous sa forme la plus simple (paragraphe 3.2), de décrire l'évolution de système vers l'équilibre ou au voisinage de l'équilibre, et, sous une forme généralisée (paragraphe 3.3), de suivre les échanges du système avec des réservoirs, en particulier d'étudier les courants (valeur moyenne, fluctuations) qui caractérisent ces échanges.

### 3 Évolution Markovienne

On considère un système dont les configurations sont notées  $\mathcal{C}$ , et une dynamique définie par les probabilités de transition  $M_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) dt$  entre deux configurations pendant l'intervalle de temps  $dt$  :

$$\mathcal{C} \xrightarrow{M_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) dt} \mathcal{C}' .$$

La propriété fondamentale d'une évolution Markovienne est que les probabilités de transition entre  $t$  et  $t+dt$  dépendent seulement des configurations initiale (à  $t$ ) et finale (à  $t+dt$ ), et pas de l'histoire du système, c'est-à-dire de toute la trajectoire  $\mathcal{C}(t')$  pour  $t' < t$ . Les taux de transition  $M_t(\mathcal{C}', \mathcal{C})$  peuvent également dépendre explicitement du temps, mais on va commencer par se limiter au cas indépendant du temps  $M_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) = M(\mathcal{C}', \mathcal{C})$ .

#### 3.1 Équation maîtresse

L'évolution de la probabilité  $P_t(\mathcal{C})$  d'une configuration  $\mathcal{C}$  est donnée par l'équation maîtresse :

$$\frac{dP_t(\mathcal{C})}{dt} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \left( \underbrace{M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_t(\mathcal{C}')}_{\substack{\text{la configuration} \\ \text{saute de } \mathcal{C}' \text{ vers } \mathcal{C}}} - \underbrace{M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_t(\mathcal{C})}_{\substack{\text{la configuration} \\ \text{saute de } \mathcal{C} \text{ vers } \mathcal{C}'}} \right) . \quad (7)$$

En posant par convention :

$$M(\mathcal{C}, \mathcal{C}) = - \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) , \quad (8)$$

l'équation maîtresse s'écrit également :

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

On peut montrer que le système évolue vers un état stationnaire si la condition :

$$\exists \ell : \forall \mathcal{C}, \mathcal{C}' M^\ell(\mathcal{C}, \mathcal{C}') \neq 0 ,$$

est vérifiée, c'est-à-dire si toutes les configurations de l'espace des phases sont reliées entre elles (par un chemin de longueur au plus  $\ell$ ). L'équation maîtresse implique que, dans un état stationnaire,

les probabilités  $P_{\text{st}}(\mathcal{C})$  des configurations vérifient :

$$\forall \mathcal{C}, \quad \sum_{\mathcal{C}'} [M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_{\text{st}}(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_{\text{st}}(\mathcal{C})] = 0. \quad (9)$$

Cette relation s'interprète comme une équation du bilan *global* des échanges d'une configuration  $\mathcal{C}$  avec toutes les autres configurations  $\mathcal{C}'$  : pendant un intervalle de temps  $dt$ , il est aussi probable de quitter  $\mathcal{C}$  vers une quelconque configuration  $\mathcal{C}'$  que d'atteindre  $\mathcal{C}$  à partir d'une configuration  $\mathcal{C}'$ .

### 3.2 Bilan détaillé et symétrie par renversement du temps

La relation (9), qui représente  $\Omega$  conditions (s'il y a  $\Omega$  configurations), est vérifiée si une condition plus forte est satisfaite :

$$\forall \mathcal{C}, \mathcal{C}', \quad M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') = M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_{\text{eq}}(\mathcal{C}). \quad (10)$$

Cette propriété (constituée de  $\Omega(\Omega - 1)/2$  conditions), appelée *bilan détaillé*, contraint beaucoup plus fortement la forme de la matrice  $M$  des probabilités de transition, et s'interprète comme une équation de bilan *local* (bilan détaillé) des échanges entre les configurations.

Une des conséquences les plus importantes de cette propriété de bilan détaillé est la micro-réversibilité de la dynamique.

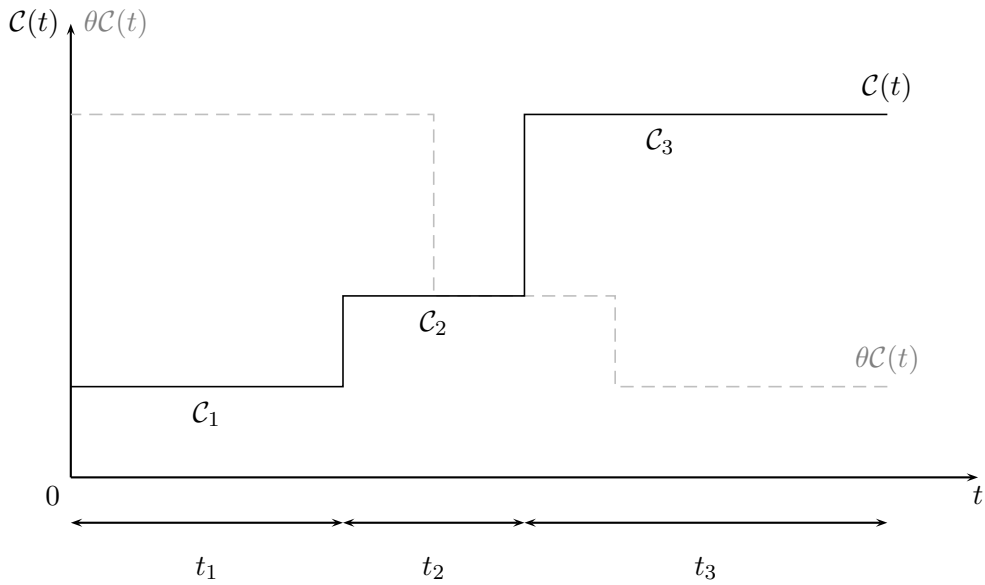


FIG. 11: Trajectoire dans un espace de configurations unidimensionnel :  $\mathcal{C}(t)$  reste un temps  $t_1$  dans  $\mathcal{C}_1$ , puis un temps  $t_2$  dans  $\mathcal{C}_2$ , et enfin un temps  $t_3$  dans  $\mathcal{C}_3$ .  $\theta\mathcal{C}(t)$  est la trajectoire obtenue par renversement du sens du temps.

Comparons en effet la probabilité d'observer une trajectoire  $\mathcal{C}(t)$  (figure 11) et celle de la trajectoire  $\theta\mathcal{C}(t)$  obtenue en renversant le sens du temps. La probabilité que le système reste dans une configuration  $\mathcal{C}$  pendant une durée  $t$  est d'après (8) :

$$(1 + M(\mathcal{C}, \mathcal{C})dt)^{\frac{t}{dt}} = e^{tM(\mathcal{C}, \mathcal{C})}.$$

Il en résulte que les probabilités des trajectoires directe et renversée de la figure 11 sont :

$$\begin{cases} P(\mathcal{C}(t)) = e^{t_3 M(\mathcal{C}_3, \mathcal{C}_3)} M(\mathcal{C}_3, \mathcal{C}_2) dt e^{t_2 M(\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_2)} M(\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_1) dt e^{t_1 M(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_1)} P_{\text{eq}}(\mathcal{C}_1) \\ P(\theta\mathcal{C}(t)) = e^{t_1 M(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_1)} M(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) dt e^{t_2 M(\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_2)} M(\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3) dt e^{t_3 M(\mathcal{C}_3, \mathcal{C}_3)} P_{\text{eq}}(\mathcal{C}_3) . \end{cases}$$

En effectuant le rapport des expressions précédentes, la relation du bilan détaillé (10) implique que :

$$\boxed{P(\mathcal{C}(t)) = P(\theta\mathcal{C}(t))} . \quad (11)$$

On voit donc que si la relation du bilan détaillé est vérifiée, la probabilité d'observer une trajectoire dans l'espace des phases est égale à celle d'observer la trajectoire obtenue par renversement du temps.

### 3.3 Généralisation de l'équation maîtresse aux systèmes en interaction avec un réservoir

On peut généraliser l'approche précédente d'une évolution Markovienne pour décrire un système en contact avec un ou plusieurs réservoirs ou thermostats<sup>1</sup> (figure 12).

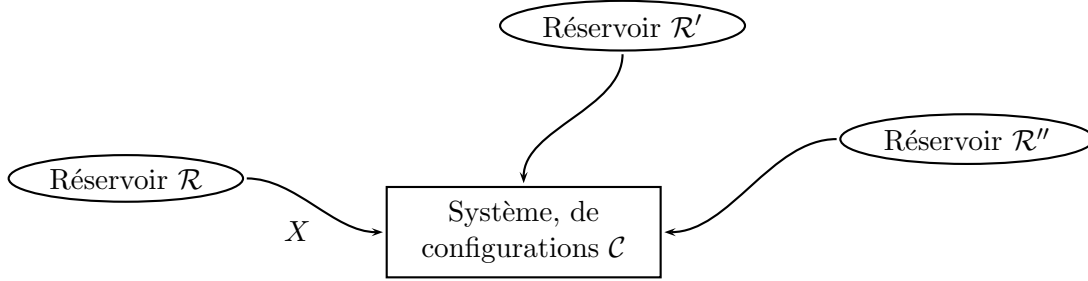


FIG. 12: Système interagissant avec un ensemble de réservoirs

Si l'on s'intéresse aux échanges avec un réservoir  $\mathcal{R}$  particulier c'est-à-dire au nombre  $X(t)$  de particules (algébriquement) transférées de  $\mathcal{R}$  vers le système pendant une durée  $t$ , on peut considérer une matrice  $M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  donnant l'évolution infinitésimale du couple  $(\mathcal{C}, X(t))$  :

$$\begin{cases} \mathcal{C} \\ X(t) \end{cases} \xrightarrow{M_x(\mathcal{C}', \mathcal{C}) dt} \begin{cases} \mathcal{C}' \\ X(t + dt) = X(t) + x . \end{cases}$$

L'élément de matrice  $M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  représente le taux de transition de la configuration  $\mathcal{C}$  à la configuration  $\mathcal{C}'$  avec  $x$  particules transférées du réservoir  $\mathcal{R}$  vers le système. L'équation maîtresse devient alors :

$$\frac{dP_t(\mathcal{C}, X)}{dt} = \sum_{\mathcal{C}'} \sum_x \left( M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_t(\mathcal{C}', X - x) - M_x(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_t(\mathcal{C}, X) \right) .$$

Ce formalisme permet de suivre l'évolution d'une nouvelle grandeur associée au système : le nombre  $X$  de particules qu'il reçoit en interagissant avec un réservoir de particules. Il est commode de considérer la fonction génératrice :

$$Q_t(\mathcal{C}, \lambda) = \sum_X P_t(\mathcal{C}, X) e^{\lambda X} , \quad (12)$$

<sup>1</sup>Comme on l'a remarqué précédemment, la situation où un système est en contact thermique avec un thermostat est un cas particulier de la situation où le système échange une quantité extensive avec un réservoir (la quantité extensive étant l'énergie).

qui vérifie l'équation d'évolution :

$$\frac{dQ_t(\mathcal{C}, \lambda)}{dt} = \sum_{\mathcal{C}'} \sum_x \left( e^{\lambda x} M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') Q_t(\mathcal{C}', \lambda) - M_x(\mathcal{C}', \mathcal{C}) Q_t(\mathcal{C}, \lambda) \right). \quad (13)$$

On voit dans cette relation l'intérêt de la fonction génératrice  $Q_t(\mathcal{C}, \lambda)$  : l'équation maîtresse se découple en  $\lambda$ , et se lit sous une forme matricielle :

$$\left( \frac{dQ}{dt} \right) = \text{Matrice}(\lambda) \times (Q), \quad (14)$$

ce qui permet d'obtenir l'estimation asymptotique (dans la limite  $t \rightarrow +\infty$ ) :

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

où  $\mu(\lambda)$  est la plus grande valeur propre de la matrice (14). En revenant à la définition de la fonction génératrice  $Q$ , cette dernière relation se lit aussi :

$$\boxed{\langle e^{\lambda X} \rangle \sim e^{\mu(\lambda)t}}. \quad (15)$$

Cette relation permet d'obtenir la statistique des échanges entre le système et le réservoir. En développant la fonction  $\mu$  en puissances de  $\lambda$  :

$$\mu(\lambda) = \mu_0 + \mu_1 \lambda + \frac{1}{2} \mu_2 \lambda^2 + \frac{1}{3} \mu_3 \lambda^3 + \dots,$$

on obtient en effet des relations de la forme :

$$\frac{\langle X \rangle}{t} = \mu_1, \quad \frac{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}{t} = \frac{\langle X^2 \rangle_c}{t} = \mu_2, \quad \frac{\langle X^3 \rangle - 3\langle X^2 \rangle \langle X \rangle + 2\langle X \rangle^3}{t} = \frac{\langle X^3 \rangle_c}{t} = \mu_3. \quad (16)$$

On a toujours  $\mu_0 = 0$  et  $Q_t(\mathcal{C}, 0) = P_{\text{st}}(\mathcal{C})$ . On peut calculer  $\mu_1, \mu_2, \dots$  en résolvant l'équation aux valeurs propres (13) perturbativement en  $\lambda$ . Par exemple à l'ordre 1 en  $\lambda$ , si on écrit :

$$Q(\mathcal{C}, \lambda) = P_{\text{st}}(\mathcal{C}) + \lambda q(\mathcal{C}),$$

on voit à partir de (13) que  $q(\mathcal{C})$  vérifie :

$$\mu_1 \lambda P_{\text{st}}(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} \sum_x \left( M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') (1 + \lambda x) (P_{\text{st}}(\mathcal{C}') + \lambda q(\mathcal{C}')) - M_x(\mathcal{C}', \mathcal{C}) (P_{\text{st}}(\mathcal{C}) + \lambda q(\mathcal{C})) \right),$$

de sorte qu'en sommant sur  $\mathcal{C}$ , on obtient :

$$\boxed{\mu_1 = \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} \sum_x x M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{\text{st}}(\mathcal{C}')}. \quad (17)$$

La condition de bilan détaillé devient maintenant, pour un système en contact avec un ou plusieurs réservoirs :

$$\boxed{\forall \mathcal{C}, \mathcal{C}', \quad M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') = M_{-x}(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_{\text{eq}}(\mathcal{C})}. \quad (18)$$

Elle s'interprète à nouveau comme une symétrie par renversement du temps. Il y a en effet, pour une trajectoire renversée dans le temps, une quantité  $-x$  de particules transférées du réservoir vers le système s'il y en avait  $x$  pour la trajectoire directe. Lorsque le bilan détaillé est vérifié, on a bien-sûr  $P_{\text{st}} = P_{\text{eq}}$ .

On voit facilement que lorsque cette relation de bilan détaillé est vérifiée, on a  $\mu_1 = 0$  : quand un système est à l'équilibre (il peut être en contact avec plusieurs réservoirs, mais en équilibre), la charge transférée de chaque réservoir vers le système est nulle en moyenne. Cela n'empêche pas qu'en général,  $\mu_2 \neq 0$ ; par exemple, si le système est en équilibre avec plusieurs réservoirs à la même température, on s'attend à ce que l'énergie échangée avec un des réservoirs ait une variance qui croît linéairement dans le temps.

## 4 Relations de Gallavotti-Cohen, d'Onsager, de fluctuation-dissipation

### 4.1 Relations de Gallavotti-Cohen

Un système dont la dynamique de Markov obéit à la condition de bilan détaillé converge asymptotiquement vers un état d'équilibre. Pour décrire une situation hors d'équilibre, il est par exemple possible d'imposer au système un *champ*  $E$  qui déséquilibre son interaction avec un réservoir donné  $\mathcal{R}$  (les autres réservoirs restant inchangés). Ceci peut se traduire en disant que le système a désormais des taux de transition  $\overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  qui vérifient un bilan détaillé modifié

$$\forall \mathcal{C}, \mathcal{C}', \quad \overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') = \overline{M}_{-x}(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) \exp\left(\frac{xE}{kT}\right), \quad (19)$$

où  $P_{\text{eq}}(\mathcal{C})$  est le poids à l'équilibre, en l'absence de champ, qui vérifie :

$$M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') = M_{-x}(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_{\text{eq}}(\mathcal{C}).$$

On peut par exemple choisir  $\overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  sous la forme :

$$\overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') = M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') \exp\left(\frac{xE}{2kT}\right), \quad (20)$$

qui vérifie la relation (19); mais la discussion qui va suivre repose uniquement sur (19) et non sur le choix particulier (20).

En présence d'un champ  $E$ , les probabilités  $P_t(\mathcal{C})$  vont cette fois converger aux temps longs vers une distribution  $P_{\text{st}}(\mathcal{C}, E)$  qui caractérise le régime stationnaire sous le champ  $E$ , et qui se distingue de la distribution d'équilibre  $P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) = P_{\text{st}}(\mathcal{C}, 0)$  des configurations  $\mathcal{C}$  dans le système en l'absence de champ.

#### 4.1.1 Fonction de grandes déviations du courant

On peut s'intéresser à la probabilité  $P(X(t)|\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$  qu'il y ait un total de  $X(t)$  particules transférées du réservoir  $\mathcal{R}$  vers le système sur une durée  $t$ , sachant que la configuration initiale était  $\mathcal{C}$  et la configuration finale  $\mathcal{C}'$ . On peut montrer qu'aux temps longs, il est possible de mettre cette probabilité sous la forme :

$$P\left(\frac{X(t)}{t} = j \mid \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'\right) \sim \underbrace{\exp(tG(j, E))}_{\text{indépendant de } \mathcal{C}, \mathcal{C}'}, \quad (21)$$



avec des préfacteurs qui dépendent des conditions initiale et finale  $\mathcal{C}$  et  $\mathcal{C}'$ . La fonction  $G(j, E)$  (*fonction de grandes déviations du courant*) est indépendante du temps et des configurations initiale et finale.

La fonction de grandes déviations  $G(j, E)$  joue un rôle très similaire à celui d'une énergie libre [28]. Cette fonction s'annule pour la valeur  $\bar{j}$  la plus probable du courant  $j$  :

$$G(\bar{j}, E) = 0 .$$

C'est également une fonction concave (figure 13) : on peut en effet comparer la probabilité d'observer un courant moyen  $j$  pendant une durée très longue  $t$  et les probabilités d'observer un courant  $j_1$  pendant une durée  $t_1 = \alpha t$ , et un courant  $j_2$  pendant une durée  $t_2 = (1 - \alpha)t$  telles que  $t = t_1 + t_2$  et  $j = \alpha j_1 + (1 - \alpha)j_2$ . On a :

$$P\left(\frac{X(t)}{t} = j \mid \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'\right) \geq P\left(\frac{X(t_1)}{t_1} = j_1 \mid \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}''\right) P\left(\frac{X(t_2)}{t_2} = j_2 \mid \mathcal{C}'' \rightarrow \mathcal{C}'\right) ,$$

car, dans l'espace des configurations, le chemin  $(\mathcal{C}, 0) \xrightarrow{j_1} (\mathcal{C}'', \alpha t) \xrightarrow{j_2} (\mathcal{C}', t)$  ne représente qu'une possibilité parmi tous les chemins  $(\mathcal{C}, 0) \xrightarrow{j} (\mathcal{C}', t)$  de courant moyen  $j$ . Cette inégalité s'écrit, pour les temps longs :

$$tG(\alpha j_1 + (1 - \alpha)j_2, E) \geq \alpha tG(j_1, E) + (1 - \alpha)tG(j_2, E) ,$$

ce qui montre que la fonction de grandes déviations du courant  $G(j, E)$  est concave par rapport à la variable  $j$ .

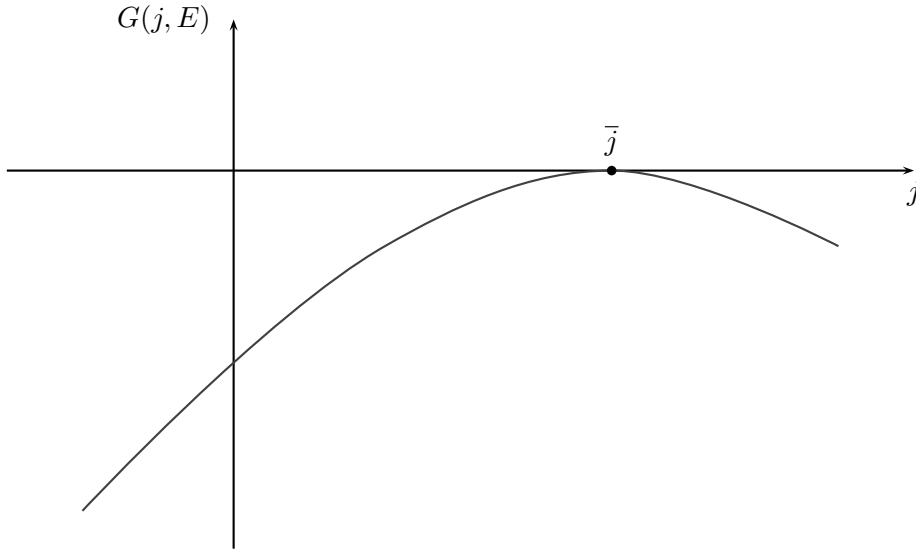


FIG. 13: Fonction de grandes déviations

### 4.1.2 Petites fluctuations et relation d'Einstein

Pour  $j$  proche de  $\bar{j}$ , on a  $G(\bar{j}) \simeq \frac{1}{2}G''(\bar{j})(j - \bar{j})^2$  car  $G(\bar{j}) = 0$  et  $G'(\bar{j}) = 0$ , et donc :

$$\begin{aligned} P\left(\frac{X(t)}{t} = j\right) &\simeq \exp\left(tG''(\bar{j})\frac{(j - \bar{j})^2}{2}\right) \\ &\simeq \exp\left(G''(\bar{j})\frac{(X(t) - \langle X(t) \rangle)^2}{2t}\right), \end{aligned}$$

ce qui montre que la variance du courant

$$\frac{\langle (X(t) - \langle X(t) \rangle)^2 \rangle}{t} = -\frac{1}{G''(\bar{j})} \quad (22)$$

s'exprime comme l'inverse de la dérivée seconde de la fonction de grandes déviations. Cette égalité est très semblable à la relation d'Einstein (cf. partie 10.1), où le rôle de la fonction de grandes déviations du courant est joué par l'énergie libre. Les dérivées d'ordre supérieur de  $G$ , si elles existent, permettent de trouver tous les cumulants de  $X(t)$ .

Remarque :

Pour passer de la fonction de grandes déviations (21) aux fluctuations (22), on a supposé que  $G(j)$  était dérivable et que les limites  $j \rightarrow \bar{j}$  et  $t \rightarrow \infty$  pouvaient être échangées. On peut aussi remarquer que la variance du courant intégré  $\langle X(t)^2 \rangle - \langle X(t) \rangle^2$  décrit des fluctuations d'ordre  $\sqrt{t}$  alors que le terme  $t/G''(\bar{j})$  décrit des déviations d'ordre  $t$ . Il peut se produire que les fluctuations ne puissent pas s'obtenir à partir de la fonction de grandes déviations (par exemple si la dérivée  $G'(j)$  n'est pas continue en un point, cf. partie 12.5) et que les régimes  $X(t) - \langle X(t) \rangle = O(t)$  et  $X(t) - \langle X(t) \rangle = O(\sqrt{t})$  ne soient pas reliés de manière simple.

### 4.1.3 La propriété de Gallavotti-Cohen : première approche

On va montrer que, pour des probabilités de transition  $\overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  qui satisfont la relation de bilan détaillé (19) :

$$\forall \mathcal{C}, \mathcal{C}', \quad \overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') = \overline{M}_{-x}(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) \exp\left(\frac{xE}{kT}\right),$$

la fonction de grandes déviations  $G$  vérifie la relation de Gallavotti-Cohen [17, 21, 23] :

$$\boxed{G(j, E) = G(-j, E) + \frac{Ej}{kT}}. \quad (23)$$

Cette relation montre que  $G(j) - G(-j)$  est linéaire en  $j$ . Elle permet de relier les valeurs de  $G$  en deux points quelconques, même loin de  $\bar{j}$ , où la plupart des événements sont concentrés.

Cette relation peut être difficile à vérifier expérimentalement de manière directe, car, si  $\bar{j} \neq 0$ , au moins l'une des deux quantités  $\exp(tG(j))$  et  $\exp(tG(-j))$  est très faible. Nous allons voir que la relation de Gallavotti-Cohen permet de retrouver le théorème de fluctuation-dissipation ainsi que les relations d'Onsager.

