Nancy-Université
Université Henri Poincaré

AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

➢ Contact SCD Nancy 1 : theses.sciences@scd.uhp-nancy.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

Faculté des Sciences et Technologies
École Doctorale Energie Mécanique et Matériaux (EMMA)
Formation Doctorale Physique et Chimie de la Matière et des Matériaux (PCMM)

Thèse

présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy I

en Physique

par **Xavier DURANG**

Vieillissement dans les processus réaction-diffusion sans bilan détaillé

Soutenance publique le 28 septembre 2011

Membres du Jury :

Président :	Thierry DAUXOIS	Directeur de Recherche, CNRS, ENS, Lyon
Examinateurs :	Satya MAJUMDAR	Directeur de Recherche, CNRS, LPTMS, Orsay
	Claude GODRÈCHE	Institut de physique théorique, Saclay
	Malte HENKEL	Professeur, IJL, UHP, Nancy I (Directeur)
	Jean-Yves FORTIN	Chargé de Recherche CNRS, IJL, UHP, Nancy I (Codirecteur)
Rapporteurs :	Martin EVANS	Professor of Statistical Physics, University of Edinburgh, UK
	Leticia CUGLIANDOLO	Professeur, LPTHE, Université Paris VI

Institut Jean Lamour
Faculté des Sciences & Techniques - 54500 Vandœuvre-lès-Nancy

Remerciements

D’une certaine manière, cette thèse a débuté, non pas en octobre 2008, mais un an auparavant lorsque je décidai de mettre temporairement de coté mon travail de professeur. Devenir docteur en physique, alors que j’avais choisi une voie toute autre, a ainsi été mon objectif ces dernières années. Le retour sur les bancs de la faculté en simple étudiant n’a pas été sans difficulté et je me suis rendu compte bien vite du travail que j’aurai à fournir pour me remettre à niveau. Finalement, ce pari est réussi mais non sans l’aide et le soutien de bien des personnes.

En premier lieu, je me dois de remercier Malte Henkel, mon directeur de thèse, qui a su croire en moi et me guider, dans un premier temps au cours de mon stage de master, puis tout au long de ma thèse. Sa patience et sa rigueur resteront pour moi un exemple à suivre. La seconde personne à laquelle je dois énormément est mon codirecteur de thèse, Jean-Yves Fortin, avec qui j’ai pu apprendre de si nombreuses techniques. Les mots “finesse” et “précision” sont ceux qui selon moi le qualifie le mieux.
Je remercie aussi l’ensemble du groupe de Physique Statistique pour les échanges que j’ai eus avec eux tout du long. Puissé-je un jour comprendre comme vous la physique statistique ...

Durant ces trois années, j’ai pu cotoyé plusieurs personnes, doctorants entre autres, à qui j’exprime toute ma gratitude : Jean-Charles Walter, Mario Collura, Sophie Mantelli, Nelson Bolivar. Vous resterez dans mon estime et avez toute mon amitié.
Je n’oublie pas non plus les voyages que j’ai pu faire, en particulier grâce au collège franco-allemand : ces quelques temps passés à Leipzig ont été bénéfiques en tout point.

J’exprime toute ma gratitude à ma famille, ma soeur Virginie, mon beau-frère Guillaume et la petite Noa qui a pu apporter de la joie dans certaines périodes tendues.

Enfin et surtout, je remercie mes chers parents dont le soutien et le dévouement sans faille force mon admiration ; je leur dédie cette thèse.

Table des matières

1 Vieillissement physique **11**
- 1.1 Phénoménologie . . . 11
  - 1.1.1 Cinétique de domaines . . . 14
  - 1.1.2 Dynamique critique . . . 17
- 1.2 Fonction de réponse et de corrélation . . . 18
- 1.3 Brisure du théorème fluctuation dissipation . . . 21
  - 1.3.1 Définition . . . 22
  - 1.3.2 Temps de passage vers le régime de vieillissement . . . 24
  - 1.3.3 Applicabilité du RFD . . . 27
  - 1.3.4 Cas du processus de contact . . . 27

2 Processus de contact bosonique **31**
- 2.1 Le modèle . . . 33
- 2.2 Equations de mouvement . . . 33
- 2.3 Solution . . . 38
  - 2.3.1 Diagramme de phase . . . 38
  - 2.3.2 Exposants de vieillissement et fonctions d'échelle . . . 40
- 2.4 Invariance d'échelle locale . . . 41
  - 2.4.1 Background . . . 42
  - 2.4.2 Application au BCPL . . . 44
- 2.5 Temps de passage vers le régime de vieillissement . . . 47
- 2.6 Conclusions . . . 51

3 Processus coagulation-diffusion Quantités à un temps **55**
- 3.1 Relations avec d'autres modèles . . . 56
- 3.2 Réalisations expérimentales . . . 57
- 3.3 Probabilité à un intervalle . . . 61
  - 3.3.1 Equation de mouvement . . . 61
  - 3.3.2 Effet de la condition au bord : limite continue . . . 63
  - 3.3.3 Cas discret . . . 67
- 3.4 Probabilité à deux intervalles . . . 69
  - 3.4.1 Equations de mouvement . . . 69

3.4.2 Solution générique 70
3.4.3 Conditions de compatibilité 71
3.5 Solution générale de $E(x, y, z, t)$ 74
3.5.1 Cas où le système est initialement entièrement rempli de particules 77
3.5.2 Contributions de la distribution initiale à un intervalle 78
3.5.3 Contributions des distributions initiales à deux intervalles 82
3.5.4 Règle de somme et limite des longues distances 83
3.6 Fonction de corrélation à deux points 85
3.6.1 Définition 85
3.6.2 Décomposition : formalisme général 86
3.6.3 Exemple 89
3.6.4 Extensions 90
3.7 Conclusions 92

4 Processus coagulation diffusion
Quantités à deux temps **93**
4.1 Généralisation de la méthode des intervalles vides 93
4.1.1 Définitions 94
4.1.2 Equation de mouvement 97
4.1.3 Equation de mouvement dans le formalisme Hamiltonien/Liouvillien 99
4.1.4 Relations de symétrie aux temps égaux 101
4.2 Symétries de F et G 102
4.2.1 Symétries entre intervalle de longueur positive et négative 103
4.2.2 Symétries entre distances positives et négatives 104
4.3 Expression générale de $F(x, z; t, s)$ 106
4.4 Fonction de corrélation à deux temps 107
4.4.1 Expression générale 107
4.4.2 Limite asymptotique 108
4.5 Fonction de réponse à deux temps 109
4.5.1 Expression générale 109
4.5.2 Limite asymptotique 109
4.6 Vérification numérique 109
4.6.1 Fonction de corrélation 110
4.6.2 Fonction de réponse 112
4.7 Fonctions d'autocorrélation et d'autoréponse 113
4.8 Rapport fluctuation-dissipation hors équilibre 115
4.9 Conclusions 121

Appendices **129**
A Remarques sur le comportement d'échelle des réponses intégrées 129
A.1 Définition des diverses réponses intégrées 129
A.2 Valeurs des exposants hors équilibre 133
B Analyse des corrélateurs 137

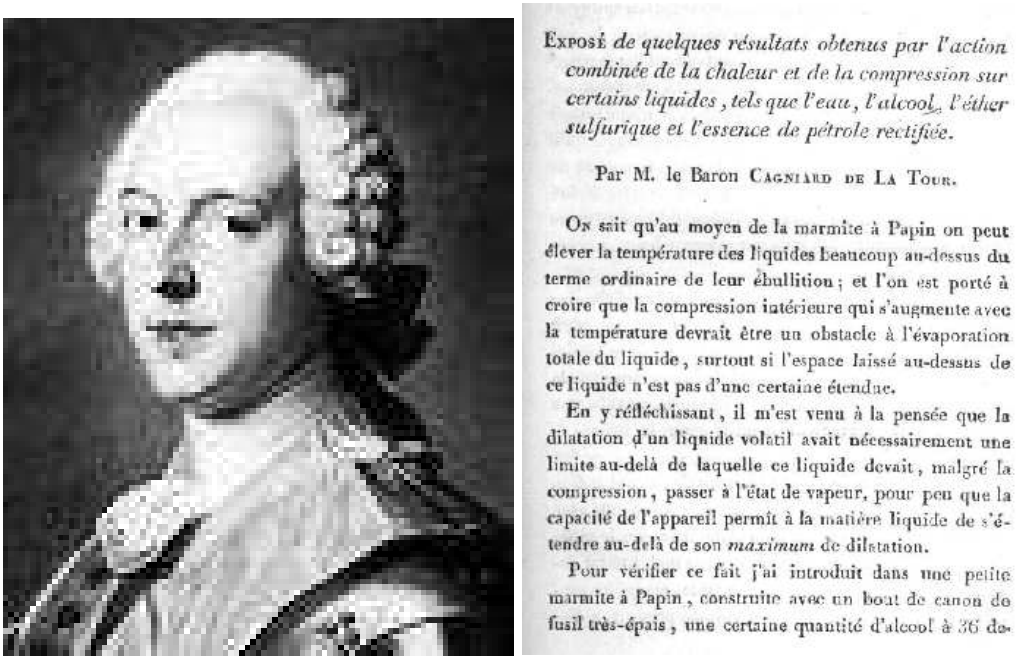
C Modèle sphérique critique 140
D Quelques intégrales 142

Introduction

En physique statistique, l'un des objets d'études est le phénomène de transition de phase et qui dit transition de phase implique, dans certains cas, l'existence d'un point critique. Dans un élan de culture historique, rappelons que ce "point critique" est attribué à Thomas Andrews. En effet, Andrews a étudié les propriétés du point critique du dioxyde de carbone CO_2 qui a donné lieu à une publication en 1869 [Andr69]. Toutefois, sans mettre en doute la paternité de l'expression "point critique", il existe un travail antérieur d'une quarantaine d'années de Charles Cagniard de la Tour qui relate la première observation de l'opacité critique dans des mélanges d'alcool et d'eau [Cagn22]. Pour une revue historique de la genèse des phénomènes critiques, voir [Brus83] ou bien la note brève [Berc09]. Dans la figure 1, panneau de gauche, est donné un portrait de ce savant. Dans le panneau de droite est présenté la première page de l'un de ces articles de 1822. C'est dans ces deux articles qu'il évoque un protocole permettant d'amener des composés dans un régime critique et qu'il y décrit aussi le phénomène d'opalescence critique [Cagn22].

Ces transitions de phase se rencontrent dans une multitude de systèmes différents : l'opalescence dans un liquide binaire, paires d'électrons appariés dans un supraconducteur à basse température, transition ferromagnétique paramagnétique, et bien d'autres. Bien que tout ceci semble disparate, ces phénomènes ont en fait beaucoup de choses en commun. En effet, leur comportement collectif macroscopique dépend drastiquement de la température. Cette dépendance envers la température peut se comprendre à partir du critère de minimisation de l'énergie libre : à basse température, l'énergie interne domine et donc le système va avoir tendance à s'ordonner ; par contre à haute température, c'est le terme entropique qui l'emporte, favorisant l'apparition du désordre. Entre ces deux comportements extrèmes, se situe un état qui est en quelque sorte un compromis. Il s'opère à une température dite "critique" en dessous de laquelle le système va présenter un ordre macroscopique. Dès lors se comprend le terme de "transition de phase", c'est-à-dire le passage de la phase ordonnée vers la phase désordonnée lorsque la température traverse le point critique. Précisément au point critique, la longueur de corrélation ξ du système devient tellement grande par rapport aux autres longueurs caractérisant le système que ces dernières jouent un rôle négligeable. On obtient alors un régime de longueur $a \ll |\mathbf{r}| \ll \xi$ où le système présente une invariance d'échelle.

Nous allons nous intéresser plus spécifiquement à des transitions de phase où la longueur de corrélation au point critique est infinie. Ainsi, toutes les échelles de longueur vont importer, même les plus petites fluctuations microscopiques vont se sentir dans tout



Exposé de quelques résultats obtenus par l'action combinée de la chaleur et de la compression sur certains liquides, tels que l'eau, l'alcool, l'éther sulfurique et l'essence de pétrole rectifiée.

Par M. le Baron Cagniard de La Tour.

On sait qu'au moyen de la marmite à Papin on peut élever la température des liquides beaucoup au-dessus du terme ordinaire de leur ébullition; et l'on est porté à croire que la compression intérieure qui s'augmente avec la température devrait être un obstacle à l'évaporation totale du liquide, surtout si l'espace laissé au-dessus de ce liquide n'est pas d'une certaine étendue.

En y réfléchissant, il m'est venu à la pensée que la dilatation d'un liquide volatil avait nécessairement une limite au-delà de laquelle ce liquide devait, malgré la compression, passer à l'état de vapeur, pour peu que la capacité de l'appareil permît à la matière liquide de s'étendre au-delà de son *maximum* de dilatation.

Pour vérifier ce fait j'ai introduit dans une petite marmite à Papin, construite avec un bout de canon de fusil très-épais, une certaine quantité d'alcool à 36 de-

FIGURE 1 – *A gauche, le portrait de Cagniard de la Tour. A droite, la première page issue de l'un de ces articles de 1822 [Cagn22] où il donne un protocole pour reproduire un comportement critique. Ces travaux sont antérieurs à ceux d'Andrews [Andr69].*

le système. Le comportement de ce dernier va alors présenter une invariance d'échelle. Cette propriété, toujours vérifiée dans le cas statique au point critique, demeure valide pour certains systèmes ayant une dynamique hors équilibre au point critique ou dans la phase ordonnée. Un exemple paradigmatique est un ferromagnétique, en phase haute température, brutalement trempé au point critique. Le système présente une invariance d'échelle dynamique. Si l'on étudie les propriétés dynamiques des systèmes physiques au voisinage d'un point critique, on peut constater que l'invariance d'échelle purement spatiale devient spatio-temporelle. Mieux, dans certaines situations, une invariance d'échelle dynamique peut même être observé très loin des points critiques d'équilibre ; par exemple, lorsqu'on trempe un aimant d'une température $T_{initiale} \gg T_c$ beaucoup plus grande que sa température critique T_c vers une température $T < T_c$. Phénoménologiquement, l'invariance d'échelle dynamique se traduit par une dynamique très lente des observables physiques, sans stimulation extérieure. Ainsi, on parlera de "vieillissement" de l'aimant.

C'est dans ce contexte que nous allons nous intéresser au vieillissement et pour répondre à la question Pourquoi, après un certain temps, les objets ont-ils l'air "vieux" ?
D'emblée, nous pourrions répondre que la seconde loi de la thermodynamique justifie le vieillissement, mais cela ne permet pas de comprendre les processus sous-jacents responsables de ce dernier. On distingue typiquement deux types de vieillissement : le vieillissement physique, avec sa dynamique microscopique réversible et le vieillissement chimique

avec sa dynamique irréversible. Nous allons nous restreindre déjà aux modèles exactement résolubles, dans l'espoir de mieux comprendre ces processus. Ainsi se profile le cadre d'étude : étudier une quantité caractéristique du vieillissement dans des modèles que l'on peut résoudre analytiquement et qui peuvent trouver une réalisation expérimentale.

Nous considèrerons dans cette thèse les systèmes qui suivent une dynamique de type **réaction-diffusion**. Plus précisément, nous allons nous intéresser aux systèmes ne satisfaisant pas le bilan détaillé. En effet, alors que le rapport fluctuation-dissipation est bien connu pour les systèmes avec bilan détaillé, il n'en est rien pour ces systèmes. Nous allons dans le premier chapitre donner les éléments de la phénoménologie du vieillissement, rappeler les quantités d'intérêt pour notre étude, les formes d'échelle attendues mais aussi les différents rapports fluctuation-dissipation qui ont été, jusqu'alors, utilisés. Aussi pour comprendre davantage le lien en réponse et corrélation, nous nous intéressons à des modèles exactement résolubles : le processus bosonique de contact qui fait l'objet du second chapitre et le processus de coagulation-diffusion à qui nous avons consacré les chapitres trois et quatre ; en effet, dans ce dernier nous avons dû développer une nouvelle méthode de résolution pour avoir accès aux quantités à deux temps.

Nous avons, dans ces deux modèles, établi les formes d'échelle des observables à deux temps et proposé un rapport fluctuation-dissipation. Une discussion sur cette proposition de RFD est donnée dans la fin du chapitre quatre. Elle permet de regrouper un grand nombre de modèles sous une même formulation. Cependant, l'interprétation physique exacte de ce rapport dans tous les cas reste à comprendre.

Ces études ont donné lieu à trois publications que nous listons ci-dessous :

1. X. Durang et M. Henkel
   Ageing in bosonic particle-reaction models with long-range transport
   J. Phys. A : Math. Theor. **42**, 395004 (2009)
   [`http://fr.arxiv.org/abs/0905.4876`]
2. X. Durang, J.-Y. Fortin, D. del Biondo, M. Henkel et J. Richert
   Exact correlations of the one-dimensional diffusion-coagulation process by the empty-interval method
   Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment (2010) P04002
   [`http://fr.arxiv.org/abs/1001.3526`]
3. X. Durang, J.-Y. Fortin, M. Henkel
   Exact two-time response and correlation function in the one-dimensional coagulation-diffusion process by the empty-interval method
   Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment (2011) P02030

Chapitre 1

Vieillissement physique

Rappelons déjà un des postulats de la physique statistique : les moyennes dans l'espace des configurations peuvent être remplacées par une moyenne temporelle sur un temps suffisamment long pour considérer que le système a exploré un grand nombre de fois l'ensemble des états de l'espace des configurations : il est connu sous le nom d'hypothèse ergodique. Imaginons maintenant que l'on change brusquement les variables de l'état thermodynamique d'un système. Dans ce cas, le phénomène de vieillissement apparaît lorsque ce même système est gouverné par les effects des fluctuations qui l'empêche de retourner vers son état stationnaire. Pour introduire et mieux percevoir ce qu'est ce phénomène, nous allons nous appuyer dans un premier temps sur les verres de polymères et formuler ensuite les comportements d'échelle attendus.

1.1 Phénoménologie

Les effets du vieillissement peuvent apparaître dans des sytèmes hors de l'équilibre qui présentent plus d'un état stationnaire, ce qui l'empêche de relaxer exponentiellement vers celui-ci. Ceci a été observé dans un grand nombre de systèmes, un des exemples les plus génériques étant un matériau de type verre, trempé de haute température à basse température en dessous de "la température de transition vitreuse" T_g.

Dans la figure 1.1, nous montrons la réponse mécanique d'un PVC, trempé de l'état liquide dans son état de type verre, à une contrainte. Due à cette trempe, le système est hors de l'équilibre et nous observons la relaxation hors équilibre de ce dernier.
Explicitons davantage cette figure : après un temps d'attente t_e, une faible contrainte est appliquée au système et la réponse linéaire est mesurée au travers de la complaisance comme une fonction du temps t à partir duquel la contrainte a été appliquée. Cette réponse évolue lentement, manifestement non exponentiellement. De plus, elle dépend du temps d'attente t_e et du temps d'observation t ; dit autrement, elle brise l'invariance par translation temporelle. Enfin, toutes les courbes obtenues pour différentes valeurs de t_e peuvent être superposées sur une courbe maîtresse par le biais d'une homothétie représentée sur

la figure par la flèche. C'est la signature d'un comportement d'échelle dynamique.

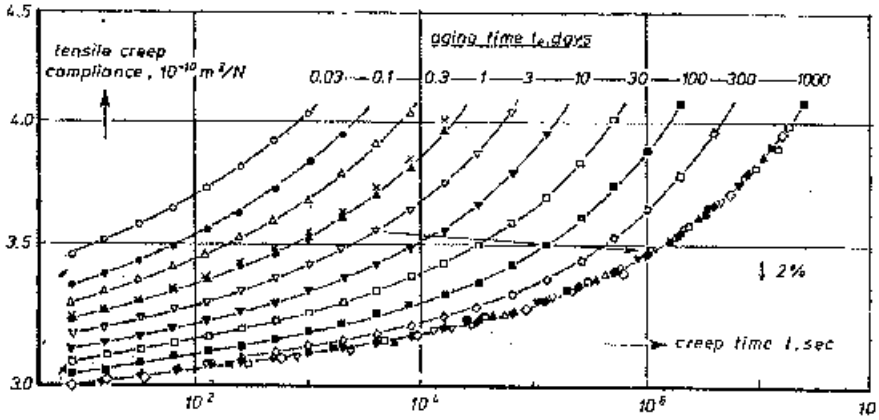


FIGURE 1.1 – *Mesure de la complaisance pour un PVC trempé de* 90°*C à* 20°*C. La flèche indique la translation horizontale nécessaire pour superposer chaque courbe. Tiré de [Stru78].*

Un autre exemple de systèmes vieillissants sont les gels colloïdaux [Cipe00]. Dans la figure 1.2 est représenté le facteur de structure de ce gel après que l'on a amené ce système hors de l'équilibre. Comme pour l'expérience de Struik, on remarque que ce facteur de structure dépend à la fois du temps d'attente t_w et du temps d'observation t et qu'il manifeste une brisure de l'invariance par translation temporelle.

On remarque aussi dans les figures 1.1 et 1.2 que lorsque le temps de séparation $t - s$ est assez faible, les courbes ont tendance à se superposer. Ceci indique qu'un régime de quasi-équilibre existe avant le régime de vieillissement.

Nous avons alors les trois points-clés définissant le vieillissement physique :

1. dynamique lente (relaxation non exponentielle)
2. brisure de l'invariance par translation temporelle
3. dynamique d'échelle

Notons qu'il faut absolument la présence simultanée de ces trois conditions pour parler de vieillissement.

Un autre aspect important du vieillissement physique est sa thermoréversibilité. En effet, avec le PVC de l'expérience de Struik présentée précédemment, après avoir mesuré son vieillissement sur plus de mille jours, il a été réchauffé pendant vingt minutes à 90°C c'est-à-dire bien au-dessus de sa température de transition vitreuse T_g. Ensuite, il a été une nouvelle fois trempé ensuite à 20°C, puis son vieillissement a été mesuré après un temps d'attente t_e d'un jour. Les résultats sont donnés par les croix sur la figure 1.1. A la vue des résultats, on peut de suite dire que cette procédure de réchauffage a effacé toute mémoire que le système aurait pu avoir de l'expérience précédente. Cette thermoréversibilité est bien évidemment absente de tout système biologique ou chimique et pourrait servir de

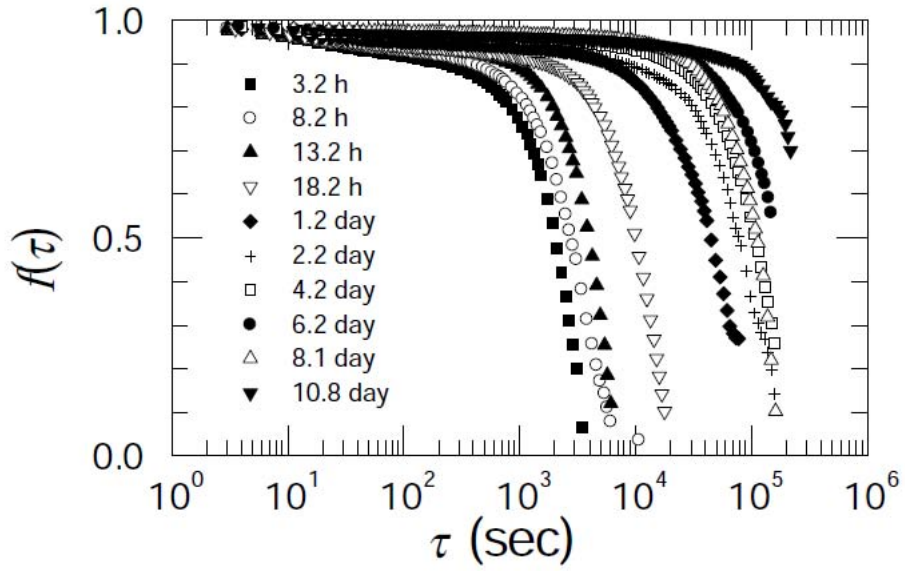


FIGURE 1.2 – *Facteur de structure d'un gel colloïdal en fonction du temps de séparation $\tau = t - s$. Il a été mesuré après que le système a été mis hors équilibre suivant un protocole chimique [Cipe00].*

critère de distinction entre le vieillissement physique et chimique. Ainsi le phénonème de vieillissement physique présente des caractéristiques reproductibles dont la plus inattendue est sans doute la brisure de l'invariance par translation temporelle.

Enfin, ce phénomène décrit plus haut semble universel. En effet, la même expérience a été conduite pour d'autres matériaux. Comme l'atteste la figure 1.3, les courbes maîtresse de réponse à la contrainte appliquée pour différents matériaux se superposent. La courbe de tendance en trait plein a pour équation

$$J(t) = J_0 \exp(t/t_0)^{1/3}. \tag{1.1}$$

Ainsi, que l'on parle de plomb ou de PVC, le vieillissement mécanique peut être décrit à l'aide d'une loi d'échelle commune, ce qui conduit à penser que les formes de ces fonctions d'échelle ne peuvent pas dépendre des détails des matériaux mais seulement de quelques paramètres généraux.

De la même façon, dans l'expérience menée par Cipelletti [Cipe00], le facteur de structure a été représenté dans la figure 1.4 en fontion d'une variable d'échelle de la forme τ/τ_f. Il est alors notable que les courbes se superposent.

Il apparaît que ce phénomène de vieillissement est observé dans des modèles bien plus simples que des verres ou des gels et c'est ce que nous nous proposons de développer dans les deux sous-sections suivantes après avoir défini les grandeurs qui nous permettront de caractériser ce vieillissement.

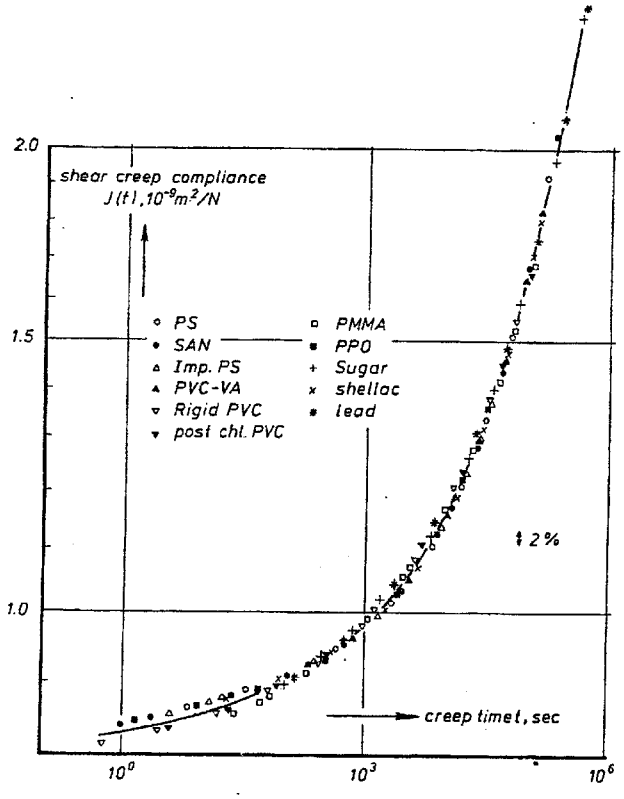


FIGURE 1.3 – *Courbe maîtresse pour différents matériaux. La courbe en trait plein représente la fonction* $J(t) = J_0 exp(t/t_0)^{1/3}$ *avec* J_0 *et* t_0 *des constantes. Image prise de [Stru78]*

1.1.1 Cinétique de domaines

Jusque-là, nous pourrions croire que le vieillissement n'intervient que dans les verres. Pourtant, il est possible de l'observer aussi dans des aimants sans désordre ni frustration. Considérons, pour ce, le modèle d'Ising préparé initiallement dans un état désordonné (température initiale infinie) puis trempé en dessous de sa température critique. La figure 1.5 présente le comportement du système au travers de l'énergie libre avant et après la trempe. Initialement, il n'y a qu'un seul état d'équilibre et le système relaxe dans cet état ; c'est un minimum global de l'énergie libre. Juste après la trempe, l'état du système n'a pas évolué mais est devenu un maximum local de l'énergie libre. Ainsi, il relaxera vers l'un des états d'équilibre. Sans champ magnétique extérieur, les états d'équilibre sont équivalents. Cependant chaque spin est sensible au champ magnétique créé par ses voisins ce qui favorisera une relaxation dans l'un des états d'équilibre. Les spins vont donc s'ordonner localement et le système se séparera en domaines ordonnés. A l'intérieur de ceux-ci, l'état du système n'évoluera pas mais la paroi de domaines va lentement bouger de telle façon que sa taille typique $L(t)$ s'accroît en fonction du temps.
Dit autrement, avant la trempe, le système reste dans un unique mininum global de l'én-

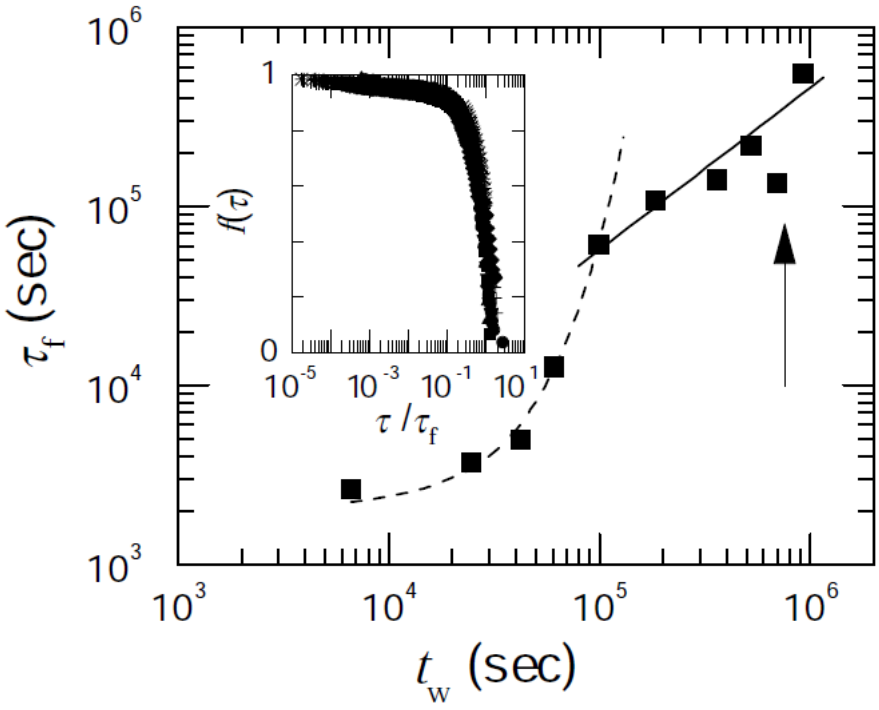


FIGURE 1.4 – *Dans l'insert,la fonction d'échelle du facteur de structure est tracée en fonction de la variable d'échelle τ/τ_f. La dépendance de cette variable τ_f est quant à elle représentée dans la figure principale en fonction du temps d'attente t_w. Tiré de [Cipe00].*

ergie libre, alors qu'après, il se crée deux minima locaux qui reflètent la symétrie "haut/bas" du modèle. Ce sont ces deux minima équivalents qui empêche le système de relaxer exponentiellement.

Typiquement, la croissance se fait selon la loi d'échelle dynamique [Bray94]

$$L(t) \sim t^{1/z}. \tag{1.2}$$

Une illustration est donnée par la figure 1.6. Dans cette expression, z est l'exposant dynamique de la trempe en phase basse-température. A ce moment, il existe dans le système deux types de dynamique

– la dynamique intra-domaine telle qu'à l'intérieur d'un domaine d'aimantation "haut" par exemple, les spins sont pratiquement tous orientés vers le haut sauf quelques-uns retournés par les fluctuations thermiques. Ainsi, chaque spin à l'intérieur d'un domaine voit d'autres spins qui ont la même orientation. Tant qu'il n'y a pas de rencontre avec un domaine d'aimantation opposée, les spins du domaine sont en équilibre local. Typiquement, le système est dans une échelle de temps telle que les processus rapides de relaxation ont déjà eu lieu et les processus de mouvement de parois vont seulement commencer.

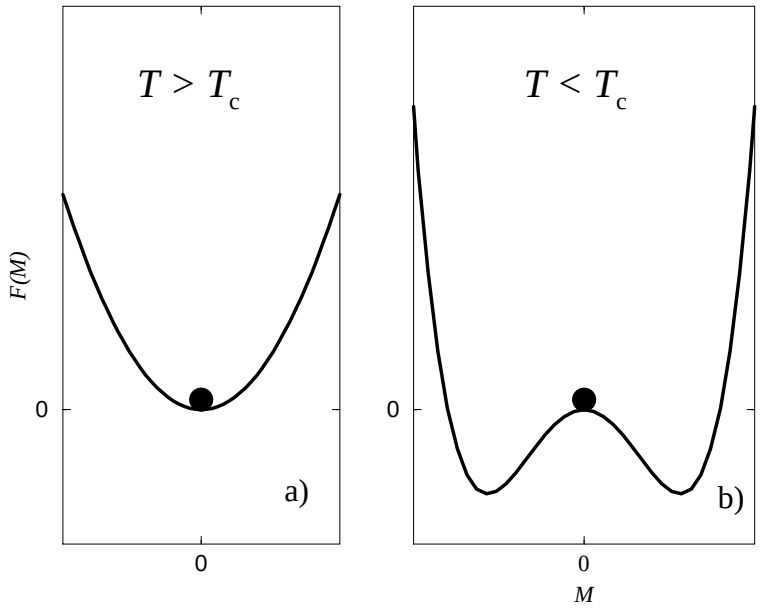


FIGURE 1.5 – *Energie libre schématique $F(M)$ d'un ferromagnétique (type Ising) lorsque (a) $T > T_c$ et (b) $T < T_c$. Le point indique l'état du système. Tiré de [Henk10].*

– la dynamique des parois de domaines. Ces dernières séparent sur de courtes distances devant $L(t)$, la taille typique d'un domaine, deux domaines d'orientation opposée. Il y a donc compétition quant à l'aimantation qui va en résulter. Si le système est de taille infinie, il ne rejoindra jamais l'équilibre et vieillira toujours. Pour les observables à deux temps, que nous détaillons dans la suite, le régime de vieillissement est tel que

$$\tau_{mic} \ll s \ , \ \tau_{mic} \ll t \ \text{ et } \ \tau_{mic} \ll t - s \tag{1.3}$$

où τ_{mic} est le temps moyen pour que les fluctuations thermiques retournent un spin. Ainsi la dynamique est avant tout une compétition de défauts topologiques (les parois de domaines).

Supposons que ce système puisse être décrit à l'aide d'un **paramètre d'ordre** ϕ et que nous souhaitons connaître sa fonction de corrélation $C(t,r) := \langle \phi(t,0)\phi(t,r)\rangle$. Pour évaluer cette quantité, nous pouvons utiliser une **équation de Langevin**. Nous nous plaçons ainsi dans une description à gros grains et le paramètre d'ordre peut être décrit à l'aide d'une fonctionnelle d'énergie libre de type **Ginzburg-Landau-Wilson**

$$\mathcal{H}[\phi] = \int \mathrm{d}^d\mathbf{r} \left[(\nabla\phi(\phi,t))^2 + V(\phi^2(\mathbf{r},t) - 1)^2\right] \tag{1.4}$$

où la caractéristique essentielle du potentiel $V = V(\phi^2(\mathbf{r},t) - 1)$ est de présenter une structure de double puits. Nous pouvons alors écrire l'équation de Langevin

$$\partial_t\phi = -D\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\phi} + \eta \tag{1.5}$$

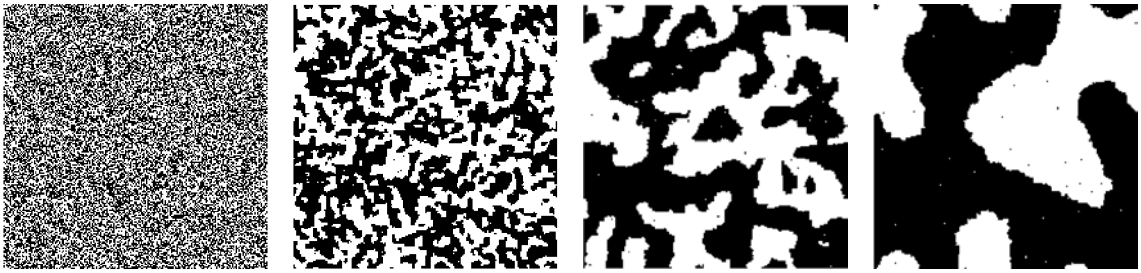


FIGURE 1.6 – *Clichés d'un modèle d'Ising en deux dimensions sur un réseau de taille* 200×200 *trempé à la température* $T_c/2$*. L'état initial, représenté à gauche, est désordonné. Les figures successives représentent l'état du système pour des temps écoulés depuis la trempe différents : de gauche à droite* $t = 0$*,* $t = 10$*,* 100 *et* 1000*. Des domaines ordonnés apparaissent et croissent. Tiré de [Walt09].*

où D est un coefficient cinétique et η est un bruit blanc de moyenne nulle et de variance

$$\langle \eta(t;\mathbf{r})\eta(t';\mathbf{r}')\rangle = 2T\delta(t-t')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{1.6}$$

Cette théorie phénoménologique de croissance de domaines conduit à l'existence d'une tension superficielle F, proportionnelle à la courbure K de la paroi $F = \sigma K$ [Bray94]. Cette force tend à minimiser la surface, et donc l'énergie libre, de la paroi de domaines. Cependant pour des temps longs, cette force est compensée par une force de frottement effective $-\eta v$ où v est la vitesse de paroi. Un calcul d'énergie [Alle79] permet de montrer que $\sigma = \eta$ et finalement, pour un ferromagnétique en deux dimensions, l'équation du mouvement se réduit à **l'équation d'Allen-Cahn** [Bray94] :

$$v = -K. \tag{1.7}$$

Ainsi, la cinétique de croissance de domaines **ne dépend pas** du potentiel du Ginzburg-Landau. En ce sens, c'est **l'équation centrale** de la cinétique de croissance des domaines à paramètre d'ordre non conservé. Elle permet aussi d'extraire l'exposant dynamique en phase ordonnée [Bray94]. En effet, la vitesse de la paroi s'estime par $v \sim dL/dt$ avec L la longueur du domaine. De plus, la courbure satisfait $K \sim 1/L$ en dimension $d = 2$. En utilisant alors l'équation d'Allen-Cahn, on trouve que $L(t) \sim t^{1/2}$ et donc l'exposant dynamique $z = 2$, pour une dynamique avec paramètre d'ordre non conservé. Ce petit calcul montre le caractère diffusif de la dynamique des parois de domaines ; il est toutefois possible de l'établir plus précisément [Rute95]. Il est même possible, en partant du comportement d'échelle dynamique, de confirmer cette valeur de z en tenant compte aussi de lois de conservations éventuelles [Huse86, Bray94, Rute95].

1.1.2 Dynamique critique

D'autres exemples de systèmes vieillissants sont les systèmes trempés à leur point critique $T = T_c$. Dans ce cas, le vieillissement est différent d'une part à cause de l'im-

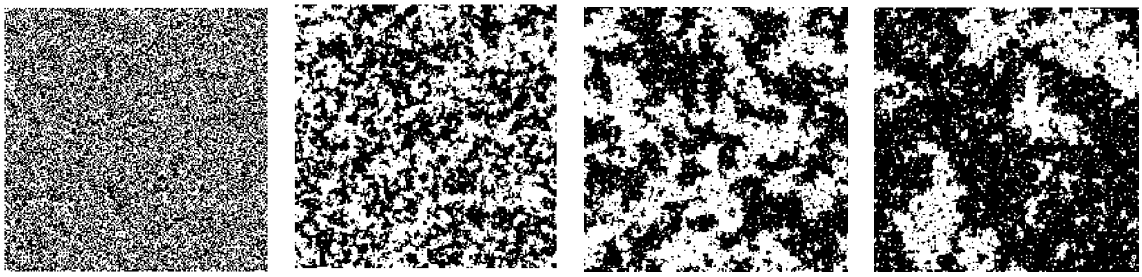


FIGURE 1.7 – *Clichés d'un modèle d'Ising en deux dimensions sur un réseau de taille* 200×200 *trempé à la température critique. L'état initial est désordonné et les figures sont prises à des temps différents : de gauche à droite* $t = 0$, $t = 10$, 100 *et* 1000*. On remarque la formation de domaines autosimilaires. Tiré de [Walt09].*

portance des fluctuations thermiques [Kada75], ensuite des intéractions [Zinn96]. La première différence est qu'il n'y a pas de structure en amas ou en domaines comme précédemment : en effet, il y a dégénérescence des états d'équilibre microscopiques. Cependant, il est connu qu'il existe une longueur caractéristique divergente : la longueur de corrélation dont le comportement temporel est

$$\xi(t) = t^{1/z} \tag{1.8}$$

où z est l'exposant dynamique critique. Ainsi, une région de taille L apparaîtra critique au bout d'un temps fini L^z. Ce vieillissement critique est dû à la présence des fluctuations thermiques à toutes échelles. C'est donc une dynamique interspins qui induit une telle manifestation macroscopique. Pourtant même si le mécanisme est différent de celui du mouvement des parois à température nulle, les deux vieillissements (à température nulle ou au point critique) présentent une invariance d'échelle dynamique. En effet, dans la figure 1.7, il est possible d'observer l'autosimilarité du comportement critique : les deux photos du système ont été prises à quatre âges différents mais une simple transformation d'échelle permet de passer de l'un à l'autre.

1.2 Fonction de réponse et de corrélation

Pour étudier le vieillissement, il nous faut introduire des grandeurs à deux temps. En effet, lorsque le temps de relaxation du système est plus grand que le temps d'observation, le système ne peut plus être considéré comme étant à l'équilibre. Supposons que le système soit dans un état stationnaire au temps $t = 0$, subisse une trempe au temps s, appelé temps d'attente, et enfin soit étudié au temps t, appelé temps d'observation. Pour une grandeur ϕ, on définit la fonction de corrélation connexe $C(t, s; \mathbf{r})$ comme

$$C(t, s; \mathbf{r}) = \langle \phi(t; \mathbf{r}) \phi(s; \mathbf{0}) \rangle - \langle \phi(t; \mathbf{r}) \rangle \langle \phi(s; \mathbf{0}) \rangle \tag{1.9}$$

où les crochets signifient que l'on moyenne sur un grand nombre d'histoire.
De manière équivalente, on peut définir la fonction de réponse pour le paramètre d'ordre

ϕ. Il faut, pour cela, introduire le champ conjugué h, il vient alors

$$R(t,s;\mathbf{r}) = \left.\frac{\delta\phi(t;\mathbf{r})}{\delta h(s;\mathbf{0})}\right|_{h=0} \tag{1.10}$$

On définit aussi plus généralement l'autocorrélation $C(t,s) = C(t,s;\mathbf{0})$ et l'autoréponse $R(t,s) = R(t,s;\mathbf{0})$ que l'on peut aussi exprimer comme

$$\langle\phi(t,s)\rangle = \int_s^t \mathrm{d}u R(t,u)h(u) + O(h^2) \tag{1.11}$$

La causalité impose la condition suivante

$$R(t,s) = 0 \text{ pour } t < s \tag{1.12}$$

Ce sont ces deux grandeurs, la fonction de réponse et la fonction de corrélation, qui vont nous permettre d'étudier et de caractériser le vieillissement.

Par définition, un système est en régime de vieillissement lorsqu'au moins l'une des deux observables $C(t,s)$ ou $R(t,s)$ ne dépend pas uniquement du temps de séparation $t-s$, c'est-à-dire lorsque **l'invariance par translation temporelle** est rompue. Nous supposerons l'invariance par translation spatiale vérifiée et que l'évolution est invariante par dilatation globale $\mathbf{r} \to k\mathbf{r}$ et $t \to k^z t$. En conséquence, les fonctions de réponse et de corrélation prennent la forme [Godr02, Cugl02]

$$C(t,s;\mathbf{r}) = s^{-b} f_C(t/s;\mathbf{r}^z/s) \text{ et } R(t,s;\mathbf{r}) = s^{-1-a} f_R(t/s;\mathbf{r}^z/s) \tag{1.13}$$

où f_C et f_R sont des fonctions d'échelle universelles et a, b les deux exposants de vieillissement. En pratique, nous parlerons davantage de l'autoréponse et de l'autocorrélation, c'est-à-dire que nous laisserons de coté toute dépendance spatiale en prenant $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ dans (1.13). Les deux observables à deux temps s'écrivent alors

$$C(t,s) = \langle\phi(t)\phi(s)\rangle - \langle\phi(t)\rangle\langle\phi(s)\rangle = s^{-b} f_C(t/s) \tag{1.14}$$

$$R(t,s) = \left.\frac{\delta\langle\phi(t)\rangle}{\delta h(s)}\right|_{h=0} = s^{-1-a} f_R(t/s) \tag{1.15}$$

où les fonctions d'échelle se comportent asymptotiquement comme

$$f_{C,R}(y) \sim y^{-\lambda_{C,R}/z} \text{ avec } y := \frac{t}{s} \to \infty. \tag{1.16}$$

Ainsi les exposants $a, b, z, \lambda_R, \lambda_C$ caractérisent le vieillissement hors équilibre.

Dans la phase ordonnée

On trouve généralement $b = 0$ dans tous les modèles [Godr02], cette valeur vient du fait qu'empiriquement la fonction d'autocorrélation obéit à la forme d'échelle $C(t,s) = f_C(t/s)$. Par contre, la valeur de l'exposant a nécessite une discussion approfondie que nous présenterons dans l'annexe A. Il se revèle essentiel de bien distinguer deux classes de système vieillissant, selon le comportement du corrélateur à l'équilibre [Henk03a, Henk04b] :

1. Si les corrélations sont à longue portée $C_{eq}(r) \sim r^{-(d-2+\eta)}$, avec un exposant η, le modèle est dit de **classe L**.
2. Si par contre il existe une longueur de corrélation ξ finie telle que $C_{eq}(r) \sim \exp(-r/\xi)$, le modèle est dit de **classe S**.

Avec ceci, l'exposant a prend les valeurs [Henk03a, Henk04b]

$$a = 1/z \quad ; \text{ pour la classe S} \tag{1.17}$$

$$a = \frac{d-2+\eta}{z} \quad ; \text{ pour la classe L} \tag{1.18}$$

Nous renvoyons le lecteur à l'annexe A pour des exemples spécifiques.

D'autre part, l'inégalité de Yeung-Rao-Desai [Yeun96]

$$\lambda_C \geq \frac{d}{2} \tag{1.19}$$

permet entre autres un contrôle *a posteriori* des estimations numériques d'exposants. De plus, on peut démontrer que pour des conditions initiales décorrélées, on a l'égalité $\lambda_C = \lambda_R$ entre les exposants d'autocorrélation et d'autoréponse [Bray94, Pico04]. Cette inégalité peut servir comme contrôle *a posteriori* des estimations numériques, voir p. ex. [Henk08] pour un exemple dans le modèle d'Ising désordonné. Nous mentionnons aussi que les resultats analytiques dans le cadre du modèle de Cardy-Ostlund ne semblent pas respecter (1.19) [Sche03]. En revanche, la relation (1.19) est modifiée dans le cas des corrélations initiales de longue portée [Yeun96].