La dérivation de (23) peut s'effectuer en se servant du fait que, si  $\overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  ne vérifie pas le bilan détaillé, c'est en revanche le cas de la matrice  $M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  des transitions de probabilité en l'absence

du champ  $E$ . Pour cela, comparons, comme précédemment, la probabilité d'une trajectoire  $\mathcal{C}(t)$  avec celle de sa trajectoire renversée dans le temps  $\theta\mathcal{C}(t)$  (comme représenté sur la figure 11) :

$$\begin{cases} P(\mathcal{C}(t)|\mathcal{C}_1 \rightarrow \mathcal{C}_3) = e^{t_3\overline{M}(\mathcal{C}_3,\mathcal{C}_3)}\overline{M}_{x_{23}}(\mathcal{C}_3,\mathcal{C}_2)dt e^{t_2\overline{M}(\mathcal{C}_2,\mathcal{C}_2)}\overline{M}_{x_{12}}(\mathcal{C}_2,\mathcal{C}_1)dt e^{t_1\overline{M}(\mathcal{C}_1,\mathcal{C}_1)} \\ P(\theta\mathcal{C}(t)|\mathcal{C}_3 \rightarrow \mathcal{C}_1) = e^{t_1\overline{M}(\mathcal{C}_1,\mathcal{C}_1)}\overline{M}_{-x_{12}}(\mathcal{C}_1,\mathcal{C}_2)dt e^{t_2\overline{M}(\mathcal{C}_2,\mathcal{C}_2)}\overline{M}_{-x_{23}}(\mathcal{C}_2,\mathcal{C}_3)dt e^{t_3\overline{M}(\mathcal{C}_3,\mathcal{C}_3)} \end{cases},$$

où la trajectoire  $\mathcal{C}(t)$  est spécifiée par les configurations  $\mathcal{C}_1$ ,  $\mathcal{C}_2$  et  $\mathcal{C}_3$  visitées, les temps  $t_1$ ,  $t_2$  et  $t_3$  de résidence dans les configurations, et les échanges  $x_{12}$  et  $x_{23}$  avec le réservoir qui accompagnent les sauts de  $\mathcal{C}_1$  vers  $\mathcal{C}_2$  puis de  $\mathcal{C}_2$  vers  $\mathcal{C}_3$ .

En utilisant le bilan détaillé (19), on obtient, en faisant le quotient des expressions précédentes :

$$P(\mathcal{C}(t)|\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \exp\left(\frac{X(t)E}{kT}\right) P(\theta\mathcal{C}(t)|\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \frac{P_{\text{eq}}(\mathcal{C}')}{P_{\text{eq}}(\mathcal{C})}.$$

En effectuant la somme sur toutes les trajectoires telles qu'un nombre  $X(t)$  fixé de particules est transféré du réservoir vers le système, on obtient :

$$P(X(t)|\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \exp\left(\frac{X(t)E}{kT}\right) P(-X(t)|\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \frac{P_{\text{eq}}(\mathcal{C}')}{P_{\text{eq}}(\mathcal{C})}.$$

Pour la valeur particulière  $X(t) = jt$  du courant intégré, la définition de la fonction de grandes déviations donne à l'ordre dominant en  $t$  :

$$\exp(tG(j)) = \exp\left(\frac{E}{kT}jt\right) \exp(tG(-j)),$$

ce qui implique la relation (23).

On remarque que la relation (11), qui traduisait la micro-réversibilité en l'absence de champ d'un processus défini par une dynamique de Markov, n'est plus valable, mais est modifiée de manière assez simple pour un système hors d'équilibre dans son régime stationnaire.

#### 4.1.4 La propriété de Gallavotti-Cohen : seconde approche et lien à $\mu(\lambda)$

On a vu dans la partie 3.3 que la fonction génératrice des moments de  $X(t)$  s'écrit, aux temps longs (relation (15)) :

$$\langle e^{\lambda X(t)} \rangle \sim e^{t\mu(\lambda)} \sim \int dj e^{t(G(j,E)+\lambda j)},$$

ce qui montre que la fonction  $\mu(\lambda)$  est la transformée de Legendre de la fonction de grandes déviations  $G(j)$  :

$$\mu(\lambda) = \max_j (G(j) + \lambda j). \quad (24)$$

La relation de Gallavotti-Cohen s'écrit donc pour  $\mu(\lambda)$  :

$$\boxed{\mu(\lambda, E) = \mu\left(-\lambda - \frac{E}{kT}, E\right)}. \quad (\text{Gallavotti-Cohen})$$

On va montrer qu'il est en fait possible d'obtenir directement cette relation.

La fonction génératrice des moments de  $X(t)$ , définie par la relation (12), vérifiait (13) en l'absence de champ. En présence d'un champ  $E$ , la fonction génératrice  $Q(\mathcal{C}, \lambda)$  vérifie désormais :

$$\frac{dQ_t(\mathcal{C}, \lambda)}{dt} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \sum_x \left( e^{\lambda x} \overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') Q_t(\mathcal{C}', \lambda) - \overline{M}_x(\mathcal{C}', \mathcal{C}) Q_t(\mathcal{C}, \lambda) \right). \quad (25)$$

Cette relation se lit sous forme matricielle. Pour les temps longs, la fonction génératrice s'écrit :

$$Q_t(\mathcal{C}, \lambda) \sim e^{t\mu(\lambda, E)} q(\mathcal{C}, \lambda),$$

où  $\mu(\lambda, E)$  est la plus grande valeur propre de la matrice et  $q(\mathcal{C}, \lambda)$  le vecteur propre (à droite) correspondant, qui vérifie :

$$\mu(\lambda, E)q(\mathcal{C}, \lambda) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \sum_x \left( e^{\lambda x} \overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') q(\mathcal{C}', \lambda) - \overline{M}_x(\mathcal{C}', \mathcal{C}) q(\mathcal{C}, \lambda) \right).$$

On peut insérer dans cette équation la relation du bilan détaillé, qui, pour les probabilités de transitions  $\overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  en présence d'un champ  $E$ , s'écrit, d'après (10) et (19) :

$$\overline{M}_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') = \exp\left(\frac{Ex}{kT}\right) \overline{M}_{-x}(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_{\text{eq}}(\mathcal{C}), \quad (26)$$

ce qui donne :

$$\mu(\lambda, E)q(\mathcal{C}, \lambda) = \sum_{\mathcal{C}'} \sum_x \left( e^{(\lambda + \frac{E}{kT})x} \overline{M}_{-x}(\mathcal{C}', \mathcal{C}) \frac{q(\mathcal{C}', \lambda)}{P_{\text{eq}}(\mathcal{C}')} P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) - \overline{M}_x(\mathcal{C}', \mathcal{C}) q(\mathcal{C}, \lambda) \right).$$

On voit donc que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{si } q(\mathcal{C}, \lambda) \text{ est un vecteur propre à droite correspondant à la valeur propre } \mu(\lambda, E), \\ \text{alors } \frac{q(\mathcal{C}, \lambda)}{P_{\text{eq}}(\mathcal{C})} \text{ est un vecteur propre à gauche correspondant à la valeur propre } \mu\left(-\lambda - \frac{E}{kT}, E\right), \end{array} \right.$$

ce qui démontre la relation de Gallavotti-Cohen pour  $\mu$ .

La relation de Gallavotti-Cohen permet d'obtenir des relations pour les moments de  $X$ , dont on a donné les expressions à l'équation (16). On a :

$$\frac{\langle X \rangle}{t} = \frac{d\mu}{d\lambda} \Big|_{\lambda=0} = j \quad , \quad \frac{\langle X^2 \rangle_c}{t} = \frac{d^2\mu}{d\lambda^2} \Big|_{\lambda=0}.$$

En particulier, en l'absence de champ,  $\mu(\lambda) = \mu(-\lambda)$ , et la valeur moyenne  $\langle X(t) \rangle$  du courant intégré est nulle.

## 4.2 Théorème de fluctuation-dissipation

Le théorème de fluctuation-dissipation établit, pour un système à l'équilibre, un lien entre deux quantités de nature *a priori* différente :

- la fluctuation en champ nul du courant intégré :

$$\Delta = \frac{\langle X(t)^2 \rangle - \langle X(t) \rangle^2}{t} \Big|_{E=0},$$

- et la réponse linéaire du système à l'application d'un faible champ  $E$  :

$$\sigma E = \frac{\langle X(t) \rangle}{t}.$$

Il s'écrit :

$$\boxed{\Delta = 2kT\sigma} . \quad (27)$$

On peut le retrouver à partir de la relation de Gallavotti-Cohen. Au voisinage de l'équilibre, le champ  $E$  et le courant  $j$  sont faibles, et l'on peut essayer de développer la fonction de grandes déviations à l'ordre 2 :

$$G(j, E) = aj + bE + cj^2 + djE + eE^2 .$$

Comme  $G$  doit s'annuler pour  $j = \bar{j}$  avec  $\bar{j} = \sigma E$ , on s'attend à ce que le développement prenne la forme simple suivante :

$$G(j, E) = -\frac{(j - \bar{j})^2}{2\Delta} .$$

En insérant cette expression dans la relation de Gallavotti-Cohen (23) et en utilisant la définition de  $\sigma$ , on obtient :

$$-\frac{(j - \sigma E)^2}{2\Delta} = -\frac{(j + \sigma E)^2}{2\Delta} + \frac{Ej}{kT} ,$$

ce qui implique la relation de fluctuation-dissipation (27).

Un exemple d'interprétation est donné par le bruit Johnson-Nyquist. On considère une résistance électrique à l'équilibre à la température  $T$ . Les fluctuations thermiques produisent un courant  $I$  de moyenne nul. Si on mesure la charge pendant le temps  $t$

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

la variance de cette charge augmente (pour les temps longs) linéairement avec le temps. Le rôle du faible champ  $E$  est joué par une faible différence de potentiel  $U$ , telle que  $R^{-1}U = I$  (c'est la loi d'Ohm, la résistance  $R$  jouant le rôle de l'inverse du coefficient de réponse linéaire  $\sigma$ ). Le théorème de fluctuation-dissipation donne la formule de Nyquist :

$$\frac{\langle Q(t)^2 \rangle - \langle Q(t) \rangle^2}{t} = \frac{2kT}{R} \quad (\text{pour } t > 0) . \quad (28)$$

### 4.3 Relations d'Onsager

On peut généraliser ce qui précède au cas où le système est en interaction avec plusieurs réservoirs (figure 14). Pour simplifier les expressions, on s'intéresse au cas de deux réservoirs  $\mathcal{R}$  et  $\mathcal{R}'$  échangeant respectivement un nombre  $X$  et  $Y$  de particules avec le système ( $X$  et  $Y$  pourraient également être des quantités extensives de différentes natures, comme l'énergie et la charge électrique). On suppose, comme dans la situation du théorème de fluctuation-dissipation, que le système est proche de l'équilibre, et soumis à de faibles champs sur les réservoirs  $\mathcal{R}$  et  $\mathcal{R}'$ .

La réponse du système (c'est-à-dire les courants moyens  $\bar{j}_x$  et  $\bar{j}_y$ ) à de faibles champs  $E_x$  et  $E_y$  est supposée linéaire :

$$\begin{pmatrix} \bar{j}_x \\ \bar{j}_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} .$$

Les relations de réciprocity d'Onsager affirment que la matrice ( $\sigma$ ) est symétrique :

$$\boxed{\sigma_{xy} = \sigma_{yx}} .$$

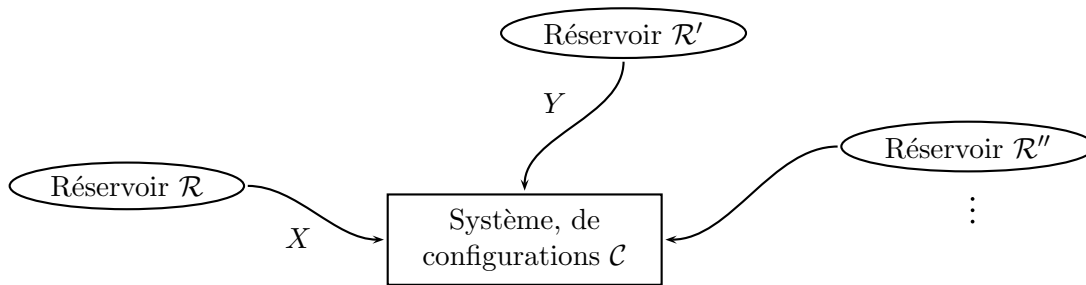


FIG. 14: Système interagissant avec plusieurs réservoirs

Elles découlent de la généralisation de la relation de Gallavotti-Cohen au cas de deux réservoirs, qui s'écrit :

$$G(j_x, j_y; E_x, E_y) = G(-j_x, -j_y; E_x, E_y) + \frac{E_x}{kT} j_x + \frac{E_y}{kT} j_y. \quad (29)$$

On peut développer  $G$  au deuxième ordre en  $j_x, j_y, E_x$  et  $E_y$  :

$$\begin{aligned} G(j_x, j_y; E_x, E_y) = & a j_x^2 + b j_y^2 + c j_x E_x + d j_y E_y \\ & + e j_x E_y + f j_y E_x \\ & + h j_x j_y + \text{termes en } E_x E_y \text{ et } E_x^2, E_y^2. \end{aligned}$$

Les termes constants et linéaires sont nuls car, en champ nul ( $E_x = E_y = 0$ ), le courant moyen est nul ( $\bar{j}_x = \bar{j}_y = 0$ ) ainsi que la fonction de grandes déviations. En substituant ce développement dans la relation de Gallavotti-Cohen (29), les termes en  $E_x^2, E_y^2$  et  $E_x E_y$  sont automatiquement égaux. On obtient de plus les relations :

$$e = f = 0 \quad c = d = \frac{1}{2kT}.$$

Les valeurs  $\bar{j}_x$  et  $\bar{j}_y$  des courants moyens, prises par  $G(j_x, j_y; E_x, E_y)$  à son extremum, sont déterminées par les équations  $\partial G / \partial j_x = 0$  et  $\partial G / \partial j_y = 0$  :

$$\begin{cases} 2a\bar{j}_x + cE_x + h\bar{j}_y = 0 \\ 2b\bar{j}_y + dE_y + h\bar{j}_x = 0. \end{cases}$$

On obtient finalement :

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = -2kT \begin{pmatrix} 2a & h \\ h & 2b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{j}_x \\ \bar{j}_y \end{pmatrix},$$

ce qui établit les relations de réciprocity de Onsager (car la matrice qui relie les champs aux courants est, comme son inverse, symétrique).

#### 4.4 Remarques

1. L'approche des chaînes de Markov n'est pas la seule possible : on peut obtenir les relations de Gallavotti-Cohen dans un contexte entièrement déterministe. Ainsi, un système isolé décrit par les équations de Hamilton (partie 2.1) peut être modifié de façon à décrire une situation hors d'équilibre : il suffit par exemple d'ajouter un champ  $\vec{E}$ , qui fournit de l'énergie au système, accompagné d'une force non-hamiltonienne (*i.e.* ne dérivant pas d'un potentiel) qui permet de maintenir le système à une énergie constante. La mesure stationnaire  $P_t(\mathcal{C})$  d'un tel système, contrairement à la mesure microcanonique, n'a plus qu'une contrainte à satisfaire :

- l'énergie totale  $E$  est conservée,
- en revanche, l'évolution de  $P_t(\mathcal{C})$  ne conserve pas l'élément de volume de l'espace des phases.

On pourra par exemple consulter [5] et [27] pour des exposés détaillés, respectivement sur le thermostat de Nosé-Hoover et les mesures stationnaires SRB.

2. En partant de l'équation maîtresse en présence d'un champ  $E$  :

$$\frac{dP_t(\mathcal{C})}{dt} = \sum_{\mathcal{C}'} \sum_x \left( M_x(\mathcal{C}, \mathcal{C}') e^{xE/2kT} P_t(\mathcal{C}', X - x) - M_x(\mathcal{C}', \mathcal{C}) e^{xE/2kT} P_t(\mathcal{C}, X) \right),$$

on peut, en effectuant une théorie des perturbations comme en mécanique quantique, développer  $\mu(\lambda)$  en  $\lambda$  et  $E$  pour de faibles valeurs de ces paramètres ; cette méthode donne directement le théorème de fluctuation-dissipation et les relations d'Onsager sans avoir à passer par les grandes déviations et la relation de Gallavotti-Cohen.

#### 4.5 La forme dynamique du théorème de fluctuation-dissipation

On considère un système décrit par ensemble de configurations  $\{\mathcal{C}\}$ , dont les probabilités de transition sont notées  $M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  à l'équilibre (en champ nul), et la distribution d'équilibre  $P_{eq}(\mathcal{C})$ . On s'intéresse à deux observables  $A(\mathcal{C})$  et  $B(\mathcal{C})$  quelconques. On note  $h_B$  la variable intensive conjuguée à  $B(\mathcal{C})$ , que l'on interprétera comme un champ. L'introduction d'un champ variable  $h_B(t)$  (associé à  $B$ ) crée une distribution de probabilité  $P_t(\mathcal{C})$  dépendante du temps. On peut, de manière très générale, étudier l'influence du champ  $h_B(t)$  sur la mesure de  $A(\mathcal{C})$ , en essayant de relier :

- la réponse  $R_{AB}$  de l'observable  $A$  à la présence du champ  $h_B$  :

$$R_{AB}(t, t') = \left. \frac{\delta \langle A(t) \rangle_h}{\delta h_B(t')} \right|_{h_B=0} = \left. \frac{\delta}{\delta h_B(t')} \sum_{\mathcal{C}} A(\mathcal{C}) P_t(\mathcal{C}) \right|_{h=0},$$

- et la fonction de corrélation  $C_{AB}(t, t')$  entre  $A$  et  $B$  aux instants  $t$  et  $t'$  (en l'absence des champs  $h_A$  ou  $h_B$ ) :

$$C_{AB}(t, t') = \langle A(t) B(t') \rangle = \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} A(\mathcal{C}) B(\mathcal{C}') e^{(t-t')M}(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{eq}(\mathcal{C}').$$

On notera  $\overline{M}_t(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  les probabilités de transition en présence du champ variable  $h(t)$ . Les matrices de transition  $M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  et  $\overline{M}_t(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  vérifient alors respectivement les relations de bilan détaillé

$$M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{eq}(\mathcal{C}') = M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_{eq}(\mathcal{C}) \quad (30)$$

$$\overline{M}_t(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{eq}(\mathcal{C}') \exp\left(\frac{h_B(t)}{kT} B(\mathcal{C}')\right) = \overline{M}_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_{eq}(\mathcal{C}) \exp\left(\frac{h_B(t)}{kT} B(\mathcal{C})\right). \quad (31)$$

Si on suppose le champ variable  $h_B(t)$  petit, la relation (31) peut s'écrire :

$$\overline{M}(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{eq}(\mathcal{C}') = \overline{M}(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_{eq}(\mathcal{C}) + \frac{h_B(t)}{kT} (M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) B(\mathcal{C}) P_{eq}(\mathcal{C}) - M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') B(\mathcal{C}') P_{eq}(\mathcal{C}')), \quad (32)$$

et la distribution des configurations peut se décomposer sous la forme :

$$P_t(\mathcal{C}) = P_{eq}(\mathcal{C}) + Q_t(\mathcal{C}),$$

où  $Q_t(\mathcal{C})$  représente la réponse linéaire à l'application d'un faible champ  $h_B(t)$ . Déterminons l'équation vérifiée par  $Q_t(\mathcal{C})$ . Des équations maîtresses vérifiées par  $P_{\text{eq}}(\mathcal{C})$  et  $P_t(\mathcal{C})$  on déduit :

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \left( M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) \right) \\ \frac{dP_t(\mathcal{C})}{dt} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \left( \overline{M}_t(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P_t(\mathcal{C}') - \overline{M}_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P_t(\mathcal{C}) \right), \end{array} \right.$$

on obtient par soustraction la relation :

$$\begin{aligned} \frac{dQ_t(\mathcal{C})}{dt} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \left( M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') Q_t(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) Q_t(\mathcal{C}) \right. \\ \left. - (M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') - \overline{M}_t(\mathcal{C}, \mathcal{C}')) P_t(\mathcal{C}') \right. \\ \left. + (M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) - \overline{M}_t(\mathcal{C}', \mathcal{C})) P_t(\mathcal{C}) \right). \end{aligned}$$

Dans cette expression, on peut approximer les termes  $P_t$  par  $P_{\text{eq}}$  car ils sont en facteur d'éléments de matrice de  $\overline{M}_t - M$ , qui sont d'ordre 1 car le champ  $h_B$  est faible. Alors, en utilisant le bilan détaillé (30) à l'équilibre et celui en présence de champ sous sa forme linéarisée (32), on obtient, toujours à l'ordre 1 en  $h_B$  :

$$\begin{aligned} \frac{dQ_t(\mathcal{C})}{dt} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \left( M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') Q_t(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) Q_t(\mathcal{C}) \right. \\ \left. - \frac{h_B(t)}{kT} \left( M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') B(\mathcal{C}') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) B(\mathcal{C}) P_{\text{eq}}(\mathcal{C}) \right) \right). \end{aligned}$$

Enfin, en utilisant la convention (8) pour définir  $M_t(\mathcal{C}, \mathcal{C})$ , on trouve :

$$\boxed{\frac{dQ_t(\mathcal{C})}{dt} = \sum_{\mathcal{C}'} \left( M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') Q_t(\mathcal{C}') - \frac{h_B(t)}{kT} M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') B(\mathcal{C}') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') \right)}.$$

Cette équation s'intègre de la manière suivante

$$\begin{aligned} Q_t(\mathcal{C}) &= - \int_{-\infty}^t \sum_{\mathcal{C}', \mathcal{C}''} e^{(t-t')M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')} \frac{h_B(t')}{kT} M(\mathcal{C}', \mathcal{C}'') B(\mathcal{C}'') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}'') \\ &= \int_{-\infty}^t \frac{d}{dt'} \left( \sum_{\mathcal{C}'} e^{(t-t')M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')} \right) \frac{h_B(t')}{kT} B(\mathcal{C}') P_{\text{eq}}(\mathcal{C}'), \end{aligned}$$

ce qui permet d'écrire :

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle_h &= \langle A \rangle \Big|_{h=0} + \sum_{\mathcal{C}} Q_t(\mathcal{C}) A(\mathcal{C}) \\ &= \langle A \rangle \Big|_{h=0} + \int_{-\infty}^t \frac{1}{kT} h_B(t') \frac{d}{dt'} \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} A(\mathcal{C}) B(\mathcal{C}') e^{(t-t')M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')} P_{\text{eq}}(\mathcal{C}') \\ &= \langle A \rangle \Big|_{h=0} + \int_{-\infty}^t \frac{1}{kT} h_B(t') \frac{d}{dt'} C_{AB}(t, t'), \end{aligned}$$



et d'obtenir finalement une généralisation du théorème de fluctuation-dissipation :

$$\boxed{R_{AB}(t, t') = \frac{1}{kT} \frac{d}{dt'} C_{AB}(t, t')} . \quad (33)$$

Le théorème de fluctuation dissipation, sous la forme  $\Delta = 2kT\sigma$  (présentée dans la partie 4.2), n'est valide que dans la limite d'un temps assez long pour que l'équilibre soit atteint. En dehors de ce régime asymptotique, ce théorème n'est pas valide, et l'on parle de "violation" du théorème de fluctuation-dissipation. L'écart à (33) permet de caractériser les phénomènes de vieillissement que l'on observe dans des systèmes dont la dynamique lente fait qu'on peut seulement les observer loin de l'équilibre.

## Troisième partie

# Fluctuations de courant entre deux réservoirs

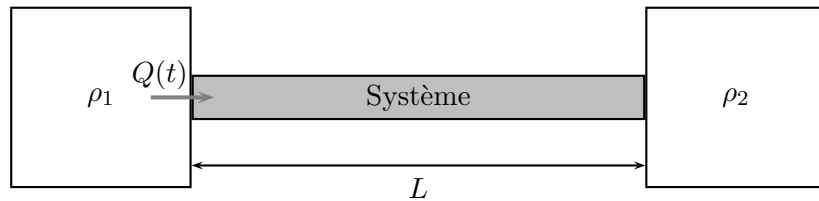


FIG. 15: Système en contact avec deux réservoirs de particules

On considère un système de particules en contact avec deux réservoirs à des densités  $\rho_1$  et  $\rho_2$  (figure 15), et on s'intéresse aux questions suivantes. Peut-on à partir d'un modèle microscopique :

- retrouver la loi de Fick, qui donne la valeur moyenne du nombre  $Q(t)$  de particules algébriquement transférées du réservoir 1 vers le système en un temps  $t$  :

$$\frac{\langle Q \rangle}{t} = \frac{\kappa}{L} \Delta \rho,$$

où  $\kappa$  est une constante (appelée coefficient de diffusion) et  $\Delta \rho = \rho_1 - \rho_2$  ;

- calculer le profil de densité le plus probable ;
- déterminer les fluctuations de  $Q$  ?

Au lieu considérer des particules, on pourrait reprendre le même problème pour une grandeur extensive quelconque, comme la charge ou l'énergie  $e$  (système en contact avec deux thermostats de températures distinctes). Les lois donnant le courant moyen de la charge ou de l'énergie seraient alors respectivement la loi d'Ohm et la loi de Fourier.

## 5 Quelques exemples

### 5.1 Transport de chaleur dans les gaz

Le gaz parfait, dont les particules évoluent sans interactions, ne permet pas de rendre compte de la conduction de l'énergie thermique dans un gaz, car le mouvement des particules y est balistique ; l'énergie est intégralement transmise d'une extrémité à l'autre du système, indépendamment de sa longueur  $L$ , et donc :

$$\frac{\langle Q \rangle}{t} \text{ est indépendant de } L, \text{ i.e. : } \kappa \propto L.$$

La description du transport de chaleur dans un gaz réel remonte à Clausius, Maxwell et Boltzmann, qui considèrent un gaz en interaction (cf. la revue de Bonetto *et al* [5]). On suppose le libre parcours moyen  $\lambda$  des particules du gaz très petit devant la longueur  $L$  du système :

$$\lambda \ll L \quad \text{avec} \quad \lambda = \frac{1}{\pi \rho \sigma^2},$$

où  $\sigma$  représente le rayon "effectif" des particules. Soit  $T(x)$  le profil de température, où  $x$  est une variable adimensionnée représentant la position (en unités  $L$ ). Les particules transportent leur énergie (cinétique) sur des distances de l'ordre de  $\lambda$  (figure 16).

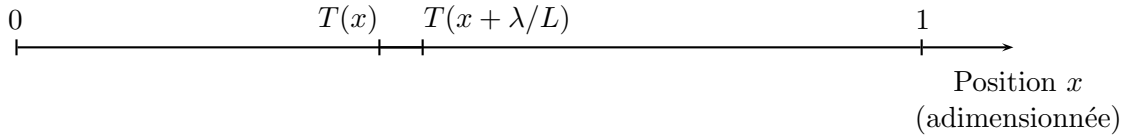


FIG. 16: Transport de l'énergie par des particules en interaction (système unidimensionnel)

On suppose que le gaz est localement en équilibre à la température  $T(x)$  et à la densité  $\rho$ , ce qui permet, en utilisant l'équipartition de l'énergie, d'affirmer que la vitesse moyenne des particules est, en un point  $x$ , proportionnelle à  $\sqrt{T(x)}$ . Le flux thermique s'exprime alors comme :

$$J = \rho \underbrace{\sqrt{T}}_{\text{vitesse}} (T(x) - T(x + \lambda/L)) = -\rho\lambda \frac{\sqrt{T}}{L} \frac{dT}{dx}.$$

Ainsi,  $\kappa \sim \sqrt{T}$  et  $\kappa$  est indépendante de  $\rho$  (loi de Clausius). Cette approche permet d'obtenir l'expression de l'énergie moyenne transférée  $\langle Q \rangle$ , en  $1/L$  en accord avec la loi de Fourier.

Une approche un peu plus précise est celle de la théorie cinétique de gaz, où l'on écrit l'équation de Boltzmann vérifiée par la densité  $f(\vec{v}, x)$  de particules à la vitesse  $\vec{v}$  au point  $x$ .

## 5.2 Diffusion d'énergie thermique dans les solides

On peut décrire le modèle du solide parfait harmonique (où chaque particule est piégée dans un potentiel quadratique, et les interactions entre plus proches voisins sont également quadratiques) comme un "gaz de phonons". Le formalisme est équivalent à celui du gaz parfait (mise à part la vitesse des phonons, qui est constante au lieu d'être proportionnelle à  $\sqrt{T}$ ), et le transport d'énergie est balistique, ce qui mène, comme pour le gaz parfait, à :

$$\kappa \propto L. \quad (\text{gaz parfait de phonons})$$

Peierls, au début des années 1920, a étudié les solides anharmoniques, et montré que les modèles les plus simples ne fonctionnent pas non plus. Pour décrire la diffusion thermique dans les solides, il faut tenir compte du phénomène d'*Umklapp*, qui est lié au fait que, dans un réseau de pas fini, la zone de Brillouin est bornée. La zone de Brillouin,  $]-\pi/a, \pi/a]$  pour un réseau de pas  $a$ , est l'intervalle dans lequel doit rester chaque composante du vecteur d'onde  $\vec{k}$  d'un phonon se propageant dans sur le réseau. Ainsi, dans une collision à trois phonons de la forme :

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{K}_{\text{réciproque}},$$

une partie de l'impulsion des phonons peut être transmise au réseau réciproque sous la forme d'une contribution  $\vec{K}_{\text{réciproque}}$ . Ce phénomène, appelé processus *Umklapp*, est responsable, dans la théorie de Peierls, de la diffusion thermique à l'intérieur d'un solide régulier.

Les modèles de conduction thermique dans les solides, et en particulier le modèle de Peierls, sont exposés dans l'article de revue de Lepri, Livi et Politi [25].

## 6 Fluctuations de courant

### 6.1 Bruit de Johnson-Nyquist (1928)

On considère, comme au paragraphe partie 4.2, une résistance  $R$  à l'équilibre avec un thermostat à température  $T$ . On note  $V$  la différence de potentiel aux bornes de la résistance, et  $Q(t)$  la charge qu'elle a algébriquement reçue au cours d'une durée  $t$ . Comme le système est à l'équilibre, la valeur moyenne de  $Q(t)$  est nulle :  $\langle Q(t) \rangle = 0$ . Ses fluctuations, comme on l'a vu (équation (28)), prennent la forme :

$$\langle (Q(t) - Q(t'))^2 \rangle = \frac{2kT}{R} |t - t'|. \quad (34)$$

On écrit habituellement la loi de Nyquist pour la quantité  $V$  sous forme spectrale :

$$\langle V(t)V(t') \rangle = \int_0^\infty df G(f) \cos 2\pi f(t - t'),$$

où  $G(f)$  est l'amplitude, en fréquence, du bruit. Le bruit Nyquist est blanc, dans le sens où toutes les fréquences ont le même poids :  $G(f)$  est une constante égale à

$$G(f) = 4RkT.$$

Historiquement, ce bruit a été découvert en 1928 par Johnson, qui s'intéressait aux mesures de "bruit de grenaille" dans les conducteurs, et expliqué par Nyquist la même année. Ce bruit a permis, avec une bonne précision (8%), d'effectuer une mesure de la constante de Boltzmann, complémentaire des autres méthodes de mesure connues à l'époque, basées sur le mouvement brownien de particules dans un fluide.

On va montrer qu'on peut retrouver ce bruit à partir d'une équation de Langevin pour  $Q$  :

$$\frac{dQ}{dt} = -A Q(t) + B \eta(t),$$

où  $\eta$  est un bruit blanc Gaussien de moyenne nulle et variance 1 :

$$\begin{cases} \langle \eta(t) \rangle = 0 \\ \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta(t - t'). \end{cases}$$

En fixant  $Q(-\infty) = 0$ , l'équation de Langevin s'intègre sous la forme :

$$Q(t) = B \int_{-\infty}^t dt' e^{-A(t-t')} \eta(t'), \quad (35)$$

ce qui permet de calculer les deux premiers moments de  $Q$ , aux temps longs :

$$\langle Q \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle Q^2 \rangle = \frac{B^2}{2A}.$$

On peut également déterminer à partir de la relation (35) la fonction de corrélation à deux points aux temps longs, avec  $|t - t'|$  fini :

$$\langle Q(t)Q(t') \rangle = \frac{B^2}{2A} e^{-A|t-t'|}. \quad (36)$$

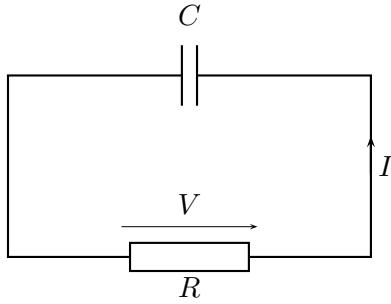


FIG. 17: Bruit Nyquist dans un circuit  $RC$  ( $C$  très grand)

Comme  $\eta(t)$  est Gaussien et  $Q$  linéaire en  $\eta$ ,  $Q$  est également Gaussien, et sa distribution aux temps longs est donnée par les deux moments que l'on vient de calculer :

$$P(Q) \propto \exp\left(-\frac{A}{B^2}Q^2\right).$$

Pour interpréter la forme de cette distribution, on peut imaginer que la résistance est reliée à une grande capacité  $C$  qui représente le reste du monde (figure 17). L'énergie contenue dans la capacité valant  $\frac{1}{2}Q^2/C$ , on a :

$$P(Q) \propto \exp\left(-\frac{Q^2}{2CkT}\right),$$

ce qui donne une première relation entre  $A$ ,  $B$  et les paramètres physiques  $C$  et  $T$  :

$$B^2 = 2ACkT.$$

D'autre part, sur le circuit précédent, la définition de l'intensité  $I = -d\langle Q \rangle/dt$ , la loi d'Ohm  $V = RI$ , et la loi de charge du condensateur  $Q = CV$  donnent une équation différentielle sur la valeur moyenne de la charge :

$$\frac{\langle Q \rangle}{C} = -R \frac{d\langle Q \rangle}{dt},$$

qui, en comparant à l'équation de Langevin vérifiée par  $Q(t)$ , implique la relation :

$$A = \frac{1}{RC}, \quad \text{et donc :} \quad B^2 = \frac{2kT}{R}.$$

On obtient alors, en utilisant la relation (36) :

$$\begin{aligned} \langle Q(t)Q(t') \rangle &= \frac{2kT}{R} \frac{1}{2A} e^{-A|t-t'|} \\ \langle (Q(t) - Q(t'))^2 \rangle &= \frac{2kT}{R} \frac{1}{A} \left(1 - e^{-A|t-t'|}\right). \end{aligned}$$

Ainsi, pour une capacité grande  $C$ , dont le temps caractéristique de charge  $\tau = 1/A = RC$  doit être très grand devant la durée d'observation  $|t - t'|$ , on retrouve bien les fluctuations (34).

Pour trouver le spectre des corrélations en tension, on remarque, grâce à la relation  $Q = CV$  :

$$\begin{aligned} \langle V(t)V(t') \rangle &= \frac{2kT}{R} \frac{1}{2AC^2} e^{-A|t-t'|} \\ &= \frac{kT}{C} \exp\left(-\frac{|t-t'|}{RC}\right) \\ &= \int_0^\infty df G(f) \cos 2\pi f(t-t'), \end{aligned}$$

avec une densité spectrale  $G(f)$  égale à :

$$G(f) = \frac{4RkT}{1 + (2\pi fRC)^2}.$$

Ainsi, pour les basses fréquences, on retrouve bien la densité spectrale  $G(f) = 4RkT$ .

## 6.2 Bruit Schottky

L'exemple sans doute le plus simple de fluctuation de courant dans un système hors d'équilibre est celui du "bruit Schottky". Il s'agit du modèle présenté sur la figure 15, avec le réservoir 1 plein et le réservoir 2 vide. On considère la dynamique suivante : pendant un intervalle de temps infinitésimal  $dt$ , une particule de charge  $q$  a une probabilité  $\alpha dt$  de quitter le réservoir 1 pour rejoindre le réservoir 2.

On note, comme dans les exemples présentés jusqu'ici,  $Q(t)$  la charge reçue par le système depuis le réservoir 1 pendant une durée  $t$ . La dynamique précédente se traduit par l'équation :

$$Q(t + dt) = \begin{cases} Q(t) & \text{avec probabilité } 1 - \alpha dt \\ Q(t) + q & \text{avec probabilité } \alpha dt. \end{cases}$$

Les moments de  $Q(t)$  obéissent donc à la relation :

$$\langle Q^k(t + dt) \rangle = (1 - \alpha dt) \langle Q^k(t) \rangle + \alpha dt \langle (Q(t) + q)^k \rangle.$$

En particulier, les deux premiers moments de la charge reçue par le système sont donnés par :

$$\begin{aligned} \langle Q(t) \rangle &= \alpha q t \\ \langle Q^2(t) \rangle - \langle Q(t) \rangle^2 &= \alpha q^2 t. \end{aligned}$$

On observe que le rapport :

$$\boxed{\frac{\langle Q^2(t) \rangle_c}{\langle Q(t) \rangle} = q}$$

est indépendant de  $t$  et  $\alpha$ , et représente la charge élémentaire des particules qui circulent dans le système.

Ce modèle très simple offre une méthode pour déterminer la charge élémentaire dans un système de particules classiques et sans interactions : il suffit de mesurer un courant et ses fluctuations (appelées "bruit de grenaille").

Dans cet exemple, on peut en fait déterminer tous les moments, grâce au calcul de la fonction caractéristique ; on a en effet :

$$\begin{aligned} \langle e^{\lambda Q(t+dt)} \rangle &= (1 - \alpha dt) \langle e^{\lambda Q(t)} \rangle + \alpha dt e^{\lambda q} \langle e^{\lambda Q(t)} \rangle \\ \frac{d \langle e^{\lambda Q(t+dt)} \rangle}{dt} &= \alpha (e^{\lambda q} - 1). \end{aligned}$$

Ainsi,  $\langle e^{\lambda Q(t)} \rangle$  est de la forme attendue :

$$\langle e^{\lambda Q(t)} \rangle = e^{t\mu(\lambda)} \quad \text{avec} \quad \boxed{\mu(\lambda) = \alpha (e^{\lambda q} - 1)}.$$

Autrement dit, pour  $n \geq 1$ , le  $n^{\text{ième}}$  moment de la charge totale  $Q(t)$  transférée du réservoir 1 au réservoir 2 est proportionnel à  $t$  et vaut :

$$\langle Q^n(t) \rangle_c = \alpha t q^n .$$

## 7 Transport quantique

### Électrons dans un système mésoscopique

Le bruit Schottky ne concerne que les systèmes de particules classiques sans interaction. Pour des électrons (des fermions) dans des conducteurs mésoscopiques le rapport des deux premiers cumulants de la charge  $Q$  devient comme l'ont montré Beenakker et Buttiker [1]

$$\frac{\langle Q^2(t) \rangle_c}{\langle Q(t) \rangle^2} = \frac{q}{3} ,$$

et non  $q$ , comme pour le bruit Schottky.

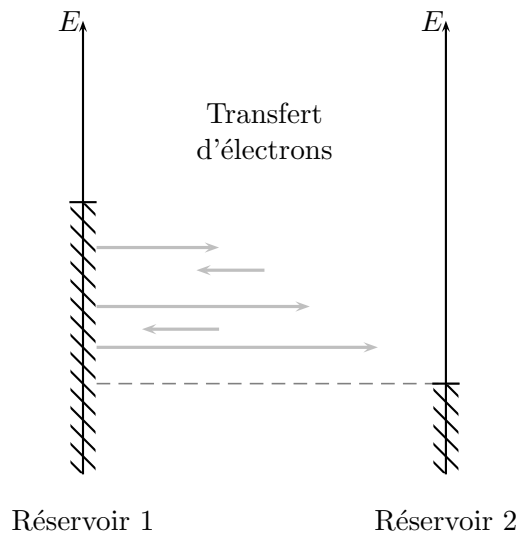


FIG. 18: Niveaux d'énergie fermioniques remplis des réservoirs

Le système est qualifié de 'mésoscopique', c'est-à-dire présente les différences suivantes par rapport au modèle de Schottky :

- Les électrons ne sortent pas du réservoir complètement au hasard, mais presque "périodiquement", du fait de leur nature fermionique. En particulier, la variance du courant qui sort du réservoir croît moins vite qu'une loi linéaire dans le temps.
- Le potentiel de l'échantillon est un potentiel aléatoire, que l'on peut modéliser en disant que le système contient de nombreux *canaux de conduction* (théorie de la localisation), chacun possédant un coefficient de transmission  $T$ .
- La plupart des canaux de conduction ont un très faible coefficient de transmission  $T$ . Seuls un petit nombre d'entre eux ont une probabilité non-nulle de transmission.

Le canal  $n$  a un coefficient de transmission quantique  $T_n$ , c'est-à-dire qu'une particule qui emprunte ce canal a une probabilité  $T_n$  d'être transmise, et  $1 - T_n$  d'être réfléchi. Une modélisation

du désordre dans l'échantillon qu'il serait trop long de décrire ici [3, 24] donne des  $T_n$  distribués selon la loi de probabilité suivante :

$$P(T) = \begin{cases} \frac{\ell}{2L} \frac{1}{T\sqrt{1-T}} & \text{si } T_{\min} < T \leq 1 \\ 0 & \text{si } 0 < T \leq T_{\min}, \end{cases}$$

où  $\ell$  représente le libre parcours moyen des particules dans le système,  $L$  est la longueur du système (avec  $\ell/L \ll 1$ ), et la probabilité  $T_{\min} = 4 \exp(-2L/\ell)$  est telle que la distribution de probabilité soit normalisée. Dans cette distribution, seuls quelques canaux ont une probabilité non-négligeable de transmettre des électrons.

Lee, Levitov et Yakovets, en 1995, ont proposé la méthode suivante [24] pour étudier les fluctuations de courant dans un tel système. Si  $t_0$  désigne le temps caractéristique de sortie de chaque électron dans un canal, alors :

$$\langle e^{\lambda Q(t)} \rangle = \prod_n \left( 1 - T_n + e^{\lambda T_n} \right)^{t/t_0},$$

ce qui permet d'identifier la fonction  $\mu(\lambda)$  :

$$\begin{aligned} \mu(\lambda) &= \frac{1}{t_0} \int_{T_{\min}}^1 dT \log \left( 1 - T + e^{\lambda T} \right) P(T) \\ \mu(\lambda) &\simeq \frac{2\ell}{Lt_0} \left[ \log \left( \sqrt{e^\lambda} + \sqrt{e^\lambda - 1} \right) \right]^2. \end{aligned} \quad (37)$$

On obtient alors les rapports suivants :

$$\frac{\langle Q^2(t) \rangle_c}{\langle Q(t) \rangle} = \frac{q}{3}, \quad \frac{\langle Q^3(t) \rangle_c}{\langle Q(t) \rangle} = \frac{q^2}{15},$$

qui caractérisent la statistique FCS (*Full counting statistics*). Celle-ci apparaît du fait des deux ingrédients suivants :

- le système est constitué de fermions sans interaction,
- et le système est désordonné.

D'autres approches, utilisant par exemple des résultats de la théorie des matrices aléatoires, ou bien celles de l'équation de Boltzmann, permettent d'obtenir le même résultat.

## 8 Fluctuations de courant dans le modèle d'exclusion symétrique

### 8.1 Cas du transport entre un réservoir plein et un réservoir vide

On va maintenant considérer des systèmes de particules classiques et en interaction, en contact avec deux réservoirs. Un des cas les plus simples est le modèle d'exclusion symétrique [13]. Dans ce modèle, des particules se déplacent sur une chaîne de  $L$  sites (figure 19), et à chaque pas de temps infinitésimal  $dt$ , chaque particule a une probabilité  $dt$  de sauter sur un de ses sites voisins (*i.e.* à gauche ou à droite), à condition qu'il soit vide, et une probabilité  $1 - 2dt$  de ne pas bouger. De plus, à chaque pas de temps, une particule est injectée au site 1 du système avec une probabilité  $\alpha dt$  si ce site est vide, et, si une particule est présente sur le site  $L$ , elle sort du système avec une probabilité  $\beta dt$ .

Nous allons voir que ce modèle donne la même distribution de probabilité du courant que celle du système mésoscopique décrit dans la partie 7.



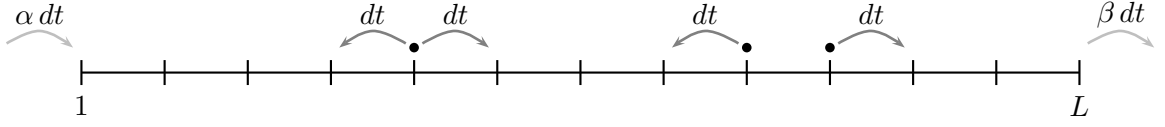


FIG. 19: Dynamique du modèle d'exclusion symétrique

Il y a  $2^L$  configurations, et, comme au paragraphe 3.3, on fait jouer un rôle particulier à l'un des réservoirs (le réservoir gauche), en distinguant les probabilités de transition suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} M_1(\mathcal{C}, \mathcal{C}') \text{ est la probabilité de transition entre } \mathcal{C}' \text{ et } \mathcal{C} \\ \text{lorsqu'une particule rentre dans le système au site 1} \\ M_0(\mathcal{C}, \mathcal{C}') \text{ est la probabilité de transition entre } \mathcal{C}' \text{ et } \mathcal{C} \\ \text{lorsqu'aucune particule ne rentre dans le système au site 1.} \end{array} \right.$$

La fonction  $\mu(\lambda)$  vérifie :

$$\mu(\lambda)q(\mathcal{C}, \lambda) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \left( \left( e^\lambda M_1(\mathcal{C}, \mathcal{C}') + M_0(\mathcal{C}, \mathcal{C}') \right) q(\mathcal{C}', \lambda) - (M_1(\mathcal{C}', \mathcal{C}) + M_0(\mathcal{C}', \mathcal{C})) q(\mathcal{C}, \lambda) \right). \quad (38)$$

La valeur de  $\mu(\lambda)$  à  $\lambda = 0$  correspond au régime stationnaire : le vecteur propre de l'équation maîtresse est alors  $q(\mathcal{C}, \lambda) = P_{\text{st}}(\mathcal{C})$ .

En chaque site  $i$ , on peut définir un nombre binaire  $\tau_i$

$$\tau_i = \begin{cases} 0 & \text{si le site } i \text{ est vide} \\ 1 & \text{si le site } i \text{ est occupé.} \end{cases}$$

L'équation maîtresse permet alors d'écrire que, pour chaque site  $i$  intérieur au système ( $1 < i < L$ ), la valeur moyenne de  $\tau_i$  évolue suivant (cf. les taux de transition donnés sur la figure 20) :

$$\frac{d\langle \tau_i \rangle}{dt} = \langle \tau_{i-1}(1 - \tau_i) \rangle + \langle \tau_{i+1}(1 - \tau_i) \rangle - \langle \tau_i(1 - \tau_{i-1}) \rangle - \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) \rangle. \quad (39)$$

Pour l'exclusion asymétrique, où une particule saute vers la droite avec une probabilité  $dt$  et vers la gauche avec  $q dt$ , l'évolution de la valeur moyenne de  $\tau_i$  s'écrit :

$$\frac{d\langle \tau_i \rangle}{dt} = \langle \tau_{i-1}(1 - \tau_i) \rangle + q \langle \tau_{i+1}(1 - \tau_i) \rangle - q \langle \tau_i(1 - \tau_{i-1}) \rangle - \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) \rangle, \quad (40)$$

et l'évolution de  $\langle \tau_i \rangle$  demande la connaissance des fonctions à deux points  $\langle \tau_i \tau_{i+1} \rangle$ . L'évolution de ces fonctions à deux points nécessite la connaissance des fonctions à trois points, et ainsi de suite : on a à résoudre un problème à  $N$  corps.

Dans le cas de l'exclusion symétrique, l'équation (39) se simplifie pour donner :

$$\frac{d\langle \tau_i \rangle}{dt} = \langle \tau_{i-1} \rangle - 2\langle \tau_i \rangle + \langle \tau_{i+1} \rangle. \quad (\text{pour } 1 < i < L)$$

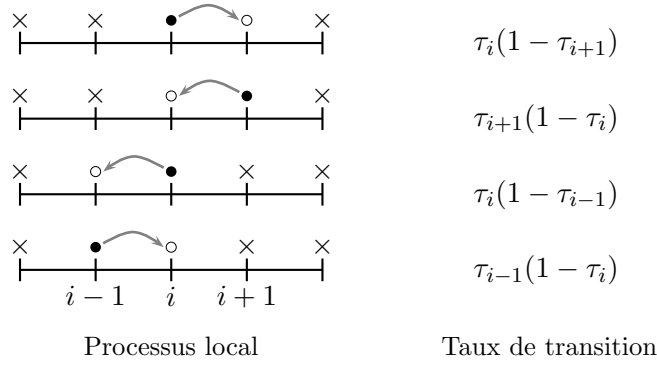


FIG. 20: Taux de transition des déplacements de particules qui touchent le site  $i$

Aux bords on a

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\tau_1\rangle}{dt} &= \alpha - (1 + \alpha)\langle\tau_1\rangle + \langle\tau_2\rangle \\ \frac{d\langle\tau_N\rangle}{dt} &= \langle\tau_{N-1}\rangle - (1 + \beta)\langle\tau_N\rangle. \end{aligned} \quad (\text{pour } 1 < i < L)$$

On obtient un système d'équations fermé pour la fonction à un point.