Dans la dynamique critique

Encore une fois, nous ne considérons que le cas des corrélations initiales décorrélées. Les résultats suivants sur les valeurs des exposants du vieillissement sont généralement admises [Jans92, Cugl02, Godr02, Cala05, Henk10] : (i) les deux exposants $\lambda_R = \lambda_C$ sont égaux ; (ii) pour les systèmes magnétiques, on a

$$a = b = \frac{d-2+\eta}{z}. \tag{1.20}$$

Ces relations sont motivés par le fait que le rapport fluctuation-dissipation, que nous définissons ci-dessous on p. 22, possède une limite d'échelle bien définie (d'où $a = b$) et qu'en plus une valeur limite finie si $t/s \to \infty$ (d'où $\lambda_C = \lambda_R$). La valeur de $a = b$ provient d'une comparaison avec les corrélateurs d'équilibre. Ici, l'inégalité de Yeung-Rao-Desai s'écrit :

$$\lambda_C \geq d - 2 + \eta. \tag{1.21}$$

Pour autant ce genre de comportement d'échelle n'est pas limité aux systèmes magnétiques ; les systèmes de type **réaction-diffusion** peuvent aussi présenter un comportement

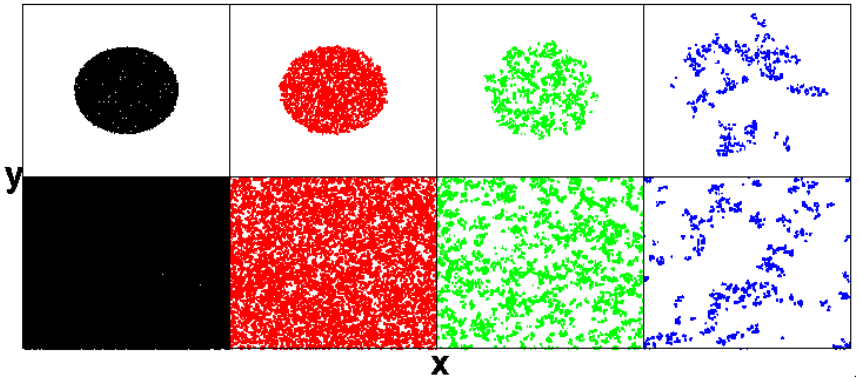


FIGURE 1.8 – *Clichés de la dissolution d'un amas dans un processus critique de contact pour deux conditions initiales différentes. Tiré de [Rama04].*

critique dynamique. A titre d'exemple, nous montrons dans la figure 1.8 des clichés pris à différents temps d'un processus de contact fermionique à deux dimensions.

Ce processus est défini ici sur un réseau bidimensionnel avec la contrainte d'avoir au maximum une particule par site. Chaque particule peut se diffuser sur un site voisin et mais aussi subir un processus d'annihilation. Enfin, il existe un processus de création de particules. Si le taux d'annihilation de particules est suffisamment fort par rapport au taux de création, la densité de particules va tendre exponentiellement vers zéro pour des temps $t \gg 1$. Par contre, si le taux de création est le plus fort, la densité de particules va tendre vers une valeur non nulle à $t \gg 1$. Entre ces deux régimes se situe le point critique, lorsque la densité de particules va s'annuler aux temps longs $t \gg 1$, non plus exponentiellement, mais algébriquement. L'illustration donnée par la figure 1.8 montre comment les amas de particules disparaissent avec le temps.

1.3 Brisure du théorème fluctuation dissipation

Dans cette section, nous allons discuter les relations entre corrélateurs et réponses pour les systèmes loin de l'équilibre. Afin de fournir un point de départ, nous rappèlerons d'abord que pour un système physique à l'équilibre à la température T, le célèbre théorème fluctuation-dissipation de Kubo relie les corrélateurs $C(t,s) = C(t-s)$ et réponses $R(t,s) = R(t-s)$ comme suit [Huan87, Thom88, Pari88, Kubo92, Cugl94]

$$\begin{aligned} R(t) &= -\frac{1}{k_B T}\partial_t C(t) \text{ pour } t > 0 \\ R(t) &= 0 \text{ pour } t < 0 \end{aligned} \tag{1.22}$$

Le nom du TFD vient du fait que le corrélateur $C(t-s)$ est une mesure des fluctuations entre deux instants temporels s et t, tandis que la réponse contient des informations sur la dissipation de l'énergie dans le système. Par exemple, pour une perturbation extérieure périodique d'un système à l'équilibre, la partie imaginaire de la fonction de réponse dans

l'espace des fréquences est proportionelle à l'énergie dissipée [Pott07, Henk09a]. Traditionnellement, le FDT est écrit dans une grande variété de formes, comme par exemple la célèbre formule d'Einstein $D = \mu k_B T$ qui permet de relier la constante de diffusion D d'une particule avec sa mobilité μ [Eins56], ou la formule de Nyquist $S_v = 4k_B TR$ qui exprime la densité spectrale du bruit thermique en tension d'une résistance R [Nyqu28].

Cependant lorsque le système n'est plus à l'équilibre, ce théorème n'est plus valide, ni même l'invariance par translation temporelle. Pour alléger les notations, nous prendrons $k_B = 1$ dans la suite.

1.3.1 Définition

La relation entre corrélation et réponse pour les processus stochastiques hors équilibre a été d'abord formulée pour les verres de spins voilà plus de quinze par Cugliandolo [Cugl93]. Ils ont proposé de la décrire à l'aide d'un rapport fluctuation dissipation X(t,s)

$$TR(t,s) = X(t,s)\frac{\partial C(t,s)}{\partial s} \quad \text{avec} \quad t > s. \tag{1.23}$$

A l'équilibre, le TFD assure que $X(t,s) = X_{eq} = 1$. Hors équilibre, on peut vérifier que $X(t,s) = X(t/s)$ satisfait une forme d'échelle simple et de plus sa valeur limite

$$X_\infty = \lim_{t\to\infty}\left(\lim_{s\to\infty} X(t,s)\right) \tag{1.24}$$

est finie. D'origine dans les systèmes vitreux, $T_{eff} = T/X_\infty$ a été appelée une température effective et cette terminologie est toujours utilisée par les expérimentateurs. Toutefois, les mêmes conclusions restent également valables pour les aimants simples, en particulier au pt critique, où Godrèche et Luck [Godr00b] ont observé l'universalité de la valeur X_∞. Celle ci sert, au même titre que les valeurs des exposants, à distinguer les différentes classes d'universalité. Par conséquent, la différence $X(t,s) - 1$ ou bien $X_\infty - 1$ fournit un moyen quantitatif pour mesurer l'écart du système par rapport à l'équilibre.
Dans le but de préciser davantage notre propos, rappelons quelques résultats des travaux de Cugliandolo *et al.* [Cugl94]. Considérons, pour ce, un système physique en contact avec un thermostat à la température T et dont le paramètre d'ordre ϕ suit une dynamique décrite par l'équation de Langevin

$$\frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = -F[\phi](t) + \eta(t) \tag{1.25}$$

avec η un bruit gaussien identique à celui défini en 1.6. En prenant $t > s$ et en posant

$$A(t,s) = \langle F[\phi](t)\phi(s) - F[\phi](s)\phi(t)\rangle \tag{1.26}$$

et enfin en utilisant $\langle\phi(t)\eta(s)\rangle = 2TR(t,s)$, il vient

$$\left(\frac{\partial}{\partial s} - \frac{\partial}{\partial t}\right) C(t,s) = 2TR(t,s) + A(t,s) \tag{1.27}$$

De part son antisymétrie par l'échange de t et s, la fonction A mesure d'une certaine façon l'asymétrie temporelle. En effet, si l'on suppose l'équilibre, la symétrie par translation temporelle est vérifiée ainsi que les relations de réciprocité et donc $\langle F[\phi](t)\phi(s)\rangle_{eq} = \langle F[\phi](s)\phi(t)\rangle_{eq}$. Autrement dit, $A_{eq}(t,s) = 0$ et en injectant l'invariance par translation temporelle dans la fonction de corrélation à l'équilibre :

$$C(t,s) = C(t-s) \quad \text{et donc} \quad \left(\frac{\partial}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial t}\right) C(t,s) = 0 \tag{1.28}$$

et l'on récupère le TFD. Maintenant, dans la situation hors équilibre, l'invariance par translation temporelle n'est plus valide, ni donc la relation précédente pour le corrélateur à deux temps. La fonction d'asymétrie A devrait donc ne plus être nulle.

Cet écart au théorème fluctuation-dissipation a donné lieu à diverses expériences et nous avons choisi d'en exposer une pour illustration.

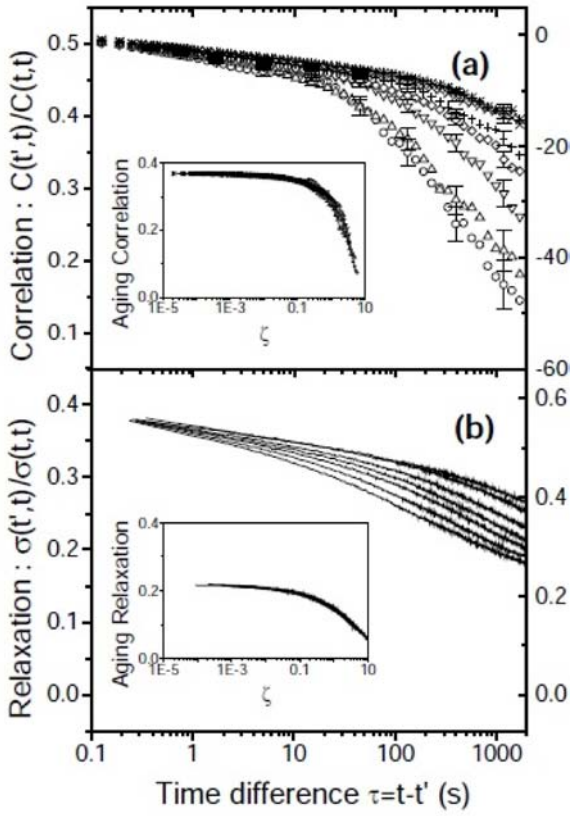


FIGURE 1.9 – *En haut, susceptibilité (en haut) et corrélateur (en bas) en fonction du temps de séparation pour différents temps d'attente* $s = [100, 200, 500, 1000, 2000, 5000, 10000]$. *Les temps d'attente sont donnés en seconde et correspondent respectivement aux courbes de haut en bas. L'insert montre le sous-vieillissement avec un exposant* $\mu = 0.78$. *Tiré de [Heri02].*

Dans la figure 1.9 est représenté le corrélateur à deux temps $C(t,s)$ normalisé par $C(t,t)$ ainsi que la susceptibilité $\chi(t,s)$ d'un verre de spin. Conduite par Hérisson et Ocio [Heri02, Heri04], ces études ont été produites sur un verre de spin isolant $CdCr_{1.7}In_{0.3}S_4$ obtenus par des mesures SQUID. Dans cette figure représentant la corrélation et la réponse intégrée en fonction du temps de séparation $t-s$, il est clair que, sur les échelles de temps considérées, l'invariance par translation temporelle est rompue. Dans la figure 1.10, la susceptibilité est tracée en fonction du corrélateur (auquel a été soustrait la partie stationnaire).

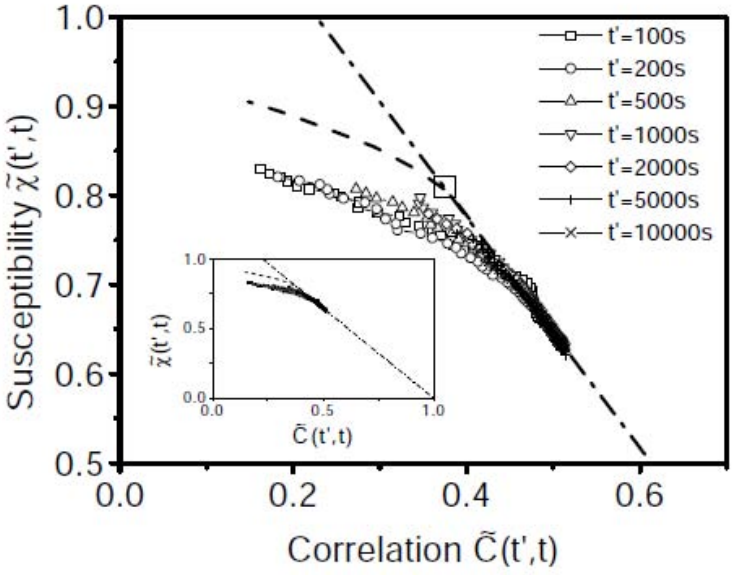


FIGURE 1.10 – *La brisure du théorème fluctuation dissipation apparaît sur ce graphe. La ligne en tiret montre la valeur attendue pour $s \to \infty$. La courbe correspondant au théorème fluctuation-dissipation est donné en tiret-pointillé. D'après [Heri04].*

La droite en pointillé représente le théorème fluctuation-dissipation. Il est alors possible d'observer que la relation entre corrélation et réponse intégrée dévie du TFD dès lors que l'autocorrélateur quitte son plateau, c'est-à-dire le régime quasistationnaire. C'est cette déviation que mesure le rapport fluctuation-dissipation.

1.3.2 Temps de passage vers le régime de vieillissement

Le rapport fluctuation-dissipation peut aussi nous permettre de mieux apprécier la manière dont un système trempé à basse température, quitte son état de quasi-équilibre. Dans la figure 1.11, nous illustrons le passage vers le régime de vieillissement dans le cas du modèle sphérique à trois dimensions, définie dans l'appendice C.

Pour plusieurs valeurs du temps d'attente s, le RFD est tracé en fonction du temps de séparation $\tau = t - s$: pour des valeurs petites de τ, $X(s+\tau, s)$ est environ égal de 1 puis décroît, à partir d'un temps de séparation tel que $\tau \sim s^{\zeta}$, pour finir vers une valeur

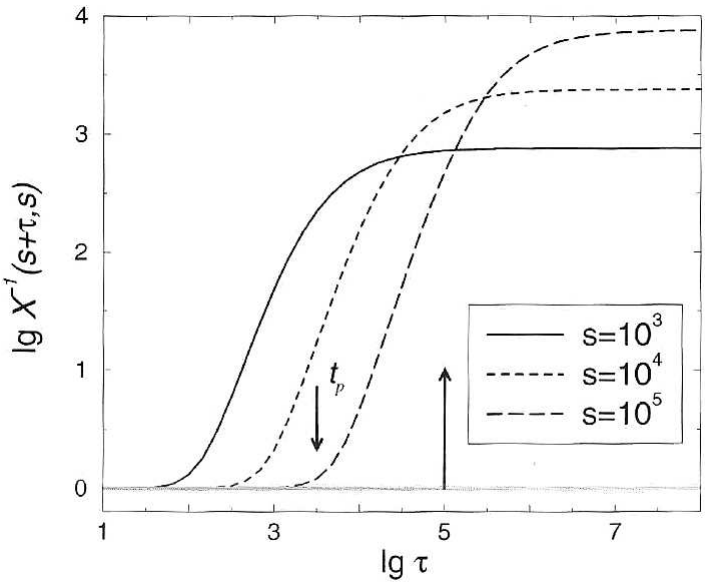


FIGURE 1.11 – *Illustration du passage dans le régime de vieillissement par le rapport fluctuation-dissipation, tracé en fonction du temps de séparation $t-s$. Il est représenté pour le modèle sphérique à trois dimensions trempé à $T=T_c$ pour trois valeurs du temps d'attente. Les deux flèches indiquent le temps d'attente $s=10^5$ (celle de droite qui pointe vers le haut) et le temps de passage $\tau_p \sim s^\zeta$ (celle de gauche qui pointe vers le bas). Tiré de [Henk10]*

limite finie. Cet exposant ζ appelé **exposant de passage** [Zipp00] décrit ce changement de comportement. De plus sa valeur est comprise entre 0 et 1. C'est un ingrédient essentiel pour dériver les formes accessibles pour les corrélateurs

$$C(t,s) = C_{\rm st}(t-s) + C_{\rm age}(t,s), \tag{1.29}$$

et où [Andreanov06]

$$C_{\rm age}(t,s) = \mathcal{C}\left(\frac{h(t)}{h(s)}\right) \quad , \quad h(t) = h_0 \exp\left[\frac{1}{A}\frac{t^{1-\mu}-1}{1-\mu}\right]. \tag{1.30}$$

Dans cette dernière expression, $\mathcal{C}$ est une fonction d'échelle, μ un paramètre libre relié à ζ et h_0 ainsi que A sont des constantes de normalisation. On distingue généralement trois types de vieillissement :
1. si $0<\mu<1$, il est appelé sous-vieillissement
2. si $\mu=1$, c'est le vieillissement simple
3. si $\mu>1$, c'est le super-vieillissement.

Pour expliquer l'origine de cette forme d'échelle 1.30, considérons le passage du plateau, voir fig. 1.12, vers le régime de vieillissement dans le cas du corrélateur. Le régime de quasi-équilibre correspond au plateau où $C(t,s) \sim q_{EA} = M_{eq}^2$ avec q_{EA} le

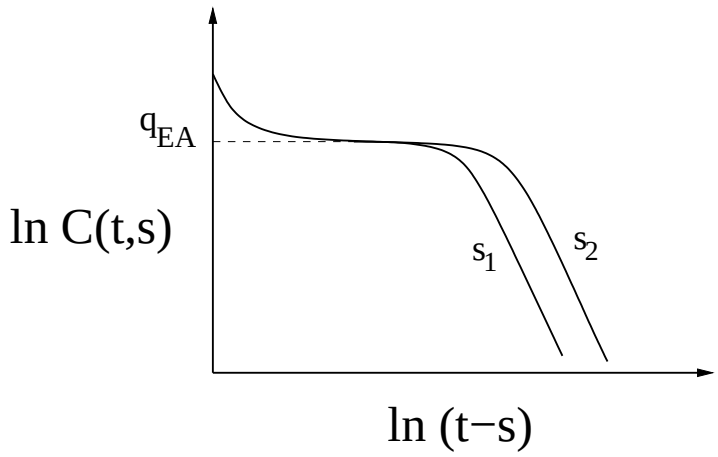


FIGURE 1.12 – *Allure shématique dans un plot log-log du corrélateur à deux temps en fonction du temps de séparation $t-s$ pour deux temps d'attente $s_1 < s_2$.*

paramètre d'ordre d'Edwards-Anderson et M_{eq} l'aimantation à l'équilibre et on peut supposer que vers la fin du plateau, le corrélateur peut s'écrire

$$C(t,s) \simeq q_{EA} + t^{-\alpha} g_1((t-s)t^{-\zeta}) \tag{1.31}$$

où α est un exposant et g_1 une fonction d'échelle.
Maintenant que nous avons obtenu la précédente expression, nous allons essayer d'exprimer $C(t,s)$ différemment. Pour cela, supposons maintenant qu'il existe une relation d'échelle telle que $C(t,s) = \mathcal{C}\left(\frac{h(t)}{h(s)}\right)$. En posant $t - s = yt^{\zeta}$ et en prenant la limite $t \to \infty$ puis $y \to \infty$, il vient

$$\begin{aligned} C(t,s) = \mathcal{C}\left(\frac{h(t)}{h(s)}\right) &\simeq \mathcal{C}\left(1 + yt^{\zeta}\frac{\mathrm{d}\ln h(t)}{\mathrm{d}t}\right) \\ &\simeq q_{EA} + c_{age}\left(yt^{\zeta}\frac{\mathrm{d}\ln h(t)}{\mathrm{d}t}\right)^{\mathbf{b}} \end{aligned} \tag{1.32}$$

où $\mathbf{b}$ est un autre exposant qui a été évalué dans certains modèles [Andreanov06] et c_{age} est une constante.
En comparant désormais 1.31 et 1.32, on remarque qu'il est possible de séparer les dépendances en y et t et il vient

$$\frac{\mathrm{d}\ln h(t)}{\mathrm{d}t} = A^{-1}t^{-\mu} \tag{1.33}$$

avec $\mu = \zeta + \alpha/\mathbf{b}$ et A une constante. On en déduit alors immédiatement que $h(t) = h_0 \exp\left[\frac{1}{A}\frac{t^{1-\mu}-1}{1-\mu}\right]$.

Ainsi cette étude [Zipp00] de l'exposant de passage permet de justifier les formes d'échelle accessibles pour les corrélateurs dans les systèmes trempés en dessous de leur

température critique. Nous verrons dans le chapitre deux qu'il est toutefois possible d'étendre son applicabilité à d'autres modèles trempés à leur température critique $T = T_c$.

1.3.3 Applicabilité du RFD

Revenons au rapport fluctuation-dissipation et plus précisément à son applicabilité. En effet, tel qu'énoncé jusque ici, ce RFD n'est pas applicable pour tous les systèmes : en utilisant les formes d'échelle (1.14,1.15), il vient

$$X(t,s) = -s^{b-a}\frac{T f_R(t/s)}{b f_C(t/s) + (t/s) f_C'(t/s)} \tag{1.34}$$

La limite $s \to \infty$ est finie seulement si $a = b$ et alors $X(t,s)$ ne dépend plus que du rapport t/s. En injectant alors les formes asymptotiques $f_{R,C}(y) \sim F_{R,C} y^{-\lambda_{R,C}/z}$ dans la relation précédente, on a pour $y = t/s \to \infty$

$$X(y) \simeq T\frac{F_R}{F_C}\left(\frac{\lambda_C}{z} - b\right)^{-1} y^{(\lambda_C - \lambda_R)/z}. \tag{1.35}$$

Là encore, $X(t/s)$ ne peut avoir de limite finie lorsque $t/s \to \infty$ que si $\lambda_C = \lambda_R$. On pose alors $X_\infty = \lim_{y\to\infty} X(y)$. L'universalité de X_∞ a été conjecturée par Godrèche et Luck [Godr00a, Godr00b] puis confirmée par plusieurs études pour des trempes à $T = T_c$ [Cala02, Cala02b, Cala05]. Enfin, ajoutons que si X_∞ est différent de un, cela signifie que le système ne rejoint jamais l'équilibre.

Ainsi, le RFD formulé en (1.23) ne se limite qu'au cas où $a = b$ et $\lambda_R = \lambda_C$.

1.3.4 Cas du processus de contact

Le processus de contact peut être vu comme une manière simple de décrire l'évolution d'une épidémie. Défini sur un réseau où chaque site ne peut accueillir qu'une seule particule au maximum, les particules peuvent diffuser sur les sites voisins et subissent les réactions $A \to \emptyset$ et $A \to 2A$. Cette compétition entre création et destruction de particules conduit, en champ moyen, à une équation du type :

$$\partial_t \phi(t,r) = \Delta_L \phi(t,r) + \tau\phi(t,r) - \phi(t,r)^2 \tag{1.36}$$

où ϕ est le paramètre d'ordre (la distribution de particules infectées). Le comportement au temps long dépend principalement de τ :

- Si $\tau < 0$, le système se trouve dans la phase absorbante et le paramètre va tendre vers zéro.
- Si $\tau > 0$, le système se trouve dans la phase active avec une densité de particules qui va tendre vers une valeur non nulle.

– Si $\tau = 0$, le système est à son point critique, et subit une transition de phase absorbante. Pour le processus de contact, il tombe dans la même classe d'universalité que la percolation dirigée.

C'est ce point critique qui nous intéresse. En effet, par analogie avec les aimants, les formes d'échelle attendues pour le corrélateur et la réponse sont encore données par (1.14,1.15). Cependant, bien que la relation $\lambda_C = \lambda_R$ reste vraie, les deux exposants a et b ne sont plus égaux et satisfont la relation

$$1 + a = b \tag{1.37}$$

Cette relation entre exposants, due à la symétrie par renversement de rapidité, suggère de définir un autre RFD. Pour expliquer cette symétrie, il faut considérer l'action en théorie des champs dans sa formulation Janssen-de Dominicis

$$\mathcal{J} = \int \mathrm{d}t\mathrm{d}\mathbf{r} \left[\tilde{\phi}(\partial_t - D\Delta)\phi - u(\tilde{\phi} - \phi)\tilde{\phi}\phi - h\tilde{\phi}\right] \tag{1.38}$$

où ϕ et h sont la densité particulaire et le taux de création de particules. Pour $h = 0$, cette action est invariante sous la symétrie :

$$\tilde{\phi}(t, \mathbf{r}) \to -\phi(-t, \mathbf{r}) \qquad , \qquad \phi(t, \mathbf{r}) \to -\tilde{\phi}(-t, \mathbf{r}) \tag{1.39}$$

C'est l'invariance par renversement de rapidité. Aussi, le rapport $\Xi(t, s)$ a été introduit [Enss04]

$$\Xi(t, s) := \frac{R(t, s)}{C(t, s)} = \frac{f_R(t/s)}{f_C(t/s)} \tag{1.40}$$

et sa valeur limite est définie par

$$\lim_{s\to\infty} \lim_{t\to\infty} \Xi(t, s). \tag{1.41}$$

Cette limite, égale au rapport de deux quantités présentant le même comportement d'échelle, est supposée universelle [Baum07b]. Baumann et Gambassi [Baum07b] ont alors argumenté que dans ce modèle le rapport $\Xi(t, s)^{-1} \neq 0$ était une mesure de la brisure de la symétrie par renversement de rapidité. En ce sens, c'est l'analogue du RFD $X(t, s)$ pour les systèmes présentant une symétrie par renversement de rapidité. Leur calcul a une boucle a permis de déterminer la valeur limite du rapport Ξ_∞ et ils ont trouvé en $4 - \epsilon$ dimensions

$$\Xi_\infty = 2\left(1 - \epsilon\left(\frac{119}{480} - \frac{\pi^2}{120}\right)\right) + O(\epsilon^2) \tag{1.42}$$

qui, en une dimension, est en assez bon accord avec l'estimation numérique $\Xi_\infty = 1.15(5)$ [Enss04].

La percolation dirigée a donné lieu à une expérience récente par Takeuchi, Kuroda, Chaté et Sano [Take09]. Ils ont étudié la transition de phase continue entre deux états turbulents (DSM1 et DSM2) dans des films minces de cristaux nématiques et ont comparé leurs résultats avec la percolation dirigée en $(2+1)D$: l'ensemble des exposants est en très bon accord avec les prédictions théoriques. Ils ont aussi pu étudier le vieillissement dans un tel système en le préparant dans l'état actif (DSM2) et en changeant brutalement le paramètre de contrôle à sa valeur critique. L'évolution du système est alors mesuré et on montre dans la figure 1.13 l'autocorrélateur connexe $C(t,s)$ dont le comportement respecte le vieillissement simple de l'éq. (1.13).

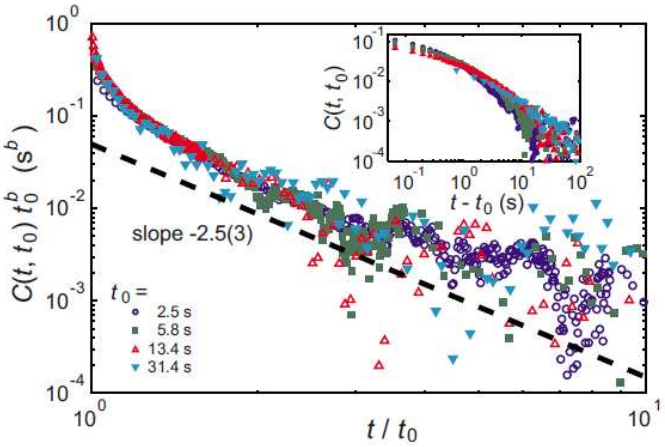


FIGURE 1.13 – *Autocorrélateur pour des films minces de cristaux nématiques MBBA, trempé à leur point critique. L'état initial est l'état actif (DSM2). En pointillé est représenté le comportement asymptotique de la fonction d'échelle* $f_C(y) \sim y^{-\lambda_C/z}$. t_0 *est ici le temps d'attente, mesuré en seconde.*

Chapitre 2

Processus de contact bosonique

Le processus de contact standard (que nous appelerons occasionnellement “fermionique”, dans un souci de clarté) est considéré comme un modèle paradigmatique d’une transition de phase vers un état absorbant. Nous avons brièvement résumé dans le chapitre précédent ses propriétés de vieillissement. Dans ce chapitre, nous allons d’abord introduire un analogue, dit “bosonique”, du processus de contact et poursuivrons en présentant une analyse exacte de ses propriétés hors équilibre.

Le processus de contact bosonique, pouvant par exemple modéliser approximativement le comportement de la population de neutrons dans un réacteur nucléaire [Cano68], a été étudié dans un article de Cox et Griffeath [Cox85]. Ils se sont basés sur les temps d’occupation et se sont appuyés sur un article de Sawyer et Fleischman [Sawy78] où leur étude avait montré qu’en $1D$ la condensation est si forte que tout ensemble fermé est finalement vide avec une probabilité 1 alors qu’en dimension 2, même si cette probabilité peut être arbritrairement petite, l’ensemble est visité de façon récurrente avec une probabilité 1. Ainsi ce phénomène de condensation (ou “clustering”) avait déjà été observé dans ce modèle. Plus tard, des physiciens ont redécouvert ce modèle du processus bosonique de contact (BCPD) et le processus bosonique de contact par paires (BPCPD) [Houch02, Paes04a, Paes04b]. Son comportement dans le régime de vieillissement a ainsi été déterminé en détail et ses exposants a, b ainsi que les fonctions d’échelle ont été calculées [Baum05] dans le cas où le transport des particules se fait par des sauts vers les sites immédiatement voisins. Tous ces modèles montrent un régime de vieillissement seulement le long de la ligne critique que nous rappellerons dans la suite, voir [Henk07] pour revue.

Une autre motivation pour étudier le BCPD est la modélisation de l’origine de la formation d’amas en biologie [Youn01, Houch02]. Il a en effet considéré l’évolution d’une population de particules browniennes soumises aux réactions suivantes : $A \to \emptyset$ et $A \to 2A$. Ils ont montré que bien que le nombre de particules reste constant à la criticalité, il est possible que, pour des temps longs et pour $d \leq 2$, les particules se condensent sur un seul site (ou très peu de sites) ce qui reproduit la croissance inhomogène

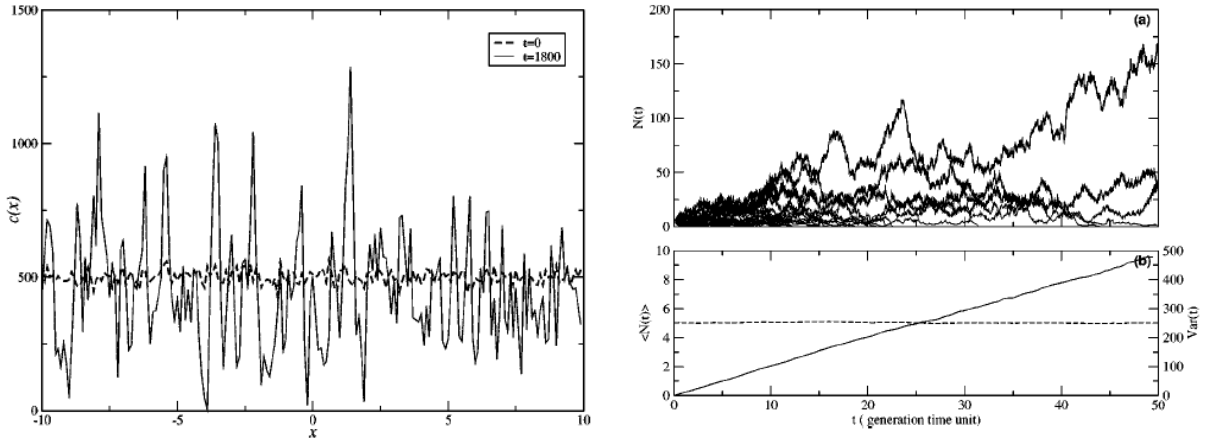


FIGURE 2.1 – *Sur le panneau de gauche, concentration de particules en fonction de sa position sur un anneau de longueur $L = 20$, et ce, pour deux temps différents. Sur le panneau de droite, simulation numérique du BCPD : (a) Nombre de particules en fonction du temps pour 50 réalisations différentes ; (b) Moyenne (échelle de gauche) et variance (échelle de droite) en fontion du temps. Tiré de [Houch02].*

des colonies de bactéries, voir figure 2.1.

Dans ce chapitre, nous allons étudier ces modèles dont la dynamique ne satisfait pas le bilan détaillé. Le système ne va donc jamais relaxer vers un état d'équilibre, étant donné que ce dernier n'existe pas. Nous savons, grâce aux études menées par exemple sur le processus de contact critique [Enss04, Rama04, Baum07b] et aussi sur le modèle d'Ising cinétique hors équilibre [Odor06], que ce type de modèle possède le même genre de comportement d'échelle hors équilibre que dans ces aimants vieillissants (1.14,1.15). Par contre, alors que dans les modèles d'aimants cités précédemment, les exposants de vieillissement a et b sont égaux du fait de la symétrie par renversement de rapidité [Baum07b], ici rien ne suggère la validité d'une telle égalité.

Nous allons étudier ici les conséquences qui s'opèrent sur les propriétés de vieillissement lorsque le transport des particules vers leurs sites adjacents est remplacé par un transport à longue portée de type *vols de Lévy*. Mais tout d'abord donnons quelques pistes sur l'objectif d'une telle étude

– Les vols de Lévy [Shle95, Metz00] généralisent les marches aléatoires (browniennes) que l'on utilise généralement dans le sens où ils conduisent à un théorème de la limite centrale généralisé pour la somme d'un grand nombre de variables aléatoires indépendantes. Ceci peut se comprendre heuristiquement en considérant les particules comme des variables à gros grains résultantes d'une somme d'un grand nombre de degrés de liberté microscopiques. Ainsi, il peut apparaître naturel d'étudier les effets des sauts entre sites éloignés. Ceci pourrait être pertinent

pour décrire les particules dans des écoulements turbulents ou la propagation d'une épidémie, voir [Lube] et les références contenues à l'intérieur.
– L'étude du processus de contact avec vols de Lévy a montré que le comportement critique de l'état stationnaire ainsi que sa relaxation sont modifiés [Hinr99, Jans99, Delo02, Bara09, Henk08].

2.1 Le modèle

Considérons un réseau à d dimensions. Chaque site de ce réseau peut contenir un nombre arbitraire de particules. Un ensemble de m particules d'un même site peut subir les réactions suivantes :

$$\begin{aligned} mA &\longrightarrow (m+k)A \qquad \text{avec un taux } \mu \\ mA &\longrightarrow (m-\ell)A \qquad \text{avec un taux } \lambda \end{aligned} \tag{2.1}$$

De plus, chaque particule peut sauter vers un site à la distance $|\mathbf{r}|$, avec un taux

$$D(\mathbf{r}) = \frac{D}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^d\mathbf{q}\, e^{(\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - c\|\mathbf{q}\|^\eta)} \tag{2.2}$$

où $0 < \eta < 2$ est un paramètre de contrôle et c est une constante non-universelle. Nous distinguerons deux cas :

1. le cas $m = 1$, appelé *processus de contact bosonique avec vols de Lévy* (BCPL)
2. le cas $m = 2$, appelé *processus de contact bosonique par paire avec vols de Lévy* (BPCPL)

2.2 Equations de mouvement

En suivant la technique de [Paes04a], l'équation maîtresse s'écrit dans le formalisme hamiltonian/Liouvillien (voir [Schu00, Henk08]) comme $\partial_t|P(t)\rangle = -H|P(t)\rangle$ où $P(t)$ est le vecteur d'état. Le Hamiltonien peut être exprimé en termes d'opérateurs création et annihilation $a(\mathbf{x})$ et $a^\dagger(\mathbf{x})$. Nous définissons aussi l'opérateur "nombre de particules" $n(\mathbf{x}) = a^\dagger(\mathbf{x})a(\mathbf{x})$. Le Hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned} H \;=\; & -\sum_{\mathbf{r}\neq\mathbf{0}}\sum_{\mathbf{x}} D(\mathbf{r})\left[a(\mathbf{x})a^\dagger(\mathbf{x}+\mathbf{r}) - n(\mathbf{x})\right] \\ & -\lambda\sum_{\mathbf{x}}\left[a^\dagger(\mathbf{x})^{m-\ell}a(\mathbf{x})^m - \prod_{i=1}^{m}(n(\mathbf{x})-i+1)\right] \\ & -\mu\sum_{\mathbf{x}}\left[a^\dagger(\mathbf{x})^{m+k}a(\mathbf{x})^m - \prod_{i=1}^{m}(n(\mathbf{x})-i+1)\right] - \sum_{\mathbf{x}} h(\mathbf{x})a^\dagger(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{2.3}$$

où le terme de la première ligne correspond à la diffusion des particules, le terme de la seconde ligne à l'annihilation de particules et enfin le terme de la dernière ligne à la création de particules. C'est un Hamiltonien tout-à-fait similaire à celui utilisé dans [Baum05] avec pour seule différence un taux de diffusion $D(\mathbf{r})$ qui dépend de la distance du saut. Pour le calcul de la fonction de réponse, nous ajoutons aussi un champ externe qui décrit la création spontanée de particules avec un taux dépendant du site $h = h(\mathbf{x})$ sur le site $\mathbf{x}$.

Les observables à un temps $g(t, \mathbf{x})$ peuvent s'obtenir à partir des quantités indépendantes du temps en passant en représentation d'Heisenberg. Les équations différentielles pour les quantités voulues s'obtiennent en utilisant l'équation de mouvement d'Heisenberg $\partial_t g = [g, H]$. En utilisant la propriété $\langle s|a^\dagger(x) = \langle s|$, la concentration de particules s'écrit

$$\rho(t, \mathbf{x}) = \langle a^\dagger(t, \mathbf{x}) a(t, \mathbf{x})\rangle = \langle a(t, \mathbf{x})\rangle \tag{2.4}$$

et satisfait

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle a(t, \mathbf{x})\rangle &= \sum_{\mathbf{r}\neq\mathbf{0}} D(\mathbf{r})[\langle a(t, \mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle - \langle a(t, \mathbf{x})\rangle] \\ &\quad -\lambda\ell\langle a(t, \mathbf{x})^m\rangle + \mu k\langle a(t, \mathbf{x})^m\rangle + h(t, \mathbf{x}) \end{aligned} \tag{2.5}$$

Pour le processus de contact bosonique BCPL, cette équation se ferme quelque soit la valeur des taux. Cependant, pour le processus de contact par paires, nous pouvons seulement avoir un système d'équations fermé le long de la ligne critique, définie par

$$\sigma = \frac{\mu k - \lambda\ell}{D} \stackrel{!}{=} 0 \tag{2.6}$$

Sans changer la généralité des résultats, nous prendrons dans la suite $k = 1$; pour le BCPD seul $\ell = 1$ est possible. Comme nous le verrons plus tard, le long de cette ligne critique, la concentration de particules

$$\rho_0 := \int \mathrm{d}\mathbf{x}\, \rho(t, \mathbf{x}) = \int \mathrm{d}\mathbf{x}\, \langle a(t, \mathbf{x})\rangle \tag{2.7}$$

est conservée, et ce, bien que le processus microscopique puisse modifier le nombre total de particules. Tout ceci est toutefois une généralisation évidente de ce qui est déjà connu dans le cas du BCPD et BPCPD [Baum05], c'est pour cette raison que nous nous limitons à énoncer les résultats.

Dans ce formalisme, les deux quantités auxquelles nous nous intéressons sont la fonction de réponse et de corrélation que l'on écrit

$$\begin{aligned} C(t; \mathbf{r}) &= \langle a(t, \mathbf{x}) a(t, \mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle - \rho_0^2 \\ C(t, s; \mathbf{r}) &= \langle a(t, \mathbf{x}) a(s, \mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle - \rho_0^2 \\ R(t, s; \mathbf{r}) &= \left.\frac{\delta\langle a(t, \mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle}{\delta h(s, \mathbf{x})}\right|_{h=0} \end{aligned} \tag{2.8}$$

Là encore, l'invariance par translation spatiale a été utilisée. Le corrélateur à un temps est alors déterminé en utilisant l'équation du mouvement suivante

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle a(t,\mathbf{x})a(t,\mathbf{x})\rangle &= 2\sum_{\mathbf{r}\neq\mathbf{0}} D(\mathbf{r})\left[\langle a(t,\mathbf{x})a(t,\mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle - \langle a(t,\mathbf{x})^2\rangle\right] \\ &\quad +\lambda\ell[(1+\ell-2m)\langle a(t,\mathbf{x})^m\rangle - 2\langle a(t,\mathbf{x})^{m+1}\rangle] \\ &\quad -\mu k[(1-k-2m)\langle a(t,\mathbf{x})^m\rangle - 2\langle a(t,\mathbf{x})^{m+1}\rangle] \end{aligned} \tag{2.9}$$

et pour $\mathbf{x}\neq\mathbf{y}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle a(t,\mathbf{x})a(t,\mathbf{y})\rangle &= \sum_{\mathbf{r}\neq\mathbf{0}} D(\mathbf{r})\left[\langle a(t,\mathbf{x})a(t,\mathbf{y}+\mathbf{r})\rangle + \langle a(t,\mathbf{x}+\mathbf{r})a(t,\mathbf{y})\rangle - \langle a(,t\mathbf{x})a(,t\mathbf{y})\rangle\right] \\ &\quad -\lambda\ell\left[\langle a(t,\mathbf{x})a(t,\mathbf{y})^m\rangle - \langle a(t,\mathbf{x})^m a(t,\mathbf{y})\rangle\right] \\ &\quad +\mu k\left[\langle a(t,\mathbf{x})a(t,\mathbf{y})^m\rangle - \langle a(t,\mathbf{x})^m a(t,\mathbf{y})\rangle\right] \end{aligned} \tag{2.10}$$

En particulier, ces équations se ferment le long de la ligne critique (2.6). Les équations de mouvement du corrélateur à deux temps s'écrivent

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle a(t,\mathbf{x})a(s,\mathbf{y})\rangle &= \sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{0}} D(\mathbf{n})\left[\langle a(t,\mathbf{x}+\mathbf{n})a(s,\mathbf{y})\rangle - \langle a(t,\mathbf{x})a(s,\mathbf{y})\rangle\right] \\ &\quad -\lambda\ell\langle a(t,\mathbf{x})^m a(s,\mathbf{y})\rangle + \mu k\langle a(t,\mathbf{x})^m a(s,\mathbf{y})\rangle \end{aligned} \tag{2.11}$$

couplées à la condition initiale $\lim_{t\to s}\langle a(t,\mathbf{x})a(s,\mathbf{y})\rangle = \langle a(t,\mathbf{x})a(t,\mathbf{y})\rangle$.

La relation de ces corrélateurs avec la densité moyenne et sa variance est donnée dans le cas du transport diffusif par

$$\langle n(t,\mathbf{x})\rangle = \langle a(t,\mathbf{x})\rangle, \tag{2.12}$$

$$\langle n(t,\mathbf{x})^2\rangle = \langle a(t,\mathbf{x})^2\rangle + \langle a(t,\mathbf{x})\rangle, \tag{2.13}$$

et pour la variance

$$\sigma^2 = \langle n(t,\mathbf{x})^2\rangle - \langle n(t,\mathbf{x})\rangle^2 \tag{2.14}$$

voir [Paes04a] et plus généralement par [Baum07d]. Nous nous proposons de généraliser la démonstration de Baumann [Baum07d] valable pour le transport diffusif au cas des sauts à longue portée. Pour ce, nous allons travailler dans le formalisme hamiltonien. En utilisant la propriété $\langle s|a^\dagger(x) = \langle s|$, nous vérifions que le long de la ligne critique

$$\partial_t\langle s|a(\mathbf{x}) = \langle s|[a(\mathbf{x}),H] = \sum_{\mathbf{n}\neq 0}\langle s|D(\mathbf{n})\left(a(\mathbf{x}+\mathbf{n})-a(\mathbf{x})\right) \tag{2.15}$$

La transformée de Fourier est définie par

$$\langle s|\widetilde{a}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x}} e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}.x}\langle s|a(\mathbf{x}), \tag{2.16}$$

ainsi on a

$$\langle s|\widetilde{a}(t,\mathbf{k}) = \exp\left(-\frac{1}{2}\omega(\mathbf{k})(t-s)\right)\langle s|\widetilde{a}(s,\mathbf{k}) \tag{2.17}$$

où $\omega(\mathbf{k})$ est la relation de dispersion définie dans la suite 2.23. Grâce à l'identité

$$\langle s|a(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-d}\int_B d\mathbf{k}\; e^{-i\mathbf{k}.x}\langle s|\tilde{a}(\mathbf{k}x), \tag{2.18}$$

nous avons pour tout temps $s \leq t$

$$\begin{aligned}\langle s|a(t,\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{y}}\int_B \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\exp\left(-\frac{1}{2}\omega(\mathbf{k})(t-s)\right)\langle s|a(s,\mathbf{y}) \qquad (2.19)\\ &= \sum_{\mathbf{y}} R(t-s;\mathbf{x}-\mathbf{y})\langle s|a(s,\mathbf{y})\end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'expression (2.26) de la fonction de réponse. Maintenant, nous appliquons l'expression (2.20) à la fonction de corrélation à deux points

$$F(t,s;\mathbf{r}) = \langle a(t,\mathbf{x})a(s,\mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle = \sum_{\mathbf{y}} R(t-s;\mathbf{x}-\mathbf{y})F(s,\mathbf{r}+\mathbf{x}-\mathbf{y}) \tag{2.20}$$

Enfin en usant du commutateur de a and $a^\dagger$ ainsi que de la relation (2.20), nous trouvons pour le corrélateur densité-densité

$$\begin{aligned}\langle n(t,\mathbf{x})n(s,\mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle &= \langle a^\dagger(t,\mathbf{x})a(t,\mathbf{x})a^\dagger(s,\mathbf{x}+\mathbf{r})a(s,\mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle\\ &= \sum_{\mathbf{y}} R(t-s;\mathbf{x}-\mathbf{y})\langle a(t,\mathbf{x})a^\dagger(s,\mathbf{x}+\mathbf{r})a(s,\mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle\\ &= \sum_{\mathbf{y}} R(t-s;\mathbf{x}-\mathbf{y})F(s,\mathbf{r}+\mathbf{x}-\mathbf{y}) + R(t-s;\mathbf{r})\rho_0\\ &= F(t,s;\mathbf{r}) + R(t-s;\mathbf{r})\rho_0. \qquad (2.21)\end{aligned}$$

Il ne reste plus qu'à utiliser les définitions (2.8) pour en déduire

$$\langle n(t,\mathbf{x})n(s,\mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle - \rho_0^2 = C(t,s;\mathbf{r}) + \rho_0 R(t-s,\mathbf{r}). \tag{2.22}$$

Ainsi, avec les formes d'échelle (1.14,1.15) couplées aux exposants énoncés dans le tableau 2.1, nous voyons que le second terme de l'eq. (2.22) devient négligeable comparé au premier dans tous les cas. $C(t,s;\mathbf{r})$ peut donc être interprété comme un corrélateur

densité-densité connexe.