Soit  $T_i = \langle\tau_i\rangle_{st}$  la limite aux temps longs de la valeur moyenne du nombre d'occupation  $\tau_i$  au site  $i$ . Cette quantité, caractéristique du régime stationnaire, vérifie (en tenant compte des conditions aux limites) :

$$\begin{cases} T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1} = 0 & \text{pour } 1 < i < L \\ \alpha - (1 + \alpha)T_1 + T_2 = 0 & \text{pour le site } 1 \\ T_{L-1} - (1 + \beta)T_L = 0 & \text{pour le site } L. \end{cases}$$

Pour  $\lambda \neq 0$ , si on définit :

$$\begin{aligned} T_i &= \frac{\sum_{\mathcal{C}} \tau_i(\mathcal{C})q(\mathcal{C}, \lambda)}{\sum_{\mathcal{C}} q(\mathcal{C}, \lambda)}, \\ U_{ij} &= \frac{\sum_{\mathcal{C}} \tau_i(\mathcal{C})\tau_j(\mathcal{C})q(\mathcal{C}, \lambda)}{\sum_{\mathcal{C}} q(\mathcal{C}, \lambda)}, \\ V_{ijk} &= \frac{\sum_{\mathcal{C}} \tau_i(\mathcal{C})\tau_j(\mathcal{C})\tau_k(\mathcal{C})q(\mathcal{C}, \lambda)}{\sum_{\mathcal{C}} q(\mathcal{C}, \lambda)}, \end{aligned}$$

on peut écrire à partir de (38) les équations vérifiées par les  $T_i, U_{ij}, V_{ijk}, \dots$ . La hiérarchie ne se ferme plus : les équations satisfaites par les  $T_i$  font intervenir les  $U_{ij}$

$$\begin{cases} \alpha(e^\lambda - 1)T_1 = \mu & \\ T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1} + \alpha(e^\lambda - 1)(T_i - U_{1,i}) = \mu T_i & \text{pour } 1 < i < L \\ \alpha - (1 + \alpha)T_1 + T_2 + \alpha(e^\lambda - 1)(T_L - U_{1,L}) = \mu T_1 & \text{pour le site } 1 \\ T_{L-1} - (1 + \beta)T_L + \alpha(e^\lambda - 1)(1 - T_1) = \mu T_L & \text{pour le site } L. \end{cases}$$

De la même manière, on obtient les équations qui déterminent la forme des fonctions à deux

points. La hiérarchie fait à nouveau intervenir des fonctions de corrélation d'ordre supérieur  $V_{ijk}$  :

$$\left\{ \begin{array}{ll} U_{i-1,j} + U_{i+1,j} + U_{i,j-1} + U_{i,j+1} - 4U_{i,j} + \alpha(e^\lambda - 1)(U_{i,j} - V_{1,i,j}) & = \mu U_{ij} & \text{pour } |i-j| \geq 2 \\ U_{i-1,i+1} + U_{i,i+2} - 2U_{i,i+1} + \alpha(e^\lambda - 1)(U_{i,i+1} - V_{1,i,i+1}) & = \mu U_{i,i+1} & \text{pour } 1 < i < L-1 \\ U_{i-1,L} + U_{i+1,L} + U_{i,L-1} - (3+\beta)U_{i,L} + \alpha(e^\lambda - 1)(U_{i,L} - V_{1,i,L}) & = \mu U_{i,L} & \text{pour } 1 < i < L-1 \\ U_{2,i} + U_{1,i-1} + U_{1,i+1} + \alpha e^\lambda T_i - (3+\alpha e^\lambda)U_{1,i} & = \mu U_{1,i} & \text{pour } 2 < i < L. \end{array} \right.$$

Lorsque  $\lambda = 0$ , les équations de la hiérarchie se ferment et on peut trouver l'expression des  $T_i$  :

$$T_i = \frac{L + \frac{1}{\beta} - i}{L + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} - 1},$$

ainsi que celles pour les  $U_{i,j}$  :

$$U_{i,j} = \frac{(L + \frac{1}{\beta} - 1 - i)(L + \frac{1}{\beta} - j)}{(L + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} - 1)(L + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} - 2)}. \quad (\text{si } i < j)$$

On peut, à partir de ces expressions, calculer la fonction de corrélation connexe à deux points :

$$U_{ij} - T_i T_j = \langle \tau_i \tau_j \rangle - \langle \tau_i \rangle \langle \tau_j \rangle = -\frac{(i-1 + \frac{1}{\alpha})(L-j + \frac{1}{\beta})}{L_1^2(L_1 - 1)} \sim \frac{1}{L}$$

(où l'on a défini  $L_1 = L + 1/\alpha + 1/\beta - 1$ ). Cela montre que le système présente de faibles corrélations mais que ces corrélations sont de longue portée.

Pour  $\lambda \neq 0$ , on peut résoudre perturbativement les équations sur  $\mu$ , et sur les  $T_i$  et les  $U_{ij}$  : pour obtenir  $\mu$  à l'ordre  $\lambda^2$ , il faut connaître les  $T_i$  à l'ordre  $\lambda$  et les  $U_{ij}$  à l'ordre  $\lambda^0$ , et ainsi de suite.

On obtient ainsi pour le modèle d'exclusion symétrique :

$$\begin{aligned} \frac{\langle Q \rangle}{t} &= \frac{1}{L_1} \\ \frac{\langle Q^2 \rangle_c}{t} &= \frac{1}{L_1} + \frac{C(\alpha, \beta) - L_1(L_1 - 1)(2L_1 - 1)}{3L_1^3(L_1 - 1)} \sim \frac{1}{3L_1}, \end{aligned}$$

où l'on a défini :

$$C(\alpha, \beta) = \frac{1}{\alpha} \left( \frac{1}{\alpha} - 1 \right) \left( \frac{2}{\alpha} - 1 \right) + \frac{1}{\beta} \left( \frac{1}{\beta} - 1 \right) \left( \frac{2}{\beta} - 1 \right).$$

Ainsi, dans la limite des grands systèmes :

$$\boxed{\frac{\langle Q^2 \rangle_c}{\langle Q \rangle} \rightarrow \frac{1}{3}}.$$

On trouve le même rapport 1/3 que pour le problème de conduction dans les systèmes quantiques mésoscopiques (partie 7). Il est en fait possible de pousser plus loin cette comparaison et on constate que les cumulants plus élevés restent identiques dans les deux types de systèmes.

## 8.2 Cas de réservoirs à densités arbitraires

On peut généraliser le modèle d'exclusion symétrique au cas où les particules sont susceptibles d'entrer ou de sortir aux deux extrémités du système, avec des taux indiqués sur la figure 21. On peut définir des densités équivalentes  $\rho_a$  et  $\rho_b$ , qui représentent les densités effectives de réservoirs que l'on placerait aux extrémités du système, par :

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

Si  $\rho_a = \rho_b$ , on peut s'attendre à ce que le système atteigne, dans la limite des temps longs, un régime où le profil de densité est uniforme. À l'autre extrême, on a étudié dans la partie 8.1 le cas, hors d'équilibre, où  $\rho_a = 1$  et  $\rho_b = 0$ .

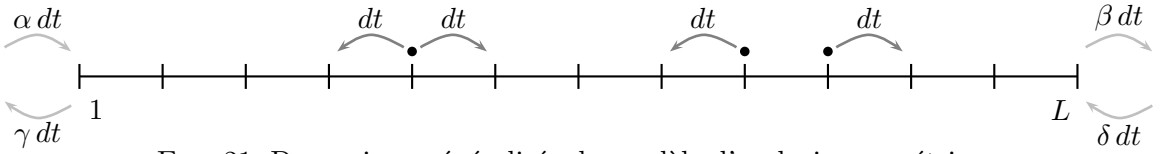


FIG. 21: Dynamique généralisée du modèle d'exclusion symétrique

En suivant la procédure proposée dans la partie 8.1, on peut calculer perturbativement [13] la fonction  $\mu(\lambda)$ . On obtient :

$$\mu(\lambda) = \frac{1}{L} \left( \omega - \frac{\omega^2}{3} + \frac{\omega^3}{45} - \frac{\omega^4}{35} + O(\omega^5) \right) + O\left(\frac{1}{L^2}\right). \quad (41)$$

On constate [13] par le calcul que le développement de  $\mu(\lambda)$  s'exprime simplement en fonction des puissances d'un seul paramètre  $\omega$  défini par :

$$\omega = \frac{(e^\lambda - 1) (\rho_a e^\lambda - \rho_b - \rho_a \rho_b (e^\lambda - 1))}{e^\lambda}, \quad (42)$$

mais il n'y a pas de raison connue pour qu'une telle simplification existe. On constate toutefois [13] que  $\omega$  possède plusieurs invariances du système (valables pour  $\mu$  avant le développement en série) :

- La symétrie droite-gauche : l'échange des rôles de  $(\alpha, \gamma)$  et  $(\beta, \delta)$  revient à changer le signe de  $Q(t)$ . Ceci implique que :

$$\mu(\alpha, \gamma, \beta, \delta, e^\lambda, L) = \mu(\beta, \delta, \alpha, \gamma, e^{-\lambda}, L).$$

- La symétrie particule-trou : au lieu de compter le nombre  $Q(t)$  de particules entrées au site 1 au taux  $\alpha$ , on peut compter le nombre  $-Q(t)$  de trous (absence de particule) entrés au site 1 au taux  $\gamma$ . Dans le système, leur dynamique d'exclusion est la même, et, au site  $L$ , les taux  $\beta$  et  $\delta$  sont également échangés, de sorte que :

$$\mu(\alpha, \gamma, \beta, \delta, e^\lambda, L) = \mu(\gamma, \alpha, \beta, \delta, e^{-\lambda}, L).$$

- La symétrie de Gallavotti-Cohen, qui, dans ce contexte, s'écrit :

$$\mu(\alpha, \gamma, \beta, \delta, e^\lambda, L) = \mu(\gamma, \alpha, \beta, \delta, \frac{\gamma \delta}{\alpha \beta} e^{-\lambda}, L).$$

Ces trois symétries laissent  $\omega$  inchangé.

On constate, grâce à ces calculs, que pour l'exclusion symétrique avec  $\rho_a = 1 - \rho_b = 1$  et la conduction quantique dans les systèmes mésoscopiques (relation (37), partie 7), les développements de  $\mu(\lambda)$  (et donc les valeurs des cumulants  $\langle Q^n \rangle_c$ ) sont égaux à tous les ordres calculés, dans les deux situations.

À l'équilibre, pour  $\rho = \rho_a = \rho_b$ , on obtient à partir de (41) et (42) :

$$\begin{aligned}\langle Q \rangle &= 0 \\ \langle Q^2 \rangle_c &= \frac{1}{L} 2\rho(1 - \rho) \\ \langle Q^4 \rangle_c &= \frac{1}{L} 2\rho(1 - \rho)(1 - 2\rho)^2.\end{aligned}$$

Pour  $\rho = 1/2$ , on constate que le quatrième cumulant s'annule. Si on conjecture que tous les cumulants d'ordre supérieur s'annulent dans ce cas particulier  $\rho_a = \rho_b = \frac{1}{2}$ , c'est-à-dire que la distribution est gaussienne et donc :

$$\mu(\lambda) = \frac{1}{L} \frac{\lambda^2}{4},$$

cela donne pour  $\mu(\lambda)$  exprimé en fonction de la variable  $\omega$  :

$$\mu(\lambda) = \begin{cases} \frac{1}{L} (\log(\sqrt{1 + \omega} + \sqrt{\omega}))^2 = \frac{1}{L} (\sinh^{-1}(\sqrt{\omega}))^2 & \text{si } \omega > 0 \\ -\frac{1}{L} (\sin^{-1} \sqrt{\omega})^2 & \text{si } \omega < 0. \end{cases} \quad (43)$$

On constate que cette expression est identique à celle de  $\mu(\lambda)$  pour les conducteurs mésoscopiques quantiques (quand  $\rho_a = 1 - \rho_b = 1$  et donc  $\omega = e^\lambda - 1$ ).

## 9 Principe d'additivité et distribution du courant

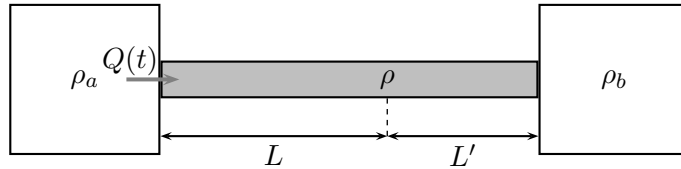


FIG. 22: Système en contact avec deux réservoirs de particules

La connaissance de  $\mu(\lambda)$  détermine pour les temps longs la fonction de grandes déviations  $F_L(j)$  définie par :

$$P_L \left( \frac{Q(t)}{t} = j, \rho_a, \rho_b \right) = \exp(t F_L(j, \rho_a, \rho_b)). \quad (44)$$

$F_L$  est la transformée de Legendre de  $\mu$ . En effet :

$$\mu_L(\lambda) = \max_j \left( \lambda j + F_L(j(\lambda)) \right),$$

et donc :

$$\begin{cases} F_L(j) = \mu_L(\lambda) - \lambda j \\ j = \frac{dF_L}{d\lambda}. \end{cases}$$

Comme on a vu que  $\mu_L(\lambda)$  peut se mettre sous la forme :

$$\mu_L(\lambda) = \frac{1}{L}R(\lambda),$$

on peut également écrire une loi d'échelle pour la fonction de grandes déviations  $F_L$  :

$$F_L(j) = \frac{1}{L}G(jL). \quad (45)$$

## 9.1 Principe d'additivité

Considérons un système de longueur  $L + L'$  en contact avec deux réservoirs, séparé artificiellement en deux parties de longueurs  $L$  et  $L'$  (figure 22), et notons  $\rho$  la densité au point de séparation. On postule que la distribution de probabilité du courant  $j$  dans le système entier est égale au maximum sur  $\rho$  de la distribution de probabilité du courant dans chacune des deux parties, supposées indépendantes, et traversées par le même courant  $j$  :

$$\boxed{P_{L+L'}(j, \rho_a, \rho_b) \sim \max_{\rho} P_L(j, \rho_a, \rho) P_{L'}(j, \rho, \rho_b)}. \quad (\text{Principe d'additivité})$$

Autrement dit, en termes de la fonction de grande déviation :

$$\boxed{F_{L+L'}(j, \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho} (F_L(j, \rho_a, \rho) + F_{L'}(j, \rho, \rho_b))}.$$

Nous allons voir que ce principe, valide au moins sur certains des exemples présentés, permet, de manière générale, de trouver la distribution du courant moyen dans le système en régime stationnaire ( $\rho_a$  et  $\rho_b$  quelconques), à partir de ses deux premiers cumulants *près de l'équilibre* ( $\rho_a \simeq \rho_b$ ).

## 9.2 Distribution du courant moyen

Lorsque les densités des deux réservoirs sont presque égales, *i.e.*  $\rho_b = \rho$  et  $\rho_a = \rho + \Delta\rho$ , avec  $\Delta\rho \ll \rho$ , on suppose que le système est traversé par un faible courant, dont la forme est donnée par la loi de Fick (approximation linéaire) :

$$\frac{\langle Q \rangle}{t} = \frac{D(\rho)}{L} \Delta\rho \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \rho_a = \rho + \Delta\rho \\ \rho_b = \rho, \end{cases}$$

ce qui définit un coefficient de diffusion effectif  $D(\rho)$ , premier moment de la distribution du courant moyen *près de l'équilibre*, à la densité  $\rho$ .

Lorsque  $\rho_a = \rho_b = \rho$ , le système, dans le régime stationnaire, est à l'équilibre, et la valeur moyenne du courant qui le traverse est nulle. En revanche, comme on l'a vu dans la partie 6, ses fluctuations sont en général non-nulles. On suppose que ces fluctuations sont de l'ordre de  $1/L$  (cette dépendance en  $L$  est une conséquence de la loi d'échelle (45)). Ceci définit une fonction  $\sigma(\rho)$  telle que

$$\frac{\langle Q^2 \rangle}{t} = \frac{\sigma(\rho)}{L}, \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \rho_a = \rho \\ \rho_b = \rho. \end{cases}$$

Dans l'exemple du modèle d'exclusion (partie 8.2), les deux fonctions précédentes sont données par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} D(\rho) = 1 \\ \sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho). \end{cases}$$

Nous allons voir qu'en appliquant le principe d'additivité, tous les cumulants de  $Q(t)$  dans le régime stationnaire peuvent être exprimés grâce aux fonctions  $D$  et  $\sigma$ . En définissant :

$$I_n = \int_{\rho_b}^{\rho_a} D(\rho) \sigma(\rho)^{n-1} d\rho,$$

les premiers cumulants de  $Q(t)$  sont donnés par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\langle Q(t) \rangle}{t} &= \frac{1}{L} I_1 \\ \frac{\langle Q(t)^2 \rangle_c}{t} &= \frac{1}{L} \frac{I_2}{I_1} \\ \frac{\langle Q(t)^3 \rangle_c}{t} &= \frac{1}{L} \frac{3(I_3 I_1 - I_2^2)}{I_1^3} \\ \frac{\langle Q(t)^4 \rangle_c}{t} &= \frac{1}{L} \frac{3(5I_4 I_1^2 - 14I_1 I_2 I_3 + 9I_2^3)}{I_1^5}. \end{aligned}$$

De manière plus générale, nous allons montrer que  $\mu(\lambda)$ , fonction génératrice des cumulants est déterminée de manière paramétrique par les équations suivantes :

$$\boxed{\begin{aligned} \mu_L(\lambda, \rho_a, \rho_b) &= -\frac{K}{L} \left[ \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho) d\rho}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}} \right]^2 + O\left(\frac{1}{L^2}\right) \\ \lambda &= \int_{\rho_b}^{\rho_a} d\rho \frac{D(\rho)}{\sigma(\rho)} \left[ \frac{1}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}} - 1 \right] \end{aligned}}. \quad (46)$$

Quand on varie  $K$ , on obtient  $\mu$  comme fonction de  $\lambda$ . Les expressions des cumulants peuvent alors s'obtenir en développant  $\mu$  en puissance de  $\lambda$  dans les équations précédentes, et en éliminant le paramètre  $K$ , ordre par ordre.

Pour établir ces relations, on applique le principe d'additivité au système, après l'avoir découpé (figure 23) en sous-systèmes de taille  $\ell$  :

- assez petite pour que  $\Delta\rho_i = \rho_i - \rho_{i+1}$  soit faible, *i.e.* que chaque sous-système soit proche de l'équilibre,
- et assez grande pour que la relation d'échelle (45) soit valable pour les sous-systèmes successifs de taille  $\ell$  (le principe d'additivité reste applicable entre ces sous-systèmes).

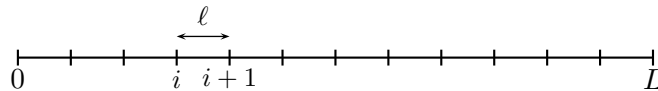


FIG. 23: Découpage du système en éléments de taille  $\ell$

Si  $\rho_i$  désigne la densité au site  $li$ , alors, le principe d'additivité s'écrit :

$$F_L(j, \rho_a, \rho_b) = \max_{\{\rho_i\}} \sum_{i=1}^{L/\ell} F_\ell(j, \rho_i, \rho_{i+1}).$$

D'après (44),  $F_\ell(j, \rho_i, \rho_{i+1})$  prend son maximum en  $j = \frac{1}{\ell} \langle Q(t) \rangle$ , et a pour variance  $\frac{1}{\ell} \langle Q^2(t) \rangle_c$ . Comme chaque sous-système de taille  $\ell$  est proche de l'équilibre, on peut approximer  $F$  quadratiquement (ce qui revient à faire une approximation gaussienne pour la distribution de probabilité), et donc écrire :

$$F_\ell(j, \rho_i, \rho_{i+1}) = - \frac{\left(j - \frac{1}{\ell} \langle Q(t) \rangle\right)^2}{2 \frac{1}{\ell} \langle Q^2(t) \rangle_c}.$$

Ainsi, en revenant aux définitions des fonctions  $D(\rho)$  et  $\sigma(\rho)$  :

$$F_\ell(j, \rho_i, \rho_{i+1}) = - \frac{\left(j - \frac{\rho_i - \rho_{i+1}}{\ell} D(\rho_i)\right)^2}{2 \frac{\sigma(\rho_i)}{\ell}}.$$

En supposant que les fonctions sont assez régulières pour pouvoir passer à la limite continue, et en posant  $x_i = i\ell/L$ , on a :

$$F_L(j, \rho_a, \rho_b) = \max_{\{\rho(x_i)\}} \left( - \sum_i \frac{\left(jL + \rho'(x_i) D(\rho(x_i))\right)^2 \ell}{2\sigma(\rho(x_i)) L} \right),$$

où l'on a utilisé la définition  $\rho_i = \rho(x_i)$  et le développement  $\rho_{i+1} = \rho(x_i + \ell/L) = \rho_i + \frac{\ell}{L} \rho'(x_i)$ . Enfin, en faisant tendre  $\ell/L$  tend vers 0, on obtient :

$$\boxed{F_L(j, \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho(x)} \left( - \int_0^1 \frac{\left(jL + \rho'(x) D(\rho(x))\right)^2}{2\sigma(\rho(x))} dx \right)}. \quad (47)$$

Ainsi, la valeur  $F_L(\rho)$  est déterminée par l'extremum d'une fonctionnelle  $\mathcal{A}[\rho(x)]$  de la densité dans le système. Le profil de densité optimal est solution de l'équation d'Euler-Lagrange :

$$\frac{d}{dx} \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta \rho'(x)} = \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta \rho(x)}.$$

Avec les expressions :

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta \rho'} &= \frac{jL + \rho' D(\rho)}{\sigma(\rho)} D(\rho) \\ \frac{\delta \mathcal{A}}{\delta \rho} &= \frac{jL + \rho' D(\rho)}{\sigma(\rho)} \rho' D'(\rho) - \frac{\left(jL + \rho' D(\rho)\right)^2}{2\sigma^2(\rho)} \sigma'(\rho), \end{aligned}$$

l'équation d'Euler-Lagrange se met sous la forme :

$$(jL)^2 \frac{d}{d\rho} \left( \frac{1}{2\sigma(\rho)} \right) - (\rho')^2 \frac{d}{d\rho} \left( \frac{D^2(\rho)}{2\sigma(\rho)} \right) - 2 \left( \frac{D^2(\rho)}{2\sigma(\rho)} \right) \rho'' = 0. \quad (48)$$



En multipliant par  $\rho'$ , cette dernière équation s'intègre sous la forme :

$$D^2(\rho)(\rho')^2 = (jL)^2 (1 + 2K\sigma(\rho)),$$

où  $K$  est une constante d'intégration. Si  $\rho_a \geq \rho_b$ , on peut s'attendre à ce que  $\rho$  soit décroissante, *i.e.*,  $\rho' \leq 0$ , au moins pour des valeurs proches du courant le plus probable. Alors,  $\rho'$  a pour expression :

$$\rho' = -\frac{jL}{D(\rho)}\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}, \quad (49)$$

ce qui donne, en substituant dans l'expression de  $F_L$  :

$$\begin{aligned} F_L(j, \rho_a, \rho_b) &= -\int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{(jL)^2 \left(1 - \sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}\right)^2}{2\sigma(\rho)} \frac{D(\rho)}{jL\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}} d\rho \\ &= jL \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho)}{\sigma(\rho)} \left[1 - \frac{1 + K\sigma(\rho)}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}}\right] d\rho. \end{aligned} \quad (50)$$

La constante  $K$  est déterminée par la relation :

$$jL = \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho)}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}} d\rho.$$

Alors, à  $\rho_a$  et  $\rho_b$  fixés, on peut dériver l'équation (47) partiellement par rapport à  $j$  :

$$\frac{\partial F_L}{\partial j} = -L \int_0^1 \frac{jL + \rho' D(\rho(x))}{\sigma(\rho(x))} dx,$$

où  $\rho$  vérifie (49). Ainsi, en substituant (49) et en utilisant (50), on obtient :

$$\frac{\partial F_L}{L \partial j} = \int_{\rho_b}^{\rho_a} d\rho \frac{D(\rho)}{\sigma(\rho)} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{1 + 2K\sigma(\rho)}}\right].$$

Enfin, comme  $\mu$  et  $F_L$  sont liés par la transformation de Legendre (24), on obtient bien les relations (46).

### 9.3 Application au modèle d'exclusion symétrique

Dans l'étude du modèle d'exclusion symétrique, pour lequel

$$\begin{cases} D(\rho) = 1 \\ \sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho), \end{cases}$$

on avait conjecturé que, à  $\rho_a = \rho_b = 1/2$ , la distribution du courant était gaussienne, ce qui avait permis de déterminer la fonction génératrice des moments de la charge intégrée dans tous les cas

$$\mu(\lambda) = (\log(\sqrt{1 + \omega} + \sqrt{\omega}))^2 = (\sinh^{-1}(\sqrt{\omega}))^2,$$

où  $\omega$  est défini par la relation (42). Nous allons voir qu'on peut retrouver ce résultat comme une simple conséquence du principe d'additivité.

La conjecture peut être vue comme la conséquence d’une remarque plus générale. Pour un système quelconque, si la fonction  $\sigma(\rho)$  admet un maximum  $\rho^*$ , alors, si l’on impose les conditions aux limites  $\rho_a = \rho_b = \rho^*$ , le profil uniforme  $\rho(x) = \rho^*$  est une solution de l’équation (47). En effet si on écrit (47) comme

$$F_L(j, \rho^*, \rho^*) = \max_{\{\rho(x)\}} \left( - (jL)^2 \int_0^1 \frac{dx}{2\sigma(\rho(x))} - \int_0^1 dx \rho'(x)^2 \frac{D(\rho(x))}{2\sigma(\rho(x))} \right).$$

et on voit que  $\rho(x) = \rho^*$  minimise à la fois les deux intégrales. Cela montre que pour  $\rho_a = \rho_b = \rho^*$

$$F_L(j, \rho^*, \rho^*) = - \frac{(jL)^2}{2\sigma(\rho^*)},$$

et que la distribution de courant est gaussienne. Cette remarque s’applique au modèle d’exclusion symétrique, où  $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$  atteint son maximum au point  $\rho^* = 1/2$ . Ceci justifie la première conjecture.

Enfin, on peut retrouver [4] dans le cas général l’expression  $\mu(\lambda) = \frac{1}{L} (\sinh^{-1}(\sqrt{\omega}))^2$  à partir des équations (46).

## 9.4 Remarques

1. La fonction de grande déviation obtenue par cette méthode possède la symétrie de Gallavotti-Cohen. En effet, la densité  $\rho(x)$  qui maximise (47) est la même pour les courants  $j$  et  $-j$  (d’après l’équation (48) vérifiée par  $\rho(x)$ ). On vérifie alors immédiatement d’après (47) que :

$$F(-j, \rho_a, \rho_b) = F(j, \rho_a, \rho_b) - \frac{2j}{L} \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho)}{\sigma(\rho)} d\rho,$$

ce qui est la symétrie de Gallavotti-Cohen (la différence entre les fonctions de grandes déviations de courants  $j$  opposés est linéaire en  $j$ ).

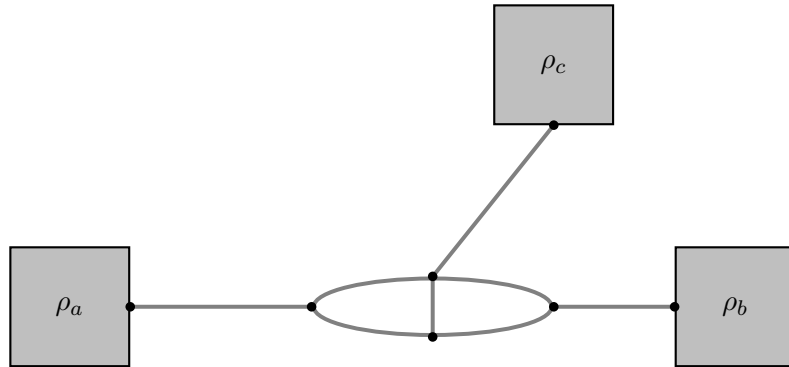


FIG. 24: Un exemple de réseau connectant plusieurs réservoirs de particules

2. On peut essayer d’utiliser le principe d’additivité à des géométries plus complexes, où, par exemple, les échanges de particules se font sur un réseau à plusieurs branches (figure 24). Le principe d’additivité s’applique en maximisant sur la densité à chaque point de connection •.

Pour un système linéaire de longueur  $L$  séparé en deux sous systèmes de longueurs  $uL$  et  $(1-u)L$ ,  $\rho$  représentant la densité au point de séparation  $uL$ , en utilisant la loi d'échelle (45), il s'écrit sous la forme :

$$G(j, \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho} \left( \frac{G(uj, \rho_a, \rho)}{u} + \frac{G((1-u)j, \rho, \rho_b)}{1-u} \right), \quad (51)$$

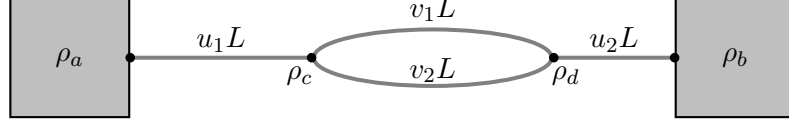


FIG. 25: Réseau à une boucle connectant deux réservoirs de particule (la longueur de chaque branche est donnée au dessus de celle-ci; les coefficients vérifient  $u_1 + v_1 + v_2 + u_2 = 1$ ).

Dans le cas particulier où le réseau connecte deux réservoirs et contient une seule boucle (figure 25), le principe d'additivité s'écrit alors ( $G$  représentant la fonction de grandes déviations pour un système linéaire, et  $G_{\text{boucle}}$  pour le système à une boucle) :

$$G_{\text{boucle}}(j, \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho_c, \rho_d, j'} \left( \frac{G(u_1 j, \rho_a, \rho_c)}{u_1} + \frac{G(v_1 j', \rho_c, \rho_d)}{v_1} + \frac{G(v_2(j-j'), \rho_c, \rho_d)}{v_2} + \frac{G(u_2 j, \rho_d, \rho_b)}{u_2} \right).$$

L'optimum sur  $j'$  est atteint pour une valeur vérifiant :

$$\frac{\partial}{\partial j'} \left( \frac{G(v_1 j', \rho_c, \rho_d)}{v_1} + \frac{G(v_2(j-j'), \rho_c, \rho_d)}{v_2} \right) = 0,$$

c'est-à-dire :

$$G'(v_1 j') = G'(v_2(j-j')).$$

Comme  $G$  est concave,  $G'$  est monotone, et la condition précédente s'écrit  $v_1 j' = v_2(j-j')$ . En remplaçant cette condition dans l'expression initiale, la fonction de grandes déviations vérifie :

$$G_{\text{boucle}}(j, \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho_c, \rho_d} \left( \frac{G(u_1 j, \rho_a, \rho_c)}{u_1} + \frac{G(v j, \rho_c, \rho_d)}{v} + \frac{G(u_2 j, \rho_d, \rho_b)}{u_2} \right),$$

où  $v$  est défini par la relation :

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2}.$$

La boucle est donc équivalente à un système de longueur  $vL$ , et d'après le principe d'additivité sous la forme (51),  $G_{\text{boucle}}(j, \rho_a, \rho_b)$  s'exprime finalement comme :

$$G_{\text{boucle}}(j, \rho_a, \rho_b) = \frac{1}{u_1 + v + u_2} G((u_1 + v + u_2)j, \rho_a, \rho_b).$$

Le principe d'additivité permet ainsi de retrouver la loi de Kirchoff pour l'"addition" de résistances en série et en parallèle.

3. Enfin, par rapport à une étude générale des fluctuations dans les systèmes hors d'équilibre, l'approche empruntée ici a l'avantage d'être assez simplifiée, car on s'intéresse aux états *stationnaires* des systèmes, au lieu de faire une théorie dépendante du temps.

## Quatrième partie

# Fonction de grandes déviations pour la densité

## 10 Définition de la fonction de grandes déviations

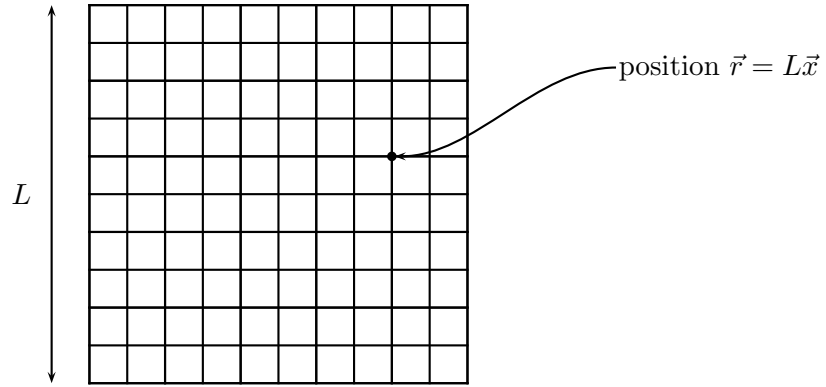


FIG. 26: Réseau de volume  $V = L^d$

On considère un système de particules dans un espace de volume  $V = L^d$  (cube de côté  $L$  en dimension  $d$ , figure 26). Si on découpe le volume en cellules de taille  $L^d dx_1 \dots dx_d$ , où  $0 \leq x_i \leq 1$ , et que l'on définit la densité  $\rho(\vec{x})$  au point  $\vec{x}$  comme le nombre de particules situées dans la cellule en  $\vec{x}$  divisé par le volume de cette cellule, on peut s'intéresser à la probabilité d'un profil de densité donné, et l'écrire sous la forme :

$$P(\rho(\vec{x})) = e^{-V\mathcal{F}(\rho(\vec{x}))} \quad (\text{Densité fonctionnelle})$$

La quantité  $V\mathcal{F}(\rho(\vec{x}))$  est une quantité de même nature que l'énergie libre, à l'équilibre, ce qui donnera une définition possible de l'énergie libre pour les systèmes hors d'équilibre. On pourra alors se demander :

- Comment les propriétés de  $\mathcal{F}$  à l'équilibre (extensivité, localité, ...) sont-elles modifiées dans un régime stationnaire hors d'équilibre ?
- Quelle est la nature des corrélations dans ce régime ?
- Comment construire l'analogie d'un diagramme des phases, et préciser la nature des éventuelles transitions de phase dans ce régime ?

### 10.1 Cas des systèmes à l'équilibre

On considère  $N$  particules dans le volume  $V$ . Leur densité moyenne est :

$$r = \frac{N}{V}.$$

Pour une cellule de volume  $v$  (figure 27), on peut chercher la probabilité qu'elle contienne  $n$  particules (*i.e.* qu'elle soit de densité  $\rho = n/v$ ). Pour  $v$  grand et  $v \ll V$ , cette probabilité prend la forme :

$$P\left(\frac{n}{v} = \rho\right) \sim e^{-va(\rho)},$$

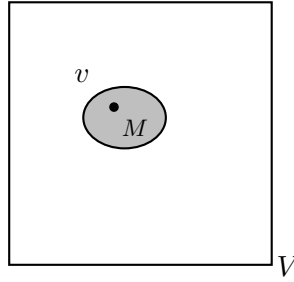


FIG. 27: Région de volume  $v$  entourant un point  $M$  du système

où, comme nous allons le voir,  $a(\rho)$  est reliée à l'énergie libre à la densité  $\rho$ .

Pour un système homogène (sans champ externe) à l'équilibre, la fonction  $a(\rho)$  ne dépend pas du point  $M$ . A priori, on s'attend à ce que la fonction  $a(\rho)$  atteigne son minimum en  $r$  (c'est la valeur la plus probable de la densité locale). Lorsque le système possède deux phases d'équilibre distinctes, de densités locales  $r_{\text{gaz}}$  et  $r_{\text{liq}}$ , la fonction  $a(\rho)$  s'annule entre  $r_{\text{gaz}}$  et  $r_{\text{liq}}$  : il y a alors coexistence de phases (figure 28).

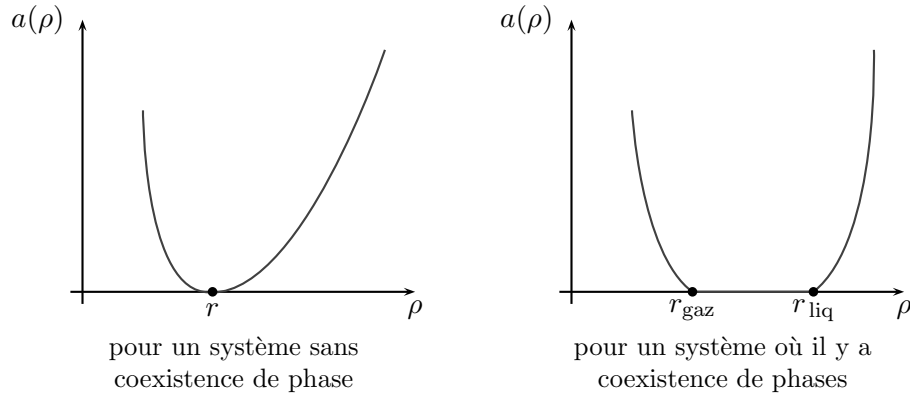


FIG. 28: Allures typiques de la fonction de grande déviation  $a(\rho)$  de densité

L'énergie libre  $f$  par unité de volume à la densité  $\rho$  est définie par :

$$f(\rho) = \lim_{V \rightarrow \infty} -kT \frac{\log Z_V(\rho V)}{V},$$

où  $Z_V$  est la fonction de partition d'un système de  $\rho V$  particules dans le volume  $V$ . La fonction  $a(\rho)$  de grandes déviations de la densité, à l'équilibre, s'écrit en fonction de  $f$  sous la forme :

$$\boxed{a(\rho) = \frac{f(\rho) - f(r) - (\rho - r)f'(r)}{kT}}. \quad (52)$$

En effet, en découpant le système suivant les deux volumes  $v$  et  $V - v$  (figure 27) :

$$P\left(\frac{n}{v} = \rho\right) \simeq \frac{Z_v(n) Z_{V-v}(N-n) e^{(\text{termes de surface})}}{Z_V(N)}.$$

Si l'interaction est locale, les termes de surface sont négligeables à la limite thermodynamique, et la densité de probabilité se réécrit :

$$P\left(\frac{n}{v} = \rho\right) \sim \exp\left(-\frac{1}{kT}\left(vf(\rho) + (V-v)f\left(\frac{Vr-v\rho}{V-v}\right) - Vf(r)\right)\right),$$

ce qui, lorsque  $v \ll V$ , donne (52), comme annoncé.

## 10.2 Remarques

1. En suivant un argument analogue à celui présenté au paragraphe 4.1.1, on voit que l'énergie libre  $f(\rho)$  et la fonction de grande déviation  $a(\rho)$  sont convexes. A des termes de surface (et donc non extensifs) près, on a

$$Z_V(N) > Z_v(n) Z_{V-v}(N-n).$$

Ceci montre que  $f(\rho)$  est convexe, et, comme  $a''(\rho) = f''(\rho)$ , que  $a(\rho)$  est également convexe.

2. Pour un faible écart  $\rho$  de la densité de la particule de fluide par rapport à la densité moyenne  $r$ , la relation (52) permet d'obtenir la relation d'Einstein. Pour  $\rho - r \ll r$ , on a :

$$a(\rho) \simeq \frac{f''(r)(\rho - r)^2}{2kT} \quad i.e. \quad P(\rho) \sim \exp\left(-v\frac{(\rho - r)^2}{2kT}f''(r)\right),$$

et donc :

$$\langle(\rho - r)^2\rangle = \frac{kT}{vf''(r)},$$

où  $f''(\rho)$  est reliée par  $\kappa(\rho) = (\rho^2 f''(\rho))^{-1}$  à la compressibilité  $\kappa(\rho)$  du fluide. Cette relation a une conséquence directement observable pour les transitions de phase du second ordre : à un point critique, la compressibilité  $\kappa(\rho)$  diverge (*i.e.*  $f''$  s'annule) et les fluctuations de densité deviennent très grandes (ce qui est à l'origine du phénomène d'opalescence critique).

3. Pour les systèmes à l'équilibre, la densité de probabilité de  $\rho(\vec{x}) = \rho$  se met sous la forme :

$$P(\rho(x)) = \exp\left(-V \int a(\rho(\vec{x})) d\vec{x}\right),$$

où  $a(\rho)$  est donnée par (52). C'est donc une fonctionnelle locale du profil de densité.

## 11 Systèmes diffusifs, corrélations à longue portée

On peut se demander ce que devient la fonction de grandes déviations de la densité, définie par la relation :

$$P(\{\rho(\vec{x})\}) = e^{-V\mathcal{F}(\{\rho(\vec{x})\})}$$

pour un système hors d'équilibre,  $P(\{\rho(\vec{x})\})$  étant la densité de probabilité d'un profil de densité  $\rho(\vec{x})$ . Nous allons montrer comment déterminer  $\mathcal{F}$  pour quelques exemples simples.

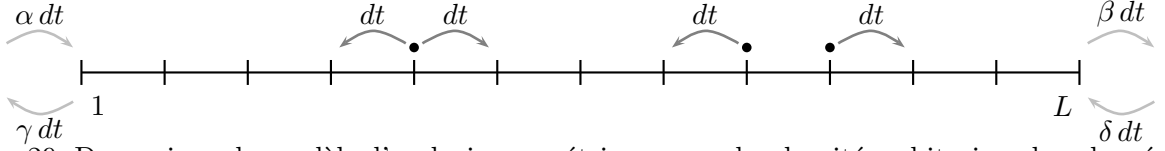


FIG. 29: Dynamique du modèle d'exclusion symétrique pour des densités arbitraires dans les réservoirs

### 11.1 Le modèle d'exclusion symétrique

La dynamique de ce modèle, déjà présentée dans la partie 6, est donnée par les probabilités de transition entre ses configurations (figure 29). On peut tout d'abord se demander sous quelles conditions la dynamique vérifie la condition de bilan détaillé (10).

Si celle-ci est vérifiée, la probabilité d'une configuration  $\mathcal{C}$ , dans le régime stationnaire, ne dépend que du nombre  $N$  de particules présentes dans la configuration : en effet, chaque mouvement où une particule se déplace d'un site à un site voisin est aussi probable que le mouvement renversé dans le temps. Deux configurations obtenues en déplaçant une particule d'un site au site voisin sont équiprobables, ce qui fait que de proche en proche,  $P(\mathcal{C})$  ne dépend que du nombre de particules dans la configuration. On notera donc :

$$P(\mathcal{C}) = p_N .$$

À l'intérieur du système, la dynamique conserve le nombre de particules. En revanche, aux frontières du système, la présence de taux de gain ou de perte de particules imposent les conditions suivantes aux probabilités  $p_N$  pour que la relation de bilan détaillé soit vérifiée :

$$\begin{cases} \gamma p_N = \alpha p_{N-1} & \text{au site 1} \\ \beta p_N = \delta p_{N-1} & \text{au site } L . \end{cases}$$

Ainsi, les taux de gain et de perte doivent vérifier la relation :

$$\frac{\gamma}{\alpha} = \frac{\beta}{\delta}$$

pour que le bilan détaillé soit vérifié (on vérifie que l'inverse est vrai). Alors, en définissant la densité des réservoirs par :

$$\rho_a = \frac{\alpha}{\alpha + \gamma} \quad \text{et} \quad \rho_b = \frac{\delta}{\delta + \beta} ,$$

on voit que la condition de bilan détaillé est vérifiée si :

$$\boxed{\rho = \rho_a = \rho_b} .$$

qui exprime que le système est en équilibre avec les deux réservoirs, ce qui n'est possible que lorsque ceux ci sont à la même densité. La probabilité d'une configuration  $\mathcal{C}$  ayant  $N$  sites occupés par des particules et  $L - N$  sites vides s'écrit alors :

$$\boxed{p_N = \rho^N (1 - \rho)^{L-N}} ,$$

comme on le voit en résolvant la récurrence :

$$p_N = \frac{\alpha}{\gamma} p_{N-1} ,$$

avec la condition de normalisation :

$$\sum_{N=0}^L \binom{L}{N} p_N = 1.$$

L'état stationnaire ainsi défini est simplement donné par une loi de Bernoulli. Pour cette distribution, il n'y a donc pas de corrélations entre les sites :

$$\begin{cases} \langle \tau_i \rangle = \rho \\ \langle \tau_i \tau_j \rangle = \langle \tau_i \rangle \langle \tau_j \rangle \quad i.e. \quad \langle \tau_i \tau_j \rangle_c = 0. \end{cases}$$

Si les densités des deux réservoirs sont différentes (par exemple  $\rho_a > \rho_b$ ), le système atteint, aux temps longs, un état stationnaire dans lequel on peut déterminer la valeur du courant et des corrélations. On a vu que  $\langle \tau_i \rangle$  vérifie, d'après l'équation maîtresse :

$$\begin{cases} \frac{d\langle \tau_i \rangle}{dt} = \langle \tau_{i-1}(1 - \tau_i) \rangle + \langle \tau_{i+1}(1 - \tau_i) \rangle - \langle \tau_i(1 - \tau_{i-1}) \rangle - \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) \rangle & \text{si } 1 < i < L \\ \frac{d\langle \tau_1 \rangle}{dt} = \langle \tau_2(1 - \tau_1) \rangle + \alpha \langle (1 - \tau_1) \rangle - \langle \tau_1(1 - \tau_2) \rangle - \gamma \langle \tau_1 \rangle & \text{si } i = 1 \\ \frac{d\langle \tau_L \rangle}{dt} = \langle \tau_{L-1}(1 - \tau_L) \rangle + \delta \langle (1 - \tau_L) \rangle - \langle \tau_L(1 - \tau_{L-1}) \rangle - \beta \langle \tau_L \rangle & \text{si } i = L. \end{cases}$$

Comme on l'a déjà vu plus haut (partie 8, où on avait examiné le cas particulier  $\gamma = \delta = 0$ ), ces équations se simplifient et s'écrivent :

$$\begin{cases} \frac{d\langle \tau_i \rangle}{dt} = \langle \tau_{i-1} \rangle - 2\langle \tau_i \rangle + \langle \tau_{i+1} \rangle \\ \frac{d\langle \tau_1 \rangle}{dt} = \alpha - (1 + \alpha + \gamma)\langle \tau_1 \rangle + \langle \tau_2 \rangle \\ \frac{d\langle \tau_L \rangle}{dt} = \delta - (1 + \delta + \beta)\langle \tau_L \rangle + \langle \tau_{L-1} \rangle. \end{cases}$$

Dans le régime stationnaire, ces équations ont pour solution :

$$\boxed{\langle \tau_i \rangle = \frac{a + i - 1}{a + b + L - 1} (\rho_a - \rho_b) + \rho_a} \quad \text{avec} \quad a = \frac{1}{\alpha + \gamma} \quad \text{et} \quad b = \frac{1}{\delta + \beta}. \quad (53)$$

La densité moyenne  $\rho(x)$  est linéaire et on retrouve la loi de Fourier. Le courant est donné par :

$$j = \langle \tau_{i-1} \rangle - \langle \tau_i \rangle = \frac{1}{a + b + L - 1} (\rho_a - \rho_b).$$

Pour des valeurs de  $L$  assez grandes,  $j$  varie bien en  $1/L$  ( $a$  et  $b$  peuvent être interprétées comme des résistances de contact avec les réservoirs).

De la même manière, on peut écrire les relations satisfaites par la fonction à deux points [29] et trouver la forme exacte de la fonction de corrélation connexe :

$$\boxed{\langle \tau_i \tau_j \rangle_c = -\frac{(a + i - 1)(b + L - j)}{(a + b + L - 1)^2 (a + b + L - 2)} (\rho_a - \rho_b)^2} \quad \text{pour } i \neq j.$$



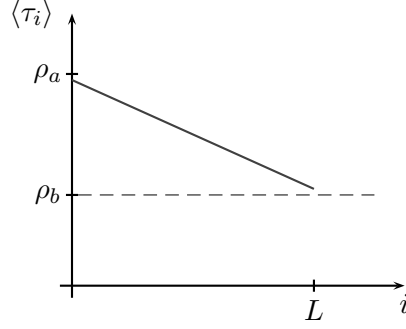


FIG. 30: Profil de  $\langle \tau_i \rangle$  pour le modèle d'exclusion symétrique

Ceci généralise les expressions obtenues dans la partie 8 dans le cas  $\gamma = \delta = 0$ . Pour  $L$  grand, en posant  $i = Lx$ ,  $j = Ly$  et  $\tau_i = \rho(x)$ , on a

$$\langle \rho(x)\rho(y) \rangle_c = -(\rho_a - \rho_b)^2 \frac{x(1-y)}{L}.$$

Le système d'exclusion symétrique présente donc des corrélations, faibles ( $\sim 1/L$  pour  $L$  grand), mais à longue portée ( $\langle \rho(x)\rho(y) \rangle_c$  varie algébriquement en  $x$  et  $y$  : il n'y a pas de longueur caractéristique de décroissance).