Commençons maintenant à analyser ces équations de mouvement pour la densité de particules. Pour le BCPL, comme pour le BPCPL d'ailleurs avec $\sigma = 0$, nous utilisons une transformée de Fourier sur l'eq. (2.5), et ceci donne

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\widetilde{a}(t,\mathbf{q})\rangle = -\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{0}}\frac{D(\mathbf{n})}{D}(1-e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}})}_{=:\,\omega(\mathbf{q})}\ \langle\widetilde{a}(t,\mathbf{q})\rangle + \frac{\sigma}{2}\langle\widetilde{a}(t,\mathbf{q})\rangle + \widetilde{h}(t,\mathbf{q}) \tag{2.23}$$

ce qui définit la relation de dispersion $\omega(\mathbf{q})$. Avec une limite continue

$$\omega(\mathbf{q}) = 1 - e^{-c\|\mathbf{q}\|^\eta} \overset{\mathbf{q}\to\mathbf{0}}{\approx} c\|\mathbf{q}\|^\eta \tag{2.24}$$

nous pouvons lire l'exposant dynamique $z = \eta$.

De la même façon, nous calculons la fonction de réponse en appliquant sa définition (2.8) sur l'équation de mouvement (2.5). Dans l'espace de Fourier, ceci devient

$$\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{R}(t,s;\mathbf{q}) = -\frac{1}{2}\omega(\mathbf{q})\widetilde{R}(t,s;\mathbf{q}) + \frac{\sigma}{2}\widetilde{R}(t,s;\mathbf{q}) + \delta(t-s) \tag{2.25}$$

où il faut imposer $\sigma = 0$ pour le BPCPL. Conséquemment, la fonction de réponse dans l'espace réel s'écrit

$$R(t,s;\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d}\underbrace{\int_B \mathrm{d}^d\mathbf{q}\, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, e^{-\frac{1}{2}\omega(\mathbf{q})(t-s)}}_{=:b(\frac{t-s}{2},\mathbf{r})}\ \exp\left(\frac{\sigma(t-s)}{2}\right)\Theta(t-s) \tag{2.26}$$

où B est la zone de Brillouin et la fonction Θ assure la causalité de cette réponse. En particulier, pour les temps longs, l'autoréponse devient pour $t > s$

$$\begin{aligned} R(t,s;\mathbf{0}) &\simeq e^{\frac{\sigma}{2}(t-s)}\left(\frac{t-s}{2}\right)^{-d/\eta}\frac{1}{(2\pi)^d}\int_0^\infty \mathrm{d}^d\mathbf{q}\, e^{-\|\mathbf{q}\|^\eta c} \\ &= \frac{2^{1-d}}{\pi^{d/2}}\frac{\Gamma\left(d/\eta\right)}{\eta\Gamma\left(d/2\right)}e^{\frac{\sigma}{2}(t-s)}\left(c\frac{t-s}{2}\right)^{-d/\eta} \end{aligned} \tag{2.27}$$

Pour la fonction de corrélation, nous devons supposer l'invariance par translation spatiale et utiliser le corrélateur non connexe $F(t,s;\mathbf{r}) := \langle a(t,\mathbf{x})a(s,\mathbf{x}+\mathbf{r})\rangle$. Nous devons aussi introduire le paramètre

$$\alpha = \frac{\mu k(k+\ell)}{2D} \tag{2.28}$$

Comme conditions initiales, nous utiliserons dans la suite la distribution de Poisson $F(0,0;\mathbf{r}) = \rho_0^2$. Avec une légère généralisation des calculs qui ont été effectués dans le cas du BCPD

et BPCPD, [Paes04a, Baum05], nous trouvons pour le corrélateur connexe et dans le cas du BCPL (sur la ligne critique $\sigma = 0$)

$$\begin{aligned} C(t,s;\mathbf{r}) &= \alpha\rho_0 \int_0^s \mathrm{d}\tau\; b(\frac{t+s}{2}-\tau,\mathbf{r}) \qquad (2.29)\\ &\simeq \alpha\rho_0 \int_0^s \mathrm{d}\tau \int_B \frac{\mathrm{d}^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \exp\left(-c\|\mathbf{q}\|^\eta \left(\frac{t+s}{2}-\tau\right) - \mathrm{i}\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}\right) \end{aligned}$$

où la limite aux temps longs $t, s \gg t_{\mathrm{micro}}$ et $t-s \gg t_{\mathrm{micro}}$ a été prise. Pour le processus de contact bosonique par paires BPCPL, nous considérons d'abord la fonction de corrélation à un temps $F(t,\mathbf{r})$ qui satisfait l'équation

$$\begin{aligned} F(t,\mathbf{r}) &= \rho_0^2 + \alpha \int_0^t \mathrm{d}\tau\; F(\tau,\mathbf{0}) \int_B \frac{\mathrm{d}^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{-\omega(\mathbf{q})(t-\tau)} e^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \qquad (2.30)\\ &= \rho_0^2 + \alpha \int_0^t \mathrm{d}\tau\; F(\tau,\mathbf{0})\; b(t-\tau,\mathbf{r}) \qquad (2.31) \end{aligned}$$

Pour $\mathbf{r} = 0$, c'est une équation de Volterra sur $F(t,\mathbf{0})$. Elle peut se résoudre en effectuant une transformée de Laplace comme dans ([Paes04a], [Baum05]). Ensuite, on obtient directement $F(t,\mathbf{r})$ à partir de (2.31). Avec ceci, le corrélateur à deux temps s'écrit

$$F(t,s,\mathbf{r}) = \rho_0^2 + \alpha \int_0^s \mathrm{d}\tau F(\tau,\mathbf{0}) b\left(\frac{t+s}{2}-\tau,\mathbf{r}\right) \qquad (2.32)$$

La principale différence par rapport au BCPD ou au BPCPD est la forme différente de la relation de dispersion $\omega(\mathbf{q})$.

2.3 Solution

2.3.1 Diagramme de phase

Etant donné que le nombre total de particules est conservé en moyenne, l'information le long de la ligne critique, vient de l'analyse de la variance $\langle n(t,\mathbf{r})^2\rangle$. Le diagramme résultant est présenté sur la figure 2.2. Il y a deux phases distinctes séparées par la ligne critique eq. (2.6) :

- une phase absorbante pour $\lambda > \mu$, avec une densité de particules s'annulant dans l'état stationnaire
- une phase active avec $\lambda < \mu$, présentant une divergence de la densité de particules aux temps longs.

Le long de la ligne critique, la densité de particules moyenne est constante et le comportement du modèle, décrit à l'aide du paramètre α eq. (2.28), est le suivant

- Pour le processus de contact bosonique BCPL, il y a le même comportement critique pour n'importe quelle valeur de α. Par contre, la valeur de la dimension du système change drastiquement son comportement. Si $d \leq \eta$, le système présente

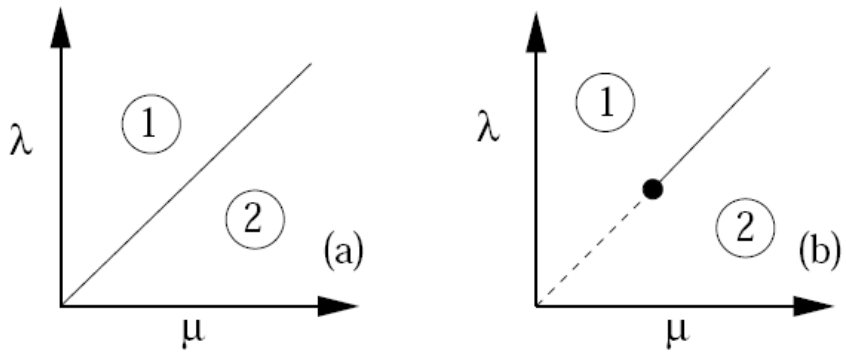


FIGURE 2.2 – *Diagrammes de phase schématiques pour $d \neq 0$ (a) du BCPL et du BPCPL lorsque $d \leq \eta$ et (b) du BPCPL lorsque $d > \eta$. La phase absorbante 1 ($\lambda > \mu$), où le nombre de particules s'annule aux temps longs, est séparée par la ligne critique eq. (2.6) de la phase active 2 ($\lambda < \mu$), où, cette fois, la densité moyenne de particule diverge aux temps longs. Le long de cette ligne critique la densité moyenne de particule reste constante.*

des amas : pour des temps longs, les particules sont finalement peu réparties et concentrées sur un petit nombre de sites, on parle alors de condensation. Pour illustrer le phénomène, voir la figure 2.3
Pour $d > \eta$, la densité particulaire est spatialement homogène aux temps longs.
Nous pouvons donner une interprétation de ce résultat en faisant appel au théorème de Polya généralisé [Paul99] : ce dernier stipule que lorsque $d < \eta$ la marche aléatoire de Lévy est récurrente, et donc elle ne peut homogénéiser le système. Par contre, lorsque $d > \eta$, il y a une probabilité non nulle que la marche aléatoire ne retourne pas à son origine. Cela semble suffisant pour rendre le système spatialement homogène
.

– Pour le processus de contact bosonique par paires, lorsque $d < \eta$, le système présente toujours des amas Cependant, lorsque $d > \eta$, on note l'existence d'un point multicritique pour $\alpha = \alpha_C$: en effet, le système est homogène pour $\alpha < \alpha_C$ alors qu'il présente des amas pour $\alpha > \alpha_C$. La valeur du paramètre α au point critique est donné par

$$\alpha_C = \left(2 \int_B \frac{\mathrm{d}^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} (2\omega(\mathbf{q}))^{-1} \right)^{-1} \tag{2.33}$$

A partir de cette expression, nous remarquons que $\alpha_C \to \infty$ si $d \to \eta$ [Godr02, Baum06a].

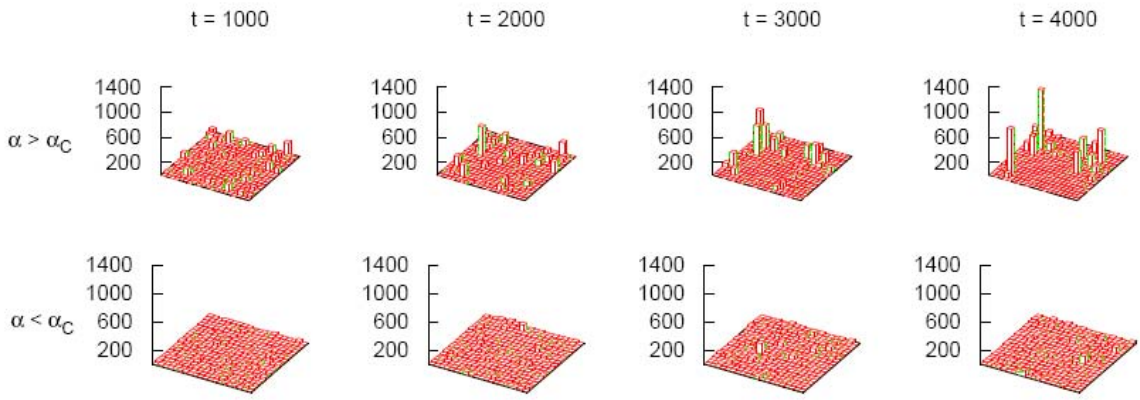


FIGURE 2.3 – *Transition de phase intervenant dans le processus de contact bosonique par paire pour le cas où $\eta = 2$. Le système pris est un cube de coté égal à 20 sites avec des conditions au bord périodiques et une condition initiale telle que chaque site contient 10 particules. Les images montrent seulement une couche du réseau et la hauteur est proportionnelle au nombre de particules sur le site. Sur la série d'images en haut, ce sont les réactions qui dominent $\alpha > \alpha_C$ alors que sur la série du bas, c'est la diffusion qui l'emporte $\alpha < \alpha_C$. On visualise bien la formation d'amas (ou condensation) dans la série supérieure, alors que dans la série inférieure, on remarque que le nombre de particules par site est à peu près constant. Tiré de [Baum07d].*

2.3.2 Exposants de vieillissement et fonctions d'échelle

En utilisant les expressions de la section précédente, il est possible d'effectuer une limite aux temps longs, et en comparant avec les formes d'échelle eqs. (1.14,1.15), nous pouvons extraire les exposants critiques hors équilibre. Nous les avons listés dans le tableau 2.1. Les fonctions d'échelle ont quant à elles été listées dans le tableau 2.2. Elles sont données à une constante de normalisation prêt.

Quelques commentaires :

- Si $d > \eta$ et si de plus $\alpha < \alpha_C$ dans le BPCPL, le comportement d'échelle dynamique (1.14,1.15) reste vrai pour le BCPL et le BPCPL. Ensuite, étant donné que les exposants et les formes des fonctions d'échelle correspondent en tout point, on peut dire que les deux modèles sont dans la même classe d'universalité.
- Pour $d < \eta$,nous trouvons encore un comportement d'échelle dynamique pour le BCPL et les exposants $a = b$ deviennent négatifs. Ceci reflète la condensation de particules qui peut s'occasionner lorsque les fluctuations divergent.
  Cependant pour le BPCPL, lorsque $d < \eta$ ou plus généralement $\alpha > \alpha_C$, aucun comportement d'échelle dynamique ne se présente. Par contre, la variance diverge exponentiellement avec le temps. Cette notion de vieillissement que nous avons rappelé dans le premier chapitre ne s'applique donc pas ici.
- Enfin, pour le BPCPL avec $d > \eta$ et au point tricritique $\alpha = \alpha_C$, le comportement d'échelle dynamique (1.14,1.15) reste vrai. Les valeurs des exposants hors équilibre

	Processus de contact bosonique	Processus de contact bosonique par paire	
		$\alpha < \alpha_C$	$\alpha = \alpha_C$
a	$\frac{d}{\eta} - 1$	$\frac{d}{\eta} - 1$	$\frac{d}{\eta} - 1$
b	$\frac{d}{\eta} - 1$	$\frac{d}{\eta} - 1$	0 if $\eta < d < 2\eta$ $\frac{d}{\eta} - 2$ if $d > 2\eta$
λ_R	d	d	d
λ_C	d	d	d
z	η	η	η

TABLE 2.1 – *Exposants de vieillissement du BCPL et BPCPL critique dans différents régimes. Les résultats pour le BCPL restent vrais quelque soit la dimension d du réseau, alors que pour le BPCPL ils ne sont valables que si $d > \eta$.*

			$f_R(y)$	$f_C(y)$
Processus de contact bosonique			$(y-1)^{-d/\eta}$	$(y-1)^{-d/\eta+1} - (y+1)^{-d/\eta+1}$
processus de contact bosonique par paire	$\alpha < \alpha_C$	$d > \eta$	$(y-1)^{-d/\eta}$	$(y-1)^{-d/\eta+1} - (y+1)^{-d/\eta+1}$
	$\alpha = \alpha_C$	$\eta < d < 2\eta$	$(y-1)^{-d/\eta}$	$(y+1)^{-d/\eta}\ {}_2F_1\left(\frac{d}{\eta}, \frac{d}{\eta}; \frac{d}{\eta}+1; \frac{2}{y+1}\right)$
		$d > 2\eta$	$(y-1)^{-d/\eta}$	$2(d-2\eta)(y-1)^{1-d/\eta}$ $-\eta(y-1)^{2-d/\eta} + \eta(y+1)^{2-d/\eta}$

TABLE 2.2 – *Fonctions d'échelle de l'autocorrélateur et de l'autoréponse des processus critiques de contact bosonique et de contact bosonique par paire. Elles sont données à une constante multiplicative prêt.*

sont différents de ceux appartenant à la classe d'universalité que nous décrivions plus haut. En particulier, nous remarquons que $a \neq b$ alors que l'on garde $\lambda_C = \lambda_R$. Ceci est dû à l'absence de bilan détaillé qui a mené à un vieillissement différent de celui d'un ferromagnétique (où $a = b$ et aussi $\lambda_C = \lambda_R$).

– La fonction de réponse $R = R(t - s; \mathbf{r})$ présente en particulier une forme très simple qui satisfait l'invariance par translation temporelle. Cependant, étant donné que cette invariance n'est pas respectée par le corrélateur à deux temps, la notion de vieillissement est toujours applicable.

Si nous identifions la dimension critique supérieure comme $d^* = \eta$, tous ces résultats peuvent être transférés sur ceux de [Baum05] concernant le BCPD et BPCPD si l'on remplace $d/\eta = d/d^* \mapsto d/2$.

2.4 Invariance d'échelle locale

Maintenant que nous avons calculé les fonctions d'échelle, il est temps de se demander si elles peuvent se déduire de symétries plus larges.

En effet, pour les ferromagnétiques qui subissent une cinétique de phase ordonnée après une trempe d'un état initial complètement désordonné vers la phase ordonnée $T < T_c$, il existe une extension de l'échelle dynamique [Bray94] vers un groupe de transformation d'échelle dépendant du temps, lui même sous-groupe du groupe de Schrödinger sans les translations temporelles [Henk02, Henk07b]. En particulier, il a été montré comment utiliser les représentations projectives des groupes tels que le groupe de Schrödinger dans le but d'analyser les symétries dynamiques des équations de Langevin stochastiques [Pico04]. L'outil essentiel pour cette étude sont les règles de sélection de Bargmann [Barg54]. Les réponses et corrélations peuvent ensuite être calculées explicitement et les résultats ont été testés dans plusieurs modèles, voir [Henk07b] pour revue. Cependant, étant donné que le groupe de Schrödinger et ses sous-groupes s'appliquent uniquement au cas où l'exposant dynamique $z = 2$, une généralisation pour des valeurs arbitraires de z a été développée [Baum07d].

2.4.1 Background

Nous allons, dans cette section, utiliser le cas du BCPL avec $z = \eta < 2$ en tant que test pour cette probable extension. Pour ce faire, nous devons réexprimer le problème en théorie des champs hors de l'équilibre, à la manière de Janssen-de Dominicis [deDo76, Jans92, Howa97]. Nous nous contentons de rappeler dans cette section les idées et le cheminement que l'on peut retrouver en intégralité dans la thèse de Florian Baumann [Baum07d]. En partant de l'équation maîtresse avec les taux de réaction eqs. (2.1,2.2), les opérateurs création et annihilation peuvent être reliés dans la limite continue au champ du paramètre d'ordre et au champ conjugué

$$\phi(t,\mathbf{r}) \quad := a(t,\mathbf{r}) - \rho_0 \tag{2.34}$$

$$\widetilde{\phi}(t,\mathbf{r}) \quad := a^\dagger(t,\mathbf{r}) - 1 \tag{2.35}$$

de telle façon que $\langle\phi(t,\mathbf{r})\rangle = \langle\widetilde{\phi}(t,\mathbf{r})\rangle = 0$. L'action associée au BCPL critique s'écrit

$$\mathcal{J}[\phi,\widetilde{\phi}] = \int \mathrm{d}\mathbf{R} \int \mathrm{d}u \ \left[\widetilde{\phi}(2\mathcal{M}\partial_u - \Delta^{\eta/2})\phi - \mu\widetilde{\phi}^2(\phi+\rho_0)\right] = \mathcal{J}_0[\phi,\widetilde{\phi}] + \mathcal{J}_b[\phi,\widetilde{\phi}] \tag{2.36}$$

où nous avons supprimé les arguments de $\phi(u,\mathbf{R})$ et $\widetilde{\phi}(u,\mathbf{R})$ dans les intégrales. Le terme de "masse" $\mathcal{M}$ est quant à lui relié à la constante de diffusion.

Cette action peut se décomposer en deux parties :

- une partie "déterministe" (sans bruit)

$$\mathcal{J}_0[\phi,\widetilde{\phi}] = \int \mathrm{d}\mathbf{R} \int \mathrm{d}u \ \left[\widetilde{\phi}(2\mathcal{M}\partial_u - \Delta^{\eta/2})\phi\right] \tag{2.37}$$

- une partie "bruitée"

$$\mathcal{J}_b[\phi,\widetilde{\phi}] = -\int \mathrm{d}\mathbf{R} \int \mathrm{d}u \ \left[\mu\widetilde{\phi}^2(\phi+\rho_0)\right] \tag{2.38}$$

Ici les puissances non-entières du Laplacien doivent être interprétées comme des dérivées fractionnaires [Baum07d, Baum09]. Dans ce formalisme, les fonctions de corrélation et de réponse deviennent

$$\begin{aligned} C(t_1,\ldots,t_n;\mathbf{r}_1,\ldots\mathbf{r}_n) &= \langle\phi_1(t_1,\mathbf{r}_1)\ldots\phi_n(t_n,\mathbf{r}_n)\rangle \\ R(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \langle\phi(t,\mathbf{r})\widetilde{\phi}(s,\mathbf{r}')\rangle \end{aligned} \tag{2.39}$$

où la moyenne d'un observable A est donnée par l'intégrale fonctionelle

$$\langle A\rangle = \int \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\widetilde{\phi}\, A[\phi,\widetilde{\phi}]e^{-\mathcal{J}[\phi,\tilde{\phi}]}. \tag{2.40}$$

Comme il a été déjà démontré pour le cas $z=2$ [Pico04], il est possible de considérer au départ seulement la partie "déterministe", obtenue à partir de la variation de $\mathcal{J}_0$ par rapport à $\widetilde{\phi}$. Son équation du mouvement associée est

$$\mathcal{S}\phi = \left(2\mathcal{M}\partial_t - \Delta^{\eta/2}\right)\phi = 0 \tag{2.41}$$

et présente une symétrie dynamique par rapport aux générateurs infinitésimaux des transformations d'échelle locale [Baum07d, Baum09]

$$\begin{aligned} X_{-1} &:= -\partial_t && \text{translation temporelle} \\ X_0 &:= -t\partial_t - \frac{1}{\eta}(\mathbf{r}\cdot\partial_{\mathbf{r}}) - \frac{x}{\eta} && \text{dilatation} \\ X_1 &:= -t^2\partial_t - \frac{2(x+\xi)}{\eta}t - \frac{2\mathcal{M}}{\eta^2}r^2\nabla_{\mathbf{r}}^{2-\eta} - \frac{2}{\eta}t(\mathbf{r}\cdot\partial_{\mathbf{r}}) && \text{transformation de} \\ &\quad -2\gamma(2-\eta)(\mathbf{r}\cdot\partial_{\mathbf{r}})\nabla_{\mathbf{r}}^{-\eta} - \gamma(2-\eta)(d-\eta)\nabla_{\mathbf{r}}^{-\eta} && \text{Schrödinger generalisée} \\ Y^{(i)}_{-1/\eta} &:= -\partial_{r_i} && \text{rotation} \\ Y^{(i)}_{-1/\eta+1} &:= -t\partial_{r_i} - \frac{2\mathcal{M}}{\eta}r_i\nabla_{\mathbf{r}}^{2-\eta} - \gamma\eta(2-\eta)\partial_{r_i}\nabla_{\mathbf{r}}^{-\eta} && \text{transformation de} \\ & && \text{Galilée généralisée} \\ R^{(i,j)} &:= -R^{(j,i)} = r_i\partial_{r_j} - r_j\partial_{r_i} && \text{rotation} \end{aligned} \tag{2.42}$$

avec $i,j=1,\ldots,d$, γ des constantes dimensionnées et x,ξ des dimensions d'échelle. Les dérivées fractionnaires $\nabla_{\mathbf{r}}^{\alpha}$ avec $\alpha\in\mathbb{R}$, quant à elles, sont définies dans [Baum07d, Baum09]. En utilisant les règles de commutation déjà établies dans [Baum07d, Baum09]

$$\begin{aligned} [X_n, X_{n'}] &= (n-n')X_{n+n'} \\ \left[X_n, Y^{(i)}_m\right] &= \left(\frac{n}{\eta} - m\right)Y^{(i)}_{n+m} \\ \left[Y^{(i)}_m, R^{(i,j)}\right] &= Y^{(j)}_m \\ \left[X_n, R^{(i,j)}\right] = 0 \quad &; \quad \left[Y^{(k)}_m, R^{(i,j)}\right] = 0 \quad \text{if } k\neq i,j \end{aligned} \tag{2.43}$$

il vient que l'ensemble des générateurs précités forment une structure d'algèbre. De plus $[\mathcal{S},\mathcal{X}]=0$ avec tous les générateurs $\mathcal{X}$ de la liste (2.42), sauf deux à savoir

$$\begin{aligned}[\mathcal{S},X_0] &= -\mathcal{S}\\ [\mathcal{S},X_1] &= -2t\mathcal{S}-\frac{2\mathcal{M}}{\eta}\left(2(x+\xi)-(\eta-2+d)-\frac{\gamma}{2\mathcal{M}}\eta^2(2-\eta)\right)\end{aligned} \quad (2.44)$$

Ainsi, les générateurs infinitésimaux (2.42) transforment une solution de l'équation "déterministe" $\mathcal{S}\phi=0$ en une autre solution, à la condition que les dimensions d'échelle x,ξ de ϕ satisfassent

$$x+\xi=\frac{\eta-2+d}{2}+\frac{\eta^2\gamma}{4\mathcal{M}}(2-\eta) \quad (2.45)$$

Pour aller un peu plus loin, rappelons la définition de la moyenne déterministe [Pico04]

$$\langle A\rangle_0 := \int \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\widetilde{\phi}\, A[\phi,\widetilde{\phi}]e^{-\mathcal{J}_0[\phi,\tilde{\phi}]}. \quad (2.46)$$

En utilisant les commutateurs successifs des générateurs $Y_m^{(i)}$, il vient que ces moyennes déterministes obéissent aux règles de sélection généralisées de Bargmann[Baum07d, Baum09]

$$\left\langle \underbrace{\phi\ldots\phi}_{n}\underbrace{\widetilde{\phi}\ldots\widetilde{\phi}}_{m}\right\rangle_0 = 0, \qquad \text{sauf si } n=m \quad (2.47)$$

Maintenant que nous avons énoncé tout ce dont nous avions besoin, il est temps d'appliquer, au cas qui nous intéresse, une analyse analogue à celle qui avait été conduite dans le cas $z=2$ [Pico04].

2.4.2 Application au BCPL

1. Dans le but de calculer la fonction de réponse, il est possible de traiter la partie"bruitée" $\mathcal{J}_b$ de l'action comme une perturbation. En utilisant les relations (2.39) et (2.47), nous avons

$$\begin{aligned}R(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \left\langle \phi(t,\mathbf{r})\widetilde{\phi}(s,\mathbf{r}')e^{-\mathcal{J}_b[\phi,\widetilde{\phi}]}\right\rangle_0\\ &= \left\langle \phi(t,\mathbf{r})\widetilde{\phi}(s,\mathbf{r}')\right\rangle_0\\ &= R(t,s)\int_{\mathbb{R}^d}\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\mathbf{k}^{\beta_R}\exp\left(\frac{\mathrm{i}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\mathbf{k}}{(t-s)^{1/z}}-\alpha_R|\mathbf{k}|^z\right)\\ &=: R(t,s)\mathcal{F}^{(\alpha_R,\beta_R)}\left(\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}{(t-s)^{1/z}}\right)\end{aligned} \quad (2.48)$$

et où nous avons utilisé les formes explicites obtenues à partir de la covariance de la fonction de réponse sans bruit. Ceci montre que la fonction de réponse ne dépend pas explicitement du bruit et peut donc être trouvée directement à partir des

symétries (2.42) de la partie "déterministe" seule. En particulier, les formes de la fonction d'autoréponse $R(t,s) = R(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r})$ sont déterminées par sa covariance sous l'action du générateur X_1. Il vient alors

$$R(t,s) = s^{-a-1}\left(\frac{t}{s}\right)^{1+a'-\lambda_R/z}\left(\frac{t}{s}-1\right)^{-1-a'} \tag{2.49}$$

Ce résultat est en accord avec les formes d'échelle (tableau 2.2) calculées dans la section précédente avec les exposants $a' = a = d/\eta - 1$, $\lambda_R = d$.

2. Pour le corrélateur, en généralisant la méthode donnée dans [Baum06a] pour $z = \eta < 2$, et en suivant [Baum06a, Baum09], nous trouvons

$$C(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}') = \left\langle \phi(t,\mathbf{r})\phi(s,\mathbf{r}')e^{-\mathcal{J}_b[\phi,\widetilde{\phi}]}\right\rangle_0 \tag{2.50}$$

En développant les exponentielles et en utilisant alors les régles de sélection de Bargmann, nous trouvons que le corrélateur est la somme de deux termes $C_1(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}')$ et $C_2(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}')$ dont les expressions sont

$$C_1(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}') = -2\mu\rho_0\int \mathrm{d}\mathbf{R}\int \mathrm{d}u\left\langle \phi(t,\mathbf{r})\phi(s,\mathbf{r}')\widetilde{\phi}^2(u,\mathbf{R})\right\rangle_0 \tag{2.51}$$

et

$$C_2(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}') = \mu^2\int \mathrm{d}\mathbf{R}\mathrm{d}\mathbf{R}'\int \mathrm{d}u\mathrm{d}u'\langle\phi(t,\mathbf{r})\phi(s,\mathbf{r}')\Upsilon(u,\mathbf{R})\Upsilon(u',\mathbf{R}')\rangle_0 \tag{2.52}$$

et où $\Upsilon := \widetilde{\phi}^2\phi$ est un champ composite avec pour une dimension d'échelle $x_\Upsilon = 2\widetilde{x} + x$. De plus, chacun des deux termes du corrélateur peut être factorisé comme un produit de fonction de réponse [Baum07d] de telle façon que

$$\begin{aligned} C_1(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}') &= -2\mu\rho_0\int \mathrm{d}\mathbf{R}\int \mathrm{d}u\ \langle\phi(t,\mathbf{r})\widetilde{\phi}(u,\mathbf{R})\rangle_0\cdot\langle\phi(s,\mathbf{r}')\widetilde{\phi}(u,\mathbf{R})\rangle_0 \\ &= -2\mu\rho_0 s^{-1-2a}\int_0^1 \mathrm{d}u\int_{\mathbb{R}^d}\mathrm{d}^d\mathbf{R}\ u^{-3-3a+\lambda_R/\eta}\left(\frac{t}{su}-1\right)^{-1-a}\left(\frac{1}{u}-1\right)^{-1-a} \\ &\quad\times\left(\frac{t}{su}\right)^{1+a-\lambda_R/\eta}\mathcal{F}^{(\alpha_1,\beta_1)}\left(\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})}{s^{1/\eta}(1-u)^{1/\eta}}\right)\mathcal{F}^{(\alpha_2,\beta_2)}\left(\frac{(\mathbf{r}'-\mathbf{R})}{s^{1/\eta}(t/s-u)^{1/\eta}}\right) \end{aligned} \tag{2.53}$$

et

$$\begin{aligned} C_2(t,s;\mathbf{r},\mathbf{r}') &= 2\mu^2\int \mathrm{d}\mathbf{R}\int \mathrm{d}u\ \langle\phi(t,\mathbf{r})\Upsilon(u,\mathbf{R})\rangle_0\cdot\langle\phi(s,\mathbf{r}')\Upsilon(u,\mathbf{R})\rangle_0 \\ &= s^{1+\frac{4(x+\widetilde{x})}{\eta}}2\mu^2\int_0^1 \mathrm{d}u\int_{\mathbb{R}^d}\mathrm{d}^d\mathbf{R}\ u^{\frac{4(x+\widetilde{x})}{\eta}}\left(\frac{t}{su}-1\right)^{-2((2\xi+x)+(2\xi_\Upsilon+x_\Upsilon))/\eta} \\ &\quad\times\left(\frac{1}{u}-1\right)^{-2((2\xi+x)+(2\xi_\Upsilon+x_\Upsilon))/\eta}\left(\frac{t}{su}\right)^{2(2\xi_\Upsilon+x_\Upsilon-x)/\eta} \\ &\quad\times\left(\frac{t}{su}\right)^{1+a-\lambda_R/\eta}\mathcal{F}^{(\alpha_1,\beta_1)}\left(\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{R})}{s^{1/\eta}(1-u)^{1/\eta}}\right)\mathcal{F}^{(\alpha_2,\beta_2)}\left(\frac{(\mathbf{r}'-\mathbf{R})}{s^{1/\eta}(t/s-u)^{1/\eta}}\right) \end{aligned} \tag{2.54}$$

En utilisant $a = \frac{x+\widetilde{x}}{\eta} - 1$, une analyse dimensionelle conduit à

$$C_n(t, s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = s^{1-2nd/\eta} F_n(t/s, \mathbf{r}s^{-1/\eta}, \mathbf{r}'s^{-1/\eta}) \tag{2.55}$$

avec $n = 1, 2$ et F_n sont des fonctions d'échelle. Il s'en suit que dans le régime d'échelle $s \to \infty$ (avec les autres variables d'échelle fixées) le terme C_2 est négligeable. Il ne reste donc qu'à montrer que le terme C_1 est compatible avec les expressions données dans le tableau 2.2. En utilisant l'identité [Baum07d],

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}\mathbf{R}\mathrm{d}\mathbf{R}' \, \mathcal{F}^{(\alpha_1,\beta_1)}\left(c\mathbf{R} + \mathbf{a}\right) \mathcal{F}^{(\alpha_2,\beta_2)}\left(d\mathbf{R} + \mathbf{b}\right) g(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \qquad (2.56) \\ = & \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\mathrm{d}^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\mathrm{d}^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{\mathbf{i}\mathbf{a}\cdot\mathbf{k} + \mathbf{i}\mathbf{b}\cdot\mathbf{q}} \widetilde{g}(c\mathbf{k}, d\mathbf{q}) |\mathbf{k}|^{\beta_1} |\mathbf{q}|^{\beta_2} \exp(-\alpha_1 |\mathbf{k}|^\eta) \exp(-\alpha_2 |\mathbf{q}|^\eta) \end{aligned}$$

Pour retrouver l'expression donnée dans l'eq (2.53), nous imposons que

$$g(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}'). \tag{2.57}$$

Sa transformée de Fourier s'écrit

$$\widetilde{g}(c\mathbf{k}, d\mathbf{q}) = (2\pi)^d \delta(\mathbf{k} + \mathbf{q}). \tag{2.58}$$

Nous pouvons alors, avec $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ et $\alpha_1 = \alpha_2$, trouver

$$\begin{aligned} C_1(t, s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -2\mu\rho_0 s \int_0^1 \mathrm{d}u \; u^{-2-2a+2\lambda_R/\eta} (t/s - u)^{-1-a+\lambda_R/\eta} (1-u)^{-1-a+d/\eta} \\ &\quad \times \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\mathrm{d}^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} |k|^{2\beta} e^{\mathrm{i}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\mathbf{k} - 2\alpha_1 |\mathbf{k}|^\eta (t+s-2us)} \end{aligned} \tag{2.59}$$

Comme $a = d/\eta - 1$ et $\lambda_R = d$, le corrélateur s'écrit

$$C_1(t, s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -2\mu\rho_0 \int_0^s \mathrm{d}u \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\mathrm{d}^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} |\mathbf{k}|^\beta e^{-2\alpha_1 |\mathbf{k}|^\eta (t+s-2u)} e^{\mathrm{i}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\mathbf{k}} \tag{2.60}$$

où nous identifions

$$\begin{aligned} \beta &= 0 \\ \alpha_1 &= \frac{\mathrm{i}^\eta}{2\mathcal{M}} = \frac{c}{2} > 0 \\ \mathcal{M} &= \frac{\mathrm{i}^\eta}{c} \end{aligned}$$

pour retrouver l'expression (2.29).

Ainsi, bien que la théorie des champs du BCPL ne soit pas libre, la structure de sa partie "déterministe" eq (2.41) est suffisamment simple pour expliquer les résultats exacts en tant que manifestation de l'invariance d'échelle locale.

2.5 Temps de passage vers le régime de vieillissement

Dans la section précédente, nous avons analysé le comportement d'échelle du BCPL et du BPCPL. Maintenant, nous analysons comment à partir d'un état initial ce régime d'échelle est atteint. Comme le BCPL et le BPCPL avec $\alpha < \alpha_C$ sont dans la même classe d'universalité, nous allons nous limiter dans la suite au BCPL et même au BCPD. Cette analyse est une généralisation d'un précédent travail de Zippold *et al.* [Zipp00], qui a examiné cette question dans le modèle sphérique à basse température,

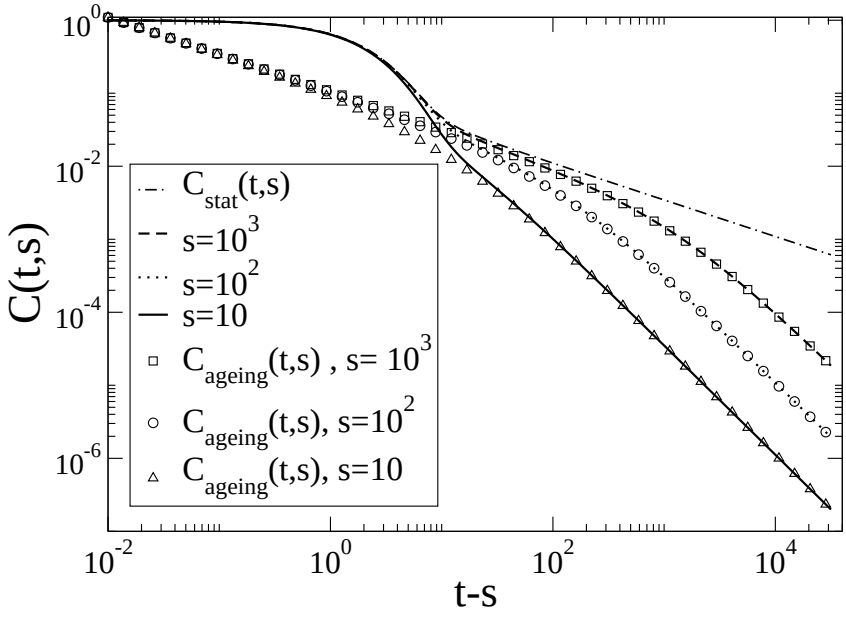


FIGURE 2.4 – *Autocorrélateur $C(t,s)$ du processus de contact bosonique avec $\eta = 2$ en $3D$. Il est représenté comme une fonction du temps de séparation $t-s$, pour différentes valeurs du temps d'attente s. Les lignes en trait plein représentent le corrélateur total, les lignes pointillés représentent le corrélateur stationnaire de l'eq. (2.62) et enfin les symboles les contributions d'échelle $C_{\rm ageing}(t,s) = s^{-b} f_C(t/s)$.*

Dans la figure 2.4 nous montrons la fonction d'autocorrélation $C(t,s)$ comme une fonction du temps de séparation $t-s$. Pour des petits temps de séparations, l'autocorrélateur reste assez proche de l'état quasi-stationnaire, invariant par translation temporelle grâce à la condition initiale de Poisson. Ensuite, l'autocorrélateur plonge vers le régime d'échelle où le comportement est de type vieillissement lorsque $t-s$ devient grand. Pour définir une mesure de ce passage, nous considérons l'erreur relative suivante

$$\delta C(t,s) = \left| \frac{C(t,s) - C_{stat}(t,s)}{C_{ageing}(t,s) - C_{stat}(t,s)} \right| \tag{2.61}$$

où $C_{stat}(t,s)$ est le corrélateur quasi-stationnaire définit par

$$C_{stat}(t,s) = \alpha\rho_0 \int_{\frac{t-s}{2}}^{\infty} \mathrm{d}\tau \int_0^{\pi} \mathrm{d}q\, q^{d-1}\, \exp\left(\omega(q)\,\tau\right) \tag{2.62}$$

et $C_{ageing}(t,s) = s^{-b} f_C(t/s)$ est l'autocorrélateur dans le régime de vieillissement, voir eq. (2.29). Comme $0 \leq \delta C(t,s) \leq 1$, nous considérons arbitrairement que le système est dans le régime stationnaire tant que $\delta C(t,s) < 10\%$ et entre dans le régime de vieillissement à partir de $\delta C(t,s) > 90\%$. Dans la figure 2.5, nous avons représenté cette erreur relative comme une fonction du temps de séparation $t-s$ pour différentes valeurs du temps d'attente s. Nous pouvons clairement observer sur cette figure que le passage de la quasi-stationnarité vers le régime de vieillissement est relativement bien défini et abrupt.

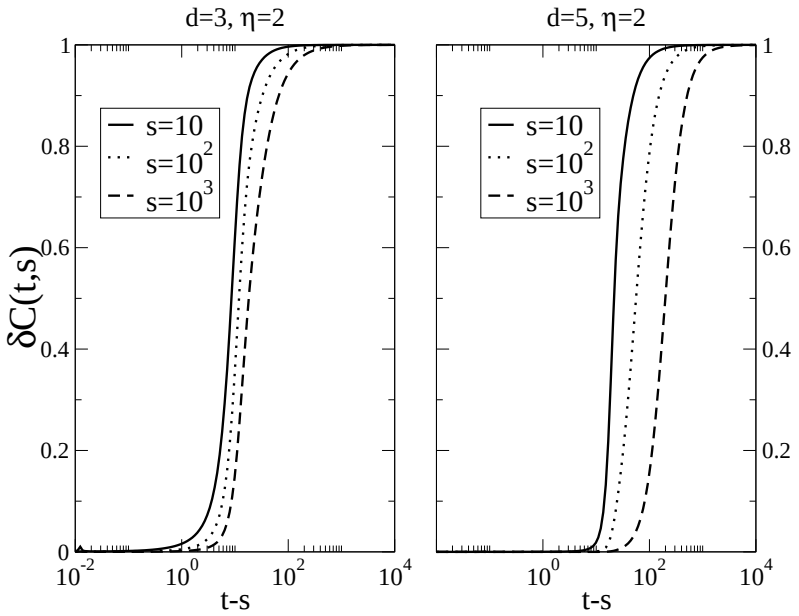


FIGURE 2.5 – *Erreur relative $\delta C(t,s)$ comme une fonction du temps de séparation $t-s$ pour différentes valeurs du temps d'attente s dans le BCPD. Le graphique de gauche est valable pour la dimension $d=3$, et celui de droite pour $d=5$.*

Deux transitions peuvent être définies :

1. le système quitte le régime quasi-stationnaire au temps d'échelle $\tau_{\mathrm{stat}}(s)$ défini de telle façon que

$$\delta C(\tau_{\mathrm{stat}}(s)+s, s) = 0.1 \tag{2.63}$$

2. le système entre dans le régime de vieillissement au temps d'échelle $\tau_{\mathrm{ageing}}(s)$ défini par

$$\delta C(\tau_{\mathrm{ageing}}(s)+s, s) = 0.9 \tag{2.64}$$

Ces temps de transitions sont représentés comme une fonction du temps d'attente s pour plusieurs valeurs de la dimension du système dans la figure 2.6. Nous trouvons que pour des temps d'attente s suffisamment grand le comportement asymptotique du temps de passage vers le régime de vieillissement est

$$\tau_{ageing}(t,s) = A\, s^{\zeta} \tag{2.65}$$

où A dépend de la dimension et $\zeta < 1$ est l'*exposant de passage*. En principe, cet exposant ζ devrait dépendre et de la dimension d et du paramètre de Lévy η. Cependant, comme illustré par la figure 2.7, ζ ne dépend que du rapport d/η. En effet, nous obtenons un très bon accord des courbes représentant $\tau_{\rm ageing}(s)$ pour des valeurs différentes de d et η mais pour des mêmes rapports d/η. Ainsi, il est suffisant de regarder les modèles avec un rapport d/η fixé. C'est pour cette raison que nous avons opéré nos calculs sur le BCPD.

La dépendance de ζ envers la dimension d est montrée dans la figure 2.5 pour $\eta = 2$ et dans le tableau 2.3. De manière analogue à l'étude de Zippold et *et al.* [Zipp00] pour le modèle sphérique et les verres de spins sphériques subissant une trempe sous-critique, nos résultats pour l'exposant de passage indique que $\zeta < 1$. Dans le tableau 2.3 nous avons listé des valeurs connues de cet exposant ζ. En conclusion, nous avons le même comportement qualitatif du temps de passage entre le régime d'échelle et le régime de vieillissement. $\tau_{\rm ageing}(s) \sim s^{\zeta}$ avec $0 < \zeta < 1$ reste donc apparemment vrai aussi pour les systèmes critiques. La forme de l'expression du temps de passage est un des ingrédients pour l'établissement des formes d'échelle du corrélateur à deux temps

$$C(t,s) = C_{\rm st}(t-s) + C_{\rm age}(t,s), \tag{2.66}$$

et où [Andreanov06]

$$C_{\rm age}(t,s) = \mathcal{C}\left(\frac{h(t)}{h(s)}\right) \quad , \quad h(t) = h_0 \exp\left[\frac{1}{A}\frac{t^{1-\mu}-1}{1-\mu}\right]. \tag{2.67}$$

Dans cette dernière expression, $\mathcal{C}$ est une fonction d'échelle, μ un paramètre libre relié à ζ et h_0 ainsi que A sont des constantes de normalisation. Cependant, alors que pour des trempes sous-critiques avec $T < T_c$ on trouve généralement que ζ devrait décroître avec d, voir le tableau 2.3 [Zipp00], nous trouvons pour des systèmes critiques un tendance inverse, voir la figure 2.5 et le tableau 2.3.