Enfin, on peut examiner l'influence de ces corrélations sur le nombre total de particules dans le système. Posons :

$$N = \sum_{i=1}^L \tau_i.$$

Le deuxième moment du nombre  $N$  de particules s'écrit :

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \underbrace{\sum_{i=1}^L \langle \tau_i \rangle - \langle \tau_i \rangle^2}_{\sim L} + 2 \underbrace{\sum_{i < j} \langle \tau_i \tau_j \rangle_c}_{\sim L^2 \frac{1}{L}} \sim L.$$

On voit que l'effet des corrélations ne peut pas être négligé et

$$\langle N^2 \rangle_c = L \int_0^1 \bar{\rho}(x)(1 - \bar{\rho}(x)) dx - L \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{12} = \langle N^2 \rangle_c |_{\text{Bernoulli}} - \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{12} L.$$

Le système présente donc de faibles corrélations à longue portée mais ces faibles corrélations modifient la variance du nombre total de particules portée. Ces faibles corrélations à longue portée sont génériques dans des systèmes hors d'équilibre [29].

## 11.2 Méthode matricielle pour le modèle d'exclusion symétrique

La probabilité d'une configuration  $(\tau_1, \dots, \tau_L)$  des particules dans le modèle d'exclusion symétrique peut s'écrire en utilisant une méthode matricielle [9]. Cette méthode peut se généraliser à d'autres types de systèmes, comme le modèle d'exclusion asymétrique ou des modèles à plusieurs espèces.

Dans cette approche on essaie d'écrire la probabilité d'une configuration  $(\tau_1 \dots \tau_L)$  des particules dans le système, dans l'état stationnaire, sous la forme :

$$P(\tau_1, \dots, \tau_L) = \frac{\langle W | X_1 \dots X_L | V \rangle}{\langle W | (D + E)^L | V \rangle} \quad \text{où} \quad X_i = \begin{cases} D & \text{si } \tau_i = 1 \\ E & \text{si } \tau_i = 0. \end{cases} \quad (54)$$

On peut montrer que si  $D$  et  $E$  sont des matrices (ou des opérateurs) et  $|V\rangle$ ,  $|W\rangle$  des vecteurs tels que :

$$\begin{cases} [D, E] = D + E \\ \langle W | (\alpha E - \gamma D) = \langle W | \\ (\beta D - \delta E) | V \rangle = | V \rangle \end{cases}. \quad (55)$$

les probabilités (54) sont bien celles de l'état stationnaire. La probabilité  $P(\tau_1, \dots, \tau_L)$  d'une configuration s'exprime donc comme :

$$P(\tau_1, \dots, \tau_L) = \frac{\langle W | \prod_{i=1}^L (\tau_i D + (1 - \tau_i) E) | V \rangle}{\langle W | (D + E)^L | V \rangle}.$$

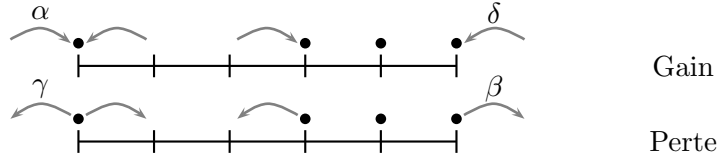


FIG. 31: Évolutions menant à, et partant d'une configuration à six sites

Pour se convaincre que cette expression de  $P(\tau_1, \dots, \tau_L)$  en fonction des matrices  $D$  et  $E$  vérifiant les propriétés précédentes donne bien l'état stationnaire, il faudrait montrer que l'expression (54) vérifie dans le régime stationnaire :

$$\forall \tau, \quad \sum_{\tau' \neq \tau} \left( W(\tau, \tau') P(\tau') - W(\tau', \tau) P(\tau) \right) = 0,$$

où  $\tau = (\tau_1, \dots, \tau_L)$  représente une configuration générique.

Ici nous allons montrer que cette relation est bien vérifiée pour la configuration particulière de la figure 31 (la généralisation à une configuration arbitraire est facile). Il faut donc montrer que

$$\begin{aligned} 0 &= \alpha \langle E^3 D^3 \rangle - \gamma \langle DE^2 D^3 \rangle \\ &\quad + \langle EDED^3 \rangle - \langle DE^2 D^3 \rangle \\ &\quad + \langle DEDED^2 \rangle - \langle DE^2 D^3 \rangle \\ &\quad + \delta \langle DE^2 D^2 E \rangle - \beta \langle DE^2 D^3 \rangle, \end{aligned}$$

où sur chaque ligne on a écrit les deux contributions produites au bord d'un cluster : le terme de gain  $W(\tau, \tau') P(\tau')$  et celui perte  $-W(\tau', \tau) P(\tau)$  dans l'équation maîtresse. En utilisant l'algèbre (55)

vérifiée par  $D$  et  $E$ , chacune de ces lignes se simplifie pour donner :

$$\begin{aligned}\alpha \langle E^3 D^3 \rangle - \gamma \langle DE^2 D^3 \rangle &= \langle E^2 D^3 \rangle \\ \langle EDED^3 \rangle - \langle DE^2 D^3 \rangle &= -\langle DED^3 \rangle - \langle E^2 D^3 \rangle \\ \langle DEDED^2 \rangle - \langle DE^2 D^3 \rangle &= +\langle DED^3 \rangle + \langle DE^2 D^2 \rangle \\ \delta \langle DE^2 D^2 E \rangle - \beta \langle DE^2 D^3 \rangle &= -\langle DE^2 D^2 \rangle .\end{aligned}$$

En sommant les lignes précédentes, on vérifie que la somme est bien nulle. On peut répéter ce calcul pour une configuration quelconque du modèle d'exclusion symétrique de taille  $L$  et vérifier ainsi que les expressions (54) et (55) donnent bien l'état stationnaire.

Cette écriture matricielle donne aussi la probabilité  $P(\tau_1, \dots, \tau_L)$  d'une configuration dans le modèle d'exclusion asymétrique (ASEP), dans lequel, par rapport au modèle d'exclusion symétrique (SSEP), chaque particule a une probabilité différente de saut à droite ( $dt$ ) et de saut à gauche ( $q dt$ ). La figure 32 indique les taux correspondants.

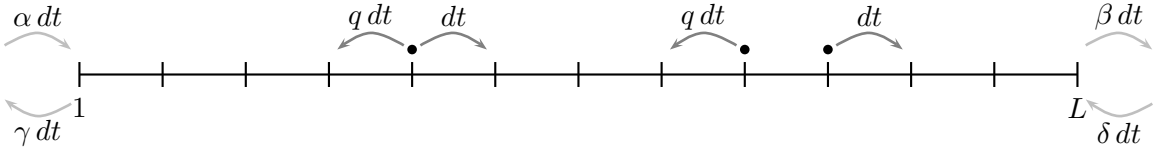


FIG. 32: Dynamique du modèle d'exclusion asymétrique, pour des conditions aux limites ouvertes

L'expression (54) de la probabilité  $P(\tau_1, \dots, \tau_L)$  est la même que dans le cas symétrique, avec des matrices  $D$  et  $E$  qui vérifient des nouvelles relations :

$$\boxed{\begin{cases} DE - qED = D + E \\ \langle W | (\alpha E - \gamma D) = \langle W | \\ (\beta D - \delta E) | V \rangle = | V \rangle \end{cases}} . \quad (56)$$

Le cas  $q = 1$  correspond au modèle d'exclusion symétrique, et le cas  $q = 0$  au modèle d'exclusion totalement asymétrique (TASEP). A partir de ces expressions sous forme matricielle de l'état stationnaire, on peut obtenir un certain nombre de propriétés des systèmes d'exclusion.

Remarque : pour évaluer une expression de la forme  $\langle W | X_1 \dots X_L | V \rangle$ , il est souvent utile de faire passer tous les  $E$  à gauche et tous les  $D$  à droite. En remarquant que, d'après (56) :

$$DE = (qE + 1)D + E ,$$

on vérifie par récurrence l'égalité :

$$DE^n = (qE + 1)^n D + E \sum_{k=0}^{n-1} E^k (qE + 1)^{n-1-k} .$$

Autrement dit :

$$DE^n = (qE + 1)^n D + E \frac{(qE + 1)^n - E^n}{(qE + 1) - E} .$$

Ainsi, pour tout polynôme (ou toute fonction entière)  $F$ , on a :

$$\boxed{DF(E) = F(qE + 1)D + E \frac{F(qE + 1) - F(E)}{(qE + 1) - E}} . \quad (57)$$

Pour les cas symétrique et totalement asymétrique, cette relation se réduit respectivement aux égalités :

$$\begin{cases} DF(E) = F(E+1)D + E(F(E+1) - F(E)) & \text{si } q = 1 \\ DF(E) = F(1)D + E \frac{F(E) - F(1)}{E-1} & \text{si } q = 0. \end{cases}$$

En général, l'occupation moyenne  $\langle \tau_i \rangle$  au site  $i$  peut s'exprimer en fonction des matrices  $D, E$  et des vecteurs  $\langle W|$  et  $|V \rangle$  :

$$\langle \tau_i \rangle = \sum_{\substack{(X_1 \dots X_{i-1}) \\ (X_{i+1} \dots X_L)}} \frac{\langle W|X_1 \dots X_{i-1}DX_{i+1} \dots X_L|V \rangle}{\langle W|(D+E)^L|V \rangle}$$

$$\boxed{\langle \tau_i \rangle = \frac{\langle W|(D+E)^{i-1}D(D+E)^{L-i}|V \rangle}{\langle W|(D+E)^L|V \rangle}}.$$

Le courant a lui, pour expression :

$$\begin{aligned} j &= \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) - \tau_{i+1}(1 - \tau_i) \rangle \\ &= \frac{\langle W|(D+E)^{i-1}(DE - qED)(D+E)^{L-i}|V \rangle}{\langle W|(D+E)^L|V \rangle}, \end{aligned}$$

c'est-à-dire :

$$\boxed{j = \frac{\langle W|(D+E)^{L-1}|V \rangle}{\langle W|(D+E)^L|V \rangle}}.$$

Dans le cas symétrique ( $q = 1$ ), les quantités précédentes sont calculables grâce à l'identité :

$$\boxed{\frac{\langle W|(D+E)^L|V \rangle}{\langle W|V \rangle} = \frac{1}{(\rho_a - \rho_b)^L} \frac{\Gamma(a+b+L)}{\Gamma(a+b)}}, \quad (58)$$

qui permet de retrouver directement la valeur du courant :

$$j = \frac{1}{L+a+b-1} (\rho_a - \rho_b).$$

Pour établir la relation (58), définissons les opérateurs

$$\begin{cases} W = \alpha E - \gamma D \\ V = \beta D - \delta E \end{cases}, \quad \text{qui vérifient les relations} \quad \begin{cases} \langle W|W = \langle W| \\ V|V = |V \rangle, \end{cases}$$

et la relation de commutation :

$$[W, V] = (\gamma\delta - \alpha\beta)(D + E).$$

Les matrices  $D$  et  $E$  s'expriment en fonction de  $V$  et  $W$  :

$$\begin{cases} E = \frac{\beta W + \gamma V}{\alpha\beta - \gamma\delta} \\ D = \frac{\delta W + \alpha V}{\alpha\beta - \gamma\delta}. \end{cases}$$

Ceci montre que :

$$D + E = \frac{bV + aW}{\rho_a - \rho_b} \quad \text{et} \quad [V, W] = \frac{aW + bV}{ab},$$

où  $a$  et  $b$  sont définis à la relation (53). Alors :

$$\frac{\langle W|(D+E)^L|V\rangle}{\langle W|V\rangle} = \frac{1}{(\rho_a - \rho_b)^L} \frac{\langle W|(bV+aW)^L|V\rangle}{\langle W|V\rangle}. \quad (59)$$

On a ensuite, successivement :

$$\begin{aligned} V(bV+aW) &= \frac{1}{b}(bV+aW) + (bV+aW)V \\ V(bV+aW)^{L-1} &= \frac{L-1}{b}(bV+aW)^{L-1} + (bV+aW)^{L-1}V \\ (bV+aW)^L &= (L-1)(bV+aW)^{L-1} + aW(bV+aW)^{L-1}V + b(bV+aW)^{L-1}V \\ \frac{\langle W|(bV+aW)^L|V\rangle}{\langle W|V\rangle} &= (L-1+a+b) \frac{\langle W|(bV+aW)^{L-1}|V\rangle}{\langle W|V\rangle}. \end{aligned}$$

La dernière relation donne donc, par récurrence, la relation (58) à partir de (59).

### 11.3 Méthode matricielle et fonction de grandes déviations de la densité : approche directe

La fonction de grandes déviations de la densité est définie, comme on l'a vu, par la relation :

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

Il est possible, grâce à l'algèbre des matrices  $D$  et  $E$ , de déterminer la forme exacte de  $\mathcal{F}(\{\rho(x)\})$  pour un système continu [12]. Nous allons d'abord décrire une approche directe permettant de déterminer  $\mathcal{F}$ . Nous verrons un peu plus loin une autre approche, plus simple, basée sur l'additivité, qui permet d'aboutir au même résultat de manière plus directe (paragraphe 11.4).

Le cas d'équilibre, où le bilan détaillé est vérifié, correspond, comme on l'a vu, au cas où les densités  $\rho_a$  et  $\rho_b$  des réservoirs sont égales :

$$\rho_a = \rho_b = r \quad i.e. \quad \frac{\alpha}{\alpha + \gamma} = \frac{\delta}{\delta + \beta}.$$

Le bilan détaillé implique que  $P(\tau_1, \dots, \tau_L)$  ne dépend que du nombre de particules  $N = \tau_1 + \dots + \tau_L$ . La distribution des configurations est donc celle de Bernouilli :

$$P(\tau_1, \dots, \tau_L) = \binom{L}{N} r^N (1-r)^{L-N}.$$

Avec l'estimation asymptotique :

$$\binom{L}{N} \sim \frac{L^L}{N^N (L-N)^{L-N}} \sim \frac{1}{\rho^N (1-\rho)^{L-N}}, \quad \text{où } \rho = \frac{N}{L},$$

on obtient :

$$P(\tau_1, \dots, \tau_L) = \left(\frac{r}{\rho}\right)^N \left(\frac{1-r}{1-\rho}\right)^{L-N}.$$

Dans la limite du continu, la fonction de grandes déviations de la densité à l'équilibre s'écrit ainsi :

$$\boxed{\mathcal{F}_{\text{eq}}(\{\rho(x)\}) = \int_0^1 B(\rho(x), r) dx, \quad \text{avec} \quad B(\rho, r) = \rho \log \frac{\rho}{r} + (1-\rho) \log \frac{1-\rho}{1-r}} \quad (60)$$

Pour le cas hors d'équilibre ( $\rho_a \neq \rho_b$ ), un moyen d'accéder à  $P(\{\rho(x)\})$  est de découper le système en  $K$  parties de longueurs  $L_1, \dots, L_K$ , et d'étudier la probabilité qu'ils contiennent respectivement  $N_1, \dots, N_K$  particules :

$$P_{L_1, \dots, L_K}(N_1, \dots, N_K) \longrightarrow P(\{\rho(x)\}) dx \quad \text{avec} \quad \begin{cases} L_i = L dx \\ N_i = L\rho(x) dx \\ dx \ll 1 \end{cases} .$$

La fonction génératrice des  $N_i$  est :

$$\overline{\lambda_1^{N_1} \dots \lambda_K^{N_K}} = \frac{\langle W | (\lambda_1 D + E)^{L_1} \dots (\lambda_K D + E)^{L_K} | V \rangle}{\langle W | (D + E)^L | V \rangle}$$

Il se trouve qu'il est en fait plus facile de calculer la quantité suivante :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{L_1 \dots L_K} \frac{\mu_1^{L_1}}{L_1!} \dots \frac{\mu_K^{L_K}}{L_K!} \overline{\lambda_1^{N_1} \dots \lambda_K^{N_K}} \\ &= \langle e^{\mu_1 \lambda_1 D + \mu_1 E} \dots e^{\mu_K \lambda_K D + \mu_K E} \rangle . \end{aligned}$$

Une manière d'effectuer ce calcul consiste à utiliser l'identité :

$$e^{xD+yE} = \left( \frac{(x-y)e^y}{xe^y - ye^x} \right)^E \left( \frac{(x-y)e^x}{xe^y - ye^x} \right)^D , \quad (61)$$

qui peut se montrer de la manière suivante : si on cherche deux fonctions  $t(z)$  et  $u(z)$  telles que

$$e^{z(xD+yE)} = e^{t(z)E} e^{u(z)D} ,$$

alors en dérivant par rapport à  $z$ , on a successivement :

$$\begin{aligned} (xD + yE)e^{z(xD+yE)} &= e^{tE} (t'E + u'D) e^{uD} \\ (xD + yE)e^{tE} &= t'E e^{tE} + u' e^{tE} D \\ (xD + yE) &= t'E + u' e^{tE} D e^{-tE} \\ &= t'E + u' (e^{-t} D + E(e^{-t} - 1)) , \end{aligned}$$

où l'on a utilisé la relation (57) dans le cas  $q = 1$  pour faire passer  $D$  à travers  $e^{tE}$ . En identifiant les coefficients des matrices  $D$  et  $E$ , on obtient les équations :

$$\begin{cases} t' = x(e^t - 1) + y \\ u' = x e^t , \end{cases}$$

que l'on peut résoudre en fonction de leurs conditions initiales, ce qui établit la relation (61).

En utilisant cette dernière équation, on obtient alors les égalités :

$$\begin{cases} Z = \left( \frac{\rho_a - \rho_b}{g} \right)^{a+b} \exp \left( a \sum_{i=1}^K \mu_i (1 - \lambda_i) \right) \\ g = -\rho_b + \rho_a \exp \left( \sum_{i=1}^K \mu_i (1 - \lambda_i) \right) + \sum_{i=1}^K \frac{1}{\lambda_i - 1} \left( e^{\mu_i (1 - \lambda_i)} - 1 \right) \exp \left( \sum_{j>i} \mu_j (1 - \lambda_j) \right) . \end{cases}$$

Il faut alors effectuer des transformations de Legendre et prendre la limite  $L \rightarrow \infty$ . On montre alors [12] que  $\mathcal{F}$  est de la forme :

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

où  $B$  est la fonction définie à la relation (60), et  $F$  est une fonction auxiliaire *monotone* déterminée par  $\rho(x)$  et solution de l'équation différentielle :

$$\rho(x) = F(x) + \frac{F(x)(1 - F(x))F''(x)}{F'(x)^2}, \quad (62)$$

avec les conditions aux limites :

$$F(0) = \rho_a \quad \text{et} \quad F(1) = \rho_b.$$

La caractéristique principale de ce résultat est que la fonctionnelle  $\mathcal{F}$  est non-locale en  $\rho(x)$  :  $F(x)$  étant la solution de (62), elle dépend de la densité  $\rho(y)$  en tout point. On peut déjà remarquer que ce résultat peut se reformuler de la manière suivante :

$$\boxed{\mathcal{F}(\{\rho(x)\}) = \sup_F \int_0^1 dx \left( B(\rho(x), F(x)) + \log \frac{F'(x)}{\rho_a - \rho_b} \right)}, \quad (63)$$

où la borne supérieure est prise sur les fonctions  $F$  monotones vérifiant les conditions aux limites  $F(0) = \rho_a$  et  $F(1) = \rho_b$ . L'équation d'Euler-Lagrange pour  $F$  est en effet exactement la relation (62).

On va montrer que ces résultats peuvent être obtenus en utilisant une formule "d'additivité" qui découle de la représentation matricielle de l'état stationnaire.

#### 11.4 Méthode matricielle et fonction de grandes déviations de la densité : approche par l'additivité

Afin de faciliter les raisonnements, on écrit les vecteurs  $|V\rangle$  et  $\langle W|$  sous la forme :

$$\begin{cases} \langle W| = \langle \rho_a, a| \\ |V\rangle = |\rho_b, b\rangle, \end{cases}$$

de sorte que :

$$\begin{cases} \langle \rho_a, a|(\rho_a E - (1 - \rho_a)D) = a \langle \rho_a, a| \\ ((1 - \rho_b)D - \rho_b E)|\rho_b, b\rangle = b |\rho_b, b\rangle. \end{cases} \quad (64)$$

On aimerait faire le lien avec le principe d'additivité en reliant la probabilité des configurations du système de taille  $L + L'$  et les probabilités des configurations de systèmes de taille  $L$  et  $L'$ . Une méthode est, avec les notations précédentes, d'écrire que :

$$\boxed{\frac{\langle \rho_a, a|X_0 X_1|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho_b, b\rangle} = \oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \frac{(\rho_a - \rho_b)^{a+b}}{(\rho_a - \rho)^{a+b}(\rho - \rho_b)} \frac{\langle \rho_a, a|X_0|\rho, b\rangle}{\langle \rho_a, a|\rho, b\rangle} \frac{\langle \rho, 1 - b|X_1|\rho_b, b\rangle}{\langle \rho, 1 - b|\rho_b, b\rangle}} \quad (65)$$

où  $X_0$  et  $X_1$  sont des produits arbitraires de matrices  $D$  et  $E$ . Cette séparation par une intégrale d'un produit de matrices en deux facteurs est assez similaire à l'insertion d'une relation de fermeture, comme on le fait en mécanique quantique.

Pour démontrer cette relation, posons :

$$\begin{cases} X = D + E \\ Y = \rho_a E - (1 - \rho_a)D. \end{cases}$$

Ces matrices vérifient la relation de commutation  $[X, Y] = X$ . Ainsi, dans tout multinôme  $X_0$  formé de produits de matrices  $D$  et  $E$ , on peut substituer  $D$  et  $E$  par leurs expressions en fonction des matrices  $X$  et  $Y$ , puis commuter les matrices  $X$  et  $Y$  pour faire passer tous les  $X$  à droite et tous les  $Y$  à gauche. En effectuant un raisonnement similaire pour  $X_1$ , on se ramène ainsi au cas où  $X_0$  et  $X_1$  sont de la forme :

$$\begin{cases} X_0 = (\rho_a E - (1 - \rho_a) D)^{q_0} (D + E)^{p_0} \\ X_1 = (D + E)^{p_1} ((1 - \rho_b) D - \rho_b E)^{q_1} \end{cases}$$

Alors, d'après les relations (64), il suffit de prouver la "relation de fermeture" (65) pour  $X_0$  et  $X_1$  de la forme :

$$\begin{cases} X_0 = (D + E)^{p_0} \\ X_1 = (D + E)^{p_1} \end{cases}$$

Comme (cf. paragraphe 11.2) :

$$\frac{\langle \rho_a, a | (D + E)^L | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle} = \frac{\Gamma(a + b + L)}{(\rho_a - \rho_b)^L \Gamma(a + b)},$$

l'intégrale (que l'on notera  $I$ ) du second membre de la relation (65) se calcule grâce au théorème des résidus (il n'y a qu'un pôle à  $\rho = \rho_b$  à l'intérieur du contour d'intégration) :

$$\begin{aligned} I &= \oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \frac{(\rho_a - \rho_b)^{a+b}}{(\rho_a - \rho)^{a+b} (\rho - \rho_b)} \frac{\Gamma(a + b + p_0)}{(\rho_a - \rho)^{p_0} \Gamma(a + b)} \frac{\Gamma(1 - b + b + p_1)}{(\rho - \rho_b)^{p_1} \Gamma(1 - b + b)} \\ I &= \frac{\Gamma(a + b + p_0)}{\Gamma(a + b)} \Gamma(p_1 + 1) (\rho_a - \rho_b)^{a+b} \underbrace{\oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \frac{1}{(\rho_a - \rho)^{a+b+p_0}} \frac{1}{(\rho - \rho_b)^{p_1+1}}}}_{=} \\ &= \frac{1}{p_1!} \frac{\partial^{p_1}}{\partial \rho^{p_1}} \left( \frac{1}{(\rho_a - \rho)^{a+b+p_0}} \right) \\ &= \frac{1}{\Gamma(p_1 + 1)} \frac{\Gamma(a + b + p_0 + p_1)}{\Gamma(a + b + p_0)} \frac{1}{(\rho_a - \rho_b)^{a+b+p_0+p_1}} \\ I &= \frac{\Gamma(a + b + p_0 + p_1)}{(\rho_a - \rho_b)^{p_0+p_1} \Gamma(a + b)} \\ I &= \langle \rho_a, a | X_0 X_1 | \rho_b, b \rangle, \end{aligned}$$

ce qui démontre la relation (65).

Pour  $L$  grand, les poids du type :

$$\frac{\langle \rho_a, a | X_0 | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle}$$

sont exponentiels en  $L$  et on peut utiliser la méthode du col pour obtenir à partir de la "relation de fermeture" (65) l'analogie, pour le profil densité, du principe d'additivité énoncé dans la partie 9 pour le courant. En notant :

$$\text{Poids}_L(X_0, \rho_a, \rho_b) = \frac{\langle \rho_a, a | X_0 | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle},$$

on a (si  $X_0 X_1$  correspond à la configuration  $(\tau_1 \dots \tau_{L+L'})$ ) :

$$\boxed{\text{Poids}_{L+L'}(\tau_1 \dots \tau_{L+L'}; \rho_a, \rho_b) = \min_{\rho_b < \rho < \rho_a} \text{Poids}_L(\tau_1 \dots \tau_L; \rho_a, \rho) \text{Poids}_{L'}(\tau_{L+1} \dots \tau_{L+L'}; \rho, \rho_b)} \quad (66)$$

Notons qu'il s'agit bien d'un minimum sur  $\rho$  : c'est un col sur un contour d'intégration qui est perpendiculaire à l'axe réel.



Le lien entre la probabilité et le poids d'une configuration défini ci-dessus est :

$$\begin{aligned} P_L(X_0, \rho_a, \rho_b) &= \text{Poids}_L(X_0, \rho_a, \rho_b) \frac{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | (D + E)^L | \rho_b, b \rangle} \\ &= \text{Poids}_L(X_0, \rho_a, \rho_b) (\rho_a - \rho_b)^L \frac{\Gamma(a + b)}{\Gamma(a + b + L)}. \end{aligned} \quad (67)$$

On en déduit que pour  $L$  et  $L'$  grands :

$$\begin{aligned} \log P_{L+L'}(X_0 X_1; \rho_a, \rho_b) &\simeq (L + L') \log \left( \frac{\rho_a - \rho_b}{L + L'} \right) + \\ &\quad \min_{\rho_b < \rho < \rho_a} \left[ \log P_L(X_0; \rho_a, \rho) - L \log \left( \frac{\rho_a - \rho}{L} \right) + \right. \\ &\quad \left. \log P_{L'}(X_1; \rho, \rho_b) - L' \log \left( \frac{\rho - \rho_b}{L'} \right) \right], \end{aligned}$$

ce qui constitue une formule d'additivité.

À partir de cette relation, on peut découper un grand système de longueur  $L$  en un grand nombre de sous-systèmes de taille  $L dx$ , et obtenir l'expression de la probabilité d'un profil de densité sous la forme :

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

où la fonction de grandes déviations de la densité  $\mathcal{F}(\{\rho(x)\})$  est donnée par :

$$\boxed{\mathcal{F}(\{\rho(x)\}) = \sup_F \int_0^1 dx \left( B(\rho(x), F(x)) + \log \frac{F'(x)}{\rho_a - \rho_b} \right)}. \quad (68)$$

La borne supérieure est prise sur les fonctions  $F(x)$  monotones sur  $[0, 1]$  vérifiant les conditions aux limites  $F(0) = \rho_a$  et  $F(1) = \rho_b$ . Ce résultat est identique à celui annoncé dans la partie **11.3**, où l'approche du problème ne passait pas par une formule d'additivité :  $\mathcal{F}$  est atteint pour la borne supérieure en  $F$  de la fonctionnelle

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

## 11.5 Remarques

1. On peut à partir de (68) déterminer le profil optimal  $\rho(x)$ . Il vérifie l'équation :

$$\frac{\delta \mathcal{G}[\rho, F]}{\delta \rho(x)} = 0,$$

c'est-à-dire :

$$\frac{\rho(x)}{F(x)} = \frac{1 - \rho(x)}{1 - F(x)}, \quad (69)$$

car :

$$\frac{\delta}{\delta \rho(x)} \left[ B(\rho(x), F(x)) \right] = \log \left( \frac{\rho(x)}{F(x)} \frac{1 - F(x)}{1 - \rho(x)} \right).$$

Ainsi, pour le profil optimal, on a :  $F(x) = \rho(x)$ . En substituant dans l'équation d'Euler (62) vérifiée par  $F$ , on voit que  $F''(x) = 0$ . Finalement :

$$\boxed{F(x) = \rho(x) = (1 - x)\rho_a + x\rho_b}. \quad (\text{À l'optimum})$$

On notera  $\bar{\rho}(x)$  cette solution, qui est un profil linéaire, comme attendu.

2. Pour de faibles valeurs de  $\rho_a - \rho_b$ , la fonctionnelle de grandes déviations s'exprime comme :

$$\mathcal{F}(\rho(x); \rho_a, \rho_b) = \int_0^1 B(\rho, \bar{\rho}) + \underbrace{\left( \frac{\rho_a - \rho_b}{\rho_a(1 - \rho_a)} \right)^2 \int_0^1 dx \int_x^1 dy x(1-y)(\rho(x) - \bar{\rho}(x))(\rho(y) - \bar{\rho}(y))}_{\text{terme non-local}} .$$

Dans cette expression, le second terme montre qu'il existe dans le modèle d'exclusion symétrique des corrélations à longue portée même dans l'état stationnaire et que la fonctionnelle de grandes déviations est non-locale.

3. Il existe une approche plus générale développée par Bertini *et al.* [2], où l'on s'intéresse au profil dépendant du temps  $\rho(x, t)$  en introduisant des fonctions similaires à  $\sigma$  et  $D$  (partie 9). On pourrait essayer d'écrire que la densité locale évolue selon l'équation infinitésimale :

$$d\rho(x, t) = \underbrace{-\frac{d}{dx} \left( D(\rho(x, t)) \frac{d\rho}{dx} \right) dt}_{\text{courant induit par un gradient de densité}} + \underbrace{\frac{d}{dx} \left( \sqrt{\sigma(\rho(x, t))} \eta(x, t) \right) \sqrt{dt}}_{\text{fluctuations de courant}},$$

où  $\eta(x, t)$  est un bruit blanc gaussien de variance unité. Écrite sous cette forme, la solution de l'équation n'est pas bien définie à cause de la présence d'un bruit multiplicatif  $\eta(x, t)$ , qui requiert, pour être interprété, d'adopter l'interprétation d'Itô ou de Stratonovich.

En fait, Bertini *et al.* [2] formulent le problème d'une façon qui évite les difficultés liées à ce bruit multiplicatif et écrivent directement la probabilité d'observer une trajectoire  $\rho(x, t)$  dans l'espace des profils sous la forme :

$$\mathcal{P}(\rho(x, t), 0 < t < T) \sim \exp \left[ -L \int_0^T dt \frac{(j(x, t) + D(\rho(x, t)) \frac{d}{dx} \rho(x, t))^2}{2\sigma(\rho(x, t))} \right],$$

où  $\rho(0, t) = \rho_a$ ,  $\rho(1, t) = \rho_b$  et  $j(x, t)$  est lié à  $\rho(x, t)$  par :

$$\frac{d}{dt} \rho(x, t) = -\frac{d}{dx} j(x, t).$$

L'approche suivie par Bertini *et al.* pour déterminer la fonctionnelle  $\mathcal{F}(\rho(x))$  est alors de chercher la trajectoire  $\rho(x, t)$  optimale telle que  $\rho(x, 0) = \rho(x)$  et que  $\rho(x, -\infty) = \bar{\rho}(x)$ , c'est-à-dire de trouver la façon la plus économique d'aller du profil le plus probable  $\bar{\rho}(x)$  au profil  $\rho(x)$  dont on souhaite calculer la fonction de grande déviation  $\mathcal{F}(\rho(x))$ .

4. Ce qui rend le calcul des fluctuations et des grandes déviations du courant (partie III) beaucoup plus facile que celui des grandes déviations de densité est que, pour le courant, le profil optimal solution de (48) était indépendant du temps, tandis que l'approche de Bertini *et al.* nécessite de trouver un profil  $\rho(x, t)$  dépendant du temps pour déterminer  $\mathcal{F}(\rho(x))$ .

## 12 Modèle d'exclusion asymétrique

### 12.1 Le modèle d'exclusion totalement asymétrique (TASEP)

Dans le modèle d'exclusion totalement asymétrique, qui correspond au cas  $q = 0$  du paragraphe 11.2, chaque particule sur un réseau unidimensionnel ne peut sauter que vers la droite, si le site n'est pas occupé (figure 33).

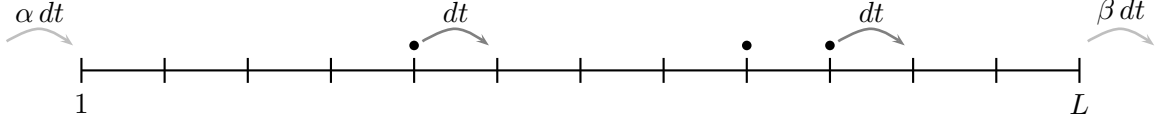


FIG. 33: Dynamique du modèle d'exclusion totalement asymétrique, pour des conditions aux limites ouvertes

L'équation maîtresse se traduit de la manière suivante pour l'évolution de la densité moyenne et des fonctions de corrélation :

$$\begin{cases} \frac{d\langle\tau_i\rangle}{dt} = \langle\tau_{i-1}(1-\tau_i)\rangle - \langle\tau_i(1-\tau_{i+1})\rangle \\ \frac{d\langle\tau_i\tau_{i+1}\rangle}{dt} = \langle\tau_{i-1}(1-\tau_i)\tau_{i+1}\rangle - \langle\tau_i\tau_{i+1}(1-\tau_{i+2})\rangle. \end{cases} \quad (70)$$

Contrairement au cas symétrique, la hiérarchie de l'évolution des fonctions à  $n$  points ne se ferme pas, et même dans l'état stationnaire, le problème est un vrai problème à  $N$  corps.

Si l'on impose des conditions aux limites périodiques, le problème se simplifie, car dans l'état stationnaire toutes les configurations sont équiprobables. En effet, le nombre de manières d'entrer dans une configuration  $\mathcal{C}$  et le nombre de manières d'en sortir sont égaux au nombre  $n(\mathcal{C})$  de *clusters* de cette configuration (nombre d'amas connexes de particules adjacentes) :

$$\sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}', \mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}, \mathcal{C}') = n(\mathcal{C}).$$

Ainsi, pour un état à  $N$  particules, la probabilité de chaque configuration  $\mathcal{C}$  est donnée par :

$$P(\mathcal{C}) = \frac{1}{\binom{L}{N}} = \frac{N!(L-N)!}{L!}.$$

On peut alors directement calculer le courant : au site  $i$

$$\begin{aligned} j &= \langle\tau_i(1-\tau_{i+1})\rangle \\ &= \frac{1}{\binom{L}{N}} \sum_{\{\tau\}} \tau_i(1-\tau_{i+1}). \end{aligned}$$

Comme toutes les configurations sont équiprobables, on a

$$j = \frac{\binom{L-2}{N-1}}{\binom{L}{N}} = \frac{N(N-L)}{L(L-1)}.$$

Ceci montre que le courant ne dépend pas du site  $i$  auquel il est défini, et que dans la limite des grands systèmes :

$$\boxed{j = \rho(1-\rho)}.$$

L'étude des fluctuations du courant peut se faire en utilisant l'ansatz de Bethe [10, 11, 7, 19, 18].

## 12.2 Le diagramme des phases

Nous allons voir maintenant que l'on peut retrouver le diagramme des phases en faisant une approximation de champ moyen. L'évolution des occupations moyennes  $\langle \tau_i \rangle$  des sites est donnée par :

$$\begin{cases} \frac{d\langle \tau_1 \rangle}{dt} = \alpha \langle (1 - \tau_1) \rangle - \langle \tau_1 (1 - \tau_2) \rangle & \text{si } i = 1 \\ \frac{d\langle \tau_i \rangle}{dt} = \langle \tau_{i-1} (1 - \tau_i) \rangle - \langle \tau_i (1 - \tau_{i+1}) \rangle & \text{si } 1 < i < L \\ \frac{d\langle \tau_L \rangle}{dt} = -\beta \langle \tau_L \rangle - \langle \tau_{L-1} (1 - \tau_L) \rangle & \text{si } i = L. \end{cases}$$

Connaissant la relation  $j(\rho)$  entre le courant et la densité, on peut déterminer [22, 26] le diagramme des phases pour le système avec des conditions aux bords ouvertes :

$$j_{\text{ouvert}} = \begin{cases} \max_{\rho_a \leq \rho \leq \rho_b} j(\rho) & \text{si } \rho_a \geq \rho_b \\ \min_{\rho_a \leq \rho \leq \rho_b} j(\rho) & \text{si } \rho_a \leq \rho_b. \end{cases} \quad (71)$$

L'idée pour arriver à ces expressions est de considérer un système infini avec :

$$\begin{cases} \rho(x) \longrightarrow \rho_a & \text{pour } x \longrightarrow -\infty \\ \rho(x) \longrightarrow \rho_b & \text{pour } x \longrightarrow +\infty, \end{cases}$$

Si  $\rho_a > \rho_b$ , il se développe une solution en éventail (cf. figure 34).



FIG. 34: Évolution “en éventail” du profil de densité du TASEP pour  $\rho_a > \rho_b$  (les graphes sont centrés sur la marche de densité).

Si  $\rho_a < \rho_b$ , il se développe un ou plusieurs chocs (cf. figure 35).

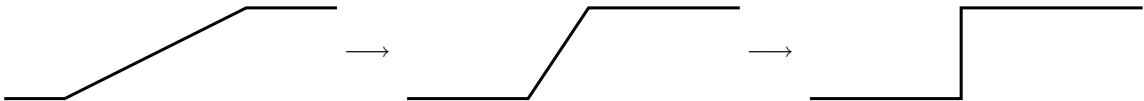


FIG. 35: Formation d'un choc : évolution du profil de densité du TASEP pour  $\rho_a < \rho_b$  (les graphes sont centrés sur la marche de densité).

Pour déterminer le diagramme de phase, il suffit de considérer la solution de l'équation de Burgers, qui décrit l'évolution de la densité à grande échelle :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{d}{dx}j(\rho),$$

et de calculer (ce qui se fait comme nous le verrons par la suite par la méthode des caractéristiques) la densité asymptotique à l'origine  $\rho(0, t)$  pour  $t \rightarrow \infty$ . Dans le cas asymétrique, le courant est donné par :

$$j = \rho(1 - \rho).$$

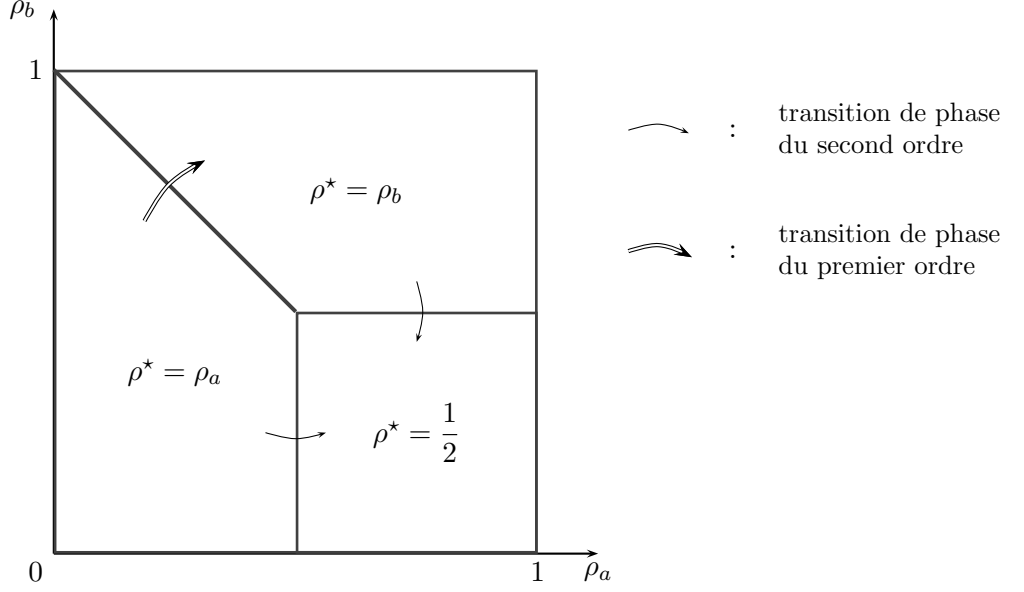


FIG. 36: Le diagramme des phases du modèle exclusion totalement asymétrique

Le diagramme des phases correspondant est donné sur la figure 36.

L'approximation de champ moyen [8] consiste à négliger les corrélations entre les  $\tau_i$  et à remplacer :

$$\langle \tau_i \tau_{i+1} \rangle \longrightarrow \langle \tau_i \rangle \langle \tau_{i+1} \rangle$$

(la solution exacte est donnée par une méthode matricielle, cf. paragraphe 12.3). La densité vérifie alors, à l'intérieur du système :

$$t_{i-1}(1 - t_i) - t_i(1 - t_{i+1}) = 0 \quad \text{avec} \quad t_i = \langle \tau_i \rangle,$$

ce qui exprime que le courant local  $j = t_i(1 - t_{i+1})$  est uniforme à l'intérieur du système. Au bord, les équations de la densité sont :

$$\begin{cases} \alpha(1 - t_1) = j \\ \beta t_L = j. \end{cases}$$

On peut calculer les  $t_i$  à partir de la récurrence :

$$t_{i+1} = 1 - \frac{j}{t_i}.$$

On doit alors distinguer trois cas (figure 37) selon la valeur de  $j$ .

On retrouve alors le diagramme des phases de la figure 36.

### 12.3 Méthode matricielle pour le modèle d'exclusion totalement asymétrique

Avec  $\rho_a = \alpha$  et  $\rho_b = 1 - \beta$ , les probabilités stationnaires sont données par (54) avec l'algèbre (56) qui devient, pour le modèle d'exclusion totalement asymétrique ( $q = 0$ ) :

$$\boxed{\begin{cases} DE = D + E \\ \langle \rho_a | E = \langle \rho_a | \frac{1}{\alpha} \\ D|V\rangle = \frac{1}{\beta}|V\rangle \end{cases}}. \quad (72)$$

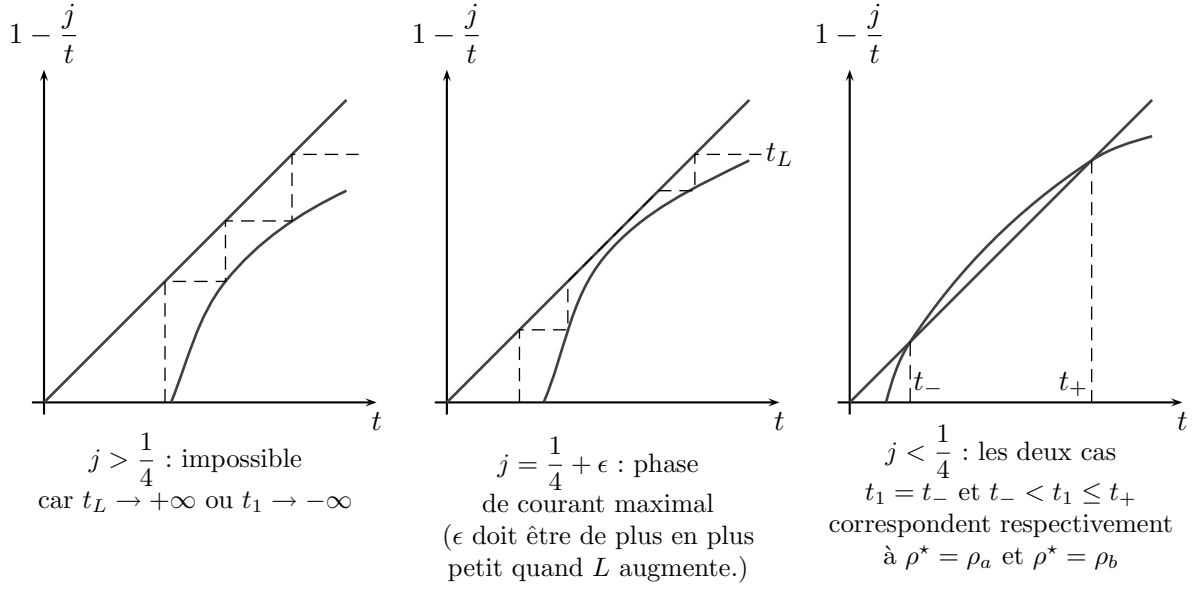


FIG. 37: Trois cas à distinguer pour la récurrence  $t_{i+1} = 1 - \frac{j}{t_i}$ .

Le courant (indépendant du site  $i$ ) est :

$$\begin{aligned}
 j &= \frac{\langle \rho_a | (D + E)^{i-1} D E (D + E)^{L-i-1} | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | \rho_b \rangle} \\
 &= \frac{\langle \rho_a | (D + E)^{L-1} | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | \rho_b \rangle}.
 \end{aligned}$$

Pour le déterminer, on peut développer le numérateur et utiliser l'égalité :

$$\frac{\langle \rho_a | E^p D^q | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | \rho_b \rangle} = \frac{1}{\alpha^p} \frac{1}{\beta^q},$$

qui découle de (72). Pour cela, en utilisant la relation (57) qui permet d'échanger les positions des deux matrices  $D$  et  $E$  dans un produit :

$$DF(E) = F(1) + E \frac{F(E) - F(1)}{E - 1},$$

on voit par récurrence que :

$$(D + E)^N = \sum_{p=1}^N \frac{p(2N - 1 - p)!}{N!(N - p)!} (E^p + E^{p-1}D + \dots + D^p),$$

et donc :

$$\frac{\langle \rho_a | (D + E)^N | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | \rho_b \rangle} = \sum_{p=1}^N \frac{p(2N - 1 - p)!}{N!(N - p)!} \frac{\frac{1}{\alpha^{p+1}} - \frac{1}{\beta^{p+1}}}{\frac{1}{\alpha} - \frac{1}{\beta}}. \quad (73)$$

Pour  $L$  grand, la somme est dominée soit par  $p \sim 1$ , soit par  $p \sim L$ , selon les valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$ . On trouve que :

$$\frac{\langle \rho_a | (D + E)^N | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | \rho_b \rangle} \sim \begin{cases} 4^N & \text{si } \alpha > \frac{1}{2} \text{ et } \beta < \frac{1}{2} \\ \left( \frac{1}{\beta(1-\beta)} \right)^N & \text{si } \beta < \alpha \\ \left( \frac{1}{\alpha(1-\alpha)} \right)^N & \text{si } \beta > \alpha. \end{cases}$$

On retrouve ainsi le diagramme des phases donné par (71) et par l'étude en champ moyen (figure 36).

Bien que le champ moyen donne un diagramme des phases correct, certaines de ses prédictions restent erronées. Ainsi, pour  $\alpha = \beta = 1$  (régime de courant maximal), les corrections de taille finie au courant sont :

$$j = \begin{cases} \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{\pi^2}{L^2} \right) + O(L^{-3}) & \text{en champ moyen} \\ \frac{L+2}{2(2L+1)} \simeq \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{3}{2L} \right) + O(L^{-2}) & \text{par un calcul exact} \end{cases}$$

Pour ce résultat, les prédictions du champ moyen sont donc fausses sur l'ordre même des corrections en  $1/L$ .