Le passage vers le régime de vieillissement peut enfin se comprendre d'une manière plus "heuristique" en utilisant le rapport fluctuation dissipation. Etant donné que pour le BCPL, les exposants de vieillissement $a = b$ sont égaux, nous allons définir un analogue de rapport fluctuation-dissipation

$$X(t,s) = \frac{\frac{\partial C}{\partial s}(s,s)}{R(s,s)}\,\frac{R(t,s)}{\frac{\partial C}{\partial s}(t,s)} \tag{2.68}$$

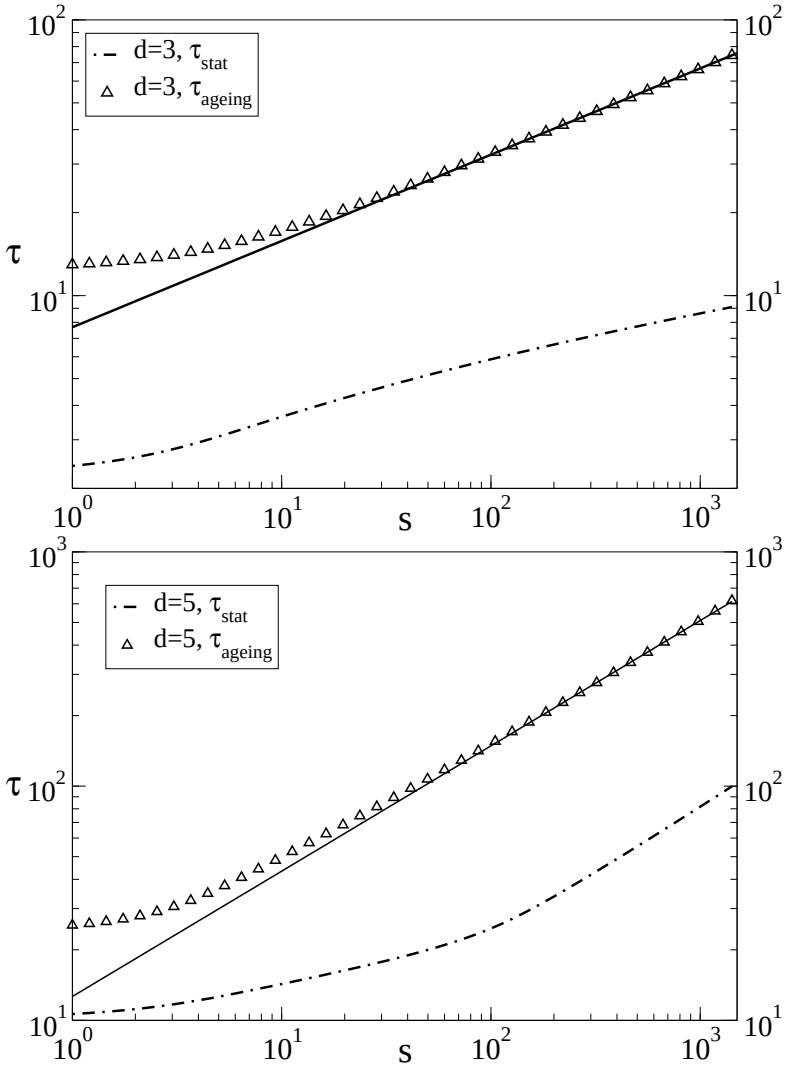


FIGURE 2.6 – *Temps de passage $\tau_{\mathrm{stat}}(s)$ (courbes du bas) et $\tau_{\mathrm{ageing}}(s)$ (courbes du haut) comme une fonction de s du BCPD, en $3D$ (graphique de gauche) et en $5D$ (graphique de droite). Les lignes en trait plein représente la courbe de tendance linéaire $\tau_{\mathrm{ageing}}(s) = 7.7 \cdot s^{0.31}$ pour $d = 3$ et $\tau_{\mathrm{ageing}}(s) = 12.6 \cdot s^{0.53}$ pour $d = 5$.*

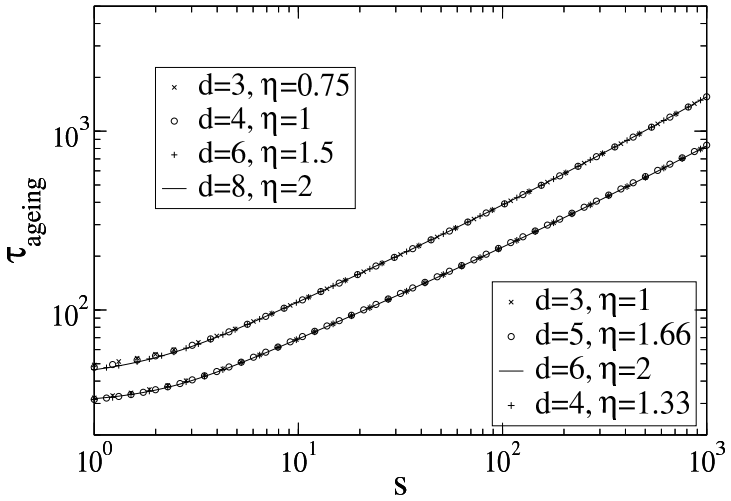


FIGURE 2.7 – *Dépendance du temps de passage $\tau_{\rm ageing}(s)$ envers le rapport d/η. L'ensemble des courbes du haut correspond à $d/\eta = 4$ et celle du bas correspond à $d/\eta = 3$.*

Ici, le RFD initial va jouer le rôle et remplacer la température que l'on pourra définir dans un système avec un état d'équilibre. Ainsi avec nos expressions exactes (tab. 2.2) injectées dans la définition ci-dessus, nous trouvons dans le régime de vieillissement.

$$X_{\rm ageing}(t,s) = \frac{1}{1+\left(\frac{t-s}{t+s}\right)^{d/\eta}} \tag{2.69}$$

Dans la figure 2.9, nous représentons $X(t,s)$ et $X_{\rm ageing}(t,s)$ comme des fonctions du temps de séparation $t-s$ pour différentes valeurs du temps d'attente s. Nous pouvons identifier trois régimes distincts

1. un régime quasi-stationnaire avec une relaxation microscopique pour $t-s \ll \tau_{\rm stat}(s)$
2. un régime de transition non-analytique pour $\tau_{\rm stat}(s) \ll t-s \ll \tau_{\rm ageing}(s)$
3. et enfin le régime de vieillissement lorsque $t-s \gg \tau_{\rm ageing}(s)$.

Les points en gras dans la figure 2.9 indiquent les transitions entre ces trois régimes. Nous constatons d'ailleurs que le RFD est encore très proche de 1, sa valeur initiale, lorsque le système quitte son régime quasi-stationnaire et est déjà proche de sa valeur finale $X_\infty = \frac{1}{2}$ lorsque ce même système entre dans le régime de vieillissement.

2.6 Conclusions

Par l'analyse des comportements d'échelle hors équilibre de ces deux modèles bosoniques de réactions de particules avec un transport des particules individuelles de type "Lévy", caractérisé par le paramètre η, nous avons obtenu les résultats suivants :

modèle		condition	d	ζ	Ref.
XY		$T = 0$	1	$2/3$	[Godr03]
sphérique		$T < T_c$	> 2	$4/(d+2)$	[Zipp00]
p-spin spherical glass	$p = 2$	$T < T_c$	–	$4/5$	[Zipp00]
	$p = 3$	$T < T_c$	–	≈ 0.68	[Kim00]
BCPD		$\lambda = \mu$	3	$0.31(1)$	
			3.5	0.40(1)	
			4	0.47(1)	
			5	0.53(1)	
			6	0.58(1)	
sphérique		$T = T_c$	3	$0.33(1)$	
			5	$0.40(1)$	

TABLE 2.3 – *Valeurs de l'exposant de passage ζ défini dans l'eq. (2.65) pour différents modèles.*

1. Grâce à l'absence de la contrainte fermionique dans ces modèles, ils deviennent exactement résolubles dans tout l'espace des paramètres pour le BCPL et le long de la ligne critique pour BPCPL. Comme le nombre global de particules est conservé le long de la ligne critique, toute l'information sur la nature de la transition de phase est contenue dans le moment d'ordre deux, à savoir la variance de la distribution de particules. On a montré d'ailleurs que le BCPL et le BPCPL peuvent donner lieu à un regroupement des particules sur très peu de sites : on a alors parlé d'amas ou de condensation de particules.
2. En partant d'une condition intiale telle que le système est loin de son état stationnaire, les corrélateur et réponse à deux temps obéissent au même genre de comportement d'échelle, discuté dans le premier chapitre, voir eq. (1.14,1.15). Ces comportements d'échelle ont déjà été trouvés dans d'autres modèles dont la dynamique ne satisfait pas le bilan détaillé. L'ensemble des exposants et des fonctions d'échelle a été condensé dans les tableaux 2.1 et 2.2. Ils sont valables pour toute valeur de η tel que $0 < \eta < 2$.

   Pour $\eta = 2$, nos résultats retombent sur ceux du cas diffusif (à savoir les modèles BCPD, et BPCPD [Houch02, Paes04a, Baum05]).
3. Nous avons profité du fait de ces résultats exacts pour tester la formulation de l'invariance d'échelle locale lorsque l'exposant dynamique est différent de 2. Nous rappelons que nous avons trouvé $z = \eta < 2$.
4. Enfin, nous avons là encore utilisé ces résultats exacts pour déterminer le temps de passage entre les différents régimes ; par analogie avec des études faites précédemment dans les systèmes non-critiques [Zipp00, Godr03], nos résultats suggèrent que le temps de passage dépend du temps d'attente s aussi bien pour les aimants "critiques" que pour les systèmes sans bilan détaillé, puisque l'on trouve que $\tau_{\text{ageing}}(s) \sim s^{\zeta}$ avec $0 < \zeta < 1$.

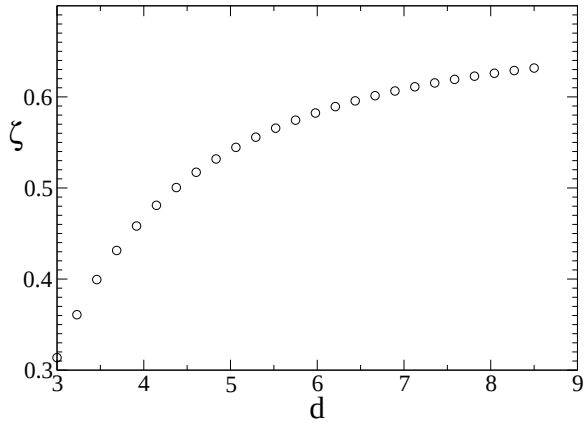


FIGURE 2.8 – *Exposant ζ en fonction de la dimension d pour le BCPD (où $\eta = 2$). Les résultats restent valables pour le BCPL en remplaçant d par $\eta d/2$.*

Ainsi se clot la première étude sur ce modèle dont la dynamique ne satisfait pas le bilan détaillé. Nous retiendrons de ceci qu'elle nous a permis d'étendre le domaine d'applicabilité de certaines relations et d'avoir une première idée de la signification d'un rapport fluctuation-dissipation dans ce type de modèle. Nous allons dans les deux chapitres suivants nous intéresser à un autre modèle exactement résoluble : le processus coagulation-dissipation.

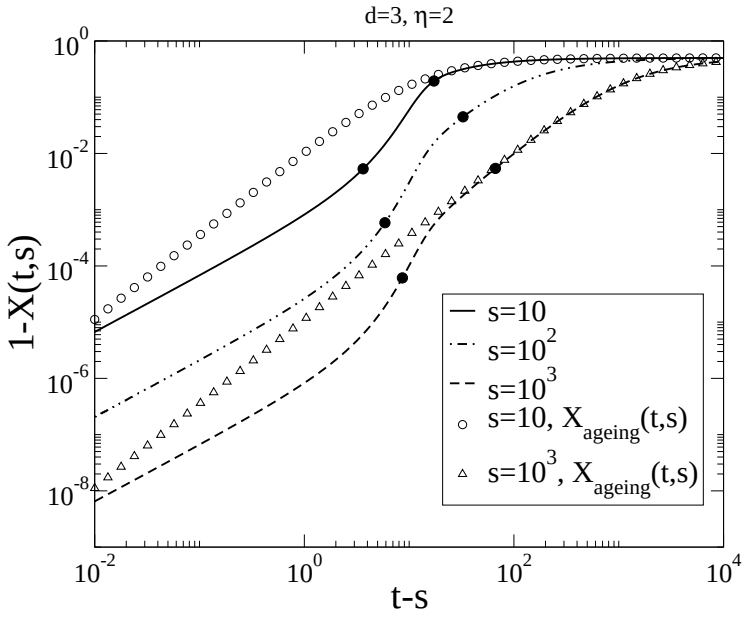


FIGURE 2.9 – *Rapport fluctuation-dissipation $X(t,s)$ en trait plein et sa valeur limite dans le régime de vieillissement $X_{\mathrm{ageing}}(t,s)$ représenté par des symboles. Ce rapport est tracé en fonction du temps de séparation $t-s$ pour différentes valeurs du temps d'attente s dans le cas du BCPD en 3 dimensions.*

Chapitre 3

Processus coagulation-diffusion Quantités à un temps

Ce modèle est un des exemples les plus étudiés de processus où la diffusion est limitante. Depuis les travaux de Toussaint et Wilczek [Tous83], il est connu que la concentration particulaire se comporte comme $c(t) \sim t^{-1/2}$ pour des temps longs et avec une amplitude universelle comme ce fut confirmé par le groupe de renormalisation [Lee94, Balb95]. Notons qu'un traitement type champ moyen aurait donné $c(t) \sim t^{-1}$.

Ce modèle décrit les intéractions de particules indiscernables A, tel que chaque site d'une chaine infinie puisse soit être libre soit occupé par une particule. La dynamique du système est décrite en terme de processus de Markov, où les réactions à deux sites admissibles sont les suivantes :

$$\begin{aligned} A + \emptyset &\xrightarrow{\Gamma} \emptyset + A \\ \emptyset + A &\xrightarrow{\Gamma} A + \emptyset \\ A + A &\xrightarrow{\Gamma} \emptyset + A \\ A + A &\xrightarrow{\Gamma} A + \emptyset \end{aligned}$$

A chaque pas de temps, une particule est aléatoirement choisie pour sauter sur un site voisin avec un taux $\Gamma := D\mathtt{a}^2$, où a est le pas du réseau. Si le site est vide, la particule est déplacée sur ce nouveau site. Par contre, si le site est occupé, une des deux particules est supprimée du système avec une probabilité 1 et la particule restante se trouve sur le site ciblé.

Le processus coagulation diffusion à une dimension est un modèle exactement résoluble, voir [benA00] comme revue. Il est donc un candidat idéal pour mieux comprendre les systèmes à grand nombre de degré de liberté, en particulier à basse dimension, où les fluctuations sont suffisamment importantes pour rendre les approximations usuelles de type champ moyen inapplicables.
La plupart des études ont été menées avec pour objectif le calcul de la densité en fonction du temps, ce qui a été fait en utilisant la *méthode des intervalles vides* dans [benA90,

Doer92, benA00, Spou88]. Notons $E_n(t)$ la probabilité d'avoir un intervalle vide d'au moins n sites consécutifs sur un réseau au temps t (voir figure 3.1a).

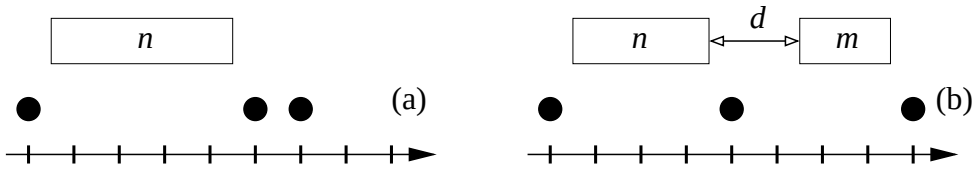


FIGURE 3.1 – *Définition de (a) la probabilité à un intervalle vide E_n de longueur au moins égale à n et (b) la probabilité à deux intervalles vides $E_{n,m}(d)$ de longueur au moins égales à n, m et distants de d.*

Si l'on effectue une limite continue $\mathrm{a} \to 0$, nous avons $E_n(t) \to E(x,t)$ et il est possible de montrer que la distribution E satisfait une équation de diffusion

$$(\partial_t - 2D\partial_x^2)E(x,t) = 0$$

avec pour contrainte $E(0,t) = 1$. La densité de particule s'écrit alors

$$c(t) = -\partial_x E(x,t)|_{x=0} \sim t^{-1/2}$$

dans les limites des temps longs. C'est un résultat classique [Tous83, Spou88] qui illustre bien qu'en dimension réduite l'approche type champ moyen devient incorrecte du fait des fluctuations importantes.

Nous nous attacherons dans les deux premières sections à préciser les relations existant avec d'autres modèles et à donner un bref aperçu des travaux expérimentaux menés pour vérifier ou utiliser les prédictions théoriques. Ensuite dans une seconde section, nous nous attarderons à retrouver les résultats pour la concentrations de particules pour illustrer, dans cet exemple simple, la technique utilisée. Enfin dans les sections suivantes, nous montrerons les étapes nécessaires à la déduction du corrélateur à un temps.

3.1 Relations avec d'autres modèles

Le modèle de coagulation-diffusion que nous nous sommes décidés à résoudre dans cette partie de la thèse n'est pas sans relation avec d'autres modèles existants. En effet, une connexion existe entre lui et le modèle d'annihilation de paires, lui-même relié au modèle de Glauber-Ising à température nulle.

Dans la formulation standard opératorielle, il est possible d'associer à chaque site i du réseau deux états orthogonaux $|0\rangle$ et $|1\rangle$ ou encore $|n_i\rangle$. L'équation maîtresse du processus peut s'écrire sous la forme

$$\partial_t |P(t)\rangle = -H |P(t)\rangle \,, \tag{3.1}$$

où $|P(t)\rangle = \sum_{\{n\}} P(\{n\};t)\,|\{n\}\rangle$ décrit l'état du système. En particulier, l'opérateur H pour la coagulation-diffusion prend la forme suivante dans le sous-espace $|n_i, n_{i+1}\rangle$ [Mayer07]

$$H_i^c = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -D & D & \gamma \\ 0 & D & -D & \gamma \\ 0 & 0 & 0 & -2\gamma \end{pmatrix}_{i,i+1}$$

où D est le taux de diffusion, et γ est le taux de coagulation. Ce processus est en fait équivalent au processus

$$H_i^a = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & -D & D & 0 \\ 0 & D & -D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha \end{pmatrix}_{i,i+1}$$

qui correspond au processus d'annihilation de paires (Diffusion et $A+A \to \emptyset$). Ce résultat est obtenu via une transformation stochastique de similarité avec $b = |0\rangle\langle 0| + 2\,|1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 1|$ tel quel

$$H^c = BH^aB^{-1} \tag{3.2}$$

où

$$B = b^{\otimes N} \tag{3.3}$$

et avec la condition $\alpha = 2\gamma$, voir [Henk95, Kreb95].

Il existe alors une relation très simple entre le modèle de Glauber-Ising à température nulle et le processus d'annihilation de paires, comme présenté dans la figure 3.2.

3.2 Réalisations expérimentales

La plupart des prédictions théoriques sur les effets des fluctuations ont aussi fait l'objet d'études expérimentales. Nous allons donner ici un bref aperçu de ces travaux en commençant par la cinétique d'excitons le long d'une chaîne de polymères TMMC = $(CH_3)_4N(MnCl_3)$ [Kroo93], puis dans d'autres polymères confinés dans une géométrie quasi-unidimensionelle [Pras89, Kope90]. Enfin, une application plus récente de processus réaction-diffusion concernent la relaxation de photoexcitations dans des nanotubes de carbone [Russ06] ou la saturation de la photoluminescence dans ces derniers [Sriv09].

A)La cinétique d'excitons est étudiée dans une chaîne de polymères de type TMMC = $(CH_3)_4N(MnCl_3)$ [Kroo93]. C'est un très bon exemple d'étude expérimentale de la cinétique d'un processus de réaction-diffusion unidimensionel. En effet, le TMMC se

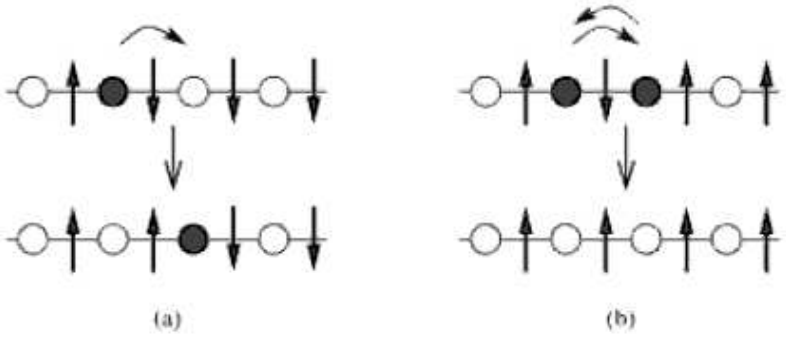


FIGURE 3.2 – *Processus d'annihilation de paires en une dimension avec sa représentation équivalente en termes de spins. En (a), diffusion vers un site vide ou déplacement de la paroi de domaines. En (b), annihilation d'une paire de particules ou suppression d'une paroi de domaines. Tiré de [Krap10].*

comporte pratiquement comme un antiferromagnétique d'Heisenberg en une dimension étant donné que les intéractions entre ions Mn^{2+} sur une même chaine sont quatre ordres de grandeurs supérieures à celles entre différentes chaînes. Le but était de montrer que les excitons subissent des réactions entre eux.

La procédure expérimentale consiste à exciter le TMMC par un laser Nd :YAG pour avoir une densité initiale d'excitons ρ_0 le long de cette chaîne. L'évolution de la densité d'excitons est ensuite suivi par une mesure de la luminescence du TMMC. En effet, dans ce polymère, l'intensité de la luminescence $I(t)$ est proportionnelle à la densité d'excitons puisqu'elle résulte de la désexcitation radiative spontanée de ces derniers. Ainsi, Kroon et *al.* ont pu testé le modèle de réaction-diffusion pour savoir si les excitons réagissaient entre eux et savoir quelle était la dépendance de la luminescence par rapport à la puissance de l'excitation initiale. Dans ce modèle, le processus de coagulation obéit à l'équation suivante :

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -k_T t^{-1/2} \rho^2(t) \tag{3.4}$$

avec

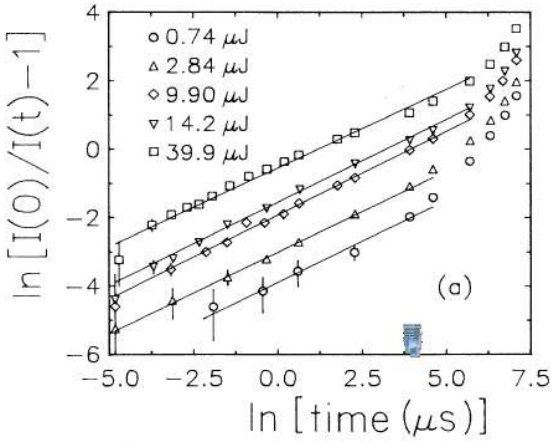
$$k_T = \sqrt{\frac{(\Delta x)^2}{\pi \tau}} \tag{3.5}$$

où Δx est le pas du réseau et τ le temps moyen entre deux sauts d'une particule. A partir de cette équation, l'intensité de la luminescence s'écrit

$$\ln\left(\frac{I(t)}{I(0)} - 1\right) = 0,5 \ln(t) + ln\alpha. \tag{3.6}$$

avec

$$\alpha = \sqrt{(4/\pi)}\rho_0 \sqrt{(1/\tau)} \tag{3.7}$$



Pulse energy (μJ)	Slope	α	$\rho(0)$
0.74	0.480	0.020	5.66×10^{-5}
2.84	0.475	0.049	1.37×10^{-4}
9.90	0.495	0.145	4.07×10^{-4}
14.23	0.485	0.202	5.66×10^{-4}
39.93	0.460	0.625	1.77×10^{-3}

FIGURE 3.3 – *La figure représente les variations de l'inverse de l'intensité $I(t)$ (émise lors de la fusion de deux excitons) en fonction du temps dans un plot ln-ln. On peut observer la partie algébrique et la valeur de la pente de chacune des droites est donnée dans le tableau. Etant donné les valeurs, il est possible d'ajouter que le comportement algébrique est indépendant de l'intensité initiale $I(0)$. Tiré de [Kroo93].*

Les résultats expérimentaux sont ensuite confrontés à cette solution théorique dans la figure 3.3. L'accord est très bon, soulignant que le modèle de réaction-diffusion représente bien le comportement des excitons et ce quelque soit la puissance avec laquelle le laser excite le système.

B) Une étude plus récente [Russ06] s'attache à comprendre la relaxation des photoexcitations dans les nanotubes de carbone. Plus précisément, la population de l'état excité dans une suspension de nanotubes de carbone à simple paroi est suivie par mesure de fluorescence.
Un pompage optique est appliqué à la suspension avec une longueur d'onde fixe de 725nm puis le spectre transitoire en absorption est sondé de 920 à 1430nm pour des temps dans la gamme 0.2 à 120ps. Une fois le spectre en absorption et en fluorescence obtenue, une suspension de nanotubes de carbone à simple paroi est excitée optiquement puis la population d'états excitée est mesurée par fluorescence. Il est alors possible d'extraire par déconvolution la population dans l'état fondamental $C(t)$. La population dans l'état excité est alors donnée par $1 - C(t)$ et est représentée dans la figure 3.4. Dans ce graphe log-log, il est clair que la décroissance se fait en $1/\sqrt{t}$, ce qui est en parfait accord avec la coagulation-diffusion à une dimension.

Cette loi algébrique de décroissance en $1/\sqrt{t}$ pour $1-C(t)$ est la signature d'un processus de diffusion et recombinaison de deux corps. Ceci suggère fortement que le processus de relaxation des photoexcitations comporte une recombinaison de pairs.

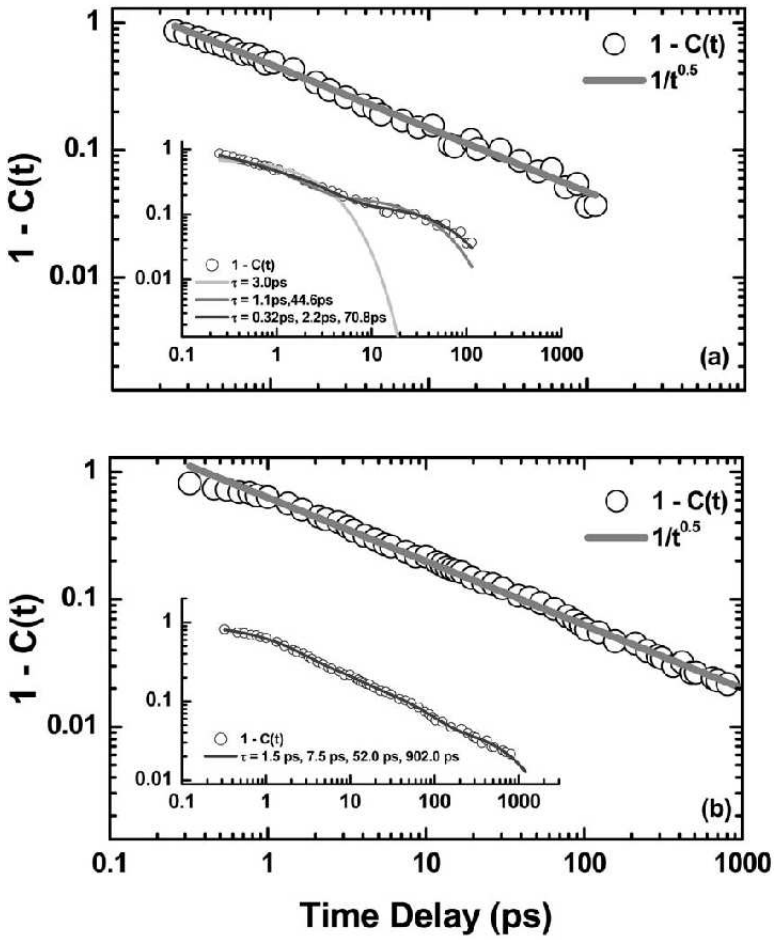


FIGURE 3.4 – *En haut, la population restante dans l'état excité (cercle) est tracée en fonction du temps t dans un graphique log-log. Elle montre un comportement linéaire sur un peu plus de trois décades et sa pente est en $1/\sqrt{t}$. La droite de même équation est donnée pour comparaison. L'insert représente un fit avec des simple-, double-, triple-exponentielles. Ici le nanotube est de type (8,6). En bas, même graphe mais pour des nanotubes de carbones (7,6). Là encore en insert est donné un fit avec des exponentielles.*

3.3 Probabilité à un intervalle

3.3.1 Equation de mouvement

Tout d'abord, commençons par rappeler la dérivation de l'équation de la probabilité à un intervalle vide [benA90]. Nous pourrions aussi utiliser le formalisme hamiltonien [Pesch94], mais gardons le pour les quantités à deux temps.

Nous noterons $E_n(t)$ la probabilité dépendante du temps d'avoir un intervalle d'au moins n sites vides au temps t. Étant donné que nous avons supposé l'invariance par translation spatiale (le système est supposé homogène), $E_n(t)$ ne dépend pas de la position de l'intervalle vide mais uniquement de sa longueur n. Bien entendu, de part la définition du processus de coagulation- diffusion, l'évolution temporelle de cette probabilité est gouvernée par le mouvement diffusif des particules. De fait, il n'y a que deux types de contribution pour l'évolution de $E_n(t)$:

– les particules qui entrent par la droite ou la gauche de l'intervalle vide $E_n(t)$

– les particules qui sont adjacentes à l'intervalle vide $E_{n-1}(t)$ et qui s'en éloignent

Dit autrement, dans un intervalle de longueur n, noté $\boxed{\text{n}}$, une particule (•) peut entrer par la gauche ou la droite de l'intervalle vide entre les temps t et $t + \mathrm{d}t$. La probabilité $E_n(t)$ décroît donc de cette valeur

$$-\Big[\Pr(\bullet \curvearrowright \boxed{\text{n}}) + \Pr(\boxed{\text{n}} \curvearrowleft \bullet)\Big]$$

La probabilité $\Pr(\bullet \curvearrowright \boxed{\text{n}})$ est proportionnelle à la probabilité qu'une particule soit à droite ou à gauche de l'intervalle vide, c'est-à-dire

$$\Pr(\bullet \curvearrowright \boxed{\text{n}}) = \Pr(\bullet \boxed{\text{n}})\Gamma \mathrm{d}t. \tag{3.8}$$

Cette dernière relation peut s'évaluer en utilisant la relation

$$\Pr(\bullet \boxed{\text{n}}) + \Pr(\circ \boxed{\text{n}}) = \Pr(\boxed{\text{n}}) = E_n(t)$$

où le symbole (∘) représente un site vide. Nous pouvons aussi identifier $\Pr(\circ \boxed{\text{n}}) = E_{n+1}(t)$, et ainsi nous obtenons pour la première contribution

$$\Pr(\bullet \boxed{\text{n}}) = \Pr(\boxed{\text{n}} \bullet) = E_n(t) - E_{n+1}(t). \tag{3.9}$$

La seconde contribution pour l'évolution de $E_n(t)$ vient si l'on considère la possibilité qu'une particule soit à droite ou à gauche d'un intervalle de taille $n-1$ et qu'elle s'en éloigne

$$+\Big[\Pr(\curvearrowleft \bullet \boxed{\text{n-1}}) + \Pr(\boxed{\text{n-1}} \bullet \curvearrowright)\Big].$$

Étant donné que le processus $A + A \to A$ contraint chaque site à ne contenir qu'une seule particule, nous n'avons pas à nous soucier du cas où la particule en rencontre une autre

lorsqu'elle s'éloigne de l'intervalle. Comme avant, nous avons

$$\begin{aligned} \Pr(\frown \bullet \boxed{\text{n-1}}) &= \Pr(\bullet \boxed{\text{n-1}})\Gamma \mathrm{d}t \\ &= (E_{n-1}(t) - E_n(t))\Gamma \mathrm{d}t. \end{aligned} \tag{3.10}$$

En sommant alors toutes les contributions, l'évolution de $E_n(t)$ est donnée par

$$\begin{aligned} \partial_t E_n(t) &= 2\Gamma\Big[-\{E_n(t) - E_{n+1}(t)\} + \{E_{n-1}(t) - E_n(t)\}\Big] \\ &= 2\Gamma\left(E_{n-1} - 2E_n + E_{n+1}\right). \end{aligned} \tag{3.11}$$

Attention toutefois, cette équation n'est valable que pour des tailles d'intervalle $n > 1$. Pour le cas $n = 1$, l'évolution de $E_n(t)$ est donnée par

$$\partial_t E_1(t)\mathrm{d}t = \Big[\Pr(\bullet \frown) + \Pr(\frown \bullet) - \Pr(\bullet \frown \circ) - \Pr(\circ \frown \bullet)\Big].$$

De la même manière, nous avons $\Pr(\bullet \frown) = \Pr(\bullet)\Gamma \mathrm{d}t$ et $\Pr(\bullet \frown \circ) = \Pr(\bullet\circ)\Gamma \mathrm{d}t$. Nous pouvons alors évaluer ces quantités en considérant les conditions suivantes

$$\begin{aligned} \Pr(\bullet) &+ \Pr(\circ) = 1 \;\Rightarrow \Pr(\bullet) = 1 - E_1(t) \\ \Pr(\bullet\circ) &+ \Pr(\circ\circ) = \Pr(\circ) \;\Rightarrow \Pr(\bullet\circ) = E_1(t) - E_2(t). \end{aligned} \tag{3.12}$$

Ainsi, l'équation pour $n = 1$ est donnée par

$$\partial_t E_1(t) = 2\Gamma\Big[1 - 2E_1(t) + E_2(t)\Big]. \tag{3.13}$$

Désormais, nous pouvons voir l'équation pour $n = 1$ comme une extension de l'eq. eq. (3.11), en introduisant la contrainte $E_0(t) = 1$. Bien que cette condition soit communément utilisée, elle est néanmoins considérée comme suffisamment compliquée pour qu'une solution de eq. (3.14) soit généralement évitée. Pourtant, nous aurons besoin de la forme explicite de $E(x,t)$ lorsque nous calculerons les fonctions de corrélations, et devons donc la donner.

Dans la limite continue, lorsque le pas du réseau a est petit, nous posons $x = n\mathrm{a}$ et $E(x,t) = E_n(t)$. L'équation précédente eq. (3.11) peut être développée par rapport à a et en introduisant le taux de diffusion rescalé $D = \Gamma/\mathrm{a}^2$, nous obtenons simplement une équation de diffusion couplée à la condition de bord

$$\partial_t E(x,t) = 2D\partial_{xx}E(x,t), \;\text{ et }\; E(0,t) = 1. \tag{3.14}$$

Nous pourrions alors utiliser une transformée de Fourier

$$E(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp(\mathrm{i}kx)\widetilde{E}(k,t) \tag{3.15}$$

pour résoudre l'équation précédente et obtiendrions

$$E(x,t) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}\,\exp\Big[-\frac{1}{{\ell_0}^2}(x-x')^2\Big]E(x',0), \tag{3.16}$$

où les intégrales selon l'axe réel ne sont pas restreintes et où nous avons introduit la *longueur de diffusion*

$$\ell_0 := \sqrt{8Dt} \tag{3.17}$$

qui joue le rôle de la longueur d'échelle de la fonction $E(x,t) = E(x/\ell_0)$.

3.3.2 Effet de la condition au bord : limite continue

L'approche donnée juste avant ne rend compte que d'une partie du problème et laisse de coté la condition au bord $E_0(t) = 1$. Il convient donc de modifier cette solution pour la prendre en compte : pour ce, il suffit de définir dans l'eq. (3.16) la signification de la probabilité $E(x',0)$ lorsque la variable x' est négative.

Lemma 3.3.1 *Si l'on étend la validité de l'eq. (3.11) à tout $n \in \mathbb{Z}$ tout en imposant la contrainte $E_0(t) = 1$, on trouve*

$$E_{-n}(t) = 2 - E_n(t). \tag{3.18}$$

ce qui dans la limite continue conduit à $E(-x,t) = 2 - E(x,t)$.

Démonstration : Nous le prouverons par induction. D'abord, considérons le cas $n = 0$. En utilisant l'eq. (3.11) et $E_0(t) = 1$, nous obtenons

$$\partial_t E_0(t) = 2\Gamma\left(E_{-1} - 2E_0 + E_1\right).$$

ce qui implique que

$$E_{-1}(t) = 2E_0(t) - E_1(t) = 2 - E_1(t). \tag{3.19}$$

Dans le cas général, considérons l'équation de mouvement pour l'index $-n-1$ et supposons (3.18) pour les indices $-n$ et $-n+1$:

$$\begin{aligned} E_{-n-1} &= 2E_{-n} - E_{-n+1} + \frac{1}{2\Gamma}\partial_t E_{-n} \\ &= 2(2-E_n) - (2-E_{n-1}) + \frac{1}{2\Gamma}\partial_t(2-E_n) \\ &= 2 - E_{n+1} \end{aligned}$$

où les équations de mouvement (3.11) ont de nouveau été utilisées. Ainsi s'achève la preuve q.e.d.

Dans la limite continue, cette relation nous autorise à réécrire l'intégrale eq. (3.16) pour que l'intégrant parcours uniquement l'axe positif.

$$E(x,t) = \mathrm{erfc}(x/\ell_0) + \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}\, E(x',0)\Big[e^{-(x-x')^2/{\ell_0}^2} - e^{-(x+x')^2/{\ell_0}^2}\Big]. \tag{3.20}$$

et où erfc est la fonction d'erreur complémentaire [Abramowitz] définie par

$$\mathrm{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-u^2}\mathrm{d}u. \tag{3.21}$$

Cette équation eq. (3.20) est la solution générale pour la probabilité $E(x,t)$ d'avoir une intervalle vide de longueur mininale x au temps t. L'état initial est décrit par la fonction $E(x,0)$. La concentration de particule $c(t) = \Pr(\bullet)/a$ découle dans la limite continue de la relation eq. (3.12) :

$$\Pr(\bullet) \quad + \quad \Pr(\circ) = 1 \;\Rightarrow \Pr(\bullet) = ac(t) = 1 - E_1(t) \tag{3.22}$$

où $ac(t) = 1 - E_1(t) \simeq 1 - E(0,t) - a\partial_x E(x=0,t)$, et ainsi

$$c(t) = -\,\partial_x E(x,t)|_{x=0}\,. \tag{3.23}$$

De part sa définition, $E(x,t)$ peut être réécrite comme une somme des probabilités d'avoir un intervalle vide borné sur sa gauche et de longueur au moins égale à x', c'est-à-dire $P(x',t) = \Pr(\bullet\boxed{\;x'\;})$:

$$E(x,t) = \int_x^\infty \mathrm{d}x'\, P(x',t). \tag{3.24}$$

Il se dessine alors deux conditions aux bords :

- la normalisation : $E(0,t) = \int_0^\infty \mathrm{d}x P(x,t) = 1$
- dans la limite $x \to \infty$, il faut que $E(x,t) \to 0$

Nous pouvons ensuite exprimer $E(x,t)$ en fonctions de $P(x,t)$ en intégrant par partie eq. (3.20) :

$$E(x,t) = 1 - \frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}x'\, P(x',0)\Big[\mathrm{erf}\Big(\frac{x'+x}{\ell_0}\Big) - \mathrm{erf}\Big(\frac{x'-x}{\ell_0}\Big)\Big]. \tag{3.25}$$

La concentration s'obtient dès lors par une simple dérivation par rapport à x et nous obtenons

$$c(t) \;\; = \;\; \frac{2}{\sqrt{\pi}\ell_0}\int_0^\infty \mathrm{d}x'\, P(x',0)\exp\Big(-\frac{x'^2}{{\ell_0}^2}\Big) \tag{3.26}$$

Le comportement aux temps longs de la concentration dépend donc de la condition initiale, caractérisée par $P(x,0)$, de la manière suivante :

Lemma 3.3.2 *Pour des temps suffisamment longs et toutes distributions initiales $P(x,0)$, la concentration décroît comme*

$$c(t) \simeq \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\ell_0} + \mathrm{o}\left({\ell_0}^{-1}\right) \tag{3.27}$$

Démonstration : Comme $P(x,0)$ est une distribution de probabilité normalisée, $\int_0^\infty \mathrm{d}x\, P(x,0) = 1$, nous devons avoir $P(x,0) = \mathrm{o}(1/x)$ lorsque $x \to \infty$. Ainsi eq. (3.26) peut se réécrire sous la forme

$$\begin{aligned} c(t) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\ell_0}\left[1 - \int_0^\infty \mathrm{d}x\, P(x,0)\left(1 - e^{-(x/\ell_0)^2}\right)\right] \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\ell_0} - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}x\, P(x\,\ell_0,0)\left(1 - e^{x^2}\right)}_{\mathrm{o}(1/\ell_0)} \end{aligned} \tag{3.28}$$

où nous avons utilisé le comportement pour les x grands de $P(x,0)$ dans l'estimation de l'intégrale. q.e.d.

Nous pouvons obtenir le même résultat par un développement formel de l'exponentielle. Si le second moment de P est bien défini, nous obtiendrions

$$c(t) \simeq \frac{2}{\sqrt{\pi}\ell_0}\Big(1 - \frac{\langle x^2\rangle}{{\ell_0}^2}\Big) + \mathrm{o}({\ell_0}^{-2}). \tag{3.29}$$

Pour le cas où ce second moment diverge, considérons l'exemple suivant

$$P(x,0) = \frac{a_0}{1 + x^{1+\alpha}}, \tag{3.30}$$

où $0 < \alpha < 1$ et $a_0 = (1+\alpha)\sin[\pi/(1+\alpha)]/\pi$ est le facteur de normalisation. Dans cet exemple, nous obtiendrions par un calcul analogue à celui fourni dans la démonstration du lemme 2.2

$$\begin{aligned} c(t) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, a_0 \frac{\exp\left(-\frac{x^2}{{\ell_0}^2}\right)}{1 + x^{1+\alpha}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}\left[1 - a_0\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{1 - \exp\left(-\frac{x^2}{{\ell_0}^2}\right)}{1 + x^{1+\alpha}}\right] \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}\left[1 - \frac{a_0}{{\ell_0}^\alpha}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{1 - e^{-x^2}}{{\ell_0}^{-1-\alpha} + x^{1+\alpha}}\right] \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}\left[1 - \frac{a_0}{{\ell_0}^\alpha}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{1 - e^{-x^2}}{x^{1+\alpha}} + \cdots\right]. \end{aligned} \tag{3.31}$$

Notons que si chaque site est occupé initialement avec une probabilité p, la concentration est égale à $c_O = p/a$ et la fonction $E_n(0)$ est proportionnelle à

$$E_n(0) \sim (1-p)^n = (1 - ac_0)^{x/a} \stackrel{a\to 0}{\longrightarrow} E(x,0) = \exp(-c_0 x) \tag{3.32}$$

Par contre, si le système est initialement totalement rempli de particules, $p = 1$, alors $E_n(0) = 0$ pour $n \neq 0$ et donc de eq. (3.20) on trouve que $E(x,t)$ se réduit à $\mathrm{erfc}(x/\ell_0)$. Dans le cas plus général d'une concentration initiale c_0 avec $E(x,0) = e^{-c_0 x}$, nous avons alors $P(x,0) = c_0 e^{-c_0 x}$ et de eq. (3.26) on tire que

$$c(t) = c_0 \exp\left(\frac{1}{4} c_0^2 {\ell_0}^2\right) \mathrm{erfc}\left(\frac{c_0 \ell_0}{2}\right). \tag{3.33}$$

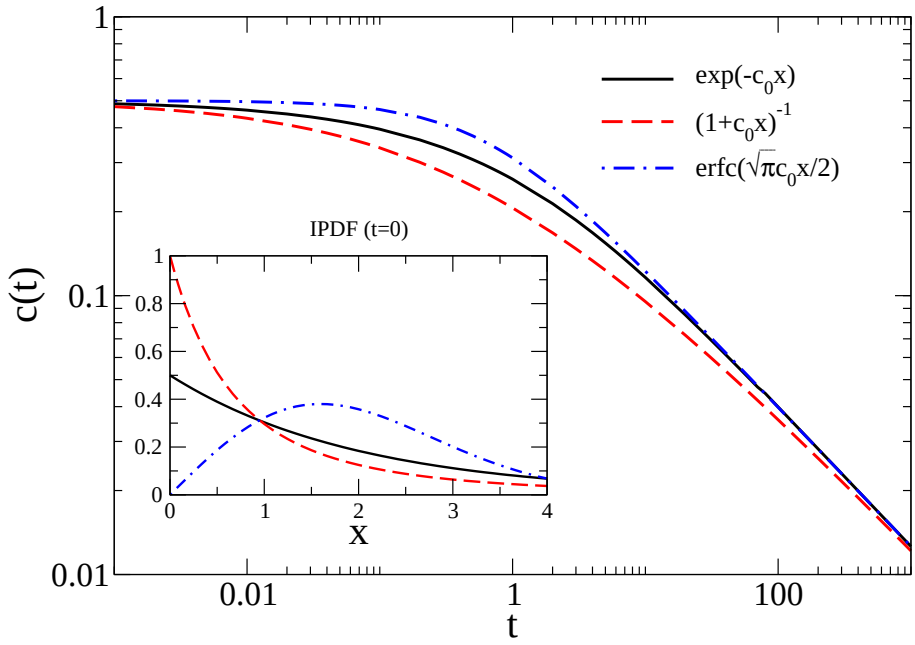


FIGURE 3.5 – *Evolution temporelle de la concentration $c(t)$ pour différentes conditions initiales caractérisées par $E(x,0)$ et avec $c_0 = 1/2$. Pour chacune d'elle, la concentration particulaire présente le même comportement asymptotique. Les différents passages entre le régime initial et asymptotique peuvent être expliqués qualitativement par la fonction de distribution interparticulaire (IPDF) définie dans l'eq. (3.34) et montrée dans l'insert à $t = 0$.*

Dans la figure 3.5, nous présentons l'effet de différentes conditions initiales $E(x,0)$ sur la concentration. Comme attendu, le comportement asymptotique de cette dernière ne s'en trouve pas modifié et nous trouvons bien $c(t) \sim t^{-1/2}$. Par contre, la façon d'atteindre ce comportement asymptotique dépend de cette condition initiale. Pour mieux comprendre, introduisons la fonction de distribution interparticulaire (IPDF)

$$p(x,t) := \frac{1}{c(t)} \frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial x^2} \tag{3.34}$$

qui exprime la densité de probabilité que le voisin immédiat d'une particule soit à la distance x au temps t [benA90, benA00]. Nous présentons dans l'insert de la figure 3.5 cette fonction à $t = 0$. Lorsque $p(x,0)$ est une fonction monotone décroissante, la transition

entre les deux régimes est plus douce. Par contre, dans le troisième cas où les particules ne sont jamais collées les unes aux autres, les particules doivent d'abord se rapprocher avant de réagir entre elles : la transition est alors plus abrupte.

3.3.3 Cas discret

Il est possible d'avoir la solution dans le cas discret en utilisant la même méthode, nous allons en donner les résultats.

Dans ce cas, rappelons la solution de l'équation différentielle eq. (3.11). La fonction génératrice

$$F(z,t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} z^n E_n(t) \tag{3.35}$$

vérifie l'équation différentielle

$$\partial_t F(z,t) = 2D(z + 1/z - 2)F(z,t). \tag{3.36}$$

Notons que c'est normalement Γ qui aurait dû apparaître dans cette équation mais nous avons choisi d'utiliser D. Elle a pour solution

$$F(z,t) = F(z,0)e^{2D(z+1/z-2)t} = e^{-4Dt} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} z^n \sum_{m=-\infty}^{+\infty} E_{n-m}(0) I_m(4Dt) \tag{3.37}$$

où nous avons utilisé pour $t \neq 0$

$$e^{(1/2)z(t+1/t)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} t^k I_k(z) \tag{3.38}$$

En identifiant $E_n(t)$ dans l'expression précédente, nous avons alors

$$E_n(t) = e^{-4Dt} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} E_m(0) I_{n-m}(4Dt). \tag{3.39}$$

Comme dans la précédente section, pour prendre en compte la condition au bord $E_0(t) = 1$, nous remplaçons la sommation sur les valeurs négatives de l'indice m en utilisant la relation $E_{-n}(t) = 2 - E_n(t)$ et finalement trouvons

$$\begin{aligned} E_n(t) = e^{-4Dt} \quad & \left[\sum_{m=1}^{+\infty} E_m(0) \Big(I_{n-m}(4Dt) - I_{n+m}(4Dt) \Big) \right. \\ + \quad & \left. \sum_{m=1}^{+\infty} 2I_{n+m}(4Dt) + I_1(4Dt) \right]. \end{aligned} \tag{3.40}$$

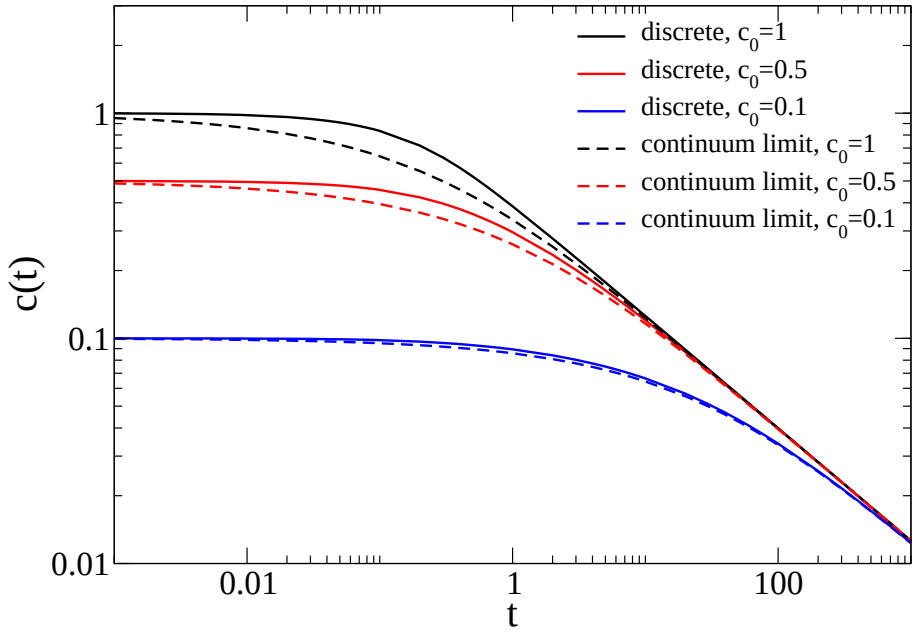


FIGURE 3.6 – *Évolution de la concentration dans le cas discret (en trait plein) et dans le cas continu (pointillé). Les concentrations initiales* c_0 *choisies sont* $[1, 0.5, 0.1]$ *en allant du haut vers le bas.*

Dans le cas discret, la concentration de particule est donnée par $c(t) = 1 - E_1(t)$. En utilisant les relations de récurrence des fonctions de Bessel modifiées (9.6.26 de [Abramowitz]), nous obtenons

$$c(t) = e^{-4Dt}\left(I_0(4Dt) + I_1(4Dt) - \sum_{m=1}^{+\infty} \frac{m}{2Dt} E_m(0) I_m(4Dt)\right), \tag{3.41}$$

ce qui généralise les résultats de Spouge [Spou88]. Dans la figure 3.6, nous illustrons la concentration de particules dans les deux cas précédemment calculés : le cas discret eq. (3.41) et sa limite continue eq. (3.33), et ce pour trois valeurs différentes de la concentration initiale c_0. La distribution initiale, quant à elle, est donnée par $E_n(0) = (1 - c_0/a)^n$ dans le cas discret et par $E(x, 0) = e^{-c_0 x}$ dans sa limite continue. Là encore, les comportements asymptotiques sont les mêmes dans tous les cas, indépendamment de la concentration initiale. Nous pouvons aussi constater que le passage entre le régime initial et le comportement asymptotique est plus doux dans la limite continue. Cela s'explique qualitativement par le fait que dans le cas discret les particules doivent d'abord se rapprocher avant d'interagir alors que, dans la limite continue, on peut toujours trouver deux particules infiniment proches et donc qui peuvent réagir de suite.

3.4 Probabilité à deux intervalles

Maintenant que nous avons vu et éprouvé la méthode dans le cas simple de la probabilité à un intervalle vide, il est temps de l'appliquer au calcul du corrélateur. Plus précisément dans cette section, nous allons généraliser la technique et dériver la probabilité $E_{n_1,n_2}(d,t)$ d'avoir deux intervalles vides au moins de longueur n_1 et n_2, séparés d'une distance d : nous le noterons par

$$E_{n_1,n_2}(d,t) = \Pr(\boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2}).$$

Bien entendu, cette fonction doit satisfaire ces conditions de symétries :

$$\begin{aligned} &E_{n_1,n_2}(d,t) = E_{n_2,n_1}(d,t) \\ &E_{n_1,0}(d,t) = E_{n_1}(t) \quad \text{et} \quad E_{0,n_2}(d,t) = E_{n_2}(t) \\ &E_{n_1,n_2}(0,t) = E_{n_1+n_2}(t). \end{aligned} \tag{3.42}$$

3.4.1 Equations de mouvement

Comme pour la probabilité à un intervalle vide, nous déterminons les variations de $E_{n_1,n_2}(d,t)$ entre les temps t et $t+\mathrm{d}t$:

$$\begin{aligned} \partial_t E_{n_1,n_2}(d,t)\mathrm{d}t \;=\; &-\Big[\Pr(\bullet\curvearrowright \boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2}) + \Pr(\boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2}\curvearrowleft\bullet) \\ &\quad + \Pr(\boxed{n_1}\curvearrowleft\bullet d-1\, \boxed{n_2}) + \Pr(\boxed{n_1}\, d-1\bullet\curvearrowright \boxed{n_2})\Big] \\ &+\Big[\Pr(\curvearrowleft\bullet\boxed{n_1-1}\, d\, \boxed{n_2}) + \Pr(\boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2-1}\bullet\curvearrowright) \\ &\quad + \Pr(\boxed{n_1-1}\bullet\curvearrowright d\, \boxed{n_2}) + \Pr(\boxed{n_1}\, d\curvearrowleft\bullet\boxed{n_2-1})\Big]. \end{aligned} \tag{3.43}$$

Les taux de probabilité sont évalués en utilisant les règles de somme dans le cas statique. Tout d'abord, considérons les contributions négatives pour lesquels nous obtenons

$$\begin{aligned} &\Pr(\bullet\curvearrowright \boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2}) = \Pr(\bullet\boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2})\,\Gamma\mathrm{d}t, \\ &\Pr(\bullet\boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2}) + \Pr(\circ\boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2}) = \Pr(\boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2}) \\ &\Rightarrow \Pr(\bullet\boxed{n_1}\, d\, \boxed{n_2}) = E_{n_1,n_2}(d,t) - E_{n_1+1,n_2}(d,t) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} &\Pr(\boxed{n_1}\curvearrowleft\bullet d-1\, \boxed{n_2}) = \Pr(\boxed{n_1}\bullet d-1\, \boxed{n_2})\,\Gamma\mathrm{d}t, \\ &\Pr(\boxed{n_1}\bullet d-1\, \boxed{n_2}) + \Pr(\boxed{n_1}\circ d-1\, \boxed{n_2}) = \Pr(\boxed{n_1}d\, \boxed{n_2}) \\ &\Rightarrow \Pr(\boxed{n_1}\bullet d-1\, \boxed{n_2}) = E_{n_1,n_2}(d,t) - E_{n_1+1,n_2}(d-1,t). \end{aligned}$$

Pour les contributions positives, nous avons

$$\begin{aligned} \Pr(\curvearrowleft\bullet\boxed{n_1-1}\, d\, \boxed{n_2}) &= \Pr(\bullet\boxed{n_1-1}\, d\, \boxed{n_2})\,\Gamma\mathrm{d}t, \\ \Pr(\bullet\boxed{n_1-1}\, d\, \boxed{n_2}) + \Pr(\circ\boxed{n_1-1}\, d\, \boxed{n_2}) &= \Pr(\boxed{n_1-1}\, d\, \boxed{n_2}) \\ \Rightarrow \Pr(\bullet\boxed{n_1-1}\, d\, \boxed{n_2}) &= E_{n_1-1,n_2}(d,t) - E_{n_1,n_2}(d,t), \end{aligned}$$

et

$$\Pr(\boxed{n_1-1}\bullet\curvearrowright d\,\boxed{n_2}) = \Pr(\boxed{n_1-1}\bullet d\,\boxed{n_2})\,\Gamma \mathrm{d}t,$$
$$\Pr(\boxed{n_1-1}\bullet d\,\boxed{n_2}) + \Pr(\boxed{n_1-1}\circ d\,\boxed{n_2}) = \Pr(\boxed{n_1-1}\,d+1\,\boxed{n_2})$$
$$\Rightarrow \Pr(\boxed{n_1-1}\bullet d\,\boxed{n_2}) = E_{n_1-1,n_2}(d+1,t) - E_{n_1,n_2}(d,t),$$

et de la même manière pour les autres termes qui sont symétriques. En rassemblant l'ensemble des contributions, nous avons alors

$$\begin{aligned}\partial_t E_{n_1,n_2}(d) = \Gamma\,[&-8E_{n_1,n_2}(d) \\ &+E_{n_1+1,n_2}(d) + E_{n_1,n_2+1}(d) + E_{n_1-1,n_2}(d) + E_{n_1,n_2-1}(d) \\ &+ E_{n_1+1,n_2}(d-1) + E_{n_1,n_2+1}(d-1) + E_{n_1-1,n_2}(d+1) + E_{n_1,n_2-1}(d+1)]\,.\end{aligned} \tag{3.44}$$

Nous avons choisi ici de le faire de façon heuristique mais il est tout à fait possible d'obtenir le même résultat en réécrivant l'équation maîtresse dans le formalisme hamiltonien [Pesch94]. La limite continue de cette équation de diffusion est obtenue en développant les termes jusqu'au second ordre en pas de réseau a, (le a^2 étant absorbé dans la définition du taux Γ). En posant $x = n_1\mathrm{a}$, $y = n_2\mathrm{a}$ et $z = d/\mathrm{a}$, nous en déduisons l'équation différentielle linéaire suivante :

$$\partial_t E(x,y,z) = 2D\Big[\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 - \Big(\partial_x\partial_z + \partial_y\partial_z\Big)\Big]E(x,y,z). \tag{3.45}$$

Il ne reste donc plus dès à présent qu'à résoudre cette équation de diffusion à trois dimensions.

3.4.2 Solution générique

La solution générique de eq. (3.45) est obtenue en diagonalisant la forme quadratique associée à l'opérateur différentiel $\widehat{P} := \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 - \partial_x\partial_z - \partial_y\partial_z$. Le changement de variables $(x,y,z) \to (X,Y,Z)$ permet de diagonaliser $\hat{P}$:

$$X = \alpha(x + y + \sqrt{2}z) \;\;,\;\; Y = \beta(x + y - \sqrt{2}z) \;\;,\;\; Z = \gamma(x-y), \tag{3.46}$$

où les constantes (positives) sont données par

$$\alpha \;=\; [2(2-\sqrt{2})]^{-1/2} \;\;,\;\; \beta = [2(2+\sqrt{2})]^{-1/2} \;\;,\;\; \gamma = 1/\sqrt{2},$$

et où l'on a $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ et $\alpha^2 - \beta^2 = 1/\sqrt{2}$.

Dans ces nouvelles variables, l'opérateur $\widehat{P} = \partial_X^2 + \partial_Y^2 + \partial_Z^2$ est diagonal. Comme dans la section précédente pour le problème à un intervalle vide, nous omettons volontairement les conditions aux bord dans un premier temps. Dans la limite continue, la fonction $E(x,y,z)$ peut ainsi être calculée à l'aide d'une transformée de Fourier et exprimée comme une intégrale dépendante des conditions initiales $E_0(x,y,z) := E(x,y,z,0)$:

$$E(x,y,z) = \frac{\sqrt{2}}{(\sqrt{\pi}\,\ell_0)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\;\mathcal{W}(x-x',y-y',z-z')E_0(x',y',z') \tag{3.47}$$

où le noyau gaussien $\mathcal{W}(u,v,w)$ de cette intégrale est

$$\begin{aligned}\mathcal{W}(u,v,w) &= \exp\frac{1}{{\ell_0}^2}\Big[-\alpha^2(u+v+\sqrt{2}w)^2-\beta^2(u+v-\sqrt{2}w)^2-\gamma^2(u-v)^2\Big]\\ &= \exp\frac{1}{{\ell_0}^2}\Big[-(u+v+w)^2-w^2-\frac{1}{2}(u-v)^2\Big],\end{aligned} \tag{3.48}$$

Notons que le Jacobien de cette transformation eq. (3.46) est égal à $4\sqrt{2}\alpha\beta\gamma=\sqrt{2}$.

3.4.3 Conditions de compatibilité

Comme exprimée précédemment dans l'équation eq. (3.18), il faut trouver la correspondance entre les intervalles dont la longueur formelle est négative et ceux dont la longueur est positive. En effet, la solution formelle (3.47) requiert des variables réelles alors que la probabilité $E(x,y,z)$ n'a de signification physique qu'avec des distances positives.
Il nous faut considérer trois cas, selon le signe de x, y et z. Du fait des conditions de symétries eq. (3.42), il n'est nécessaire de considérer que les cas où x ou z sont négatifs. Le cas $y<0$ se déduira de la première équation eq. (3.42). L'objectif de cette section est d'énoncer ces conditions de compatibilité et de les démontrer.

Lemma 3.4.1 *La probabilité de deux intervalles vides de longueur négative est reliée à celle de longueur positive par les relations suivantes*

$$E_{-n_1,n_2}(d) = 2E_{n_2} - E_{n_1,n_2}(d-n_1), \tag{3.49}$$
$$E_{n_1,-n_2}(d) = 2E_{n_1} - E_{n_1,n_2}(d-n_2), \tag{3.50}$$
$$E_{-n_1,-n_2}(d) = 4 - 2E_{n_1} - 2E_{n_2} + E_{n_1,n_2}(d-n_1-n_2). \tag{3.51}$$

Démonstration : En partant du cas discret eq. (3.44), on considère l'équation différentielle pour $n_1=0$, ce qui donne

$$\partial_t E_{0,n_2}(d) = \partial_t E_{n_2}. \tag{3.52}$$

Le premier terme est évalué à partir de eq. (3.44) et est égal à

$$\begin{aligned}\partial_t E_{0,n_2}(d) &= \Gamma\Big[2E_{n_2-1}-4E_{n_2}+2E_{n_2+1}\\ &\quad +E_{-1,n_2}(d)+E_{-1,n_2}(d+1)-4E_{n_2}+E_{1,n_2}(d)+E_{1,n_2}(d-1)\Big].\end{aligned}$$

En utilisant eq. (3.11), le terme de droite dans eq. (3.52) est égal à

$$\partial_t E_{n_2} = 2\Gamma\Big[E_{n_2-1}-2E_{n_2}+E_{n_2+1}\Big].$$

En comparant les deux dernières expressions, nous obtenons une égalité entre les cas $n_1=-1$ et $n_1=1$

$$E_{-1,n_2}(d)+E_{-1,n_2}(d+1)+E_{1,n_2}(d)+E_{1,n_2}(d-1) = 4E_{n_2}.$$

Il nous reste à différencier cette relation par rapport au temps et à utiliser eq. (3.44) pour chacun des 4 termes de gauche et eq. (3.11) pour le terme de droite dans le but d'obtenir une relation entre les indices $n_1 = -2$ et $n_1 = 2$:

$$E_{-2,n_2}(d) + 2E_{-2,n_2}(d+1) + E_{-2,n_2}(d+2) + E_{2,n_2}(d) + 2E_{2,n_2}(d-1) + E_{2,n_2}(d-2) = 8E_{n_2}.$$

Par récurrence, nous pouvons étendre ce résultat à tout indice positif n_1

$$\sum_{k=0}^{n_1} \binom{k}{n_1} E_{-n_1,n_2}(d+k) + \sum_{k=0}^{n_1} \binom{k}{n_1} E_{n_1,n_2}(d-k) = 2^{n_1+1} E_{n_2}. \tag{3.53}$$

En particulier, on retrouve dans le cas $n_2 = 0$ le résultat eq. (3.18) : $E_{-n_1} + E_{n_1} = 2$, en utilisant la relation $\sum_{k=0}^{n_1} \binom{k}{n_1} = 2^{n_1}$.
L'équation eq. (3.53) peut être inversée pour obtenir une relation entre $E_{-n_1,n_2}(d)$ et les fonctions d'indices positifs. Pour ce, utilisons une transformée de Fourier discrète

$$E_{n_1,n_2}(d) = \int_0^1 \mathrm{d}z\ \widetilde{E}_{n_1,n_2}(z) e^{2\mathrm{i}\pi z d},\ \widetilde{E}_{n_1,n_2}(z) = \sum_{d=-\infty}^{\infty} E_{n_1,n_2}(d) e^{-2\mathrm{i}\pi z d}$$

pour résoudre la fonction de Green précédente eq. (3.53)

$$\widetilde{E}_{-n_1,n_2}(z) = -\widetilde{E}_{n_1,n_2}(z) \Big(\frac{1+e^{-2\mathrm{i}\pi z}}{1+e^{2\mathrm{i}\pi z}} \Big)^{n_1} + \frac{2^{n_1+1} e^{-2\mathrm{i}\pi z d}}{(1+e^{2\mathrm{i}\pi z})^{n_1}} \widetilde{E}_{0,n_2}(z)$$

où nous avons utilisé le fait que $E_{n_2} = E_{0,n_2}(0)$. En inversant la relation, nous obtenons

$$\begin{aligned} E_{-n_1,n_2}(d) &= -\sum_{d'} E_{n_1,n_2}(d') \int_0^1 \mathrm{d}z\ e^{2\mathrm{i}\pi z(d-d'-n_1)} \\ &+ 2^{n_1+1} \sum_{d'} E_{0,n_2}(d') \int_0^1 \mathrm{d}z\ \frac{e^{-2\mathrm{i}\pi z d'}}{(1+e^{2\mathrm{i}\pi z})^{n_1}}. \end{aligned}$$

La première intégrale sur la variable z donne une fonction de Kronecker $\delta_{d-d'-n_1,0}$. Pour la seconde, nous utilisons le fait que $E_{0,n_2}(d') = E_{n_2}$, et ce indépendamment de d', ainsi que le peigne de Dirac

$$\sum_{d'} e^{-2\mathrm{i}\pi z d'} = \sum_{d'} \delta(z - d') \tag{3.54}$$

qui va sélectionner la valeur $z = d'$ lorsque l'on évaluera l'intégrale sur z. Nous obtenons alors le résultat

$$\sum_{d'} \int_0^1 \mathrm{d}z\ \frac{e^{-2\mathrm{i}\pi z d'}}{(1+e^{2i\pi z})^{n_1}} = \int_0^1 \mathrm{d}z\ \sum_{d'} \delta(z-d') \frac{1}{(1+e^{2\mathrm{i}\pi z})^{n_1}} = 2^{-n_1}.$$

Ainsi, nous obtenons les symétries entre les indices négatifs et positifs n_1 (and n_2). La relation eq. (3.51) est directement issue des deux premières de ce lemme, en considérant les cas où les longueurs des intervalles vides sont toutes deux négatives. q.e.d.

Une autre relation relie la distance "négative" $-d$ entre deux intervalles avec le cas où cette distance est positive.

Lemma 3.4.2 *Nous avons*

$$E_{n_1,n_2}(-d) = 2E_{n_1+n_2-d} - E_{n_1-d,n_2-d}(d). \tag{3.55}$$

Démonstration : Considérons le cas $d = 0$ dans l'équation discrète eq. (3.44). Etant donné que $E_{n_1,n_2}(0) = E_{n_1+n_2}$, nous avons

$$\partial_t E_{n_1,n_2}(0) = \partial_t E_{n_1+n_2}.$$

En utilisant eq. (3.44) le premier terme donne

$$\begin{aligned}\partial_t E_{n_1,n_2}(0) &= \Gamma\Big[2E_{n_1+n_2+1} - 8E_{n_1+n_2} + E_{n_1+1,n_2}(-1) + E_{n_1,n_2+1}(-1) \\ &\quad +2E_{n_1+n_2-1} + E_{n_1-1,n_2}(1) + E_{n_1,n_2-1}(1)\Big],\end{aligned}$$

alors que le second terme procure

$$\partial_t E_{n_1+n_2} = 2\Gamma\left(E_{n_1+n_2-1} - 2E_{n_1+n_2} + E_{n_1+n_2+1}\right).$$

En comparant les deux dernières expressions, nous obtenons

$$E_{n_1+1,n_2}(-1) + E_{n_1,n_2+1}(-1) + E_{n_1-1,n_2}(1) + E_{n_1,n_2-1}(1) = 4E_{n_1+n_2}.$$

Reste alors à dériver par rapport au temps la dernière expression. Nous obtenons une fonction de Green impliquant des termes dont les distances sont positives ou négatives :

$$\sum_{k=0}^{d} \binom{k}{d} E_{n_1+k,n_2+d-k}(-d) + \sum_{k=0}^{d} \binom{k}{d} E_{n_1-k,n_2-d+k}(d) = 2^{d+1} E_{n_1+n_2}.$$

Remarquons que la somme sur les trois indices est toujours égale à $n_1 + n_2$. Pour inverser cette expression, nous utilisons une transformée de Fourier

$$\begin{aligned}E_{n_1,n_2}(d) &= \int_0^1 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\ \widetilde{E}(x,y,d) e^{2i\pi(n_1 x + n_2 y)}, \\ \widetilde{E}(x,y,d) &= \sum_{n_1,n_2=-\infty}^{\infty} E_{n_1,n_2}(d) e^{-2i\pi(n_1 x + n_2 y)}\end{aligned}$$

pour aboutir à

$$\widetilde{E}(x,y,-d) + \widetilde{E}(x,y,d)\Big(\frac{e^{-2\mathrm{i}\pi x} + e^{-2\mathrm{i}\pi y}}{e^{2\mathrm{i}\pi x} + e^{2\mathrm{i}\pi y}}\Big)^d = \widetilde{E}(x,y,0)\frac{2^{d+1}}{(e^{2\mathrm{i}\pi x} + e^{2\mathrm{i}\pi y})^d}.$$

La transformée de Fourier inverse donne alors

$$E_{n_1,n_2}(-d) = \sum_{n_1',n_2'} E_{n_1',n_2'}(0) \int_0^1 \mathrm{d}x\mathrm{d}y \, \frac{2^{d+1}\exp(2\mathrm{i}\pi x(n_1-n_1')+2\mathrm{i}\pi y(n_2-n_2'))}{(e^{2\mathrm{i}\pi x}+e^{2\mathrm{i}\pi y})^d}$$
$$- \sum_{n_1',n_2'} E_{n_1',n_2'}(d) \int_0^1 \mathrm{d}x\mathrm{d}y \left(\frac{e^{-2\mathrm{i}\pi x}+e^{-2\mathrm{i}\pi y}}{e^{2\mathrm{i}\pi x}+e^{2\mathrm{i}\pi y}}\right)^d e^{2\mathrm{i}\pi x(n_1-n_1')+2\mathrm{i}\pi y(n_2-n_2')}.$$

De la même façon quand dans la démonstration précédente, la seconde intégrale sur x et y donne deux fonctions de Kronecker $\delta_{n_1-n_1'-d,0}\delta_{n_2-n_2'-d,0}$, et la première intégrale peut se réécrire comme

$$\sum_{n_1',n_2'} E_{n_1',n_2'}(0) \int_0^1 \mathrm{d}x\mathrm{d}y \, \frac{2^{d+1}}{(e^{2\mathrm{i}\pi x}+e^{2\mathrm{i}\pi y})^d} e^{2\mathrm{i}\pi x(n_1-n_1')+2\mathrm{i}\pi y(n_2-n_2')}$$
$$= \sum_{n_1',n_2'} E_{n_1'+n_2'} \int_0^1 \mathrm{d}x\mathrm{d}y \, \frac{2^{d+1}}{(e^{2\mathrm{i}\pi x}+e^{2\mathrm{i}\pi y})^d} e^{2\mathrm{i}\pi x(n_1-n_1')+2\mathrm{i}\pi y(n_2-n_2')}$$
$$= \sum_{n_1'} E_{n_1'} \int_0^1 \mathrm{d}x\mathrm{d}y \, \frac{2^{d+1}}{(e^{2\mathrm{i}\pi x}+e^{2\mathrm{i}\pi y})^d} e^{2\mathrm{i}\pi x(n_1-n_1')+2\mathrm{i}\pi y n_2} \sum_{n_2'} e^{2\mathrm{i}\pi n_2'(x-y)}.$$

La dernière somme sur n_2' se fait en utilisant l'égalité eq. (3.54), qui sélectionne $x = y$ dans l'intervalle d'intégration sur y. L'intégrale sur la variable x donne alors directement une fonction de Kronecker $\delta_{n_1+n_2-d-n_1',0}$, ce qui permet d'obtenir la relation entre les indices $-d$ et d. q.e.d.

Dans la limite continue, les expressions eq. (3.18), eq. (3.50), eq. (3.51) et eq. (3.55) prennent la forme suivante

$$\begin{aligned} E(-x) &= 2 - E(x), \\ E(-x,y,z) &= 2E(y) - E(x,y,z-x), \\ E(x,-y,z) &= 2E(x) - E(x,y,z-y), \\ E(-x,-y,z) &= 4 - 2E(x) - 2E(y) + E(x,y,z-x-y), \\ E(x,y,-z) &= 2E(x+y-z) - E(x-z,y-z,z). \end{aligned} \tag{3.56}$$

Ceci nous permettra de réécrire eq. (3.47) dans un domaine où (x', y', z') sont toutes positives, et où $E_0(x', y', z')$ est physiquement bien définie.

3.5 Solution générale de $E(x, y, z, t)$

De l'équation générale eq. (3.47), nous séparons les huits différents domaines d'intégration autour de l'origine ; par exemple $(x' > 0, y' > 0, z' > 0)$, $(x' < 0, y' > 0, z' > 0)$ etc.., et nous utilisons les relations eq. (3.18), eq. (3.50), eq. (3.51) et eq. (3.55) pour associer tous les domaines au domaine $(x' > 0, y' > 0, z' > 0)$. Commençons par séparer

les régions où $z' > 0$ de celle où $z' < 0$. Pour simplifier les notations, nous avons changé l'échelle de toutes les longueurs par ℓ_0 tel que $E_{\ell_0}(x,y,z) = E(x\ell_0, y\ell_0, z\ell_0, t)$)

$$\begin{aligned} E_{\ell_0}(x,y,z,t) &= \sqrt{\frac{2}{\pi^3}} \int_{\mathbb{R}^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z' \Big[\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')E_{0,\ell_0}(x',y',z') \\ &\quad +\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z+z')E_{0,\ell_0}(x',y',-z')\Big]. \end{aligned} \tag{3.57}$$

Dans le dernier terme, nous reportons les valeurs négatives de z' aux valeurs positives en utilisant eq. (3.55) dans la limite continue $E_0(x',y',-z') = -E_0(x'-z',y'-z',z') + 2E_0(x'+y'-z')$, où $E_0(x) = E(x,0)$. Ensuite, deux translations $x'-z' \to x'$ et $y'-z' \to y'$ dans le premier terme $E_0(x'-z',y'-z',z')$, ainsi qu'une translation sur la variable $x' \to x'-y'+z'$ dans le second terme $E_0(x'+y'-z')$ nous permettent d'obtenir

$$\begin{aligned} E_{\ell_0}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{\pi^3}} \int_{\mathbb{R}^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\, \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')E_{0,\ell_0}(x',y',z') \\ &\quad -\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x'-z',y-y'-z',z+z')E_{0,\ell_0}(x',y',z') \\ &\quad +2\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x'+y'-z',y-y',z+z')E_0(x'). \end{aligned} \tag{3.58}$$

Dans le troisième terme contenant $E_0(x')$, nous pouvons désormais intégrer sur y' and z', vu que la fonction $\mathcal{W}_{\ell_0}()$ est un noyeu gaussien. Lorsque x' est négatif, nous avons aussi $E_0(x') = 2 - E_0(-x')$ ce qui nous permet là encore de tout reporter sur l'axe positif. Après un réarrangement, nous arrivons à

$$\begin{aligned} E_{\ell_0}(x,y,z) &= \mathrm{erfc}(z)\mathrm{erfc}(x+y+z) \\ &\quad +\mathrm{erfc}(z)\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}}\left[e^{-(x+y+z-x')^2} - e^{-(x+y+z+x')^2}\right] E_{0,\ell_0}(x') \\ &\quad +\sqrt{\frac{2}{\pi^3}}\int_{\mathbb{R}^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z' \Big[\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z') \\ &\quad -\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x'-z',y-y'-z',z+z')\Big]E_{0,\ell_0}(x',y',z') \end{aligned} \tag{3.59}$$

Dans le dernier terme, La différence entre les deux poids $\mathcal{W}_{\ell_0}()$ peut être simplifié en remarquant que

$$\begin{aligned} &\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z') - \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x'-z',y-y'-z',z+z') \\ &\quad = \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')(1-e^{-4zz'}) := \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z'). \end{aligned} \tag{3.60}$$

A partir de l'intégrale multiple eq. (3.59), nous pouvons diviser le domaine d'intégration sur x' et y' en quatre parties : $E_0(x',y',z')$, $E_0(-x',y',z')$, $E_0(x',-y',z')$, et $E_0(-x',-y',z')$, avec les variables (x',y',z') toutes positives. $E_0(-x',y',z')$ peut être transformé en utilisant les étapes suivantes ainsi que eq. (3.50) et eq. (3.55)

$$\begin{aligned} E_0(-x',y',z') &= 2E_0(y') - E_0(x',y',z'-x') \\ &= 2E_0(y') - \theta(z'-x')E_0(x',y',z'-x') \\ &\quad -\theta(x'-z')\Big[2E_0(y'+z') - E_0(z',-x'+y'+z',x'-z')\Big] \end{aligned} \tag{3.61}$$

ensuite

$$\begin{aligned} E_0(-x',y',z') &= 2E_0(y') - \theta(x'-z')2E_0(y'+z') \\ &\quad +\theta(x'-z')\theta(x'-y'-z')2E_0(z') \\ &\quad -\theta(z'-x')E_0(x',y',z'-x') \\ &\quad +\theta(x'-z')\theta(-x'+y'+z')E_0(z',-x'+y'+z',x'-z') \\ &\quad -\theta(x'-z')\theta(x'-y'-z')E_0(z',x'-y'-z',y'). \end{aligned} \tag{3.62}$$

Dans cette dernière expression, tous les arguments des fonctions sont positifs. Une analyse équivalente peut être conduite sur $E_0(x',-y',z')$, qui est symétrique en inversant x' et y'

$$\begin{aligned} E_0(x',-y',z') &= 2E_0(x') - \theta(y'-z')2E_0(x'+z') \\ &\quad +\theta(y'-z')\theta(-x'+y'-z')2E_0(z') \\ &\quad -\theta(z'-y')E_0(x',y',z'-y') \\ &\quad +\theta(y'-z')\theta(x'-y'+z')E_0(x'-y'+z',z',y'-z') \\ &\quad -\theta(y'-z')\theta(-x'+y'-z')E_0(-x'+y'-z',z',x'). \end{aligned} \tag{3.63}$$

Enfin, en utilisant eq. (3.51) et eq. (3.55) la dernière expression $E_0(-x',-y',z')$ est modifiée en

$$\begin{aligned} E_0(-x',-y',z') &= 4 - 2E_0(x') - 2E_0(y') + E_0(x',y',z'-x'-y') \\ &= 4 - 2E_0(x') - 2E_0(y') + \theta(z'-x'-y')E_0(x',y',z'-x'-y') \\ &\quad +\theta(x'+y'-z')\Big[2E_0(z') - E_0(z'-y',z'-x',x'+y'-z')\Big]. \end{aligned}$$

Dans le dernier terme, $z'-y'$ et $z'-x'$ peuvent être aussi bien positives que négatives, et donc demande à être analysées

$$\begin{aligned} &E_0(-x',-y',z') = 4 - 2E_0(x') - 2E_0(y') + \theta(x'+y'-z')2E_0(z') \\ &+\theta(z'-x'-y')E_0(x',y',z'-x'-y') \\ &-\theta(x'+y'-z')\Big[\theta(z'-y')\theta(z'-x')E_0(z'-y',z'-x',x'+y'-z') \\ &+\theta(y'-z')\theta(z'-x')\{-E_0(y'-z',z'-x',x') + 2E_0(z'-x')\} \\ &+\theta(z'-y')\theta(x'-z')\{-E_0(z'-y',x'-z',y') + 2E_0(z'-y')\} \\ &+\theta(y'-z')\theta(x'-z')\{4 - 2E_0(y'-z') - 2E_0(x'-z') + E_0(y'-z',x'-z',z')\}\Big]. \end{aligned} \tag{3.64}$$

Ici, remarquons trois types de termes :

1. les termes indépendants des probabilités à un ou deux intervalles vides
2. les termes qui dépendent uniquement des probabilités à un intervalle vide
3. les termes dépendants uniquement des probabilités à deux intervalles vides

Le premier type de terme est requis pour un réseau initialement rempli de particules. Nous verrons dans la suite, que ce terme génère aussi les contributions dominantes dans les régimes d'échelle aux temps longs.
La solution générale peut donc se décomposer de la sorte

$$E(x, y, z, t) = E^{(0)}(x, y, z, t) + E^{(1)}(x, y, z, t) + E^{(2)}(x, y, z, t), \tag{3.65}$$

où $E^{(0)}(x, y, z, t)$ est obtenue à partir des termes indépendant des conditions initiales, $E^{(1)}(x, y, z, t)$ à partir de la probabilité à un intervalle vide $E_0(x')$ et $E^{(2)}(x, y, z, t)$ à partir de la probabilité à deux intervalles vides $E_0(x, y, z)$, respectivement. Insistons sur le fait que $E^{(1)}(x, y, z, t)$ et $E^{(2)}(x, y, z, t)$ dépendent $E_0(x')$, $E_0(x', y', z')$ avec des arguments positifs, et donc donne la solution "physique" du processus coagulation-diffusion avec n'importe quelles conditions initiales. Nous allons maintenant analyser chacun des trois termes.

3.5.1 Cas où le système est initialement entièrement rempli de particules

Nous remarquons que eq. (3.62), eq. (3.63), et eq. (3.64) contiennent les conditions initiales des distributions à un intervalle $E_0(x')$, quelques constantes indépendantes des conditions initiales, et les conditions initiales des distributions à deux intervalles $E_0(x', y', z')$. Dans un souci de simplification de notations, nous allons rescaler chaque longueur par ℓ_0 tel que $E_{\ell_0}(x, y, z) = E(x\ell_0, y\ell_0, z\ell_0, t)$. Dans eq. (3.64), nous pouvons isoler dans $E_0(-x', -y', z')$ deux termes indépendant des conditions initiales,

$$4 - 4\theta(y' - z')\theta(x' - z')\theta(x' + y' - z').$$

Notons que $\theta(y' - z')\theta(x' - z')\theta(x' + y' - z') = \theta(y' - z')\theta(x' - z')$. Ces deux termes additionnés au premier terme de eq. (3.59), donne la contribution suivante

$$E^{(0)}_{\ell_0}(x, y, z) = \mathrm{erfc}(z)\mathrm{erfc}(x + y + z)$$
$$+\sqrt{\frac{2}{\pi^3}} \int_{\mathbb{R}^3_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\, \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x', -y', z')\{4 - 4\theta(y' - z')\theta(x' - z')\}.$$

En utilisant les translations $x' - z' \to x'$ et $y' - z' \to y'$ dans la dernière contribution, nous obtenons

$$E^{(0)}_{\ell_0}(x, y, z) = \mathrm{erfc}(z)\mathrm{erfc}(x + y + z)$$
$$+\sqrt{\frac{2}{\pi^3}} \int_{\mathbb{R}^3_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z' \left\{\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x', -y', z') - \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x' - z', -y' - z', z')\right\}.$$

En utilisant la relation eq. (3.60) ainsi que l'identité

$$\mathcal{W}_{\ell_0}(x - x' - z', y - y' - z', z + z') = \mathcal{W}_{\ell_0}(x - x', y - y', z - z')e^{-4zz'}$$
$$\Rightarrow \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x' + z', y' + z', -z') = -\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x', y', z') \tag{3.66}$$

Nous pouvons réécrire E comme suit

$$\begin{aligned} E^{(0)}_{\ell_0}(x,y,z) &= \mathrm{erfc}(z)\mathrm{erfc}(x+y+z) \\ &\quad +\sqrt{\frac{32}{\pi^3}}\int_{\mathbb{R}^3_+}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\left\{\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',z')+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',-z')\right\} \\ &= \mathrm{erfc}(z)\mathrm{erfc}(x+y+z) \\ &\quad +\sqrt{\frac{32}{\pi^3}}\int_{\mathbb{R}^2_+}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\int_{\mathbb{R}}\mathrm{d}z'\,\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',z') \end{aligned}$$

L'intégrale sur z' donne une exponentielle gaussienne alors que les deux intégrales restantes peuvent aussi être calculées en utilisant quelques résultats donnés dans l'appendice D. Après réintroduction de la longueur de diffusion ℓ_0, nous avons

$$\begin{aligned} E^{(0)}(x,y,z) &= \mathrm{erfc}\left(\frac{x}{\ell_0}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{y}{\ell_0}\right)+\mathrm{erfc}\left(\frac{z}{\ell_0}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{x+y+z}{\ell_0}\right) \\ &\quad -\mathrm{erfc}\left(\frac{x+z}{\ell_0}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{y+z}{\ell_0}\right). \end{aligned} \tag{3.67}$$

Ce résultat est exact dans le cas d'un réseau initialement complètement rempli (i.e où $E_0(x)$ et $E_0(x,y,z)$ sont nulles). En particulier, la solution (3.67) respecte les conditions de symétries eq. (3.42). Dans la limite z grand, nous pouvons remarquer la factorisation $E(x,y,z,t) \simeq E(x,t)E(y,t)$, conformément à ce que nous nous attendions. En effet, lorsque la distance z est grande, il n'y a pratiquement plus d'interaction entre les deux intervalles et donc la probabilité jointe est bien le produit des probabilités.

Les termes restants dans la solution générale dépendent des conditions initiales et c'est ce que nous allons maintenant analyser, en commençant par la contribution dépendant de la probabilité initiale à un intervalle vide.

3.5.2 Contributions de la distribution initiale à un intervalle

La contribution de la distribution à un intervalle à la probabilité $E(x,y,z,t)$ vient des relations eq. (3.62), eq. (3.63) et eq. (3.64), où nous avons isolé les termes suivants

- le second terme de l'équation eq. (3.59)
- les trois premiers termes dans eq. (3.62) et eq. (3.63)
- les termes 2, 3, 4 dans eq. (3.64).

En tout, nous avons donc 10 termes qui contribuent, pour une condition initiale donnée $E_0(x')$. En rassemblant ces termes et en faisant des translations successives sur les variables x', y' or z' quand nécessaire, nous arrivons à

$$E^{(1)}_{\ell_0}(x,y,z) = \mathrm{erfc}(z)\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}}\,E_{0,\ell_0}(x')\left(e^{-(x+y+z-x')^2}-e^{-(x+y+z+x')^2}\right)$$

$$
\begin{aligned}
+\sqrt{\frac{8}{\pi^3}}\int_{\mathbb{R}^3_+}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\; E_0(x')\Big\{ & \underbrace{\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',-y',z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x'-z',-y'-z',z')}_{I_1} \\
& +\underbrace{\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y',x',z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y'-z',x'-z',z')}_{I_2} \\
& +\underbrace{\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-z',-y'-z',z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',z')}_{I_3} \\
& +\underbrace{\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y'-z',-x'-z',z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y',-x',z')}_{I_4} \\
& +\underbrace{\theta(-x'-y'+z')[\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(y',-z',x')+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',y',x')]}_{I_5} \\
& +\underbrace{\theta(-x'+y'+z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',-y',x')}_{I_6}\Big\}
\end{aligned}
\tag{3.68}
$$

Pour arriver à ce dernier résultat, il est intéressant de noter que la fonction $\theta(x'-z')$ (dans le cas où l'intégrale sur la distribution à un intervalle E_0 ne dépend pas de la x') avec x' et z' positives peut être simplifiée et remplacée par la fonction unité si nous opérons la translation $x''=x'-z'$. L'intégrale sur x'' s'étend alors de $-z'<0$ à∞, cependant la fonction θ restreint ce domaine d'intégration sur l'axe positif $x''>0$. Ainsi, les bornes d'intégration reste inchangée par ce changement de variable, et la fonction θ mise à 1. Dans le cas opposé, où nous avons une contribution présentant un terme tel que $E_0(x')\theta(x'-z')$, une translation sur x' changera l'argument de E_0, ce qui ne permet plus de conserver la forme eq. (3.68). En lieu et place de cela, nous préférons écrire $\theta(x'-z')=1-\theta(z'-x')$ et appliquer les précédentes translations à la variable positive $z'=z''+x'$. Ceci changera l'argument dans $\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(\cdots)$ seulement et plus dans E_0. En utilisant alors eq. (3.66), les différents groupes de termes $I_1,\ldots,I_4$ peuvent être simplifiés comme suit

$$
\begin{aligned}
I_1 &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',-y',z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x'-z',-y'-z',z') \\
&= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',-y',z')+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',-y',-z') \\
I_2 &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y',x',z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y'-z',x'-z',z') \\
&= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y',x',z')+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y',x',-z') \\
I_3 &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-z',-y'-z',z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',z') \\
&= -\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',-z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',z') \\
I_4 &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y'-z',-x'-z',z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y',-x',z') \\
&= -\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y',-x',-z')-\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y',-x',z').
\end{aligned}
\tag{3.69}
$$

Ces relations nous permettent d'étendre le domaine d'intégration sur z' de $-\infty$ à $+\infty$ étant donné qu'elles combinent à chaque fois deux termes dépendant de z' et $-z'$. Comme la variable z' apparaît seulement dans les poids gaussiens, l'intégration sur z' donne de nouvelles exponentielles gaussiennes. Les intégrations sur y' donnent alors des fonctions

erf ou erfc, combinées à $E_0(x')$. Les termes I_5 et I_6 peuvent être mis ensemble, et le premier terme de I_5 se transforme

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\ E_0(x')\theta(-x'-y'+z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(y',-z',x') \\
&= \int_{\mathbb{R}^3_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\ E_0(x')\theta(-x'+y'-z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(z',-y',x') \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}x'\ E_0(x') \int_0^\infty \mathrm{d}y' \int_{-\infty}^0 \mathrm{d}z'\ \theta(-x'+y'+z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',-y',x'). \qquad (3.70)
\end{aligned}$$

Le second terme donne

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^3_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\ E_0(x')\theta(-x'-y'+z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',y',x') = \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}x'\ E_0(x') \int_{-\infty}^0 \mathrm{d}y' \int_0^\infty \mathrm{d}z'\ \theta(-x'+y'+z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',-y',x'). \qquad (3.71)
\end{aligned}$$

Finalement, l'intégrale I_6 est égale à

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x'\ E_0(x') \int_0^\infty \mathrm{d}y' \int_0^\infty \mathrm{d}z'\ \theta(-x'+y'+z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',-y',x') \qquad (3.72)$$

et peut être combinée avec les deux termes précédents. En remarquant que $\theta(-x'+y'+z') = 0$ dans le domaine où y' et z' sont toutes deux négatives, nous pouvons écrire l'intégrale sur I_5 et I_6 de la manière suivante

$$\begin{aligned}
&\sqrt{\frac{8}{\pi^3}} \int_{\mathbb{R}^3_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\ E_{0,\ell_0}(x')\Big(I_5+I_6\Big) \\
&= 2\sqrt{2}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}}\, E_{0,\ell_0}(x') \iint_{-\infty}^\infty \frac{\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'}{\pi}\, \theta(-x'+y'+z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',-y',x') \\
&= 2\sqrt{2}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}}\, E_{0,\ell_0}(x') \iint_{-\infty}^\infty \frac{\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'}{\pi}\, \theta(-x'+z')\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(y'-z',-y',x'). \qquad (3.73)
\end{aligned}$$

Il est alors possible d'intégrer sur y' et z' successivement (voir Appendice D). En rassemblant tous les termes de I_1 à I_6 nous obtenons

$$\begin{aligned}
E^{(1)}_{\ell_0}(x,y,z) = \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}}\, E_{0,\ell_0}(x')\Big\{&\mathrm{erfc}(z)\Big[e^{-(x'-x-y-z)^2} - e^{-(x'+x+y+z)^2}\Big] \\
+\mathrm{erfc}(x)&\Big[e^{-(x'-y)^2} - e^{-(x'+y)^2}\Big] - \mathrm{erfc}(x+z)\Big[e^{-(x'-y-z)^2} - e^{-(x'+y+z)^2}\Big] \\
+\mathrm{erfc}(y)&\Big[e^{-(x'-x)^2} - e^{-(x'+x)^2}\Big] - \mathrm{erfc}(y+z)\Big[e^{-(x'-x-z)^2} - e^{-(x'+x+z)^2}\Big] \\
&+\mathrm{erfc}(x+y+z)\Big[e^{-(x'-z)^2} - e^{-(x'+z)^2}\Big]\Big\} \\
&=: \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}}\, E_{0,\ell_0}(x') K_{1,\ell_0}(x';x,y,z), \qquad (3.74)
\end{aligned}$$

où le noyau K_1 est positif. Lorsque $z=0$, nous récupérons le résultat eq. (3.20) pour la distribution à un intervalle de longueur $x+y$. Pour des exemples simples de $E_0(x')$, les intégrales précédentes peuvent être exactement calculées étant donné que ce noyau K_1 est gaussien par rapport à la variable x'. Par exemple, prenons le cas d'une condition initiale telle que $E_0(x)=e^{-c_0 x}$; alors c_0 est la concentration initiale en particule et nous trouvons

$$\begin{aligned} E^{(1)}(x,y,z) &= \mathrm{erfc}\left(\frac{z}{\ell_0}\right) F_{c_0}(x+y+z) + \mathrm{erfc}\left(\frac{x}{\ell_0}\right) F_{c_0}(y) \\ &\quad -\mathrm{erfc}\left(\frac{x+z}{\ell_0}\right) F_{c_0}(y+z) + \mathrm{erfc}\left(\frac{y}{\ell_0}\right) F_{c_0}(x) \\ &\quad -\mathrm{erfc}\left(\frac{y+z}{\ell_0}\right) F_{c_0}(x+z) + \mathrm{erfc}\left(\frac{x+y+z}{\ell_0}\right) F_{c_0}(z), \end{aligned} \tag{3.75}$$

où $F_{c_0}(x)$ est définie par

$$F_{c_0}(x) := \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\ell_0\sqrt{\pi}}\, e^{-c_0 x'}\left[e^{-(x'-x)^2/{\ell_0}^2} - e^{-(x'+x)^2/{\ell_0}^2}\right] \tag{3.76}$$

$$= \frac{1}{2} e^{{\ell_0}^2 c_0^2/4}\left\{ e^{-c_0 x}\mathrm{erf}\left(\frac{x}{\ell_0} - \frac{\ell_0 c_0}{2}\right) + e^{c_0 x}\mathrm{erf}\left(\frac{x}{\ell_0} + \frac{\ell_0 c_0}{2}\right) - 2\sinh(c_0 x)\right\}.$$

Les valeurs limites de cette fonction sont

$$F_{c_0}(x) \overset{x\to\infty}{\simeq} e^{c_0^2{\ell_0}^2/4 - c_0 x}, \quad F_{c_0}(x) \overset{x\to 0}{\simeq} \left(\frac{2}{\ell_0\sqrt{\pi}} - c_0 e^{c_0^2{\ell_0}^2/4}\mathrm{erfc}(\ell_0 c_0/2)\right)x, \tag{3.77}$$

et $F_0(x) = \mathrm{erf}(x/\ell_0)$.

Dans la limite des temps longs, l'expression ci-dessus tend vers zéro selon une loi algébrique en $1/\ell_0$

$$F_{c_0}(x) \simeq \frac{4x}{\sqrt{\pi} c_0^2 {\ell_0}^3}\left(1 - \frac{6}{c_0^2{\ell_0}^2} - \frac{x^2}{{\ell_0}^2} + \dots\right) \tag{3.78}$$

et la partie dominante de la contribution $E^{(1)}(x,y,z,t)$ dans cette même limite se comporte comme

$$E^{(1)}(x,y,z) \simeq \frac{4(x+y)}{\sqrt{\pi} c_0^2 {\ell_0}^3}. \tag{3.79}$$

Il est alors intéressant de comparer ce développement avec le développement aux temps longs de $E^{(0)}(x,y,z)$, qui est indépendant de c_0

$$E^{(0)}(x,y,z) \simeq 1 - \frac{2(x+y)}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^2} + \frac{2\left[(x+y)^3 + 6xyz\right]}{3\sqrt{\pi}{\ell_0}^3}. \tag{3.80}$$

Le premier terme de eq. (3.79) tend à accroître la probabilité à deux intervalles par un facteur indépendant de la distance, étant donné qu'il y a moins de particules dans le système et ce pour une concentration finie de particules.