## 12.4 Corrélations et lien aux excursions browniennes

Dans la limite des grands systèmes, on repère la position de  $k$  points par les réels  $x_1 \dots x_k$  qui correspondent aux indices  $Lx_1 \dots Lx_k$ . Dans la phase de courant maximal, on peut montrer [14] que les corrélations sont données par la relation :

$$\left\langle \left\langle \left( \tau(x_1) - \frac{1}{2} \right) \dots \left( \tau(x_k) - \frac{1}{2} \right) \right\rangle \right\rangle = \frac{1}{2^k} \frac{1}{L^{k/2}} \frac{d^k}{dx_1 \dots dx_k} \langle y_1 \dots y_k \rangle, \quad (74)$$

où les  $y_i(x)$  sont des excursions browniennes d'abscisse  $x$  (*i.e* des marches aléatoires unidimensionnelles  $y(x)$  qui ne repassent qu'une fois à l'origine  $y = 0$  en  $x = 1$  après en être parti à  $x = 0$ ). La statistique sur ces marches est définie par la probabilité  $P(y_1 \dots y_k; x_1 \dots x_k)$  d'être aux hauteurs  $y_1 \dots y_k$  pour les abscisses  $0 < x_1 < \dots < x_k < 1$ , qui est :

$$P(y_1 \dots y_k; x_1 \dots x_k) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} g_0(y_1, x_1) g(y_1, y_2; x_2 - x_1) \dots g(y_{k-1}, y_k; x_k - x_{k-1}) g_0(y_k, 1 - x_k),$$

où les fonctions  $g_0$  et  $g$  sont définies par :

$$\begin{cases} g_0(y, x) = \frac{2y}{x^{3/2}} e^{-y^2/x} \\ g(y, y'; x) = \frac{1}{\sqrt{\pi x}} \left( e^{-(y-y')^2/x} - e^{-(y+y')^2/x} \right). \end{cases}$$

On peut comprendre facilement le résultat (74) dans le cas particulier  $\alpha = \beta = 1$ . Une représentation de l'algèbre des matrices  $D$  et  $E$  et des vecteurs  $|V\rangle$  et  $|W\rangle$  est :

$$D = \sum_{n \geq 1} |n\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1| = \begin{pmatrix} 1 & 1 & & (0) \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ (0) & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$E = \sum_{n \geq 1} |n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n| = \begin{pmatrix} 1 & & & (0) \\ 1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ (0) & & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\langle W| = \langle 1| = (1, 0, 0 \dots)$$

$$\langle V| = \langle 1| = (1, 0, 0 \dots).$$

On peut écrire  $\langle W|(D + E)^L|V\rangle$  comme une somme sur l'ensemble  $\mathcal{M}_L$  des marches aléatoires unidimensionnelles discrètes de  $L$  pas qui ne reviennent pas à l'origine. Chacune de ces marches  $w$  est définie par une suite  $(n_i(w))$  de  $L + 1$  entiers positifs ( $n_i \geq 0$ ) et satisfaisant  $(|n_{i+1} - n_i| \leq 1)$  :

$$\langle W|(D + E)^L|V\rangle = \sum_{w \in \mathcal{M}_L} \Omega(w),$$

où :

$$\Omega(w) = \sum_{i=1}^L v(n_{i-1}, n_i) \quad \text{où} \quad v(n, n') = \begin{cases} 2 & \text{si } |n - n'| = 0 \\ 1 & \text{si } |n - n'| = 1. \end{cases}$$

On a en effet simplement  $v(n, n') = \langle n|D + E|n'\rangle$  car  $D + E$  s'écrit :

$$D + E = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & (0) \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ (0) & & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

On obtient alors grâce aux expressions matricielles de  $\langle \tau_i \rangle$  et  $\langle \tau_i \tau_j \rangle$  :

$$\left\langle \left( \tau_{i_1} - \frac{1}{2} \right) \cdots \left( \tau_{i_k} - \frac{1}{2} \right) \right\rangle = \frac{1}{2^k} \sum_w \nu(w) (n_{i_1} - n_{i_1-1}) \cdots (n_{i_k} - n_{i_k-1}), \quad (75)$$

où  $\nu(w)$  est la mesure sur  $\mathcal{M}_L$  qui découle de  $\Omega$  :

$$\nu(w) = \frac{\Omega(w)}{\sum_w \Omega(w')}.$$

L'équation (75) est la version discrète de (74). Le cas général ( $\alpha$  et  $\beta$  quelconques, où seuls changent la représentation de  $|V\rangle$  et  $|W\rangle$  et le poids  $\Omega(w)$ ) et le passage à la limite continue sont traités dans [14].



Ce lien avec les excursions browniennes permet de montrer que les fluctuations de densité ne sont pas gaussiennes. Pour un système de  $L$  sites, dont  $N$  particules sont situées entre  $Lx_1$  et  $Lx_2$ , définissons l'écart  $\mu$  à la densité moyenne dans la phase de courant maximal ( $\rho^* = 1/2$ ) par :

$$\mu = \frac{N - L(x_2 - x_1)/2}{\sqrt{L}}.$$

Le lien avec les excursions browniennes permet de voir qu'à la limite du continu :

$$P(\mu) = \int_{\mathbb{R}} dy_1 \int_{\mathbb{R}} dy_2 \frac{1}{\sqrt{2\pi(x_2 - x_1)}} \exp\left(-\frac{(2\mu + y_1 - y_2)^2}{x_2 - x_1}\right). \quad (76)$$

La distribution n'est donc pas gaussienne. Cette expression des fluctuations de densité, en terme d'une excursion brownienne, reste sans doute valable pour des modèles plus généraux dans la phase de courant maximum comme le montrent certaines simulations [14, 15].

## 12.5 Additivité et fonction de grandes déviations de la densité pour le TASEP

Comme dans le cas du modèle d'exclusion symétrique, une relation d'additivité peut être déduite du formalisme matriciel, et permet d'obtenir la fonction de grandes déviations. Avec les notations :

$$\begin{cases} DE = D + E \\ \langle \rho_a | E = \langle \rho_a | \frac{1}{\rho_a} \\ D | \rho_b \rangle = \frac{1}{1 - \rho_b} | \rho_b \rangle, \end{cases}$$

(où l'on a simplement remplacé  $\langle W |$  par  $\langle \rho_a |$  et  $| V \rangle$  par  $| \rho_b \rangle$ ) pour l'algèbre des matrices du TASEP, la relation d'additivité sous sa forme intégrale peut s'écrire :

$$\frac{\langle \rho_a, a | X_0 X_1 | \rho_b, b \rangle}{\langle \rho_a, a | \rho_b, b \rangle} = \oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \frac{(\rho_a - \rho_b)}{(\rho_a - \rho)(\rho - \rho_b)} \frac{\langle \rho_a | X_0 | \rho \rangle}{\langle \rho_a | \rho \rangle} \frac{\langle \rho | X_1 | \rho_b \rangle}{\langle \rho | \rho_b \rangle}, \quad (77)$$

où, comme précédemment,  $X_0$  et  $X_1$  sont des polynômes en  $E$  et  $D$  de longueur  $L$  et  $L'$ . Il suffit de la vérifier pour  $X_0 = E^{p_0} D^{q_0}$  et  $X_1 = E^{p_1} D^{q_1}$ , ce qui peut se montrer par exemple en faisant une récurrence sur  $q_0$ .

Remarque : lorsque  $\rho_a < \rho_b$ , cette relation peut être prolongée analytiquement en déformant le contour d'intégration de façon à ce que  $\rho_b$  et 0 restent à l'intérieur et  $\rho_a$  à l'extérieur. Une analyse asymptotique, où l'on utilise (73) pour passer des poids aux probabilités, donne alors les résultats suivants :

1. Lorsque  $\rho_b < \rho_a$  :

$$\mathcal{F}(\{\rho(x)\}) = - \max_{\rho_b < r < \rho_a} \left[ \log(r(1-r)) \right] + \sup_F \int_0^1 dx \left( B(\rho(x), F(x)) + \log F(x)(1-F(x)) \right),$$

où la borne supérieure est prise sur toutes les fonctions décroissantes sur  $[0, 1]$  telles que  $F(0) = \rho_a$  et  $F(1) = \rho_b$ . À partir de cette expression, on peut montrer que si on considère une boîte de longueur  $\lambda L$  avec  $0 < \lambda < 1$ , la probabilité  $P(\rho)$  de trouver une densité  $\rho$  dans cette boîte a la forme :

$$P(\rho) \sim \exp(-La(\rho)),$$

où  $a(\rho)$  dépend de  $\lambda$  et de la position de la boîte, et que la dérivée  $a''(\rho)$  n'est pas continue en  $\rho = \frac{1}{2}$ . On a donc une situation où la relation d'Einstein-Smoluchowksy (27) n'est pas satisfaite puisque  $a''(\rho)$  n'est pas continue et que les fluctuations de densité (76) ne sont pas gaussiennes.

2. Lorsque  $\rho_b < \rho_a$  :

$$\mathcal{F}(\{\rho(x)\}) = \inf_{0 < y < 1} \left[ \int_0^y dx \left( B(\rho(x), \rho_a) + \log \frac{\rho_a(1 - \rho_a)}{\bar{\rho}(x)(1 - \bar{\rho}(x))} \right) + \int_y^1 dx \left( B(\rho(x), \rho_b) + \log \frac{\rho_b(1 - \rho_b)}{\bar{\rho}(x)(1 - \bar{\rho}(x))} \right) \right].$$

Ce régime possède la particularité suivante : contrairement au cas d'équilibre, la fonction  $\mathcal{F}$  n'est pas convexe, par exemple, le long de la ligne de transition du premier ordre (figure 36).

### 13 Modèle totalement asymétrique, front d'onde, et équation de Burgers

Le modèle d'exclusion asymétrique est une réalisation microscopique de l'équation de Burgers. L'équation (70), qui donne la dynamique exacte du TASEP, devient en champ moyen :

$$\frac{d\langle \tau_i \rangle}{dt} = \langle \tau_{i-1} \rangle \langle (1 - \tau_i) \rangle - \langle \tau_i \rangle \langle (1 - \tau_{i+1}) \rangle.$$

Pour des variations lentes de  $\tau_i$  le système peut être décrit, à la limite du continu, par une densité locale  $\rho(x)$ , qui vérifie alors l'équation :

$$\partial_t \rho = -\partial_x (\rho(1 - \rho)). \quad (\text{équation de Burgers})$$

On peut obtenir cette équation à partir d'un raisonnement macroscopique : dans ce modèle, le courant s'écrit  $j(x) = \rho(x)(1 - \rho(x))$  (dans la limite des grands systèmes), et l'on a, en effectuant un bilan de matière entre  $t$  et  $t + dt$  et  $x$  et  $x + dx$  :

$$\underbrace{dx (\rho(x, t + dt) - \rho(x, t))}_{\text{variation de la quantité de matière entre } x \text{ et } x + dx} = \underbrace{j(x)dt - j(x + dx)dt}_{\text{matière arrivant en } x \text{ et partant en } x + dx},$$

ce qui donne bien la même relation (équation de "continuité").

#### 13.1 La méthode des caractéristiques

Comme l'équation de Burgers est une équation du premier ordre, on peut calculer  $\rho(x, t)$  à partir du profil initial  $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$  en utilisant la méthode des caractéristiques. Cette méthode consiste à chercher les trajectoires  $x(t)$  le long desquelles  $\rho(x(t), t)$  reste constant, égal à  $\rho_0(x(0))$ . Le long d'une telle trajectoire  $x(t)$  :

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

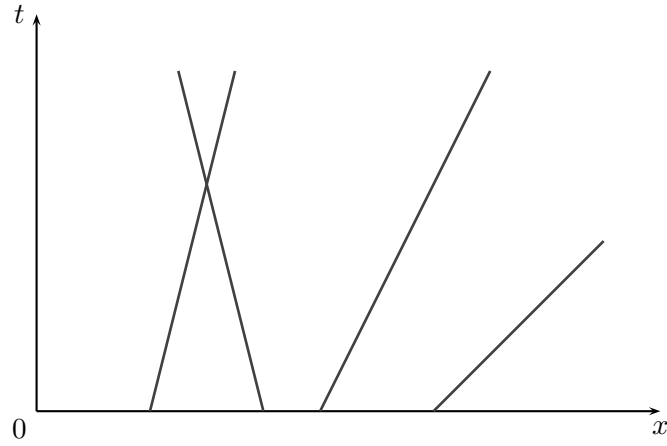


FIG. 38: Trajectoires caractéristiques  $x(t)$  (telles que  $\rho(x(t), t) = \text{constante}$ ) pour l'équation de Burgers

En insérant dans l'équation de Burgers, on obtient :

$$\frac{\partial x(t)}{\partial t} = 1 - 2\rho_0(x(0)).$$

Les trajectoires  $x(t)$  recherchées ont donc une vitesse constante (figure 38). Au point où deux trajectoires se croisent,  $\rho$  est discontinue : il y a formation d'une onde de choc.

### 13.2 Ondes de choc

Un exemple de profil initial donnant naissance à une onde de choc est donné par la figure 39.

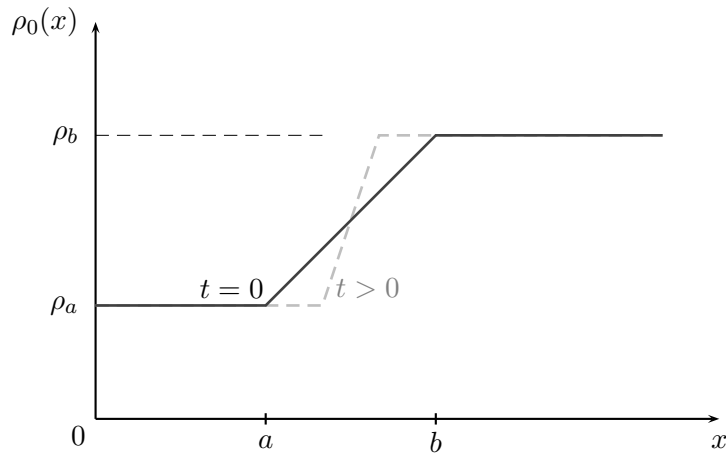


FIG. 39: Profil initial donnant naissance à une onde de choc

Les zones de densité  $\rho_a$  et  $\rho_b$  (respectivement,  $x \rightarrow -\infty$  et  $x \rightarrow +\infty$ ) ont tendance à se rapprocher, comme indiqué sur la figure 39 (où le point  $a$  avance avec la vitesse  $1 - 2\rho_a$  et le point  $b$  avec la vitesse  $1 - 2\rho_b$ ).

Pour ce profil de densité initial, les courbes caractéristiques  $x(t)$  sont données sur la figure 40. À l'instant où l'onde de choc se forme, le profil de densité a l'allure donnée sur la figure 41.

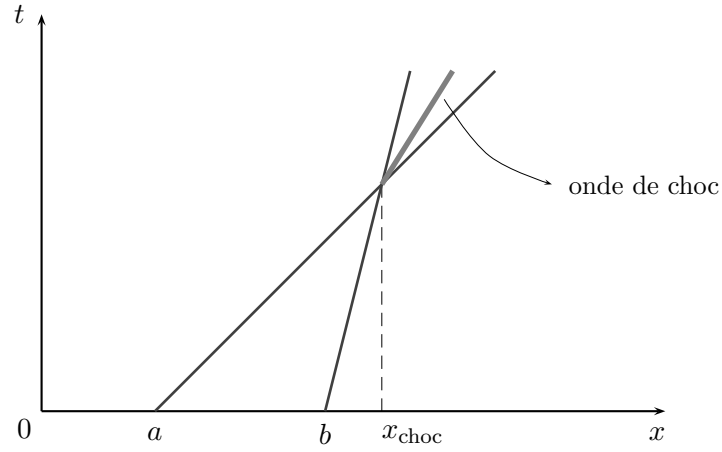


FIG. 40: Trajectoires caractéristiques pour le profil initial de la figure précédente

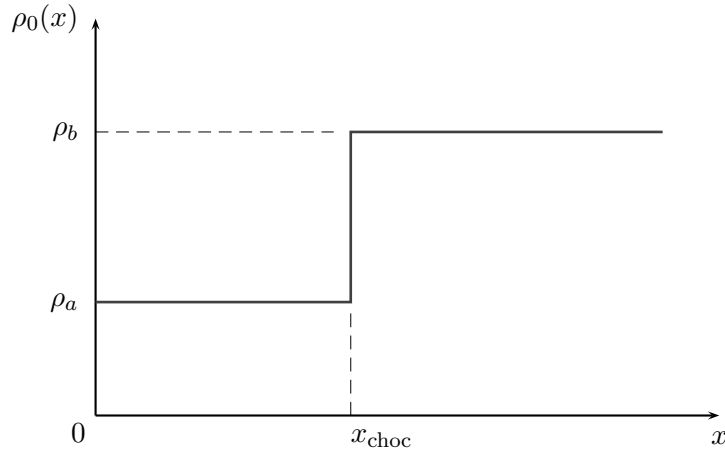


FIG. 41: Profil à l'instant de l'onde de choc

### 13.3 Vitesse d'une onde de choc

On peut chercher à déterminer la vitesse d'une onde de choc. Dà

Une première méthode consiste à effectuer un bilan de matière sur un intervalle  $[A, B]$ , où  $A$  est situé à gauche de l'onde de choc et  $B$  à droite. Entre  $t$  et  $t + \Delta t$ , le nombre de particules qui passent aux sites  $A$  et  $B$  sont :

$$\begin{cases} \Delta N_A = \rho_a(1 - \rho_a) \Delta t \\ \Delta N_B = \rho_b(1 - \rho_b) \Delta t \end{cases} \quad \text{d'où} \quad \Delta N = \Delta N_A - \Delta N_B = (\rho_a - \rho_b)(1 - \rho_a - \rho_b) \Delta t.$$

La quantité  $\Delta N$  représente la variation de quantité de matière située entre  $A$  et  $B$ . Celle-ci s'exprime également en fonction de la vitesse de l'onde de choc :

$$\Delta N = -v(\rho_b - \rho_a) \Delta t.$$

Ceci donne l'expression de la vitesse  $v$  de l'onde de choc :

$$\boxed{v = 1 - \rho_a - \rho_b}.$$

Une autre méthode consiste à introduire un terme supplémentaire dans l'équation de Burgers pour la "régulariser", en ajoutant un terme de viscosité  $\nu$  (ou "terme entropique"), puis de faire tendre  $\nu$  vers 0. L'équation devient alors :

$$\partial_t \rho = -\partial_x \rho + 2\rho \partial_x \rho + \nu \partial_x^2 \rho . \quad (78)$$

Cette équation peut en fait se ramener une équation linéaire. En posant :

$$Z = \exp \left( \frac{1}{\nu} h(x, t) \right) , \quad (\text{Transformation de Cole-Hopf})$$

et :

$$\partial_t Z = \nu \partial_x^2 Z ,$$

on voit que  $h$  vérifie l'équation :

$$\partial_t h = -\partial_x h + (\partial_x h)^2 + \nu \partial_x^2 h .$$

Ainsi,  $\rho = \partial_x h$  vérifie l'équation de Burgers avec viscosité (78). L'évolution de la fonction  $Z$  peut se calculer exactement :

$$Z(x, t) = \int_{\mathbb{R}} dx' \frac{\exp \left( -\frac{(x-x')^2}{4\nu t} \right)}{\sqrt{4\pi\nu t}} Z(x', 0) ,$$

et si l'on part d'une condition initiale comme celle de la figure 39, on retrouve la même expression de la vitesse du front.

## Références

- [1] Beenakker CWJ, Büttiker M, *Suppression of shot noise in metallic diffusive conductors*, Phys. Rev. B **46**, 1889-1892 (1992)
- [2] Bertini L, De Sole A, Gabrielli D, Jona-Lasinio G, Landim C, *Fluctuations in Stationary non Equilibrium States*, Phys. Rev. Lett. **87**, 040601 (2001) [[cond-mat/0104153](#)] ; *Macroscopic fluctuation theory for stationary non equilibrium states*, J. Stat. Phys. **107**, 635-675 (2002) [[cond-mat/0108040](#)]
- [3] Blanter YM, Buttiker M, *Shot noise in mesoscopic conductors*, Phys. Rep. **336**, 1-166 (2000) [[cond-mat/9910158](#)]
- [4] Bodineau T, Derrida B, *Current fluctuations in non-equilibrium diffusive systems : an additivity principle*, [[cond-mat/0402305](#)]
- [5] Bonetto F, Lebowitz J L, Rey-Bellet L, *Fourier's Law : a Challenge for Theorists in Mathematical Physics 2000*, Imp. Coll. Press, London (2000), pp 128-150 [[math-ph/0002052](#)]
- [6] Crisanti A, Ritort F, *Violation of the fluctuation-dissipation theorem in glassy systems : basic notions and the numerical evidence*, J. Phys. A : Math. Gen. **36**, R181-R290 (2003) [[cond-mat/0212490](#)]
- [7] Derrida B, Appert, *Universal large-deviation function of the Kardar-Parisi-Zhang equation in one dimension* J. Stat. Phys. **94**, 1-30 (1999)
- [8] Derrida B, Domany E, Mukamel D, *An exact solution of the one dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries*, J. Stat. Phys. **69**, 667-687 (1992)
- [9] Derrida B, Evans MR, Hakim V, Pasquier V, *Exact solution of a 1D asymmetric exclusion model using a matrix formulation*, J. Phys. A **26**, 1493 (1993) ; Essler FHL, Rittenberg V, *Representations of the quadratic algebra and partially asymmetric diffusion with open boundaries*, J. Phys. A **29**, 3375 (1996)
- [10] Derrida B, *An exactly soluble non-equilibrium system : The asymmetric simple exclusion process* Phys. Rep. **301**, 65-83 (1998)
- [11] Derrida B, Lebowitz JL, *Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process* Phys. Rev. Lett. **80**, 209-213 (1998) [[cond-mat/9809044](#)]
- [12] Derrida B, Lebowitz JL, Speer ER, *Free Energy Functional for Nonequilibrium Systems : An Exactly Soluble Case*, Phys. Rev. Lett. **87**, 150601 (2001) [[cond-mat/0105110](#)] ; *Exact large deviation functional of a stationary open driven diffusive system : the asymmetric exclusion process*, J. Stat. Phys. **110**, 775-810 (2003) [[cond-mat/0205353](#)]
- [13] Derrida B, Douçot B, Roche PE, *Current fluctuations in the one dimensional symmetric exclusion process with open boundaries*, J. Stat. Phys. **115**, 717-748 (2004) [[Cond-Mat/0310453](#)]
- [14] Derrida B, Enaud C, Lebowitz JL, *The asymmetric exclusion process and Brownian excursions*, J. Stat. Phys. **115**, 365-382 (2004) [[cond-mat/0306078](#)]
- [15] Enaud C, Derrida B, *Sample-dependent phase transitions in disordered exclusion models*, Europhysics Letters (in press) [[cond-mat/0402450](#)]
- [16] Dorfman JR, Kirkpatrick TR, Sengers JV, *Generic Long-Range Correlations in Molecular Fluids*, Ann. Rev. Phys. Chem. **45**, 179-211 (1994)
- [17] Gallavotti G, Cohen EGD, *Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics*, Phys. Rev. Lett. **74**, 2694-2697 (1995) ; Gallavotti G, Cohen EGD, *Dynamical ensembles in stationary states*, J. Stat. Phys., **80**, 931 (1995) ; *Fluctuation theorem for stochastic dynamics*, J. Phys. A **31**, 3719 (1998)

- [18] Gwa LH, Spohn H *Bethe solution for the dynamic-scaling exponent of the noisy Burgers equation* Phys. Rev. A **46** 844-854 (1992)
- [19] Golinelli O, Mallick K *Bethe ansatz calculation of the spectral gap of the asymmetric exclusion process* J. Phys. A **37**, 3321 (2004)
- [20] Halpin-Healy T, Zhang YC, *Kinetic roughening phenomena, stochastic growth directed polymers and all that — aspects of multidisciplinary statistical-mechanics*, Phys. Rep. **254**, 215-415 (1995)
- [21] Kurchan J, *Fluctuation theorem for stochastic dynamics*, J. Phys. A **31**, 3719-3729 (1998) [[cond-mat/9709304](#)]
- [22] Kolomeisky AB, Schütz GM, Kolomeisky EB, Straley JP, *Phase diagram of one-dimensional driven lattice gases with open boundaries*, J. Phys. A **31** 6911-6919 (1998) [[www.pa.uky.edu/straley/asep.html](#) ]
- [23] Lebowitz JL, Spohn H, *A Gallavotti-Cohen-Type Symmetry in the Large Deviation Functional for Stochastic Dynamics*, J. Stat. Phys. **95**, 333-365 (1999) [[cond-mat/9811220](#)]
- [24] Lee H, Levitov LS, Yakovets A Yu, *Universal statistics of transport in disordered conductors*, Phys. Rev. B **51**, 4079-4083 (1995)
- [25] Lepri S, Livi R, Politi A, *Thermal conduction in classical low-dimensional lattices*, Phys. Rep. **377**, 1-80 [[cond-mat/0112193](#)]
- [26] Popkov V, Schütz GM, *Steady-state selection in driven diffusive systems with open boundaries*, Europhys. Lett, **48**, 257-263 (1999) [[cond-mat/0002242](#)]
- [27] Ruelle D, *Smooth dynamics and new theoretical ideas in nonequilibrium statistical mechanics*, J. Stat. Phys. **95**, 393-468 (1999)
- [28] Sasa S, Tasaki H, *Steady state thermodynamics for heat conduction* [[cond-mat/0108365](#)]
- [29] Spohn H, *Long range correlations for stochastic lattice gases in a non-equilibrium steady state*, J. Phys. A **16** 4275 (1983)
- [30] van Kampen N G, *Stochastic processes in physics and chemistry*, North-Holland (1992)