3.5.3 Contributions des distributions initiales à deux intervalles

Comme précédemment, nous pouvons isoler dans les équations eq. (3.62), eq. (3.63) et eq. (3.64) les termes impliquant $E(x',y',z',t=0)=E_0(x',y',z')$:

- un terme $E_0(x',y',z')$ lorsque toutes les variables sont positives, en combinaison avec $\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z')$
- 2×3 termes dans eq. (3.62) et eq. (3.63)
- 5 termes dans eq. (3.64).

Il y a donc douze termes impliquant les poids $\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(\cdots)$. Après avoir exécuté quelques translations, nous arrivons à l'expression

$$\begin{aligned}
E^{(2)}_{\ell_0}(x,y,z) = \sqrt{\frac{2}{\pi^3}} \int_{\mathbb{R}^3_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\; E_{0,\ell_0}(x',y',z') \times \\
\Big\{\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z') - \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y'-z',-x'-z',z') \\
+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',x'+y'+z') - \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-z',-y'-z',x'+y'+z') \\
+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-y'-z',-z',x'+z') - \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',y',x'+z') \\
+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',-x'-y'-z',y'+z') - \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',-y',y'+z') \\
+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-z',y'+z',x') - \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-y'-z',z',x') \\
+\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x'+z',-y'-z',y') - \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(z',-x'-y'-z',y')\Big\}.
\end{aligned} \tag{3.81}$$

Nous pouvons apparier les termes qui apparaissent sur chaque ligne de la relation ci-dessus en remarquant que

$$\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(u-w,v-w,w-(u+v)) = \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(u,v,w-(u+v))e^{-4w(x+y+z)}. \tag{3.82}$$

Ce qui conduit à

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-y'-z',-x'-z',z') &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z')e^{-4(x'+y'+z')(x+y+z)}, \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-z',-y'-z',x'+y'+z') &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',x'+y'+z')e^{-4z'(x+y+z)}, \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-y'-z',-z',x'+z') &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',y',x'+z')e^{-4(y'+z')(x+y+z)}, \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-z',-x'-y'-z',y'+z') &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',-y',y'+z')e^{-4(x'+z')(x+y+z)}, \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-y'-z',z',x') &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-z',y'+z',x')e^{-4y'(x+y+z)}, \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(z',-x'-y'-z',y') &= \tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x'+z',-y'-z',y')e^{-4x'(x+y+z)}.
\end{aligned} \tag{3.83}$$

De plus, nous avons

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z') &= \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')(1-e^{-4z'z}), \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',-y',x'+y'+z') &= \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')e^{-4x'x-4y'y}[1-e^{-4(x'+y'+z')z}], \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x',y',x'+z') &= \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')e^{-4x'x}[1-e^{-4(x'+z')z}], \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',-y',y'+z') &= \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')e^{-4y'y}[1-e^{-4(y'+z')z}], \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-z',y'+z',x') &= \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')e^{-4x'x-4z'(x+z)}(1-e^{-4x'z}) \\
\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x'+z',-y'-z',y') &= \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')e^{-4y'y-4z'(y+z)}(1-e^{-4y'z}).
\end{aligned}$$

Ce qui nous permet de réécrire eq. (3.81) comme

$$E^{(2)}_{\ell_0}(x,y,z) = \sqrt{\frac{2}{\pi^3}} \int_0^\infty \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z' \qquad E_{0,\ell_0}(x',y',z')\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z') \times K_{2,\ell_0}(x',y',z';x,y,z)$$

avec

$$\begin{aligned} K_{2,\ell_0}(x',y',z';x,y,z) = {} & [1-e^{-4(x'+y'+z')(x+y+z)}](1-e^{-4z'z}) \\ & +e^{-4x'x-4y'y}[1-e^{-4z'(x+y+z)}][1-e^{-4(x'+y'+z')z}] \\ & -e^{-4x'x}[1-e^{-4(y'+z')(x+y+z)}][1-e^{-4(x'+z')z}] \\ & -e^{-4y'y}[1-e^{-4(x'+z')(x+y+z)}][1-e^{-4(y'+z')z}] \\ & +e^{-4x'x-4z'(x+z)}[1-e^{-4y'(x+y+z)}](1-e^{-4x'z}) \\ & +e^{-4y'y-4z'(y+z)}[1-e^{-4x'(x+y+z)}](1-e^{-4y'z}) \end{aligned} \tag{3.84}$$

3.5.4 Règle de somme et limite des longues distances

A partir des résultats précédents, nous pouvons écrire la distribution totale de deux intervalles comme une somme de trois termes

$$\begin{aligned} E(x,y,z,t) = {} & E^{(0)}(x,y,z,t) \\ & + \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\ell_0\sqrt{\pi}}\, E_0(x')K_1(x';x,y,z) \\ & + \int_0^\infty \frac{\sqrt{2}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'}{{\ell_0}^3\sqrt{\pi}^3}\, E_0(x',y',z')\mathcal{W}(x-x',y-y',z-z')K_2(x',y',z';x,y,z). \end{aligned} \tag{3.85}$$

Comme test, nous pouvons considérer le cas où la configuration initiale est un système vide (ou $c_0 = 0$). Les deux distributions initiales $E(x)$ et $E(x,y,z)$ sont alors égales à un et ce en tout temps. Ce qui signifie que si l'on insère les conditions $E_0(x') = 1$ et $E_0(x',y',z') = 1$ dans l'équation eq. (3.85) nous devons récupérer le résultat $E(x,y,z,t) = 1$. La première contribution vient de eq. (3.67) et est indépendante des conditions initiales. La seconde viens de eq. (3.74) ou eq. (3.75) avec $c_0 = 0$:

$$\begin{aligned} E(x,y,z,t) = {} & \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\ell_0}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{y}{\ell_0}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{\ell_0}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{x+y+z}{\ell_0}\right) \\ & -\operatorname{erfc}\left(\frac{x+z}{\ell_0}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{y+z}{\ell_0}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\ell_0}\right)\operatorname{erf}\left(\frac{y}{\ell_0}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\ell_0}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{y}{\ell_0}\right) \\ & +\operatorname{erfc}\left(\frac{z}{\ell_0}\right)\operatorname{erf}\left(\frac{x+y+z}{\ell_0}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{z}{\ell_0}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{x+y+z}{\ell_0}\right) \\ & -\operatorname{erfc}\left(\frac{x+z}{\ell_0}\right)\operatorname{erf}\left(\frac{y+z}{\ell_0}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x+z}{\ell_0}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{y+z}{\ell_0}\right) \\ & + \int_0^\infty \frac{\sqrt{2}\,\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'}{{\ell_0}^3\sqrt{\pi}^3}\, \mathcal{W}(x-x',y-y',z-z')K_2(x',y',z';x,y,z). \end{aligned}$$

Les termes peuvent se réarranger et l'on aboutit à l'égalité suivante, étant donné que $E(x,y,z,t)=1$ pour tout t,

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{2}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'}{{\ell_0}^3\sqrt{\pi}^3}\mathcal{W}(x-x',y-y',z-z')K_2(x',y',z';x,y,z)$$
$$=\mathrm{erf}\left(\frac{x}{\ell_0}\right)\mathrm{erf}\left(\frac{y}{\ell_0}\right)+\mathrm{erf}\left(\frac{z}{\ell_0}\right)\mathrm{erf}\left(\frac{x+y+z}{\ell_0}\right)-\mathrm{erf}\left(\frac{x+z}{\ell_0}\right)\mathrm{erf}\left(\frac{y+z}{\ell_0}\right).$$

Cette dernière expression donne une identité pour l'intégrale impliquant seulement des poids différents lorsque la condition initiale est fixée comme étant égale à 1. Lorsque nous comparons cette expression avec eq. (3.67), nous voyons que l'expression est identique à ceci près que les fonctions erfc sont remplacées par erf. Nous remarquons aussi que tous les corrélateurs s'annulent, comme escompté.

De l'expression générale eq. (3.85) nous pouvons calculer la limite lorsque la distance z est grande. Comme vu précédemment avec eq. (3.67) lorsque le système est entièrement rempli initialement, la quantité $E^{(0)}(x,y,z,t)$ est facilement factorisée puisque $\lim_{z\gg 1}E^{(0)}(x,y,z,t)=\mathrm{erfc}(x/\ell_0)\mathrm{erfc}(y/\ell_0)=E(x,t)E(y,t)$. Dans le cas plus général, pour une concentration finie initialement, nous pouvons montrer que cette limite est toujours valide. En effet, les deux autres parties $E^{(1)}$ et $E^{(2)}$ ont des comportements plus simples dans cette limite. Pour $E^{(1)}$, le noyau K_1 eq. (3.74) peut être approximé par

$$K_{1,\ell_0}(x';x,y,z)\simeq\mathrm{erfc}(x)\Big[e^{-(x'-y)^2}-e^{-(x'+y)^2}\Big]+\mathrm{erfc}(y)\Big[e^{-(x'-x)^2}-e^{-(x'+x)^2}\Big],$$

et donc $E^{(1)}$ se comporte comme

$$E^{(1)}(x,y,z,t)\simeq\mathrm{erfc}(x/\ell_0)\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}E(x',0)\Big[e^{-(x'-y)^2/{\ell_0}^2}-e^{-(x'+y)^2/{\ell_0}^2}\Big]$$
$$+\mathrm{erfc}(y/\ell_0)\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}E(x',0)\Big[e^{-(x'-x)^2/{\ell_0}^2}-e^{-(x'+x)^2/{\ell_0}^2}\Big]. \qquad (3.86)$$

Le second noyau K_2 se comporte comme

$$K_{2,\ell_0}(x',y',z';x,y,z)\simeq\Big(1-e^{-4xx'}\Big)\Big(1-e^{-4yy'}\Big). \qquad (3.87)$$

Ainsi

$$E^{(2)}(x,y,z,t)\simeq\int_{\mathbb{R}^3_+}\frac{\sqrt{2}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'}{{\ell_0}^3\sqrt{\pi}^3}E_0(x',y',z')\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x',y-y',z-z')$$
$$\times\Big(1-e^{-4xx'}\Big)\Big(1-e^{-4yy'}\Big) \qquad (3.88)$$

Dans cette dernière expression, nous avons posé $z''=z'-z$, tel que $E_0(x',y',z')=E_0(x',y',z''+z)$. Supposons maintenant que $E_0(x',y',z''+z)\simeq E_0(x')E_0(y')$, et que l'intégrale sur z'' puisse être étendue sur tout l'axe réel étant donné que la borne inférieure $-z$

est grande et négative. Alors, il reste une intégrale sur le poids $\mathcal{W}_{\ell_0}(x-x', y-y', -z'')$, qui est indépendante de z, et qui peut être calculée. Nous trouvons

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{2}\mathrm{d}z''}{\ell_0\sqrt{\pi}}\, \mathcal{W}_{\ell_0}(x-x', y-y', -z'') = e^{-(x-x')^2/{\ell_0}^2-(y-y')^2/{\ell_0}^2}. \tag{3.89}$$

Si nous multiplions cette exponentielle par le noyau K_2, nous obtenons

$$\begin{aligned} E^{(2)}(x,y,z,t) \simeq & \int_0^{\infty} \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}\, E(x',0)\left[e^{-(x'-x)^2/{\ell_0}^2} - e^{-(x'+x)^2/{\ell_0}^2}\right] \\ & \times \int_0^{\infty} \frac{\mathrm{d}y'}{\sqrt{\pi}\,\ell_0}\, E(y',0)\left[e^{-(y'-y)^2/{\ell_0}^2} - e^{-(y'+y)^2/{\ell_0}^2}\right]. \end{aligned} \tag{3.90}$$

La somme des expressions eq. (3.86), eq. (3.90), combinée avec la limite de eq. (3.67), donne , après factorisation, la limite escomptée. C'est la généralisation du résultat vu avec eq. (3.67) dans le cas particulier d'un système initialement rempli

$$\lim_{z\gg 1} E(x,y,z,t) = E(x,t)E(y,t) \tag{3.91}$$

Cette limite est valable pour n'importe quelle condition initiale et pour tout temps.

3.6 Fonction de corrélation à deux points

3.6.1 Définition

La fonction de corrélation à deux points est définie dans le cas discret comme la probabilité d'avoir deux particules à la distance d l'une de l'autre.

$$C_d(t) := \Pr(\bullet\ d\ \bullet) - \Pr(\bullet)\Pr(\bullet) \tag{3.92}$$

Utilisons les fonctions à deux intervalles vides pour réexprimer cette définition. Nous avons en effet

$$\Pr(\bullet\ d\ \bullet) + \Pr(\circ\ d\ \bullet) = \Pr(\bullet) = 1 - \Pr(\circ) = 1 - E_{0,1}(d) \tag{3.93}$$

Comme $\Pr(\circ\ d\ \bullet) + \Pr(\circ\ d\ \circ) = \Pr(\circ) = E_{1,0}(d)$, il vient $\Pr(\circ\ d\ \bullet) = E_{1,0}(d) - E_{1,1}(d)$ et le corrélateur devient

$$C_d(t) = 1 - E_{0,1}(d) - E_{1,0}(d) + E_{1,1}(d) - (1 - E_{1,0}(d))(1 - E_{0,1}(d)). \tag{3.94}$$

En utilisant le fait que $E_{0,0}(d) = 1$, nous pouvons développer $C_d(t)$ au second ordre en a, le pas du réseau. En posant $z = da$, et $C(z,t) = C_d(t)/a^2$, ceci conduit à

$$C(z,t) = \partial^2_{xy} E(x,y,z)\big|_{x=0,y=0} - \partial_x E(x)|_{x=0}\, \partial_y E(y)|_{y=0} \tag{3.95}$$

3.6.2 Décomposition : formalisme général

Il y a trois contributions à $C(z,t)$ qui viennent des dérivées secondes par rapport à x et y de $E^{(0)}$, $E^{(1)}$ et $E^{(2)}$ respectivement. Utilisons la décomposition suivante

$$C(z,t) = C^{(0)}(z,t) + C^{(1)}(z,t) + C^{(2)}(z,t) \tag{3.96}$$

où les différentes contributions sont

$$\begin{aligned} C^{(0)}(z,t) &= \partial^2_{xy} E^{(0)}(x,y,z,t)|_{x=0,y=0} - (\partial_x \mathrm{erfc}(x/\ell_0)|_{x=0})^2 \\ C^{(1)}(z,t) &= \partial^2_{xy} E^{(1)}(x,y,z,t)|_{x=0,y=0} - 2\partial_x I(x)|_{x=0}\, \partial_y \mathrm{erfc}(y/\ell_0)|_{y=0} \\ C^{(2)}(z,t) &= \partial^2_{xy} E^{(2)}(x,y,z,t)|_{x=0,y=0} - (\partial_x I(x)|_{x=0})^2 \end{aligned} \tag{3.97}$$

avec

$$I(x) = \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}\ell_0} E(x',0) \left(e^{-(x'-x)^2/{\ell_0}^2} - e^{-(x'+x)^2/{\ell_0}^2} \right) \tag{3.98}$$

De eq. (3.67), nous obtenons la première contribution non connexe de $C^{(0)}(z,t)$ (qui ne dépend pas des conditions initiales)

$$\partial^2_{xy} E^{(0)}(x,y,z)\big|_{x=0,y=0} = \frac{4e^{-z^2/{\ell_0}^2}}{\pi {\ell_0}^2} \left[2\sinh(z^2/{\ell_0}^2) + \sqrt{\pi}\frac{z}{\ell_0}\mathrm{erfc}\left(\frac{z}{\ell_0}\right)\right] \tag{3.99}$$

et donc

$$C^{(0)}(z,t) = \frac{4e^{-z^2/{\ell_0}^2}}{\pi {\ell_0}^2} \left[-e^{-z^2/{\ell_0}^2} + \sqrt{\pi}\frac{z}{\ell_0}\mathrm{erfc}\left(\frac{z}{\ell_0}\right)\right] =: \frac{1}{{\ell_0}^2} f_0(z/\ell_0) \tag{3.100}$$

où la fonction d'échelle f_0 tend vers une constante $-4/\pi$ dans la limite aux temps longs $\ell_0 \gg z$ [benA98]. La seconde contribution $C^{(1)}(z,t)$ peut être extraite en dérivant le noyau dans eq. (3.74)

$$\begin{aligned} C^{(1)}(z,t) &= \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^3}\, E(x',0) \Big(\mathrm{erf}(z/\ell_0)\Big\{2 - 4(x'+z)^2/{\ell_0}^2\Big\} e^{-(x'+z)^2/{\ell_0}^2} \\ &\quad -\mathrm{erf}(z/\ell_0)\Big\{2 - 4(x'-z)^2/{\ell_0}^2\Big\} e^{-(x'-z)^2/{\ell_0}^2} \\ &\quad +\frac{4}{\sqrt{\pi}\ell_0}\Big\{(2x'-z)e^{-(x'-z)^2/{\ell_0}^2} + (2x'+z)e^{-(x'+z)^2/{\ell_0}^2}\Big\} e^{-z^2/{\ell_0}^2}\Big) \\ &=: \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^3}\, E(x',0) L_1(x',z) \end{aligned} \tag{3.101}$$

Enfin, pour obtenir le troisième terme $C^{(2)}(z,t)$, nous utilisons la propriété que

$$K_2(x',y',z',0,0,z) = \partial_x K_2(x',y',z',x,y,z)|_{x=y=0} = \partial_y K_2(x',y',z',x,y,z)|_{x=y=0} = 0$$

En utilisant alors eq. (3.84), nous arrivons à

$$\begin{aligned} C^{(2)}(z,t) &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/2}{\ell_0}^3}\int_{\mathbb{R}^3_+}\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y'\,\mathrm{d}z'\;E_0(x',y',z')\mathcal{W}(-x',-y',z-z')\times \\ &\quad \Big\{16e^{-4z'z/{\ell_0}^2}\Big[x'y'\Big(e^{4z'z/{\ell_0}^2}+e^{-4(x'+y'+z')z/{\ell_0}^2}\Big) \\ &\quad -(x'+z')(y'+z')\Big(1+e^{-4(x'+y')z/{\ell_0}^2}\Big)\Big] \\ &\quad +16e^{-4z'z/{\ell_0}^2}z'(x'+y'+z')\Big(e^{-4x'z/{\ell_0}^2}+e^{-4y'z/{\ell_0}^2}\Big)\Big\}/{\ell_0}^4 \\ &\quad -\left(\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^3}\;4x\,E(x,0)\;e^{-x^2/{\ell_0}^2}\right)^2 \qquad (3.102) \\ &=: \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/2}{\ell_0}^3}\int_{\mathbb{R}^3_+}\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y'\,\mathrm{d}z'\;E_0(x',y',z')\mathcal{W}(-x',-y',z-z')L_2(x',y',z',z) \\ &\quad -\left(\int_0^\infty \mathrm{d}x\;\frac{4x}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^3}\;E(x,0)\;e^{-x^2/{\ell_0}^2}\right)^2 \end{aligned}$$

Ainsi, nous pouvons sommer les différentes contributions pour exprimer la fonction de corrélation, dépendante des conditions initiales. Pour étudier les effets des conditions initiales sur le comportement aux temps longs, nous pouvons isoler la contribution dominante pour chacun des trois termes $C^{(0)}$, $C^{(1)}$, $C^{(2)}$. Pour $C^{(0)}$, il vient

$$C^{(0)}(z,t) = \frac{1}{{\ell_0}^2}f_0(z/\ell_0),\ \text{with}\quad f_0(z/\ell_0)\overset{\ell_0\gg 1}{\simeq}-\frac{4}{\pi} \qquad (3.103)$$

Pour $C^{(1)}$, lorsque ℓ_0 est grande, nous pouvons appliquer un développement de Taylor de $L_1(x',z)$ autour de $x'=0$, et comme $L_1(0,z)=0$ nous obtenons

$$C^{(1)}(z,t)\simeq\frac{f_1(z/\ell_0)}{{\ell_0}^4}\int_0^\infty \mathrm{d}x\;E(x,0)\,x \qquad (3.104)$$

où la fonction d'échelle f_1 est donnée par l'expression

$$\begin{aligned} f_1(\frac{z}{\ell_0}) = \frac{8}{\pi}e^{-z^2/{\ell_0}^2}\Big[2\left(1-\frac{z^2}{{\ell_0}^2}\right)e^{-z^2/{\ell_0}^2}+\sqrt{\pi}\frac{z}{\ell_0}\left(2\frac{z^2}{{\ell_0}^2}-3\right)\mathrm{erf}\left(\frac{z}{\ell_0}\right)\Big] \\ \overset{\ell_0\gg z}{\simeq}\frac{16}{\pi}\Big(1-6\frac{z^2}{{\ell_0}^2}\Big) \qquad (3.105) \end{aligned}$$

La quantité $E_1 := \int_0^\infty \mathrm{d}x\;E(x,0)x$ est reliée au second moment de la distribution en intervalle vide $P(x,0)$ eq. (3.24) après avoir exécuté une intégration par parties

$$E_1=\int_0^\infty \mathrm{d}x\;E(x,0)\,x=\frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\;P(x,0)\,x^2. \qquad (3.106)$$

Concernant le comportement dominant de $C^{(2)}$, notons que le poids gaussien $\mathcal{W}(-x',-y',z-z')$ présente un pic autour de la valeur $(x',y',z')=(0,0,z)$. Nous pouvons alors commencer

par appliquer un développement de Taylor de $E_0(x', y', z')$ autour de $z' = z$ et intégrer z' sur tout l'axe réel si z est suffisamment loin de la valeur zéro, ce qui est satisfait si z/ℓ_0 est petit.

$$C^{(2)}(z,t) \simeq \int_{\mathbb{R}^2_+} \mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y' E_0(x',y',z) \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \frac{\sqrt{2}\mathrm{d}z'}{(\sqrt{\pi})^3 {\ell_0}^5} \mathcal{W}(-x',-y',z-z') L_2(x',y',z',z)}_{M_0(x',y',z)}$$
$$+ \int_{\mathbb{R}^2_+} \mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y' \partial_z E_0(x',y',z) \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \frac{\sqrt{2}\mathrm{d}z'}{(\sqrt{\pi})^3 {\ell_0}^5} (z'-z) \mathcal{W}(-x',-y',z-z') L_2(x',y',z',z)}_{M_1(x',y',z)}$$
$$- \left(\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{4x}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^3}\, E(x,0)\, e^{-x^2/{\ell_0}^2} \right)^2 \tag{3.107}$$

Lorsque ℓ_0 est grande, la fonction M_0 peut être développée en séries en x' et y' pour obtenir le terme dominant

$$M_0(x',y',z) \simeq \frac{x'y'}{{\ell_0}^6} f_2^{(0)}(\frac{z}{\ell_0}) \quad , \quad f_2^{(0)}(u) = -\frac{32}{\pi} e^{-2u^2} \Big(1 + 2u^2 - e^{2u^2} \Big).$$

La fonction suivante M_1 dans le développement peut aussi être développée comme suit

$$M_1(x',y',z) \simeq \frac{x'y'}{{\ell_0}^6} f_2^{(1)}(\frac{z}{\ell_0}) \quad , \quad f_2^{(1)}(u) = -u f_2^{(0)}(u).$$

Le dernier terme dans eq. (3.107) peut être approximé par

$$\left(\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{4x}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^3}\, E(x,0)\, e^{-x^2/{\ell_0}^2} \right)^2 \simeq \frac{16}{\pi {\ell_0}^6} E_1^2.$$

où E_1 est la moyenne de la distribution à un intervalle, donnée dans eq. (3.106).

Enfin, $C^{(2)}$ peut être développée en séries par rapport à l'inverse de la longueur de diffusion, tant que les intégrales impliquant les distributions à deux intervalles ne sont pas divergentes :

$$C^{(2)}(z,t) \simeq \frac{f_2^{(0)}(z/\ell_0)}{{\ell_0}^6} \int_{\mathbb{R}^2_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\, x'\, y'\; E_0(x',y',z)$$
$$+ \frac{f_2^{(1)}(z/\ell_0)}{{\ell_0}^6} \int_{\mathbb{R}^2_+} \mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\, x'\, y'\; \partial_z E_0(x',y',z) - \frac{16}{\pi {\ell_0}^6} E_1^2. \tag{3.108}$$

Ce développement eq. (3.108) présente l'avantage que si la condition initiale ne dépend pas de la distance z entre les intervalles de longueur x et y, alors le second moment impliquant $\partial_z E_0(x,y,z)$ s'annule. Cependant, des résultats précédents eq. (3.103), eq. (3.104)

et eq. (3.108), on tire une hiérarchie en puissance de $1/\ell_0$, où $|C^{(0)}(z,t)| \gg |C^{(1)}(z,t)| \gg |C^{(2)}(z,t)|$, avec une contribution dominante d'ordre $1/{\ell_0}^2$, $1/{\ell_0}^4$ and $1/{\ell_0}^6$, successivement. A partir des comportements asymptotiques, il est alors aisé de vérifier que dans chaque cas les signes des contributions au corrélateur sont respectivement $C^{(0)} < 0$, $C^{(1)} > 0$ et $C^{(2)} < 0$. En particulier, si $z \ll \ell_0$, la contribution dominante à C_2 vient du dernier terme de eq. (3.108), étant donné que les fonctions d'échelle $f_2^{(0)}$ et $f_2^{(1)}$ décroissent rapidement en z/ℓ_0. Ainsi

$$C^{(2)}(z,t) \overset{\ell_0 \gg 1}{\simeq} -\frac{16}{\pi {\ell_0}^6} E_1^2. \tag{3.109}$$

3.6.3 Exemple

Considérons le cas où les conditions initiales sont les suivantes :

$$\begin{aligned} E_0(x') &= \exp(-c_0 x') \\ E_0(x',y',z') &= \exp(-c_0(x'+y')) \end{aligned} \tag{3.110}$$

où c_0 est la concentration initiale de particules décorrélées. Nous supposons donc qu'initialement la distribution à deux intervalles est indépendante de la distance entre les intervalles. Il doit néanmoins satisfaire la condition de compatibilité $E_0(x',y',z'=0) = E_0(x'+y')$. Dans ce cas, les solutions formelles précédentes peuvent être calculées sauf pour la triple intégrale (troisième ligne de 3.85), où le noyau gaussien ne peut être exprimé (à notre connaissance) en terme de fonctions spéciales.
Etant donné que nous sommes intéressé dans la limite au temps long et sur l'influence des conditions initiales, nous allons tout de même effectuer un développement en x'/ℓ_0 et y'/ℓ_0 dans les dérivées du noyau K_{2,ℓ_0} et dans le poids $\mathcal{W}_{\ell_0}(-x',-y',z-z')$ dans eq. (3.102). Il est possible d'établir un tel développement car seules les petites valeurs de x' et y' sont significatives lorsque $c_0\ell_0$ est grand et lorsque ces intégrands sont combinés au facteur exponentielle $\exp(-c_0(x'+y'))$. La dernière fonction rend l'intégrale finie après un développement du poids et du noyau. En effet, le paramètre naturel du développement est $1/(c_0\ell_0)$, lui même petit par rapport à l'autre paramètre z/ℓ_0, et le développement en série est supposé diverger seulement dans la limite des petites concentrations ou des temps courts. Mais le résultat eq. (3.102) nous fournit une forme pratique pour le développement en séries de la fonction de corrélation avec une distribution initiale quelconque. L'autre partie connexe du corrélateur $C^{(1)}(z,t)$, défini dans l'équation eq. (3.101), peut être calculée exactement avec la condition initiale exponentielle $E_0(x') = \exp(-c_0x')$, ou en dérivant deux fois par rapport à x et y le précédent résultat donné par l'équation eq. (3.75). Dans la limite asymptotique, lorsque $c_0\ell_0$ est grand, nous obtenons

$$\begin{aligned} C^{(1)}(z,t) &= \frac{8\, z/\ell_0}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^2(c_0\ell_0)^2}\Big(-3+2\frac{z^2}{{\ell_0}^2}\Big)\mathrm{erf}(z/\ell_0)e^{-z^2/{\ell_0}^2} \\ &\quad + \frac{16}{\pi {\ell_0}^2(c_0\ell_0)^2}\Big(1-\frac{z^2}{{\ell_0}^2}\Big)e^{-2z^2/{\ell_0}^2} \end{aligned} \tag{3.111}$$

$$+\frac{16z/\ell_0}{\sqrt{\pi}{\ell_0}^2(c_0\ell_0)^4}\Big(15-20\frac{z^2}{{\ell_0}^2}+4\frac{z^4}{{\ell_0}^4}\Big)\mathrm{erf}(z/\ell_0)e^{-z^2/{\ell_0}^2}$$
$$+\frac{32}{\pi{\ell_0}^2(c_0\ell_0)^4}\Big(-3+9\frac{z^2}{{\ell_0}^2}-2\frac{z^4}{{\ell_0}^4}\Big)e^{-2z^2/{\ell_0}^2}+o(1/(c_0\ell_0)^4).$$

Nous remarquons que les premiers termes de la fonction de corrélation dans la limite des temps longs ne contribuent qu'au minimum en $1/{\ell_0}^4$ fois une fonction d'échelle de z/ℓ_0. C'est donc une correction à $C^{(0)}(z,t)$ qui lui se comporte comme $1/{\ell_0}^2$.

Le dernier terme $C^{(2)}(z,t)$ peut aussi être développé en séries de puissance $1/(c_0\ell_0)$ dont les coefficients sont des fonctions d'échelle de z/ℓ_0

$$C^{(2)}(z,t) \;=\; \frac{16}{\pi{\ell_0}^2}\exp(-2z^2/{\ell_0}^2)\sum_{k=2}^{\infty}\frac{P_{2k}(z/\ell_0)}{(c_0\ell_0)^{2k}} \tag{3.112}$$

où les premiers polynômes $P_{2k}(z)$ s'écrivent

$$\begin{aligned}
&P_4(z)=-1-2z^2\;\;,\;\;P_6(z)=12+24z^2-16z^4,\\
&P_8(z)=-156-312z^2+528z^4-96z^6,\\
&P_{10}(z)=2400+4800z^2-15360z^4+5888z^6-512z^8.
\end{aligned} \tag{3.113}$$

En général, $C(z,t)$ peut être développé en séries de $1/(c_0\ell_0)$, avec des coefficients qui sont des fonctions d'échelle de z/ℓ_0. Seule la contribution de $C^{(0)}(z,t)$ est dominante à l'ordre zéro en $1/(c_0\ell_0)$, alors que $C^{(1)}(z,t)$ contribue à l'ordre $1/(c_0\ell_0)^2$. Enfin, la partie dominante de $C^{(2)}(z,t)$ est de l'ordre de $1/(c_0\ell_0)^4$, comme le montre l'équation eq. (3.112) ; elle est donc encore plus faible que la contribution de $C^{(1)}(z,t)$.

Dans la figure 3.7, l'évolution temporelle du corrélateur $C(1/2,t)$ est présentée, pour des particules initialement décorrélées avec une concentration $c_0=1$ et $8D=1$, telle que $\ell_0=\sqrt{t}$. En particulier, nous avons représenté respectivement la contribution dominante aux temps longs, $t\to\infty$, $C^{(0)}(1/2,t)$, puis celle incluant la première correction $C^{(1)}(1/2,t)$, puis lorsque toutes les corrections $C^{(1)}(1/2,t)+C^{(2)}(1/2,t)$ sont prises en compte. Nous voyons clairement que, pour des temps relativement courts, la hiérarchie $|C^{(0)}(1/2,t)|\gg|C^{(1)}(1/2,t)|\gg|C^{(2)}(1/2,t)|$, déduites de nos développements asymptotiques, s'illustre.

3.6.4 Extensions

En ayant calculé les probabilités d'avoir un et deux intervalles vides, nous avons désormais accès à bien d'autres quantités que les seules fonctions de corrélation, de réponse, densité de particules. Par exemple, le taux de réaction effectif est essentiellement contrôlé par la probabilité d'avoir deux particules l'une à coté de l'autre $\mathrm{Pr}(\bullet\bullet)$. De même, nous pourrions définir la probabilité de triplet $\mathrm{Pr}(\bullet\bullet\bullet)$. Et nous avons

$$\begin{aligned}
\mathrm{Pr}(\bullet\bullet) &= E_0(t)-2E_1(t)+E_2(t)\overset{a\to0}{=}\left.\frac{\partial^2E(x,t)}{\partial x^2}\right|_{x=0}\\
\mathrm{Pr}(\bullet\bullet\bullet) &= (E_0(t)-2E_1(t)+E_2(t))-(E_1(t)-E_2(t))+E_{1,1}(1)(t)
\end{aligned} \tag{3.114}$$

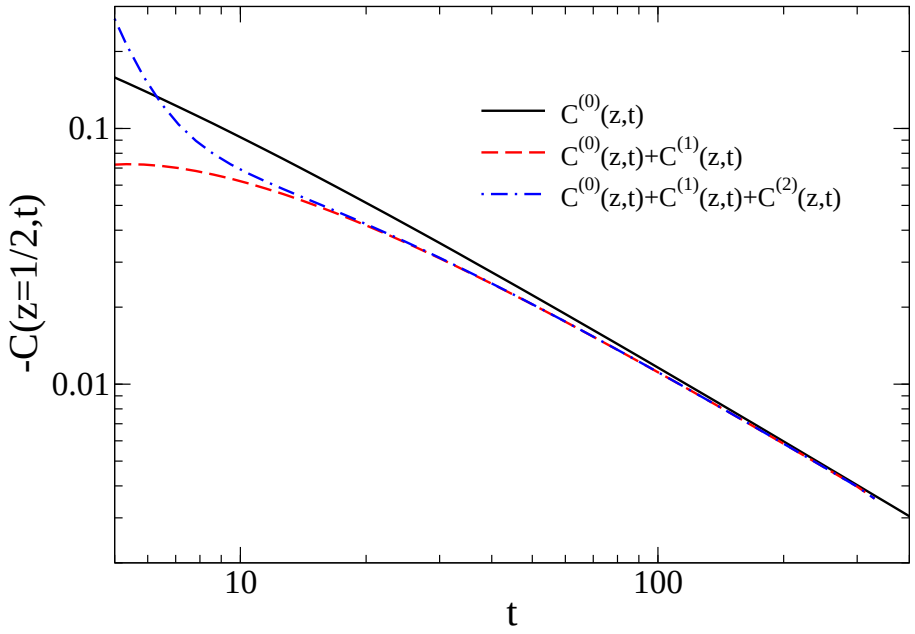


FIGURE 3.7 – *Evolution temporelle du corrélateur connexe $C(z,t)$ pour $c_0 = 1$ et $z = 1/2$. La ligne pleine représente la contribution dominante $C^{(0)}(1/2,t)$, le ligne en tiret inclut la première correction et représente donc $C^{(0)}(1/2,t) + C^{(1)}(1/2,t)$ et enfin la ligne en pointillé et tiret représente le corrélateur total $C^{(0)}(1/2,t) + C^{(1)}(1/2,t) + C^{(2)}(1/2,t)$.*

Alors que la probabilité de paires $\Pr(\bullet\bullet)$ peut être exprimée en termes de la probabilité à un intervalle vide,[1] la probabilité de triplet dépend aussi de la probabilité à deux intervalles vides. Dans la limite continue, la probabilité de paires s'écrit pour les trois exemples de conditions initiales déjà considérées dans la figure 3.5

$$\Pr(\bullet\bullet) = \begin{cases} c_0^2 \exp\left(\dfrac{c_0\ell_0}{2}\right) \operatorname{erfc}\left(\dfrac{c_0\ell_0}{2}\right) & ;\ \text{si } E_0(x) = e^{-c_0 x} \\ \dfrac{4c_0^2}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}x\, e^{-x^2} \dfrac{1}{(1+c_0\ell_0 x)^3} & ;\ \text{si } E_0(x) = (1+c_0 x)^{-1} \\ 0 & ;\ \text{si } E_0(x) = \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} c_0 x\right) \end{cases} \tag{3.115}$$

où c_0 caractérise l'état initial. Dans les deux premiers cas, le comportement aux temps longs est donné par $\Pr(\bullet\bullet) \simeq (2/\sqrt{\pi})(c_0/\ell_0) \sim t^{-1/2}$ lorsque c_0 est fixée. Cependant, bien que le comportement aux temps longs soit algébrique, l'amplitude associée dépend explicitement de la distribution initiale des particules, ce qui diffère de ce que l'on avait eu dans l'éq (3.27) pour la concentration de particules $c(t)$.

1. La dépendance en x de $\partial_x^2 E(x,t)/c(t)$ décrit la fonction de distribution interparticulaire et a déjà été étudiée en détail, voir [benA90, benA00] et les références à l'intérieur de ces derniers.

Enfin, à partir des résultats calculés dans ce chapitre, d'autres corrélateurs sont accessibles tels que par exemple

$$\begin{aligned}
\Pr(\bullet\bullet d\bullet) &= (E_0 - 2E_1 + E_2) + (E_{1,1}(d+1) + E_{1,1}(d) - E_{1,2}(d) - E_1) \\
\Pr(\bullet\bullet d\bullet\bullet) &= \Pr(\bullet\bullet d\bullet) - (E_1 - E_2) \\
&\quad + (E_{1,1}(d+2) + E_{2,2}(d) - E_{2,1}(d+1) - E_{1,2}(d+1)) \qquad (3.116)
\end{aligned}$$

3.7 Conclusions

Nous avons analysé une méthode pour le calcul des corrélateurs dépendant du temps dans le processus coagulation-diffusion unidimensionnel. Les quantités pertinentes sont les probabilités de trouver soit un seul intervalle vide de longueur donnée soit deux intervalles de longueurs données et à une distance fixée l'un de l'autre. Ces probabilités satisfont des équations différentielles linéaires simples, mais extraire la solution explicite est ardue à trouver à cause des conditions aux bords. Plutôt que d'éviter cet écueil nous avons montré comment par une continuation analytique vers les distances et longueurs négatives, les solutions pouvaient être déduites pour n'importe quelles conditions initiales, caractérisées par leurs probabilités à un ou deux intervalles vides.

De manière plus précise, nous avons observé que :

1. Le comportement aux temps longs de la densité particulaire est indépendant des conditions initiales, comme attendu par le groupe de renormalisation [Lee94, Balb95] et en parfait accord avec des calculs précédents utilisant une formulation des intervalles vides où l'invariance par translation spatiale n'est pas directement prise [benA90, benA00]. Nos résultats nous permettent aussi de comparer directement la limite continue avec la solution discrète ainsi que de déterminer les corrections au comportement dominant.
2. Le comportement dominant aux temps longs du corrélateur densité-densité éq. (3.100), en parfait accord avec une précédente estimation de son comportement asymptotique [benA98], a été montré indépendant des conditions initiales. Nous avons aussi accès aux corrections à ce comportement d'échelle ainsi qu'à l'importance relative de la probabilité à un ou deux intervalles vides.
3. En considérant la condition initiale générale, nous avons identifié une décomposition naturelle éqs. (3.65,3.96), en termes qui sont soumis à une hiérarchie dans la limite des temps longs.

C'est cette dernière information qui est primordiale dans le prochain chapitre. En effet, pour calculer le corrélateur à deux temps, nous avions besoin des informations sur les comportements aux temps longs des quantités à un temps. Le fait que le comportement dominant aux temps longs du corrélateur soit indépendant des conditions initiales nous permet de ne pas nous en soucier pour déterminer les exposants du vieillissement.

Chapitre 4

Processus coagulation diffusion Quantités à deux temps

Maintenant que nous avons démontré comment obtenir les probabilités à un ou deux intervalles $E_n(t)$ et $E_{n,m}(d,t)$, nous allons pouvoir utiliser ces résultats pour étudier le vieillissement dans ce processus unidimensionnel.

4.1 Généralisation de la méthode des intervalles vides

Etant donné que l'analyse du comportement de vieillissement requiert le calcul des quantités à deux temps, nous pourrions définir la probabilité à deux intervalles vides et à deux temps

$$E_{n,m}(d;t,s) := \Pr(\{\boxed{\text{n}},t\}\ d\ \{\boxed{\text{m}},s\}). \tag{4.1}$$

Cependant, il nous est apparu plus simple et plus efficace de généraliser la méthode des intervalles vides et de considérer plutôt

$$\Pr(\{\boxed{\text{n}},t\}\ d\ \{\bullet,s\}), \tag{4.2}$$

, voir la figure 4.1.
Notons que nous supposerons encore dans la suite la validité de l'invariance par translation spatiale. Enfin, cette quantité peut être utilisée pour calculer aussi bien le corrélateur

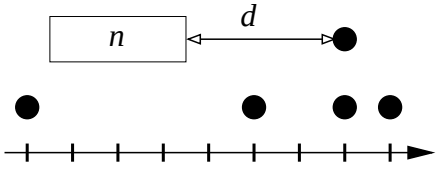


FIGURE 4.1 – *Définition de la probabilité mixte $F(n,d)$ d'avoir un intervalle vide d'au moins n sites consécutifs et à la distance d d'une particule.*

	correlateur	réponse
notation	$F(n,d;t,s)$	$G(n,d;t,s)$
bord	$F(x,z;s,s) = -\partial_y E(x,y,z;s)\|_{y=0}$	$G(x,z;s,s) = E(x,s)$
conditions	$F(0,z;t,s) = c(s)$	$G(0,z;t,s) = 1$
observable	$C(t,s;r) = -\partial_x F(x,r;t,s)\|_{x=0} - c(t)c(s)$	$R(t,s;r) = -\partial_x G(x,r;t,s)\|_{x=0} - c(t)$

TABLE 4.1 – *Les fonctions génératrices F et G pour le corrélateur connexe C et la fonction de réponse R dans la limite continue, respectivement. La définition formelle étant identique, elles ne sont distinguables que par leurs conditions aux bords. Ici $c(t)$ est la concentration de particule.*

que la fonction de réponse. Pour les différencier, il suffit de fournir des conditions aux bords différentes. Nous allons donc, pour les distinguer dans la suite, parler des fonctions génératrices F et G, qui obéissent aux mêmes équations de mouvement, écrites ici dans la limite continue

$$\begin{aligned}\left[\partial_t - 2D\left(\partial_x^2 + \frac{1}{2}\partial_z^2 - \partial_{xz}^2\right)\right] F(x,z;t,s) &= 0 \\ \left[\partial_t - 2D\left(\partial_x^2 + \frac{1}{2}\partial_z^2 - \partial_{xz}^2\right)\right] G(x,z;t,s) &= 0\end{aligned} \tag{4.3}$$

mais que la condition initiale permet de distinguer. Notons que nous utiliserons, abusivement, le terme de "fonction génératrice" pour F ou G dans le sens où ce sont ces fonctions qui sont utilisées directement pour obtenir la fonction de corrélation C et la fonction de réponse R mais aussi car ces mêmes fonctions F ou G peuvent donner accès à d'autres quantités comme nous l'avons vu, par exemple, pour les probabilités à un ou deux intervalles vides dans le chapitre précédent. Le tableau 4.1 résume ceci.

Maintenant que nous avons donné les bases de notre étude, entrons y plus en détail.

4.1.1 Définitions

Attardons nous un moment pour bien rappeler ce que nous souhaitons calculer : la fonction de réponse R et la fonction de corrélation C. La fonction de corrélation est définie par

$$C(t,s) = \Pr(\{\bullet\,, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) - \Pr(\{\bullet\,, t\})\Pr(\{\bullet, s\}) \tag{4.4}$$

et la fonction de réponse est la réponse linéaire à un accroissement du nombre de particules. Pour être plus explicite, nous calculons la réponse linéaire à l'ajout d'une particule au temps s sur un site donné ; nous reviendrons plus en détail sur la définition de la fonction de réponse dans la section concernant le formalisme hamiltonien.
Pour calculer ces deux quantités précédemment citées, nous définissons la probabilité d'avoir au temps t un intervalle de n sites vides avec la condition qu'au temps $s < t$ il y ait eu une particule à une distance d de cet intervalle (voir figure 4.1). Cette probabilité

conditionnelle est représentée par la fonction génératrice suivante

$$F(n,d;t,s) = \Pr(\{\boxed{\text{n}},t\}\ d\ \{\bullet,s\}). \tag{4.5}$$

Elle nous permettra de calculer la fonction de corrélation.
Pour calculer la fonction de réponse, nous utiliserons la probabilité conditionnelle suivante

$$G(n,d;t,s) = \Pr(\{\boxed{\text{n}},t\}\ d\ \{\underline{\bullet},s\}) \tag{4.6}$$

où la particule soulignée $\underline{\bullet}$ signifie qu'au temps s, nous sommes certains que la particule existe, car nous l'avons créée : c'est à dire que pour $t = s$, nous aurons la propriété suivante :

$$G(n,d;s,s) = \Pr(\{\boxed{\text{n}},s\}\ d\ \{\underline{\bullet},s\}) = \Pr(\{\boxed{\text{n}},s\}). \tag{4.7}$$

Pour résumer, ces deux probabilités ne se différencient que par leurs conditions initiales que nous imposerons au temps $t = s$. Ainsi, nous noterons la fonction (4.5) par F lorsqu'elle décrit la probabilité d'avoir une particule à la distance d de l'intervalle vide. Avec cette dernière, nous pourrons calculer le corrélateur à deux temps, comme nous le verrons dans la suite. Par contre, si nous ajoutons une particule au temps s et à la distance d de l'intervalle vide, nous noterons cette probabilité $G(n,d;t,s)$ et pourrons obtenir d'elle la réponse linéaire.

Nous avons la propriété suivante aux temps égaux $t = s$:

$$\Pr(\{\boxed{\text{n}},s\}\ d\ \{\bullet,s\}) + \Pr(\{\boxed{\text{n}},s\}\ d\ \{\circ,s\}) = \Pr(\boxed{\text{n}},s) = E_n(s), \tag{4.8}$$

où $E_n(s)$ est la probabilité d'avoir au temps s un intervalle vide de taille au moins égal à n sites :

$$E_n(s) = \Pr(\boxed{\text{n}},s). \tag{4.9}$$

Rappelons aussi brièvement la probabilité d'avoir deux intervalles vides de longueur au moins n_1 et n_2 séparés d'une distance d :

$$E_{n_1,n_2}(d;s) = \Pr(\boxed{n_1}\ d\ \boxed{n_2},s). \tag{4.10}$$

Maintenant que nous avons défini tout ce dont nous avons besoin, il nous faut distinguer les deux fonctions génératrices F et G. Si aucune condition au temps $t = s$ n'est imposée sur la particule, F représente la probabilité mixte d'avoir d'un côté un intervalle vide au temps t et de l'autre une particule au temps s. Pour ce, utilisons le fait que

$$\Pr(\{\boxed{\text{n}},s\}\ d\ \{\circ,s\}) = E_{n,1}(d;s), \tag{4.11}$$

où $E_{n,1}(d;s)$ est la probabilité d'avoir deux intervalles vides de longueur 1 et n, distants de d. Couplé avec eq. (4.8), nous en déduisons l'identité suivante aux temps égaux

$$F(n,d;s,s) = E_n(s) - E_{n,1}(d;s) = E_{n,0}(d;s) - E_{n,1}(d;s).$$

Dans la limite continue, lorsque le pas a du réseau tend vers zéro, nous pouvons remplacer formellement la probabilité discrète $F(n,d;s,s)$ par sa limite continue $F(x,r;s,s)$, où nous avons effectué les substitutions $x = n\mathsf{a}$ et $r = d\mathsf{a}$. En appliquant ces mêmes substitutions aux probabilités à un et deux intervalles vides, nous pouvons exprimer F comme une dérivée $F(n,d;s,s) = E_{n,0}(d;s) - E_{n,1}(d;s) \simeq -\mathsf{a}\partial_y E(x,y,r;s)|_{y=0}$ et

$$F(x,r;s,s) = \lim_{\mathsf{a}\to 0} \frac{1}{\mathsf{a}} F(n,d;s,s) = -\partial_y E(x,y,r;s)|_{y=0}. \tag{4.12}$$

Dans le second cas, si au temps s une particule est ajoutée (par une quelconque excitation) à la distance d de l'intervalle vide, alors G est la fonction de réponse du système à cette perturbation au temps $t > s$. La probabilité eq. (4.11) est désormais égale à zéro étant donné qu'au temps s l'existence de la particule est imposée à la distance d de l'intervalle vide. Ainsi, la possibilité d'avoir un trou à cet endroit est nul. Ceci impose la condition initiale suivante pour G dans la limite continue

$$G(x,r;s,s) = \lim_{\mathsf{a}\to 0} G(n,d;s,s) = E(x;s). \tag{4.13}$$

Remarquons que dans la limite continue, F a la dimension de G divisée par une longueur.

Nous pouvons maintenant relier les fonctions génératrices F et G au corrélateur connexe $C(t,s;r)$ et à la fonction de réponse $R(t,s;r)$, aussi bien dans le cas discret que dans sa limite continue. Pour le corrélateur, nous utilisons l'identité suivante

$$\underbrace{\Pr(\{\circ,t\}\ d\ \{\bullet,s\})}_{F(1,d;t,s)} + \underbrace{\Pr(\{\bullet,t\}\ d\ \{\bullet,s\})}_{C(t,s;d)+c(t)c(s)} = \Pr(\bullet,s) \tag{4.14}$$

où $c(t)$ est la densité moyenne de particule et le second terme est simplement le corrélateur non-connexe. Nous pouvons le réécrire de la façon suivante

$$\begin{aligned} F(1,d;t,s) + C(t,s;d) + c(t)c(s) &= 1 - E_1(s) \\ \Rightarrow C(t,s;d) &= 1 - E_1(s) - F(1,d;t,s) - c(t)c(s). \end{aligned}$$

Dans la limite continue, nous obtenons $C(t,s;r) + c(t)c(s) \simeq 1 - E_1(s) - F(t,s;0,r) - \mathsf{a}\partial_x F(x,r;t,s)|_{x=0}$, et comme $F(0,d;t,s) = 1 - E_1(s)$, nous pouvons réexprimer le corrélateur particule-particule comme

$$C(t,s;r) = \lim_{\mathsf{a}\to 0} \frac{C(t,s;d)}{\mathsf{a}} = -\left.\frac{\partial F(x,r;t,s)}{\partial x}\right|_{x=0} - c(t)c(s). \tag{4.15}$$

Conduisons la même analyse pour la fonction de réponse. Commençons en utilisant l'identité

$$\underbrace{\Pr(\{\circ,t\}\ d\ \{\bullet,s\})}_{G(1,d;t,s)} + \underbrace{\Pr(\{\bullet,t\}\ d\ \{\bullet,s\})}_{R(t,s;d)+c(t)} = \Pr(\bullet,s) = 1. \tag{4.16}$$

Ici, le second terme donnerait simplement la concentration de particule $c(t)$ en l'absence de perturbation et la fonction de réponse R (qui mesure l'écart à cette concentration sans perturbation). Il vient alors $R(t,s;d) + c(t) = 1 - G(1,d;t,s) \simeq 1 - G(0,d;t,s) - \mathtt{a}\partial_x G(x,z;t,s)|_{x=0}$. En remarquant que $G(0,d;t,s) = 1$, puisque c'est la probabilité d'avoir un intervalle de longueur au moins nulle tout en sachant qu'une particule a été ajoutée au temps s et la distance d de ce dernier, nous obtenons la relation

$$R(t,s;r) = \lim_{\mathtt{a}\to 0} \frac{R(d;t,s)}{\mathtt{a}} = -\left.\frac{\partial G(x,r;t,s)}{\partial x}\right|_{x=0} - c(t). \tag{4.17}$$

Comme avant, C possède la dimension de R divisée par une longueur. Nous avons condensé les résultats de cette section dans le tableau table 4.1. Les deux définitions du corrélateur et de la réponse eq. (4.15) et eq. (4.17) sont reliées directement à la dérivée de la probabilité mixte F ou G. Pour les distinguer, il suffit de prendre l'une ou l'autre des conditions initiales données dans eq. (4.12) et eq. (4.13) au temps $t = s$. Ainsi, pour obtenir la solution complète au temps (t,s) nous allons déterminer les équations de mouvement pour F, G.

4.1.2 Equation de mouvement

Les équations de mouvement des fonctions génératrices F, G peuvent être dérivées indépendamment de leur condition initiale. Nous allons donc, dans un souci de clarté, ne donner dans la suite de cette section que la dérivation pour F, tout en sachant que la même équation est valable pour G.

Commençons par calculer comment la fonction génératrice F change entre les temps t et $t + dt$, selon les différentes contributions possibles (création ou destruction de l'intervalle de longueur n). Ces différentes possibilités s'écrivent :

$$\begin{aligned}\partial_t F(n,d;t,s)\mathrm{d}t = &-\left[\Pr(\{\bullet \frown \boxed{\ n\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) + \Pr(\{\boxed{\ n\ } \frown \bullet, t\}\ d-1\ \{\bullet, s\})\right] \\ &+ \Big[\Pr(\{\frown \bullet \boxed{\ n-1\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) + \Pr(\{\boxed{\ n-1\ } \bullet \frown, t\}\ d\ \{\bullet, s\})\Big]\end{aligned} \tag{4.18}$$

Il est possible d'évaluer chaque probabilité de la relation précédente en introduisant le taux de transition Γ et en considérant une règle de somme. Par exemple :

$$\Pr(\{\bullet \frown \boxed{\ n\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) = \Pr(\{\bullet \boxed{\ n\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\})\Gamma \mathrm{d}t,$$

avec

$$\begin{aligned}\Pr(\{\bullet \boxed{\ n\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) + \Pr(\{\circ \boxed{\ n\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) &= \Pr(\{\boxed{\ n\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) \\ \Rightarrow \Pr(\{\bullet \boxed{\ n\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) &= F(n,d;t,s) - F(n+1,d;t,s).\end{aligned}$$

Le second terme dans eq. (4.18) peut aussi s'écrire

$$\Pr(\{\boxed{\ n\ } \frown \bullet, t\}\ d-1\ \{\bullet, s\}) = \Pr(\{\boxed{\ n\ } \bullet, t\}\ d-1\ \{\bullet, s\})\Gamma \mathrm{d}t,$$

avec

$$\Pr(\{\boxed{\ n\ }\bullet, t\}\ d-1\ \{\bullet, s\}) + \Pr(\{\boxed{\ n\ }\circ, t\}\ d-1\ \{\bullet, s\}) = \Pr(\{\boxed{\ n\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\})$$
$$\Rightarrow \Pr(\{\boxed{\ n\ }\bullet, t\}\ d-1\ \{\bullet, s\}) = F(n, d; t, s) - F(n+1, d-1; t, s).$$

Pour le troisième terme de eq. (4.18), nous avons

$$\Pr(\{\frown\bullet\boxed{\ n-1\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) = \Pr(\{\bullet\boxed{\ n-1\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\})\Gamma \mathrm{d}t,$$

avec

$$\Pr(\{\bullet\boxed{\ n-1\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) + \Pr(\{\circ\boxed{\ n-1\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) = \Pr(\{\boxed{\ n-1\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\})$$
$$\Rightarrow \Pr(\{\bullet\boxed{\ n-1\ }, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) = F(n-1, d; t, s) - F(n, d; t, s).$$

Enfin, le dernier terme de eq. (4.18) s'exprime comme

$$\Pr(\{\boxed{\ n-1\ }\bullet\frown, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) = \Pr(\{\boxed{\ n-1\ }\bullet, t\}\ d\ \{\bullet, s\})\Gamma \mathrm{d}t,$$

avec

$$\Pr(\{\boxed{\ n-1\ }\bullet, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) + \Pr(\{\boxed{\ n-1\ }\circ, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) = \Pr(\{\boxed{\ n-1\ }, t\}\ d+1\ \{\bullet, s\})$$
$$\Rightarrow \Pr(\{\boxed{\ n-1\ }\bullet, t\}\ d\ \{\bullet, s\}) = F(n-1, d+1; t, s) - F(n, d; t, s).$$

Si nous sommons toutes ces contributions, nous obtenons l'équation différentielle linéaire pour une chaîne discrète en fonction du taux de transition Γ

$$\begin{aligned}\partial_t F(n, d; t, s) = \Gamma\,[&F(n+1, d; t, s) + F(n+1, d-1; t, s) \\ +\ \ &F(n-1, d; t, s) + F(n-1, d+1; t, s) - 4F(n, d; t, s)]\,.\end{aligned} \tag{4.19}$$

Cette expression nous permet d'évaluer l'évolution pour des temps $t > s$ des probabilités mixtes (F ou G) à partir des conditions initiales eq. (4.12) or eq. (4.13). Dans la limite continue, la précédente identité peut se développer en fonction du pas du réseau a et nous obtenons alors une équation différentielle du second ordre :

$$\partial_t F(x, z; t, s) = 2D\left[\partial_x^2 + \frac{1}{2}\partial_z^2 - \partial_x\partial_z\right] F(x, z; t, s). \tag{4.20}$$

où nous avons utilisé $D := \Gamma \mathtt{a}^2$. L'opérateur différentiel dans le membre de droite de cette équation peut là encore se diagonaliser, en effectuant le changement de variables $X = \sqrt{2}\,(x+z)$ et $Z = \sqrt{2}\,z$, et ainsi

$$\partial_t F(X, Z; t, s) = 2D\Big(\partial_X^2 + \partial_Z^2\Big) F(X, Z; t, s).$$

C'est une équation de diffusion en deux dimensions, qui peut donc se résoudre par des méthodes standards. Aussi, la solution générale de eq. (4.20), en utilisant comme condition initiale $F(x, z; s, s)$, est

$$F(x, z; t, s) = \iint_{\mathbb{R}^2} \frac{2\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi\ell_1^2} \mathcal{W}_{\ell_1}(x-x', z-z') F(x', z'; s, s), \tag{4.21}$$

où le noyau gaussien $\mathcal{W}_{\ell_1}(x-x', z-z')$ est défini par

$$\mathcal{W}_{\ell_1}(x-x', z-z') = \exp\left[-\frac{2}{\ell_1^2}(x-x'+z-z')^2 - \frac{2}{\ell_1^2}(z-z')^2\right]. \tag{4.22}$$

En écrivant ceci, nous avons introduit deux échelles de longueur

$$\ell_1^2 := 8D(t-s) \;\;,\;\; \ell_0^2 := 8Ds \tag{4.23}$$

qui sont les longueurs de diffusion aux temps $t-s>0$ et s.

La démonstration présentée ici est probabiliste, nous allons donné dans la suite, la démonstration de la même équation mais en utilisant le formalisme Hamiltonien/Liouvilien [Alca94, Pesch94, Schu00].

4.1.3 Equation de mouvement dans le formalisme Hamiltonien/Liouvillien

Pour établir l'équation maîtresse dans sa forme matricielle, nous avons besoin d'introduire deux états sur chaque site i : l'état vide $|0\rangle_i = \binom{1}{0}$ et l'état occupé $|1\rangle_i = \binom{0}{1}$. Définissons également l'opérateur de création de particule $d_i^\dagger$ et l'opérateur d'annihilation d_i sur un site i comme suit :

$$d_i|0\rangle_i = 0 \;\;,\;\; d_i|1\rangle_i = |0\rangle_i \;\;,\;\; d_i^\dagger|0\rangle_i = |1\rangle_i \;\;,\;\; d_i^\dagger|1\rangle_i = |1\rangle_i\,. \tag{4.24}$$

Il est important de noter que la notation choisie pour les opérateurs création et annihilation l'est au bénéfice de l'usage et qu'en aucun cas les deux opérateurs ne sont pas conjugués. Ces opérateurs peuvent être représentés dans la base de dimension $2^{\mathcal{N}}$ $|\{\sigma\}\rangle = \otimes_{i=1}^{\mathcal{N}}\{|\sigma_i\rangle\}$, avec $\sigma_i = 0, 1$, par les matrices

$$d_i = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_i \;\;,\;\; d_i^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}_i. \tag{4.25}$$

Nous insistons encore sur le fait que les opérateurs $d_i^\dagger\, d_i$ ne sont pas des opérateurs conjugués, il s'agit seulement d'une notation pour rappeler les habituels opérateurs création et annihilation.

L' *opérateur nombre de particules* $n_i := d_i^\dagger d_i$ et l'*opérateur trou* $h_i := 1 - n_i$ ont les représentations suivantes dans la même base

$$n_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_i \;\;,\;\; h_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_i. \tag{4.26}$$

L'équation maîtresse est réécrite sous la forme $\partial_t|P(t)\rangle = -H|P(t)\rangle$, où $|P(t)\rangle = \sum_{\{\sigma\}} P(\{\sigma\};t)\,|\{\sigma\}\rangle$ décrit l'état du système et où l'Hamiltonien quantique non hermitien H s'écrit

$$H = -\Gamma\sum_{i=1}^{\mathcal{N}}\left(d_{i+1}^\dagger d_i + d_{i-1}^\dagger d_i\right) + 2\Gamma\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} n_i \tag{4.27}$$

pour le processus coagulation-diffusion à une dimension (avec bord périodique). L'état du système au temps t est donné par la solution formelle $|P(t)\rangle = \exp(-Ht)\,|P(0)\rangle$ de l'équation maîtresse. Du fait de la conservation de la probabilité, nous avons le bra de l'état fondamental qui satisfait $\langle 0|\, H = 0$, et où ce bra s'écrit explicitement comme $\langle 0| := \otimes_i\{(1\ 1)^{\mathrm{T}}\}$. En particulier, nous pouvons constater que la normalisation $\mathcal{P}(t) := \sum_{\{\sigma\}} P(\{\sigma\};t) = \langle 0|\,|P(t)\rangle = 1$ reste vrai en tout temps si elle l'est initialement C'est d'autant plus clair, étant donné que $\langle 0|\otimes_i |\sigma_i\rangle = 1$ pour toutes configurations, et $\partial_t\mathcal{P} = \langle 0|\,(-H)\exp(-Ht)\,|P(0)\rangle = 0$, alors que l'état initial doit satisfaire $\mathcal{P}(0) = 1$.

Peschel *et. al.* [Pesch94] ont montré comment adapter ce formalisme dans le but de reproduire les résultats de la méthode des intervalles vides. Ils ont introduit, pour ce, l'*opérateur intervalle-vide* entre les sites $i = 1$ et $i = n$

$$X(1,n) := \prod_{i=1}^{n}(1-n_i) = \prod_{i=1}^{n} h_i. \tag{4.28}$$

et ont montré que sa moyenne $\langle 0|\, X(1,n)\,|P(t)\rangle$ satisfait les mêmes équations de mouvement que la probabilité d'avoir un intervalle vide $E_n(t)$. Utilisons donc ce formalisme pour exprimer la fonction de réponse et la fonction génératrice G, où la particule est créée au temps s comme une moyenne d'opérateurs. Pour la fonction de réponse, nous avons

$$R(d;t,s) = \langle 0|\,(\hat{1} - X(1,1))\exp(-H(t-s))\,(d^{\dagger}_{d+2} - \hat{1})\exp(-Hs)\,|P(0)\rangle \tag{4.29}$$

ce qui traduit la réponse à une perturbation de type $-h(d_i^{\dagger}) - \hat{1})$ et pour la fonction G

$$G(n,d;t,s) = \langle 0|\, X(1,n)\exp(-H(t-s))\,d^{\dagger}_{n+d+1}\exp(-Hs)\,|P(0)\rangle \tag{4.30}$$

(la même analyse peut être conduite pour F). Ici, le premier site de l'intervalle vide est en $i = 1$, ce qui est admissible étant donné l'invariance par translation spatiale et que G ne dépend que de la taille de l'intervalle vide n et de la distance d entre ce dernier et la particule créée au temps s.

Pour fixer les idées, considérons le cas $n = 0$ (i.e pas d'intervalle vide) où nous avons $G(0,d;t,s) = \langle 0|\exp[-H(t-s)]d^{\dagger}_{d+1}\,|P(s)\rangle = \langle 0|\,|P(s)\rangle = 1$, où dans le premier élément de matrice nous développons l'exponentielle et ensuite utilisons $\langle 0|\, H = 0$ et $\langle 0|\, d_i^{\dagger} = \langle 0|$. Ceci permet de reproduire l'une des conditions aux bords du tableau 4.1.

L'équation de mouvement peut maintenant être obtenue à partir de l'expression

$$\partial_t G(n,d;t,s) = -\langle 0|\,[H, X(1,n)]\exp(-H(t-s))d^{\dagger}_{n+d+1}\,|P(s)\rangle\,. \tag{4.31}$$

Nous utilisons alors les règles de commutations des opérateurs d et $d^{\dagger}$

$$[d_i, 1-n_i] = -(1-n_i)d_i \ \ , \ \ d_i(1-n_i) = 0, \ \ [d_i, d_i^{\dagger}] = h_i, \tag{4.32}$$

et la propriété $\langle 0|\, d_i = \langle 0| - \langle 0|\,(1-n_i)$, dans le but d'exprimer eq. (4.31) seulement en terme d'équation différentielle pour G. Pour $d \geq 1$, la principale tâche est de calculer le commutateur entre H et $X(1,n)$

$$[H, X(1,n)] = \Gamma \left[\sum_i (d_{i-1}^\dagger d_i + d_{i+1}^\dagger) + 2 \sum_i d_i^\dagger d_i, X(1,n) \right]. \tag{4.33}$$

Si l'intervalle $[i-1, i, i+1]$ est entièrement contenu dans l'intervalle vide $X(1,n)$, nous avons

$$\Big[(d_{i-1}^\dagger d_i + d_{i+1}^\dagger), (1-n_{i-1})(1-n_i)(1-n_{i+1}) \Big] = 0. \tag{4.34}$$

Ainsi, seuls les bords de l'intervalle vide contribuent et nous obtenons

$$\begin{aligned}
\Big[d_0^\dagger d_1, (1-n_1) \Big] &= -d_0^\dagger (1-n_1) d_1 \\
\Big[d_1^\dagger d_0, (1-n_1) \Big] &= d_0 d_1^\dagger (1-n_1) \\
\Big[d_{n+1}^\dagger d_n, (1-n_n) \Big] &= -d_{n+1}^\dagger (1-n_n) d_n \\
\big[d_n^\dagger d_{n+1}, (1-n_n) \big] &= d_{n+1} d_n^\dagger (1-n_n).
\end{aligned} \tag{4.35}$$

En remplaçant le commutateur dans eq. (4.31) par son expression, nous trouvons

$$\begin{aligned}
\partial_t G(n,d;t,s) &= -\langle 0|\,(X(2,n) + X(0,n) + X(1,n+1) + X(1,n-1) \\
&\quad -4X(1,n)) \exp[-H(t-s)] d_{n+d+1}^\dagger]\,|P(s)\rangle\,.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Cette expression peut enfin se réécrire comme

$$\begin{aligned}
\partial_t G(n,d;t,s) &= \Gamma\,[G(n+1,d;t,s) + G(n+1,d-1;t,s) \\
&+ \quad G(n-1,d;t,s) + G(n-1,d+1;t,s) - 4G(n,d;t,s)]\,,
\end{aligned} \tag{4.37}$$

qui est bien évidemment équivalente à l'équation différentielle eq. (4.19), obtenue précédemment mais avec des arguments probabilistes.

La solution de cette équation requiert de prendre en compte les différentes symétries espace-temps implicitement définies dans F et G. C'est ce que nous allons développer dans la suite.

4.1.4 Relations de symétrie aux temps égaux

La forme générale de la solution des équations de mouvement a déjà été donné précédemment en terme d'intégrales eq. (4.21) et contient de multiples intégrales sur les variables d'espaces x' and z'. Or, $F(x', z'; s, s)$ est seulement physiquement bien définie pour des variables positives. Il est donc essentiel de chercher à étendre sa définition aux autres domaines où (x', z') peuvent être positives ou négatives.

Nous connaissons déjà ces symétries dans le cas à un temps. C'est ce que nous avons présenté dans la section précédente. Rappelons les continuations analytiques pour la probabilité à un et deux intervalles vides que nous avions trouvé

$$\begin{aligned} E(-x;s) &= 2 - E(x;s), \\ E(-x,y,z;s) &= 2E(y;s) - E(x,y,z-x;s), \\ E(x,-y,z;s) &= 2E(x;s) - E(x,y,z-y;s), \\ E(-x,-y,z;s) &= 4 - 2E(x;s) - 2E(y;s) + E(x,y,z-x-y;s), \\ E(x,y,-z;s) &= 2E(x+y-z;s) - E(x-z,y-z,z;s). \end{aligned} \tag{4.38}$$

Ces relations sont des contraintes imposées par la structure de l'équation de mouvement satisfaite par $E(x;s)$ et $E(x,y,z;s)$ et aussi donnent les continuations analytiques des variables d'espaces x,y,z de $\mathbb{R}^3_+$ vers $\mathbb{R}^3$.
Nous sommes intéressés par le comportement au temps long. Il est donc naturel de se restreindre aux solutions qui contribuent au terme dominant dans la limite $t \to \infty$. Or nous avons vu qu'un état initial où le système est entièrement rempli génère ce terme dominant lorsque $t \to \infty$. Nous allons donc utiliser les solutions exactes précédemment calculées :

$$\begin{aligned} E(x;s) &= \mathrm{erfc}(x/\ell_0), \\ E(x,y,z;s) &= \mathrm{erfc}(x/\ell_0)\mathrm{erfc}(y/\ell_0) - \mathrm{erfc}((x+y+z)/\ell_0)\mathrm{erfc}(z/\ell_0) \\ &\quad -\mathrm{erfc}((x+z)/\ell_0)\mathrm{erfc}((y+z)/\ell_0). \end{aligned} \tag{4.39}$$

Notons que ces solutions satisfons les symétries (4.38), et donc restent vraies sur tout l'espace $\mathbb{R}^3$. Enfin, étant donné qu'un état initial avec une densité $c(0) < 1$ ou alors avec des corrélations initiales ne génèrent que des corrections au terme dominant, nous allons uniquement considérer le cas d'un système initialement entièrement rempli de particules.

Comme pour les quantités à un temps, notre but est donc, dans l'immédiat, de trouver des analogues à eq. (4.38) mais qui s'appliquent à F et G.

4.2 Symétries de F et G

Les symétries de F et G peuvent être obtenues en même temps en considérant les symétries de l'équation de mouvement, avant de faire la distinction entre la condition initiale donnant la corrélation ou la réponse. En effet, pour la fonction génératrice de la réponse, les conditions initiales/au bord à $t = s$ et pour $n = 0$ sont

$$\begin{aligned} G(n,d;s,s) &= \Pr(\{\boxed{\text{n}}, s\}, d, \{\bullet, s\}) = \Pr(\boxed{\text{n}}, s) = E_n(s) \\ G(0,d;t,s) &= 1, \end{aligned} \tag{4.40}$$

et, pour la fonction génératrice de la corrélation

$$\begin{aligned} F(n,d;s,s) &= \Pr(\{\boxed{\text{n}}, s\}, d, \{\bullet, s\}) = \Pr(\boxed{\text{n}}, s) - \Pr(\{\boxed{\text{n}}, s\}, d, \{\circ, s\}) \\ &= E_{n,0}(s) - E_{n,1}(d;s) \\ F(0,d;t,s) &= 1 - E_1(s). \end{aligned} \tag{4.41}$$

Dans la limite continue, ces relations deviennent

$$\begin{aligned} G(x,z;s,s) &= E(x;s) \quad , \quad G(0,z;t,s)=1, \\ F(x,z;s,s) &= -\partial_y E(x,y,z;s)|_{y=0} \quad , \quad F(0,z;t,s) = -\partial_x E(x;s)|_{x=0} = c(s), \end{aligned} \tag{4.42}$$

où $c(s)$ est la concentration de particules au temps s. Il nous est donc possible de traiter de manière simultanée les deux fonctions génératrices en considérant la fonction $F(x,z;s,s)$ avec la condition initiale $F(0,z;t,s)=\gamma(s)$, avec $\gamma(s):=1$ pour la fonction générant la réponse et $\gamma(s):=c(s)$ pour celle générant la corrélation. La quantité $\gamma(s)$, indépendante de la distance et du temps t, représente la concentration de particules lorsque la corrélation et la réponse sont mesurées au temps s. Ces fonctions sont ensuite déduites en prenant les dérivées eq. (4.17) and eq. (4.15).

4.2.1 Symétries entre intervalle de longueur positive et négative

Nous pouvons obtenir une relation entre les intervalles de longueur positive et négative en partant de la relation discrète eq. (4.42). Pour la valeur $n=0$ cette équation différentielle impose les conditions de continuité

$$\begin{aligned} \lim_{t\to s} \partial_t F(0,d;t,s) = \Gamma\,[&F(1,d;s,s)+F(1,d-1;s,s) \\ +\,F(-1,d;s,s)+F(-1,d+1;s,s)-4F(0,d;s,s)] &= 0, \end{aligned} \tag{4.43}$$

ce qui amène à une relation entre les probabilités de longueur $n=-1$ et celle impliquant une longueur $n=1$

$$F(1,d;s,s)+F(1,d-1;s,s)+F(-1,d;s,s)+F(-1,d+1;s,s)=4\gamma(s). \tag{4.44}$$

Cette relation peut s'étendre en itérant l'analyse aux autres valeurs négatives de n et il vient finalement

$$\sum_{k=0}^{n} F(-n,d+k;s,s)\binom{n}{k} + \sum_{k=0}^{n} F(n,d-k;s,s)\binom{n}{n-k} = 2^{n+1}\gamma(s). \tag{4.45}$$

Cette identité eq. (4.45) peut être inversée en utilisant une transformée de Fourier de la fonction F, par exemple

$$F(n,d;s,s)=\int_0^1 \mathrm{d}z\,\widetilde{F}(n,z;s,s)e^{2\mathrm{i}\pi z d}, \quad \widetilde{F}(n,z;s,s)=\sum_{d=-\infty}^{+\infty} F(n,d;s,s)e^{-2\mathrm{i}\pi z d}.$$

Nous avons aussi besoin d'introduire le peigne de Dirac

$$\sum_{d'=\infty}^{+\infty} e^{-2\mathrm{i}\pi z d'} = \sum_{d'=-\infty}^{+\infty} \delta(z+d'). \tag{4.46}$$

A partir des trois précédentes égalités, nous pouvons exprimer eq. (4.45) dans l'espace de Fourier et sommer sur les indices discrets k, ce qui nous permet d'évaluer directement la transformée de Fourier $\tilde{F}(-n,z;s,s)$ comme une fonction de $\tilde{F}(n,z;s,s)$

$$\tilde{F}(-n,z;s,s) = -\widetilde{F}(n,z;s,s)e^{-2\mathrm{i}\pi zn} + 2^{n+1}\sum_{d'=-\infty}^{+\infty}\frac{e^{2\mathrm{i}\pi zd'}}{(1+e^{-2\mathrm{i}\pi z})^n}. \tag{4.47}$$

Enfin, nous inversons la précédente relation vers l'espace réelle et nous obtenons, après avoir effectué les intégrales complexes sur le cercle unité,

$$\begin{aligned} F(-n,d;s,s) &= -\int_0^1 \mathrm{d}z\,\widetilde{F}(n,z;s,s)e^{2\mathrm{i}\pi z(d-n)} \\ +2^{n+1}\int_0^1 \mathrm{d}z\sum_{d'=-\infty}^{+\infty}\frac{e^{2\mathrm{i}\pi z(d'+d)}}{(1+e^{-2\mathrm{i}\pi z})^n} &= 2 - F(n,d-n;s,s). \end{aligned} \tag{4.48}$$

Nous obtenons alors la première symétrie importante pour $F(x,z;s,s)$, à $t=s$, et avec $x>0$:

$$F(-x,z;s,s) = 2\gamma(s) - F(x,z-x;s,s). \tag{4.49}$$

4.2.2 Symétries entre distances positives et négatives

Nous obtenons la seconde relation en regardant comme avant l'équation différentielle pour $d=0$. Pour ce, nous avons besoin de calculer l'équation de mouvement de la fonction génératrice $\lim_{t\to s}F(n,0;t,s) = \Pr(\boxed{\text{n}}\bullet,s)$. Ceci peut être fait en évaluant $F(n,0;s+\epsilon,s)$ pour $\epsilon\to 0$, comme suit :

$$\begin{aligned} F(n,0;s+\epsilon,s) &= F(n,0;s,s) + \epsilon\Gamma\Big[\Pr(\{\boxed{\text{n-1}}\}\bullet\bullet) + \Pr(\bullet\{\boxed{\text{n-1}}\}\bullet) \\ &\quad -\Pr(\{\boxed{\text{n}}\}\bullet) - \Pr(\bullet\{\boxed{\text{n}}\}\bullet)] + \mathrm{O}(\epsilon^2) \\ &= F(n,0;s,s) + \epsilon\Gamma\left[F(n-1,1;s,s) - F(n,0;s,s) + F(n-1,0;s,s)\right. \\ &\quad \left. -F(n,0;s,s) - F(n,0;s,s) - F(n,0;s,s) + F(n+1,0;s,s)\right] + \mathrm{O}(\epsilon^2) \end{aligned}$$

Ensuite, nous retrouvons l'équation de $F(n,0;t,s)$ dans la limite $t\to s$

$$\begin{aligned} \lim_{t\to s}\partial_t F(n,0;t,s) &= \Gamma\left[F(n-1,1;s,s) + F(n-1,0;s,s)\right. \\ &\quad \left. +F(n+1,0;s,s) - 4F(n,0;s,s)\right]. \end{aligned} \tag{4.50}$$

En comparant cette équation avec eq. (4.19) nous obtenons $F(n+1,-1;s,s)=0$. La signification physique est qu'une particule ne peut exister dans l'intervalle vide mesuré au même temps si nous supposons que $d=-1$ correspond à une particule située dans le dernier (ou le premier) site de l'intervalle vide. Pour la réponse et la corrélation, il est équivalent de dire que la probabilité d'avoir à la fois une particule et un site vide est nulle

à temps égaux.

Cependant, en répétant l'argument qui nous avait mené à (4.50), nous trouvons maintenant

$$F(n+1,-1;s+\epsilon,s) = F(n+1,-1;s,s) + \epsilon\Gamma\left[\Pr(\{\boxed{\text{n}}\}\bullet)\right] + \mathrm{O}(\epsilon^2). \tag{4.51}$$

A partir duquel on a

$$\lim_{t\to s} \partial_t F(n+1,-1;t,s) = \Gamma F(n,0;s,s). \tag{4.52}$$

Là encore, une identification avec eq. (4.19) donne $F(n+2,-2;s,s)=0$. En itérant le même procédé, nous en déduisons que $F(n+d,-d;s,s)=0$ pour $d>0$. Ceci est correct tant que la particule existe dans l'intervalle, ce qui apparaît lorsque $d \geq n$. Dans ce cas, nous pouvons formellement imposer que $F(n,-d;s,s) = F(n,d-n;s,s)$. Sinon, lorsque $d<n$, $F(n,-d;s,s)$ est identiquement nulle. Ainsi, nous obtenons la seconde relation en introduisant une fonction Heaviside θ avec $\theta(0)=0$ dans le cas discret et dans la limite continue

$$\begin{aligned} F(n,-d;s,s) &= \theta(d-n)F(n,d-n-1;s,s) \\ F(x,-z;s,s) &= \theta(z-x)F(x,z-x;s,s). \end{aligned} \tag{4.53}$$

Une troisième symétrie peut être déduite pour $F(-n,-d;s,s)$ en utilisant les relations eq. (4.49)et eq. (4.53). A partir de la dernière symétrie (4.53), nous avons en effet, pour $n>0, d>0$:

$$\begin{aligned} F(-n,-d;s,s) &= \theta(d+n)F(-n,d+n-1;s,s) \\ &= \theta(d+n)[2\gamma(s) - F(n,d-1;s,s)] \\ &= 2\gamma(s) - F(n,d-1;s,s), \end{aligned} \tag{4.54}$$

qui devient dans la limite continue avec $x>0$, $z>0$

$$F(-x,-z;s,s) = 2\gamma(s) - F(x,z;s,s) \tag{4.55}$$

Finalement, résumons toutes les symétries de F que nous avons trouvées

$$\begin{aligned} F(-x,z;s,s) &= 2\gamma(s) - F(x,z-x;s,s) \quad , \quad x>0 \\ F(x,-z;s,s) &= \theta(z-x)F(x,z-x;s,s)) \quad , \quad z>0 \\ F(-x,-z;s,s) &= 2\gamma(s) - F(x,z;s,s) \quad , \quad x>0 \text{ and } z>0. \end{aligned} \tag{4.56}$$

Il nous est désormais possible de calculer la solution générale tout en gardant à l'esprit que pour la fonction F générant la corrélation nous devons imposer $\gamma(s)=1$ alors que pour celle G générant la réponse l'eq. (4.56) reste vraie pour $\gamma(s)=c(s)$.

4.3 Expression générale de $F(x,z;t,s)$

En partant des symétries eq. (4.56), la solution formelle eq. (4.21) peut d'abord se réécrire dans le domaine où x' et z' sont positifs

$$F(x,z;t,s) = \iint_{\mathbb{R}^2} \frac{2\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi\ell_1^2}\mathcal{W}_{\ell_1}(x-x',z-z')F(x',z';s,s)$$
$$= \iint_{\mathbb{R}_+^2} \frac{2\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi\ell_1^2}\{\mathcal{W}_{\ell_1}(x-x',z-z')F(x',z';s,s) + \mathcal{W}_{\ell_1}(x+x',z-z')F(-x',z';s,s)$$
$$+\mathcal{W}_{\ell_1}(x-x',z+z')F(x',-z';s,s) + \mathcal{W}_{\ell_1}(x+x',z+z')F(-x',-z';s,s)\}\,. \tag{4.57}$$

et où le noyau $\mathcal{W}_{\ell_1}$ a été défini en eq. (4.22). En utilisant eq. (4.56) dans l'expression précédente, nous pouvons exprimer les différents termes de F non physiques avec des termes physiques selon

$$\begin{aligned} F(-x',z';s,s) &= 2\gamma(s) - \theta(z'-x')F(x',z'-x';s,s) \\ F(x',-z';s,s) &= \theta(z'-x')F(x',z'-x';s,s) \\ F(-x',-z';s,s) &= 2\gamma(s) - F(x',z';s,s). \end{aligned} \tag{4.58}$$

Cette décomposition, accompagnée de quelques translations sur les variables d'intégration, nous permet de réécrire l'intégrale comme une somme de deux termes : le premier contient les propriétés génériques de $F(x',z';t,s)$ et le second dépend de la condition initiale au travers de $\gamma(s)$.

$$\begin{aligned} F(x,z;t,s) &= \iint_{\mathbb{R}_+^2} \frac{2\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi\ell_1^2}\left[\mathcal{W}_{\ell_1}(x-x',z-z') - \mathcal{W}_{\ell_1}(x+x',z+z')\right. \\ &\quad \left. -\mathcal{W}_{\ell_1}(x+x',z-z'-x') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x-x',z+x'+z')\right]F(x',z';s,s) \\ &\quad +2\gamma(s)\iint_{\mathbb{R}_+^2}\frac{2\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi\ell_1^2}\left[\mathcal{W}_{\ell_1}(x+x',z-z') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x+x',z+z')\right]. \end{aligned} \tag{4.59}$$

Ensuite, pour le corrélateur ou la fonction de réponse, nous avons besoin de la dérivée $-\partial_x F(x,z;t,s)|_{x=0}$. Nous exprimons alors cette dérivée par rapport à x dans l'intégrale comme une dérivée en fonction des variables d'intégration

$$\begin{aligned} \partial_x\mathcal{W}_{\ell_1}(x+x',z+z')|_{x=0} &= \partial_{x'}\mathcal{W}_{\ell_1}(x',z+z'), \\ \partial_x\mathcal{W}_{\ell_1}(x-x',z-z')|_{x=0} &= -\partial_{x'}\mathcal{W}_{\ell_1}(-x',z-z'), \\ \partial_x\mathcal{W}_{\ell_1}(x+x',z-x'-z')|_{x=0} &= (\partial_{x'}-\partial_{z'})\mathcal{W}_{\ell_1}(x',z-x'-z') \\ \partial_x\mathcal{W}_{\ell_1}(x-x',z+x'+z')|_{x=0} &= -(\partial_{x'}-\partial_{z'})\mathcal{W}_{\ell_1}(x',z-x'-z'). \end{aligned}$$

Au final, la dérivée de $-F(x,z;t,s)$ par rapport à x, après réarrangement des différents termes, s'écrit

$$-\partial_x F(x,z;t,s)|_{x=0} = \iint_{\mathbb{R}_+^2}\frac{2\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi\ell_1^2}\partial_{x'}\left[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x',z-z') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x',z+z')\right. \tag{4.60}$$

$$+\mathcal{W}_{\ell_1}(x', z-z'-x') + \mathcal{W}_{\ell_1}(-x', z+x'+z')\big] F(x', z'; s, s)$$
$$- \iint_{\mathbb{R}_+^2} \frac{2\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi\ell_1^2} \partial_{z'} \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(x', z-z'-x') + \mathcal{W}_{\ell_1}(-x', z+x'+z')\right] F(x', z'; s, s)$$
$$-2\gamma(s) \iint_{\mathbb{R}_+^2} \frac{2\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi\ell_1^2} \partial_{x'} \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(x', z-z') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x', z+z')\right].$$

Notons au passage que $\mathcal{W}_{\ell_1}(x', z-z'-x') = \mathcal{W}_{\ell_1}(-x', z-z')$ et $\mathcal{W}_{\ell_1}(-x', z+x'+z') = \mathcal{W}_{\ell_1}(x', z+z')$.

Enfin, après quelques intégrations par parties, nous obtenons finalement

$$-\left.\frac{\partial F(x,z;t,s)}{\partial x}\right|_{x=0} = -\frac{4}{\pi\ell_1^2} \iint_{\mathbb{R}_+^2} \mathrm{d}x'\mathrm{d}z' \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x', z-z') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x', z+z')\right] \partial_{x'} F(x', z'; s, s)$$
$$+\frac{2}{\pi\ell_1^2} \iint_{\mathbb{R}_+^2} \mathrm{d}x'\mathrm{d}z' \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x', z-z') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x', z+z')\right] \partial_{z'} F(x', z'; s, s)$$
$$+\frac{2}{\pi\ell_1^2} \int_{\mathbb{R}_+} \mathrm{d}x' \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x', z) + \mathcal{W}_{\ell_1}(x', z)\right] F(x', 0; s, s). \tag{4.61}$$

Ce résultat est indépendant de $\gamma(s)$. Cette expression est directement obtenue si nous considérons le cas d'une chaîne initialement entièrement remplie de particules. Ceci donne la contribution dominante dans la limite des temps longs, où les expressions exactes pour la probabilité à un ou deux intervalles vides ont été rappelées dans eq. (4.39).

4.4 Fonction de corrélation à deux temps

4.4.1 Expression générale

Dans cette section, nous allons utiliser les résultats précédents eq. (4.61) pour calculer la fonction de corrélation $C(t, s; r)$, avec $t > s$.
A partir de eq. (4.61) et eq. (4.42), nous avons directement

$$C(t,s;r) = \frac{4}{\pi\ell_1^2} \iint_{\mathbb{R}_+^2} \mathrm{d}x'\mathrm{d}r' \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x', r-r') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x', r+r')\right] \partial^2_{x'y'} E(x', y', r'; s)\big|_{y'=0}$$
$$- \frac{2}{\pi\ell_1^2} \iint_{\mathbb{R}_+^2} \mathrm{d}x'\mathrm{d}r' \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(x', r-x'-r') + \mathcal{W}_{\ell_1}(-x', r+x'+r')\right] \partial^2_{y'r'} E(x', y', r'; s)\big|_{y'=0}$$
$$- \frac{2}{\pi\ell_1^2} \int_{\mathbb{R}_+} \mathrm{d}x' \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x', r') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x', r')\right] \partial_{y'} E(x', y', 0; s)|_{y'=0} - c(t)c(s). \tag{4.62}$$

En remplaçant l'expression de la distribution à deux intervalles vides $E(x, y, r; t)$ par celle donnée en eq. (4.39) et en effectuant une intégration par parties, nous obtenons

$$C(t,s;r) = \frac{4}{\pi\ell_1\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}} \exp\left(-\frac{4(\ell_0^2+\ell_1^2)}{2\ell_0^2+\ell_1^2}\frac{r^2}{\ell_1^2}\right)$$

$$+\frac{8}{\pi^2\ell_0^2\ell_1^2}\iint_{\mathbb{R}_+^2}\mathrm{d}x'\mathrm{d}r'\,[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x',r-r')+\mathcal{W}_{\ell_1}(x',r+r')]$$
$$\times\left[\frac{\sqrt{\pi}(x'+r')}{\ell_0}\mathrm{erfc}(\frac{r'}{\ell_0})e^{-(x'+r')^2/\ell_0^2}+\frac{\sqrt{\pi}\,r'}{\ell_0}\mathrm{erfc}\left(\frac{x'+r'}{\ell_0}\right)e^{-r'^2/\ell_0^2}\right.$$
$$\left.+2e^{-x'^2/\ell_0^2}-2e^{-(x'+r')^2/\ell_0^2-r'^2/\ell_0^2}\right]-c(t)c(s). \qquad (4.63)$$

où les concentrations particulaires sont $c(t)=(2/\sqrt{\pi})(\ell_1^2+\ell_0^2)^{-1/2}$, $c(s)=(2/\sqrt{\pi})\ell_0^{-1}$ aux temps t et s respectivement. Le corrélateur connexe $C(t,s;r)$ est directement relié aux intéractions. En effet dans un système sans corrélations, ce corrélateur connexe s'annule. Enfin, on peut réduire le nombre d'intégrales en effectuant encore une intégration par parties, ce qui donne

$$C(t,s;r)=\frac{4}{\pi\ell_1\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}}\exp\left(-\frac{4(\ell_0^2+\ell_1^2)}{2\ell_0^2+\ell_1^2}\frac{r^2}{\ell_1^2}\right)-\frac{4}{\pi\ell_0\sqrt{\ell_0^2+\ell_1^2}}\mathrm{erfc}\left(\frac{2\sqrt{\ell_0^2+\ell_1^2}}{\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}}\frac{r}{\ell_1}\right)$$
$$-\frac{2}{\pi(2\ell_0^2+\ell_1^2)}e^{-4r^2/(2\ell_0^2+\ell_1^2)}\left[\mathrm{erfc}\left(\frac{2\ell_0}{\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}}\frac{r}{\ell_1}\right)^2+\mathrm{erfc}\left(-\frac{2\ell_0}{\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}}\frac{r}{\ell_1}\right)^2\right]$$
$$+\frac{8}{\pi^{3/2}\ell_0\sqrt{\ell_0^2+\ell_1^2}}\int_{\frac{2\sqrt{\ell_0^2+\ell_1^2}}{\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}}\frac{r}{\ell_1}}^{\infty}\mathrm{d}r'\,e^{-r'^2}\mathrm{erfc}\left(\frac{\ell_0}{\sqrt{\ell_0^2+\ell_1^2}}\,r'\right)$$
$$+\frac{8}{\pi^{3/2}\ell_0^3\ell_1^2}\left[\int_0^\infty\mathrm{d}r'\,r'e^{-r'^2/\ell_0^2-2(r'-r)^2/\ell_1^2}\times\int_0^\infty\mathrm{d}r''\,e^{-2(r''-r)^2/\ell_1^2}\mathrm{erfc}(r''/\ell_0)\right.$$
$$\left.+\int_0^\infty\mathrm{d}r'\,r'e^{-r'^2/\ell_0^2-2(r'+r)^2/\ell_1^2}\times\int_0^\infty\mathrm{d}r''\,e^{-2(r''+r)^2/\ell_1^2}\mathrm{erfc}(r''/\ell_0)\right] \qquad (4.64)$$

4.4.2 Limite asymptotique

Dans la limite où la distance $r\gg\ell_{0,1}$ est plus grande que les deux longueurs de diffusions, il est possible de développer la précédente intégrale dans eq. (4.64) et d'ordonner les termes exponentiels par amplitude décroissante

$$C(t,s;r)=\exp\left(-\frac{4r^2}{2\ell_0^2+\ell_1^2}\right)\left\{-\frac{2}{\pi r^2}+\frac{3(2\ell_0^2+\ell_1^2)}{2\pi r^4}+\mathrm{O}(r^{-6})\right\}$$
$$+\quad\exp\left(-\frac{4r^2(\ell_0^2+\ell_1^2)}{\ell_1^2(2\ell_0^2+\ell_1^2)}\right)\left\{\frac{4}{\pi\ell_1\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}}+\frac{2\ell_1^3}{\pi^{3/2}\ell_0(\ell_0^2+\ell_1^2)\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}r}+\mathrm{O}(r^{-3})\right\}$$
$$+\quad\exp\left(-\frac{4r^2}{\ell_1^2}\right)\left\{\frac{\ell_1^2}{\pi^2\ell_0^2\,r^2}-\frac{(4\ell_0^2+\ell_1^2)\ell_1^4}{8\pi^2\ell_0^4r^4}+\mathrm{O}(r^{-6})\right\} \qquad (4.65)$$

Ainsi, nous pouvons grossièrement dire que pour des distances r suffisamment grandes, le corrélateur décroît exponentiellement comme $C(t,s;r)\sim r^{-2}\exp(-4r^2/(t+s))$ et où les paramètres dimensionnés et non universels ont été supprimés. Là encore, il est possible de lire l'exposant dynamique $z=2$.

4.5 Fonction de réponse à deux temps

4.5.1 Expression générale

Dans ce cas, nous avons précédemment vu que la condition initiale est donnée par $G(x,r;s,s) = E(x;s)$ pour r positif, avec la contrainte additionnelle $G(0,d;t,s) = 1$. Après usage de eq. (4.61) et eq. (4.42), nous obtenons

$$\begin{aligned} R(t,s;r) &= -\frac{4}{\pi\ell_1^2}\iint_{\mathbb{R}_+^2} \mathrm{d}x'\mathrm{d}r' \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x', r-r') + \mathcal{W}_{\ell_1}(x', r+r')\right] \partial_{x'} E(x';s) \\ &\quad + \frac{2}{\pi\ell_1^2}\int_{\mathbb{R}_+} \mathrm{d}x' \left[\mathcal{W}_{\ell_1}(-x', r) + \mathcal{W}_{\ell_1}(x', r)\right] E(x';s) - c(t) \end{aligned}$$

Et en substituant $E(x,t)$ par son expression eq. (4.39), il vient

$$\begin{aligned} R(t,s;r) = \frac{2}{\pi\ell_1\ell_0}\int_{\mathbb{R}_+} \mathrm{d}x' \left[\mathrm{erf}\left(\frac{x'-2r}{\ell_1}\right) - \mathrm{erf}\left(\frac{x'+2r}{\ell_1}\right)\right] \exp\left(-\frac{x'^2(\ell_0^2+\ell_1^2)}{\ell_0^2\ell_1^2}\right) \\ + \frac{2}{\pi\ell_1^2} e^{-2r^2/\ell_1^2} \int_{\mathbb{R}_+} \mathrm{d}x' \left[\exp\left(-\frac{2(r-x')^2}{\ell_1^2}\right) + \exp\left(-\frac{2(r+x')^2}{\ell_1^2}\right)\right] \mathrm{erfc}\left(\frac{x'}{\ell_0}\right) \end{aligned} \tag{4.66}$$

4.5.2 Limite asymptotique

De la même façon que pour le corrélateur, il est possible d'avoir son comportement asymptotique, lorsque la distance $r \gg \ell_{0,1}$ est plus grande que les longueurs de diffusion. Nous développons alors l'expression précédente (4.66) et organisons les termes exponentiels par amplitude décroissante. Il vient deux contributions exponentielles

$$\begin{aligned} R(t,s;r) &= \exp\left(-\frac{2r^2}{2\ell_0^2+\ell_1^2}\right)\left\{\frac{\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}}{\pi\ell_1 r} - \frac{(2\ell_0^2+\ell_1^2)^{3/2}}{4\pi\ell_1 r^3} + \mathrm{O}(r^{-5})\right\} \\ &+ \exp\left(-\frac{4r^2(\ell_0^2+\ell_1^2)}{\ell_1^2(2\ell_0^2+\ell_1^2)}\right)\left\{-\frac{\ell_1\sqrt{2\ell_0^2+\ell_1^2}}{(\ell_0^2+\ell_1^2)\pi r} + \frac{\ell_1^3(2\ell_0^2+\ell_1^2)^{3/2}}{8(\ell_0^2+\ell_1^2)^2\pi r^3} + \mathrm{O}(r^{-5})\right\} \end{aligned} \tag{4.67}$$

Nous voyons donc une décroissance exponentielle $R(t,s;r) \sim r^{-1}\exp(-2r^2/(t+s))$, où là encore les paramètres dimensionnés et non-universels ont été supprimés.

4.6 Vérification numérique

Dans cette section, nous donnons un bref aperçu des méthodes numériques qui ont permis de vérifier notre méthode.

Pour modéliser le processus de coagulation-diffusion, nous avons utilisé une chaîne périodique Λ comportant $\mathcal{N} = 512$ sites, chacun ayant un degré de liberté local $\sigma_i = 0, 1$.

L'équation maîtresse s'écrit dans ce cas

$$P(\{\sigma\}, t+\Delta t) = (1-\Delta t)P(\{\sigma\}, t) + \Delta t \sum_{\{\sigma'\}} W(\{\sigma'\} \to \{\sigma\}) P(\{\sigma'\}, t)$$

où $P(\{\sigma\}, t)$ est la probabilité d'observer le système dans l'état $\{\sigma\}$ et $W(\{\sigma'\} \to \{\sigma\})$ est le taux de transition par unité de temps de l'état $\{\sigma'\}$ vers l'état $\{\sigma\}$. Ainsi, pour un site donné i, nous avons les taux de diffusion et de coagulation respectivement donnés par

$$W(\bullet\circ \to \circ\bullet) = W(\circ\bullet \to \bullet\circ) = W(\bullet\bullet \to \circ\bullet) \;\; = \;\; W(\bullet\bullet \to \bullet\circ) = 1/2 \quad (4.68)$$

Le système initial est préparé dans un état où chaque site est occupé. Un site $j \in \Lambda$ est choisi aléatoirement, s'il est occupé, la particule bouge sur un des deux sites voisins avec la même probabilité, et coagule avec la particule qui pourrait déjà être présente dans le site cible. $\mathcal{N}$-fois ce processus définissent un pas de temps Montecarlo $t \mapsto t + \Delta t$.

La concentration est donnée par $c(t) = \mathcal{N}^{-1} \sum_{j\in\Lambda} \langle \sigma_j \rangle$ et la fonction de corrélation connexe est calculée en utilisant

$$C(t, s; r) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{j\in\Lambda} \langle \sigma_{j+r}(t)\sigma_j(s) \rangle - \frac{1}{\mathcal{N}^2} \sum_{j\in\Lambda} \langle \sigma_j(t) \rangle \sum_{j\in\Lambda} \langle \sigma_j(s) \rangle \quad (4.69)$$

où les moyennes sont effectuées sur les réalisations microscopiques. Enfin, précisons que l'autocorrélation connexe est la corrélation entre une particule au temps s et une autre au temps t mais sur le même site.

Par contre, pour évaluer la fonction de réponse, nous démarrons l'évolution du système par le même processus que précédemment. Cependant, au temps t, nous introduisons une perturbation. Ensuite, nous continuons l'évolution des deux systèmes, celui perturbé $\{\sigma^p(t, s)\}$ et celui non-perturbé $\{\sigma(t, s)\}$. La perturbation est réalisée en choisissant un site $j \in \Lambda$ et en y imposant la présence d'une particule ; si le site j comporte déjà une particule, la perturbation n'y change rien et donc il n'y aura pas de contribution à la fonction de réponse. La réponse linéaire est ensuite donnée en comparant l'évolution des deux systèmes de telle façon que

$$R(t, s; r) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{j\in\Lambda} \left\langle \sigma^p_{j+r}(t, s) - \sigma_{j+r}(t) \right\rangle = (1 - G(1, r, t, s)) - (1 - E(t)) \,. \quad (4.70)$$

4.6.1 Fonction de corrélation

Pour tester et aussi constater comment le régime asymptotique décrit par eq. (4.64) est atteint, nous comparons dans la figure 4.2 les simulations numériques pour le corrélateur connexe $C(t, s; r)$ avec sa forme asymptotique eq. (4.64).

Ainsi, même pour un temps d'attente modéré $s = 100$, nous ne voyons pratiquement aucune différence entre les deux. Par contre, pour des temps d'attente courts comme $s = 10$, nous observons les premières indications de corrections à prendre en compte. Dans tous les cas, la continuation analytique que nous avons proposée est en très bon accord avec les simulations Monte-Carlo.

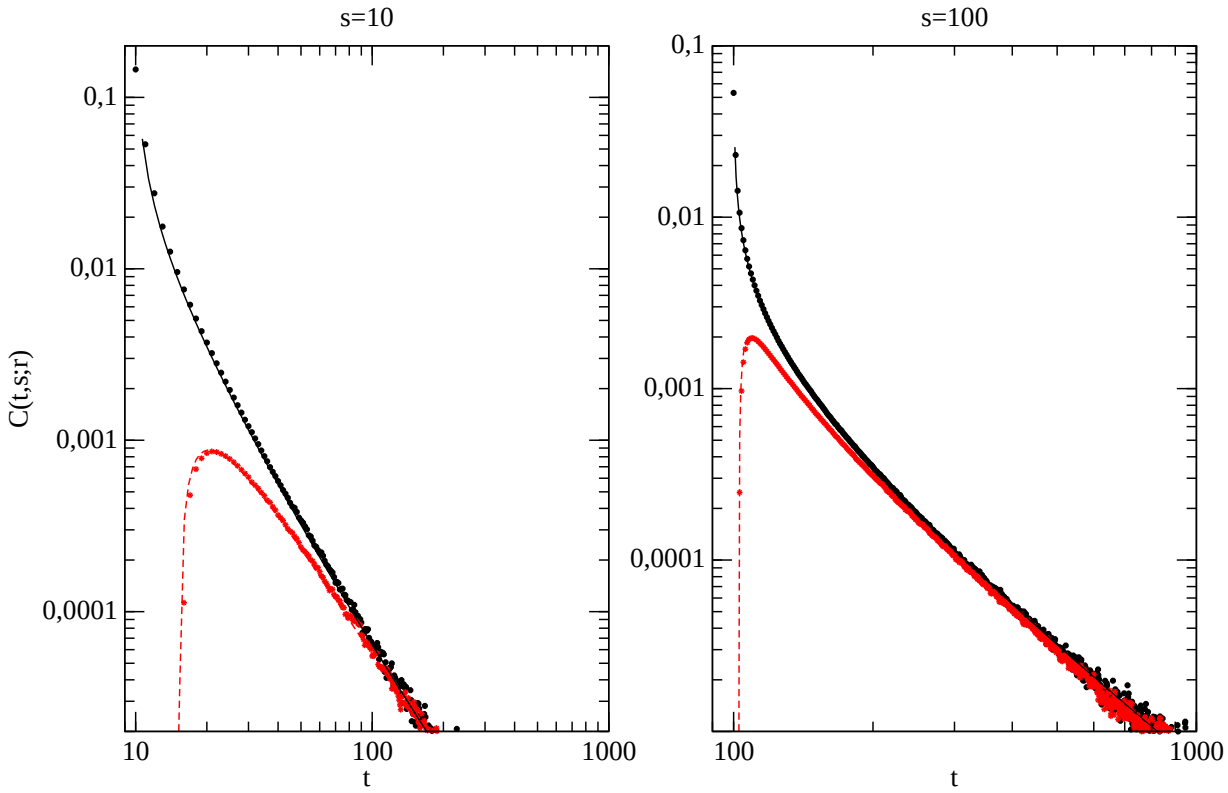


FIGURE 4.2 – *Graphique de la fonction de corrélation pour $r = 0$ (courbe du haut) et $r = 3$ (courbe du bas), et avec deux valeurs différentes de s, à savoir $s = 10$ (à gauche) et $s = 100$ (à droite). Les points viennent des simulations, réalisées sur un réseau de $\mathcal{N} = 512$ sites et la courbe en trait plein est le comportement asymptotique (4.64).*

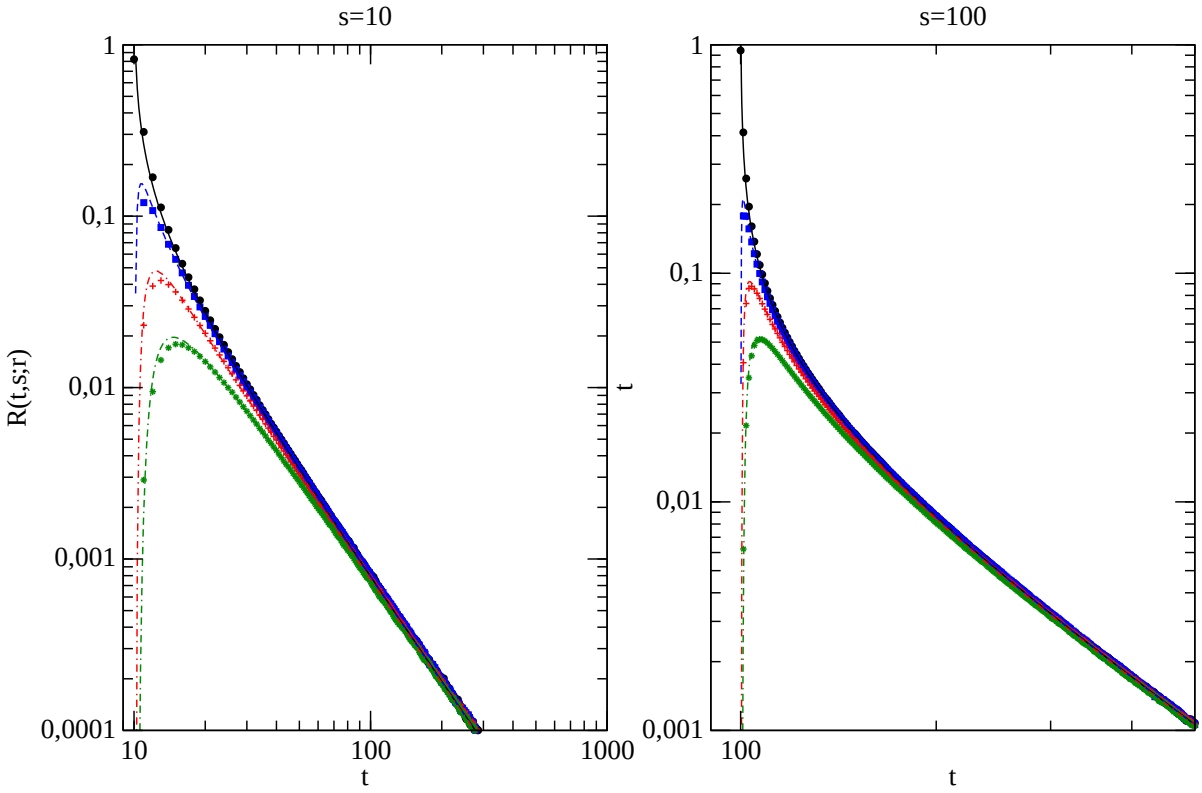


FIGURE 4.3 – *Graphique représentant la fonction de réponse pour $r = [0, 1, 2, 3]$ (de haut en bas) et pour $s = 10$ (à gauche) et $s = 100$ (à droite). Les symboles indiquent les résultats des simulations numériques alors que la courbe en trait plein représente la forme analytique donnée dans (4.66). Là encore, ces simulations ont été menées sur un réseau périodique de $\mathcal{N} = 512$ sites.*

4.6.2 Fonction de réponse

De la même façon que pour le corrélateur, nous avons aussi testé les résultats que nous avons obtenus en les confrontant aux simulations Monte-Carlo décrites dans le préambule de cette section.

Ainsi, dans la figure 4.3, nous avons représenté les données numériques issues des simulations Monte-Carlo avec les formes asymptotiques exactes données par l'éq 4.66, valables dans la limite des temps longs En fait, même pour des temps finalement modérés $t, s \approx 100$, l'accord entre les simulations et les solutions analytiques sont excellentes. Pour de petits temps d'attente comme $s = 10$, nus observons tout de même de petites corrections au comportement dominant. Cette confrontation numérique permet de confirmer les conditions initiales (4.52,4.50) ainsi que la condition au bord (4.56) pour la fonction génératrice de la réponse G.

La comparaison de nos calculs avec les données numériques est importante pour une autre raison. En effet, Mayer et Sollich ont, il y a quelques temps déjà, calculés le corrélateur et une fonction de réponse. Malheureusement, nous ne sommes pas en accord

avec leur résultat. Il nous fallait donc vérifier qu'il n'y avait aucun doute possible sur nos calculs. Mais finalement, l'origine de la divergence de résultats vient du fait que nous n'utilisons pas la même définition de la fonction de réponse [Mayer07].

4.7 Fonctions d'autocorrélation et d'autoréponse

Dans cette section, nous analysons le comportement d'échelle de la fonction de corrélation pour $r = 0$. Nous utiliserons les notations suivantes $y := t/s > 1$ et la constante de diffusion sera fixée à $D = 1/2$. Nous savons d'ores et déjà que ces fonctions satisfont le comportement d'échelle suivant :

$$C(t,s) := C(t,s;0) = \frac{1}{s^b} f_C(y) \quad , \quad R(t,s) := R(t,s;0) = \frac{1}{s^{1+a}} f_R(y), \tag{4.71}$$

où nous pouvons extraire les exposants d'une simple identification à partir des expressions eq. (4.63) et eq. (4.66). Asymptotiquement, pour $y \gg 1$, on s'attend à ce que

$$f_{C,R}(y) \sim y^{-\lambda_{C,R}/z}, \tag{4.72}$$

ce qui nous permet de définir l'exposant de l'autocorrélation λ_C et celui de l'autoréponse λ_R. Je rappelle à toutes fins utiles que l'exposant dynamique a déjà été évalué à $z = 2$. A partir de eq. (4.63), il est possible de calculer exactement la fonction d'autocorrélation en utilisant des intégrations par parties et en utilisant l'identité suivante (voir [Prud86, eq. (2.8.10.3)])

$$\int_{\mathbb{R}_+} \mathrm{d}x\, e^{-x^2} \mathrm{erfc}(x/\alpha) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \arctan \alpha. \tag{4.73}$$

Il vient alors

$$\begin{aligned} C(t,s) &= \frac{1}{s} \cdot \frac{1}{2\pi D} \left\{ \frac{1}{\sqrt{y^2-1}} + \frac{\sqrt{2(y-1)}}{\pi(1+y)} \arctan\left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{y-1}} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{\pi\sqrt{y}} \arctan\left(\frac{1}{\sqrt{y}} \right) - \frac{1}{1+y} \right\} \end{aligned} \tag{4.74}$$

Pour $y \gg 1$, les deux premiers termes dominants de la fonction d'échelle f_C deviennent

$$f_C(y) \simeq (2D)^{-1} \left[(1 - 8/(3\pi))\pi^{-1} y^{-2} + (\frac{16}{5}\pi - 1/2)\pi^{-1} y^{-3} \right]. \tag{4.75}$$

Cette expression nous permet d'identifier de suite l'exposant $\lambda_C = 4$. Ce résultat est en parfait accord avec les travaux de Mayer et Sollich [Mayer07] et finalement ici nous n'avons développé qu'une autre technique pour aboutir à ce même résultat. L'avantage de notre méthode est que l'on pourrait très bien établir ces corrélateurs à deux temps pour n'importe quelle condition initiale.

Pour l'autoréponse, un calcul direct de $R(t,s;0)$ avec comme point de départ eq. (4.66) nous amène à

$$\begin{aligned} R(t,s) &= \frac{4}{\pi\ell_1\ell_0}\int_{\mathbb{R}_+}\mathrm{d}x'\,\mathrm{erf}\left(\frac{x'}{\ell_1}\right)\exp\left(-\frac{x'^2(\ell_0^2+\ell_1^2)}{\ell_0^2\ell_1^2}\right) \\ &\quad +\frac{4}{\pi\ell_1^2}\int_{\mathbb{R}_+}\mathrm{d}x'\,\mathrm{erfc}\left(\frac{x'}{\ell_0}\right)\exp\left(-\frac{2x'^2}{\ell_1^2}\right). \end{aligned}$$

Là encore, les intégrales sont données par (4.73) et finalement nous obtenons le comportement d'échelle

$$R(t,s) = \frac{1}{\sqrt{s}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi D}}\left\{\frac{\sqrt{2}}{\pi\sqrt{y-1}}\arctan\left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{y-1}}\right)-\frac{2}{\pi\sqrt{y}}\arctan\left(\frac{1}{\sqrt{y}}\right)\right\} \quad (4.76)$$

Pour $y \gg 1$, les termes dominants dans le développement asymptotique de l'autoréponse deviennent

$$f_R(y) \simeq (2D)^{-1/2}\left[\frac{4}{3}\pi^{-3/2}y^{-2}+\frac{8}{15}\pi^{-3/2}y^{-3}\right] \quad (4.77)$$

Ainsi, nous lisons l'exposant de la fonction d'autoréponse $\lambda_R = 4$.

A ce niveau, il faut mentionner que pour cette fonction de réponse, nous trouvons des résultats très différents de ce que nous pouvons trouver dans l'article de Mayer et Sollich [Mayer07]. En effet, il trouve en fait $a = b$. La fonction de corrélation étant parfaitement bien reproduite, la différence vient de la fonction de réponse. En fait, nous utilisons la même définition générale mais pas la même perturbation ; de fait ils considèrent

$$R_{i-j}(t,s) = \langle n_i e^{H(t-s)}V_j e^{Hs}|P(0)\rangle \quad (4.78)$$

où $V_j = T[\partial H(h)/\partial h]|_{h=0}$ est l'opérateur qui rend compte de la perturbation $\delta H = -hn_i$ au temps s. Cet opérateur prend la forme

$$V_j = \frac{1}{2}(F_{j-1}F_j - 1)n_{j-1}(1-n_j) + \frac{1}{2}(F_{j+1}F_j - 1)n_{j+1}(1-n_j) \quad (4.79)$$

où F_j est l'opérateur de flip défini par

$$F_j = (|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|)_j. \quad (4.80)$$

Au regard de V_j, on comprend l'origine de la différence de nos résultats. La perturbation de Mayer et Sollich peut se décomposer en deux parties : l'une dite symétrique et l'autre antisymétrique. La partie antisymétrique revient à une augmentation locale des taux de diffusion pour les particules entrant dans le site j et à une diminution locale de ces taux lorsque la particule quitte le site j. La partie symétrique, quant à elle, correspond à une augmentation des taux de diffusion entre les sites $j-1$, j et $j+1$.

Pour résumer, voici l'ensemble des exposants que nous avons déduits

$$\lambda_C = \lambda_R = 4 \;\;,\;\; a = -\frac{1}{2} \;\;,\;\; b = 1 \;\;,\;\; z = 2 \quad (4.81)$$

4.8 Rapport fluctuation-dissipation hors équilibre

Comme nous l'avons déjà énoncé dans le premier chapitre, pour les systèmes relaxant vers un état d'équilibre, et donc dont la dynamique satisfait le bilan détaillé, le rapport fluctuation dissipation

$$X(t,s) = TR(t,s)/\partial_s C(t,s) \tag{4.82}$$

est devenu [Cugl94, Cris03] un outil utile pour caractériser la distance par rapport à l'équilibre.

Ici, nous souhaitons aller plus loin et regardons un rapport fluctuation dissipation généralisé $\Xi(t,s)$ tel que dans la limite des grands temps de séparation $y = t/s \gg 1$ il tende vers une limite finie et universelle Ξ_∞. Dans le but de faire ceci, rappelons les formes d'échelle

$$\begin{aligned} C(t,s) &= L(s)^{-bz} F_C\left(\frac{t}{s}\right) &&= s^{-b} f_C\left(\frac{t}{s}\right) \\ R(t,s) &= L(s)^{-az-z} F_R\left(\frac{t}{s}\right) &&= s^{-1-a} f_R\left(\frac{t}{s}\right) \end{aligned} \tag{4.83}$$

Nous les avons formulées en termes de longueur d'échelle $L(s) = (\vartheta s)^{1/z}$. Ce terme ϑ^{-1} est un temps caractéristique pour le passage vers le régime d'échelle. Il contient une amplitude non universelle, étant donné qu'il est proportionnel à la constante de diffusion $\vartheta \sim D$, cependant il peut apparaître invisible dans la plupart des calculs grâce à un changement d'échelle de temps. Nous supposerons aussi que le corrélateur "initial" aux temps égaux est normalisé à 1.

Posons maintenant notre proposition de rapport fluctuation-dissipation généralisé. En partant des formes d'échelle écrites précédemment, et en faisant apparaître explicitement le terme ϑ, nous arrivons à

$$\Xi(t,s) := \vartheta^{1+a-b} R(t,s) \left[\partial_s^{1+a-b} C(t,s)\right]^{-1} \tag{4.84}$$

Cette proposition contient les deux cas déjà étudiés, à savoir

- Les systèmes critiques avec bilan détaillé. (Dans ce cas, $a = b$ et $\vartheta \mapsto T$ devient la température d'équilibre)
- Les modèles de réaction de particules critiques avec $a + 1 = b$ et la relation (1.40).

Mais elle ne s'arrête pas à ces deux cas. Dans la limite des grands temps de séparations $y = t/s \gg 1$, la fonction $\Xi = \Xi(t/s)$ tend vers une limite universelle Ξ_∞. En général, la dérivée (4.84) n'est pas d'ordre entier et par choix, nous utiliserons ici la définition de Riemann-Liouville de cette dérivée fractionnaire. Pour plus de clarté, nous la définissons *à la Hadamard* [Samk93] en imposant que l'opérateur linéaire ∂_s^α agira sur les monômes s^μ comme suit :

$$\partial_s^\alpha s^\mu = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\alpha+1)}\, s^{\mu-\alpha} \tag{4.85}$$

modèle	réactions		mvt des part.	$n_{\max}$	Ref.
BCPD	$A \to 2A$	$A \to \emptyset$	diffusion	∞	[Houch02, Baum05]
BCPL	$A \to 2A$	$A \to \emptyset$	vols de Lévy	∞	[Dura09]
FA	$A \to 2A$	$2A \to A$	aucun	1	[Mayer07]
CP	$A \to 2A$	$A \to \emptyset$	diffusion	1	
NEKIM	$2A \to \emptyset$	$A \leftrightarrow 3A$	diffusion	1	[Odor06]
RAC	$2A \to C$	$C \to 2A$	diff. avec $D_A = D_C$	∞	[Rey99, Elga08]
BPCPD	$2A \to 3A$	$2A \to \emptyset$	diffusion	∞	[Paes04a, Baum05]
BPCPL	$2A \to 3A$	$2A \to \emptyset$	vols de Lévy	∞	[Dura09]

TABLE 4.2 – *Définition schématique des divers processus de réaction-diffusion dont nous discutons dans le corps du texte. L'abréviation "CP" veut dire "processus de contact". Ces processus se caractérisent par les réactions que subissent les particules (données dans la seconde colonne), le type de mouvement que subit une particule (troisième colonne) et enfin le nombre de particules maximum que peut accueillir chaque site appelé ici $n_{\max}$. Notons que chaque particule peut être sujette à soit un mouvement de type vols de Lévy (avec le paramètre de contrôle η), soit un mouvement diffusif (qui revient à prendre $\eta = 2$), soit aucun mouvement.*

et où μ n'est pas un entier négatif. Enfin, si nous utilisons les fonctions d'échelle asymptotiques $f_{C,R}(y) \sim a_{C,R}\, y^{-\lambda_{C,R}/z}$, nous trouvons

$$\begin{aligned} \Xi(t,s) &= \frac{a_R}{a_C}\frac{\vartheta^{1+a-b}\,\Gamma(\lambda_C/z-a)}{\Gamma(\lambda_C/z+1-b)}\, y^{-(\lambda_R-\lambda_C)/z} \\ &\longrightarrow \frac{a_R}{a_C}\frac{\vartheta^{1+a-b}\,\Gamma(\lambda_C/z-a)}{\Gamma(\lambda_C/z+1-b)} =: \Xi_\infty \end{aligned} \tag{4.86}$$

où une limite finie pour $y \to \infty$ est obtenue, à la condition que $\lambda_C = \lambda_R$. Le caractère fini de Ξ_∞ ne devrait pas dépendre du choix de la dérivée fractionnaire, au contraire de sa valeur numérique qui, elle, en dépendra. Une autre condition nécessaire pour l'universalité est la propriété

$$\partial^\alpha_{(\lambda s)} f(s) = \lambda^{-\alpha}\partial^\alpha_s f(s), \tag{4.87}$$

qui est bien entendu satisfaite par la dérivée fractionnaire de Riemann-Liouville.

Dans le but de mieux comprendre les conséquences de notre proposition (4.84) et de sa valeur limite (4.86), nous allons déterminer sa valeur dans plusieurs modèles de réaction-diffusion, en nous plaçant au point critique et qui donc va suivre un vieillissement comme défini dans le premier chapitre.

Dans un premier temps, nous rappelons donc les différents modèles que nous allons tester. Le premier groupe de modèles que je vais citer ne contient qu'un seul type de particules et admet au maximum qu'une seule particule par site :

- le processus de contact (CP) (avec sa transition de phase dans la classe d'universalité de la percolation dirigée)
- le modèle d'Ising cinétique hors équilibre, appelé NEKIM (pour "non-equilibrium kinetic Ising model") avec une dynamique venant de la dynamique de Glauber non conservée et la dynamique conservée de Kawasaki.
- le modèle Frederikson-Andersen (FA)

Le second groupe n'admet pas de limite quant au nombre de particules sur un même site :

- le processus de contact bosonique avec diffusion ou vols de Lévy des particules (dans ce modèle, je rapelle que la densité moyenne de particules est constante le long de la ligne critique et que la dynamique critique est trouvée en analysant la variance de la densité de particules)
- le modèle "A-C" réversible (RAC) qui contient deux types de particules (A, C) mais avec des constantes de diffusion égales $D_A = D_C$.

Enfin, le modèle qui requiert la présence de deux particules sur un même site pour avoir une réaction :

- le processus de contact bosonique par paires avec diffusion ou vols de Lévy des particules.

Nous avons résumé leur dynamique dans le tableau 4.2. Les comportements d'échelle dans le régime de vieillissement de ces modèles peuvent être trouvés en détail dans [Henk10] (mais aussi dans cette thèse pour le BCPL et le BPCPL).

Maintenant, analysons le comportement du vieillissement dans tous ces modèles. Dans les références citées, soient des estimations numériques précises soient des résultats exacts ont été obtenus pour les exposants de vieillissements $a, b, \lambda_C, \lambda_R, z$. Cependant, nous ne prêterons pas attention aux exposants λ_C et λ_R. En effet, nous remarquerons qu'ils sont dans tous les cas égaux $\lambda_C = \lambda_R$. Ce qui par contre change est la relation entre les exposants a et b. Nous allons donc distinguer les différentes situations qui se présentent :

1. **Modèles avec $a = b$.** Bien sûr, ce cas contient aussi les systèmes critiques avec bilan détaillé et relaxant vers un état d'équilibre et où la définition habituelle du rapport fluctuation-dissipation $X(t, s)$ s'applique [Cugl94]. Mais c'est aussi le cas que suit le modèle FA [Mayer07].

   Mais notre but est de comprendre les modèles sans bilan détaillé et où $a = b$. Dans ces cas, il suffit de reformuler l'eq. (1.23) en considérant qu'aux temps égaux, le système est localement à l'équilibre. Ainsi, on a

   $$X_{\text{eq}} = 1 = TR(s, s)/\partial_s C(s, s) \tag{4.88}$$

   ou encore

   $$X(t, s) = \left(\frac{R(s, s)}{\partial_s C(s, s)}\right)^{-1} \frac{R(t, s)}{\partial_s C(t, s)} = X\left(\frac{t}{s}\right) \longrightarrow X_\infty \tag{4.89}$$

   Cette dernière définition est maintenant applicable aux modèles sans bilan détaillé étant donné qu'il n'y a plus de référence explicite à une quelconque température

modèle	d	b, a	Ξ_∞	Ref.
BCPD	> 0	$b = a$	$1/2$	[Baum05]
BCPL	> 0	$b = a$	$1/2$	cette thèse
FA	1	$b = a$	$-3\pi/(6\pi - 16)$	[Mayer07]
électeur Potts	2	$b = a$	≈ 0.38	[Chat11]
CP	1	$b = 1 + a$	$1.15(5)$	[Enss04]
(perco. dirigée)	$4 - \varepsilon$	$b = 1 + a$	$2 - \varepsilon(\frac{119}{240} - \frac{\pi^2}{60})$	[Baum07b]
NEKIM	1	$b = 1 + a$	≈ 0.1	[Odor06, Odor10]
RAC	≥ 1	$b = 1 + a$	voir le texte	[Elga08]
coag.-diff.	1	$b = 3/2 + a$	$3\pi/(6\pi - 16)$	cette thèse
BPCPD	$2 < d < 4$	$b = 0$	voir le texte	[Baum05]
BPCPL	$\eta < d < 2\eta$	$b = 0$	voir le texte	cette thèse
modèle sphé. $T < T_c$	$d > 2$	$b = 0$	voir le texte	[Godr00b]
BPCPD	$d > 4$	$b = a - 1$	voir le texte	[Baum05]
BPCPL	$d > 2\eta$	$b = a - 1$	voir le texte	[Dura09]

TABLE 4.3 – *Relation entre les exposants a, b et la valeur limite du rapport fluctuation-dissipation généralisé. Ξ_∞ pour différents modèles en d dimensions. Pour les modèles où $a = b$, la définition prise pour la limite du RFD est donnée par (4.89), dans les autres cas elle vient de (4.86). Les processus de contact bosonique par paire (BPCPD et BPCPL) sont situés à leur point multicritique où $\alpha = \alpha_C$.*

T. C'est bien entendu la définition que nous avons utilisé dans le chapitre 2 de cette thèse dans notre étude du processus de contact bosonique avec vols de Lévy [Dura09].

Dans le tableau 4.3, nous avons listé sous la catégorie Ξ_∞ les valeurs limites extraites de l'éq. (4.89) pour les modèles BCPD/L. Au moins dans les modèles considérés ici, X_∞ apparaît universel. Cependant, alors que pour les états stationnaires d'équilibre, on a $X_{\rm eq} = 1$, les modèles tels que le BCPD et le BCPL ne sont pas réversibles. Dans l'état stationnaire, on a plutôt $X^{-1}_{\rm stat} = 0$.

2. **Modèles avec $a + 1 = b$.** Dans la classe d'universalité de la percolation dirigée, la relation entre les exposants a et b est une conséquence directe de la symétrie par renversement de rapidité [Baum07b]. Cependant, bien que cette symétrie ne soit pas sensée être vraie ni dans le modèle NEKIM ni dans le modèle RAC, la relation est encore valable.

   Dans le tableau 4.3 nous avons référencé la valeur limite (4.86). Lorsque la relation $a + 1 = b$, nous savons directement que la valeur limite est universelle étant donné que la longueur ϑ disparaît. Dans l'état stationnaire, nous avons $\Xi^{-1}_{\rm stat} = 0$, ainsi une valeur finie de Ξ_∞ implique que le modèle ne relaxe jamais dans un état stationnaire.

Le modèle *RAC* est un peu différent et mérite une certaine attention. A partir des équations de mouvement, il est possible de montrer que $\chi := a+2c$ est une quantité conservée telle que $\chi(t) = \int \mathrm{d}\mathbf{r}\, \chi(t,\mathbf{r})$ est une charge conservée [Rey99]. Ici, nous nous contentons de nous concentrer sur la relation existant entre l'autocorrélation des particules C et l'autoréponse correspondante. A partir des solutions exactes [Elga08], le rapport limite s'écrit

$$\Xi_\infty^{(CC)} = \frac{\mu^3}{64\lambda^3 a_\infty^5}\left((\mu-3)a_\infty - a_0\right) \tag{4.90}$$

où λ, μ sont les taux des deux réactions et $a_{0,\infty}$ est la densité moyenne en particules A au temps $t=0$ et $t=\infty$, respectivement. Il est d'ailleurs possible de montrer que a_∞ dépend seulement des taux et de la charge conservée $\chi(0) = \chi(\infty)$).
Ce qui diffère par rapport aux modèles plus simples jusque-là étudiés, est la dépendance explicite de la valeur limite Ξ_∞ envers l'état initial. Dans l'état stationnaire $\Xi_{\mathrm{stat}}^{-1} = 0$. Il est cependant tout à fait concevable que dans des système plus complexes, le rapport fluctuation-dissipation ne puisse pas toujours être universel.

Récemment, la valeur limite de ce RFD a été mesurée dans le modèle de l'électeur le long de la ligne critique [Chat11].

3. **Modèles avec** $a + \frac{3}{2} = b$**.** Le processus coagulation-diffusion est un exemple d'un tel cas et sa longueur caractéristique est donnée par $L(t) = \sqrt{8D\,t}$. Nous donnons dans le tableau 4.3 notre résultat pour Ξ_∞. Ce résultat provient de (4.86). De plus, une fois que $\vartheta = 8D$ a été correctement identifié, les fonctions d'échelle C, R sont universelles en ce sens qu'elles ne dépendent pas de l'état initial. Ainsi, Ξ_∞ est lui-même universel. Dans l'état stationnaire, $\Xi_{\mathrm{stat}}^{-1} = 0$, et donc cette valeur finie de Ξ_∞ signifie que le modèle ne peut pas relaxer vers un état stationnaire dans un temps fini. Dans la figure 4.4, nous avons représenté $\Xi(t/s)$ dans le but de voir comment le rapport fluctuation-dissipation atteint sa valeur limite. Son comportement n'est pas monotone alors que dans les modèles où la relation $a+1=b$ ou $a=b$ est satisfaite c'est généralement le cas.
   Enfin, nous avons comparé nos résultats avec ceux dérivés dans [Mayer07] via le modèle d'annihilation de paires. Clairement, comme la relation entre les exposants a et b est différente dans ces deux travaux, le rapport fluctuation-dissipation à utiliser l'est aussi. Pour être plus précis, il n'y a aucune erreur dans l'un ou l'autre des calculs, ce sont juste des définitions différentes de la fonction de réponse qui engendrent ces écarts. En effet, Mayer et Sollich ont utilisé une définition de la réponse normalement issue du modèle FA. Cependant, comme dans la limite des temps longs, ce modèle FA se comporte de manière similaire au processus de coagulation-diffusion, il est tout-à-fait concevable d'utiliser cette définition pour calculer la réponse.
4. **Modèles avec** $b = 0$**.** Pour mieux comprendre la signification de Ξ, nous allons maintenant l'appliquer aux aimants simples avec une dynamique satisfaisant le bi-

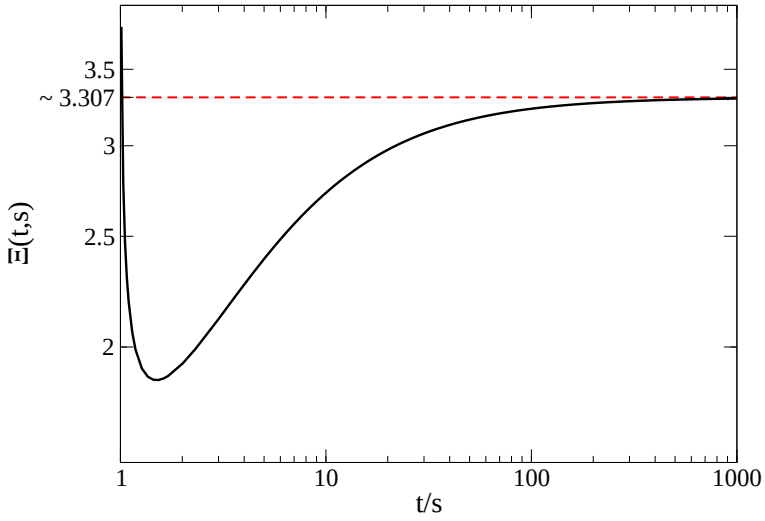


FIGURE 4.4 – *Représentation du rapport fluctuation-dissipation $\Xi(t,s)$ par rapport à t/s pour le processus de coagulation-diffusion. La ligne en trait plein représente les valeurs numériques de $\Xi(t/s)$ en utilisant les expressions (4.76) pour l'autoréponse and (4.85),(4.74) pour la fonction de corrélation. La ligne en tiret donne la valeur asymptotique $\Xi_\infty = \frac{3\pi}{6\pi-16}$.*

lan détaillé mais qui serait trempé en dessous de sa température critique où $a \neq b = 0$. Nous avons choisi de prendre le modèle sphérique en dimensions $d > 2$ comme référence. La longueur d'échelle $L^2(t) = 4dDt$ a déjà été extraite explicitement [Ebbi08], et donc on en déduit immédiatement $\vartheta = 4dD$ est proportionelle à la constante de diffusion, tout comme le processus coagulation-diffusion. A partir des résultats déjà obtenus sur ce modèle [Godr00b], nous trouvons que la limite du RFD généralisé est

$$\Xi_\infty = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{d/2} |\Gamma(1-d/4)|/\Gamma(1+d/4), \tag{4.91}$$

qui est finie sauf si d est un multiple de 4.

Toujours dans cette même catégorie de modèles avec $b = 0$, nous pouvons citer le BPCPD et BPCPL, au point multicritique et pour $2 < d < 4$ [Baum05] ou $\eta < d < 2\eta$ [Dura09], respectivement. A partir de l'expression du corrélateur à deux temps et de la réponse à deux temps, la longueur d'échelle $L^2(t) = Dt$ est extraite. On en déduit que $\vartheta = D$. Nous avons normalisé l'autocorrélateur connexe au temps $s = 0$ à 1. Nous trouvons alors, pour le BPCPL, la valeur limite du RFD :

$$\Xi_\infty = \frac{d\, 2^{1-d+d/\eta}\Gamma^2(d/\eta)|\Gamma(1-d/\eta)|}{\pi^{d/2}\eta^2\Gamma(d/2)\Gamma(1+d/\eta)} \tag{4.92}$$

avec $0 < \eta < 2$. Pour le BPCPD, le résultat est obtenu en prenant la limite $\eta \to 2$ dans l'expression ci dessus. Là encore c'est manifestement universel.

5. **Modèles avec $a - 1 = b$.** Une attention particulière doit se porter sur les modèles BPCPD et BPCPL au point multicritique mais pour des dimensions $d > 4$. Cependant, bien que la longueur d'échelle puisse être trouvée de la même façon que précédemment et s'écrive $L^2(t) = Dt$, le comportement du modèle est très différent. En effet, l'amplitude de l'autocorrélateur connexe contient un facteur non-universel
$$A_2 = \left(\frac{2}{(2\pi)^d} \int_{\mathcal{B}} \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{4\omega(\mathbf{q})^2} \right)^{-1} \tag{4.93}$$
dont la valeur numérique dépend de la forme de la relation de dispersion $\omega = \omega(\mathbf{q})$. En conséquence, dans ce cas, la limite du rapport fluctuation-dissipation n'est pas universelle et est égale à $\Xi_\infty = 2A_2$.
Cette non-universalité devrait être prise en compte en cherchant les variables non pertinentes dans l'autocorrélateur.

Pour résumer, nous avons finalement une belle liste de modèles où une limite finie du rapport fluctuation-dissipation généralisé Ξ_∞ peut être définie, alors que sa valeur dans l'état stationnaire est $X^{-1}_{\mathrm{stat}} = 0$.

4.9 Conclusions

Ainsi, nous avons généralisé la méthode des intervalles vides en considérant une probabilité mixte (intervalle vide - particule) $\Pr(\{\boxed{\text{n}}, t\} d\{\bullet, s\})$ à deux temps t, s. Celle ci sert de fonction génératrice pour le corrélateur à deux temps ou pour la réponse à deux temps, selon la condition au bord aux temps égaux $t = s$ qui est fournit. Il est possible d'utiliser une méthode heuristique basée sur les probabilités ou alors d'utiliser le formalisme Hamiltonien/Liouvilien quantique pour dériver les équations de mouvements fermées. La solution de ces équations de mouvement, qui n'ont de sens physique que dans le demi plan supérieur $n \geq 0$, $d \geq 0$ est prolongée par continuation analytique dans le demi plan inférieur où n et d sont à la fois négatifs. Par ce biais, le comportement aux temps longs du processus de coagulation-diffusion peut être étudié exactement et son régime de vieillissement analysé en détail. Nous avons aussi calculé les expressions exactes des corrélateurs et réponses dans le cas d'un système initialement complètement rempli. Les équations (4.74) et (4.76) donne les formes d'échelle exacte de l'autocorrélateur et de l'autoréponse dans le régime de vieilissement. A partir de ces solutions, les exposants hors équilibre ont pu être extraits
$$\lambda_C = \lambda_R = 4 \ , \ \ a = -\frac{1}{2} \ , \ \ b = 1 \tag{4.94}$$
ainsi que l'exposant dynamique $z = 2$. Rappelons qu'il est essentiel que les taux de diffusion $A + \emptyset \leftrightarrow \emptyset + A$ et de coagulation $A + A \to A + \emptyset$ or $\emptyset + A$ soient égaux pour que la méthode présente soit applicable.

Notons enfin que bien que nous nous soyons limité à la résolution dans le cas où la condition initiale est un système complètement rempli, la méthode est aussi applicable

pour n'importe quelle condition initiale, au prix d'une modification d'une des conditions aux bords. Toutefois, n'ayant pas eu pour objectif d'étudier les corrections au comportement dominant, nous n'avons pas cru intéressant de calculer ces solutions plus générales.

La méthode des intervalles vides peut être appliquée pour déterminer la densité de particules dans des modèles bien plus généraux que la simple diffusion-coagulation, voir [Burs89, benA90, Doer92, benA00, Mass00, Henk01, Agha05]. En particulier, si l'on inclut le processus de décoagulation $A \to 2A$, une transition de phase avec des effets de taille finie non triviaux a été trouvée [Burs89]. Il est cependant concevable qu'une généralisation de notre méthode puisse être développée pour s'appliquer à ces modèles plus ardus. Les points essentiels d'une telle généralisation seront la détermination des observables à un temps, leurs conditions aux bords et surtout la continuation analytique pour rendre ces conditions compatible avec les équations de mouvement.

Avec la définition que nous avons prise pour la fonction de réponse, nous pouvons dire que c'est le premier modèle du genre dont les exposants a et b satisfont cette relation $a + \frac{3}{2} = b$. C'est pour cela que nous avons discuté de la possible généralisation, voir eq. (4.84)), de la relation entre corrélateur et réponse. Notre proposition contient tous les rapports fluctuation-dissipation précédemment étudiés et conduit systématiquement vers une limite finie Ξ_∞, voir les valeurs listées dans le tableau 4.3. Par contre, la signification physique d'un tel rapport reste à saisir.

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons étudié, au travers de plusieurs modèles exactement résolubles, le vieillissement dans des systèmes dont la dynamique ne satisfait pas le bilan détaillé. Pour être plus précis, nous avons étudié trois modèles : le processus de contact bosonique, le processus de contact bosonique par paires et enfin le processus de coagulation-diffusion.

Dans les deux premiers modèles cités, notre étude s'était basée sur les travaux de mon prédécesseur, Florian Baumann. Elle a permis d'étendre et de calculer les exposants de vieillissement dans le cas où le transport de particules se fait à longue portée, représenté par des vols de Lévy. Une fois, cette connaissance acquise sur l'ensemble des exposants, il nous est apparu judicieux d'étudier le temps de passage vers le régime de vieillissement pour mettre en évidence, qu'au moins dans ces modèles ainsi que dans le modèle sphérique à température critique, ce temps de passage suit une loi algébrique. Nous avons alors étudié et vérifié que cet exposant suivait la même contrainte que ce qui avait été trouvé par Zippold *et al.* pour le modèle sphérique trempé en dessous de sa température critique. Ces informations recueillies, nous avons alors pu étendre la validité de l'argument d'Andreanov, relatif aux formes d'échelle accessibles par les corrélateurs dans les systèmes sous-critiques, au cas critique. Enfin, pour parachever notre étude du modèle, nous nous sommes penchés sur l'établissement d'un rapport fluctuation-dissipation dans le processus de contact bosonique. Ce modèle, dont, je le rappelle, la dynamique ne satisfait pas le bilan détaillé, ne peut se voir définir une température. Nous avons donc pris parti de remplacer cette température qui apparaît dans la définition de Cugliandolo *et al.* du RFD par une quantité caractéristique de l'état du système au temps d'attente. Ainsi, nous avons pu extraire une valeur limite de ce rapport, supposée universelle, et qui caractérise d'une certaine façon le fait que le système ne rejoint jamais l'équilibre.

Le troisième modèle que nous avons étudié et qui finalement nous a pris le plus de temps est le processus de coagulation-diffusion. Nous sommes penchés tout d'abord sur le calcul des quantités à un temps. Il nous a fallu développer une nouvelle méthode pour résoudre les équations de mouvement pour les probabilités à un ou deux intervalles vides. En effet, la symétrie de l'équation différentielle n'était pas en accord avec la condition aux bords et nous avons donc du établir une continuation analytique pour pouvoir ensuite résoudre simplement cette équation. Avec cette technique, l'accès à l'expression formelle pour les probabilités à un ou deux intervalles vides a été établie, pour n'importe quelle

condition initiale. C'est en ce sens que la méthode a été novatrice : elle a permis de connaître exactement l'influence des conditions initiales sur le corrélateur. Pour être plus précis, ces conditions initiales sont caractérisées par leurs distributions de probabilité d'avoir un ou deux intervalles vides ; nous avons alors établi que ces conditions initiales n'engendrent que des corrections au comportement aux temps longs mais mieux encore qu'elles obéissent à une hiérarchie. En effet, la distribution initiale de probabilité d'avoir deux intervalles vides engendre une correction plus faible que celle de la distribution initiale de probabilité d'avoir un intervalle vide. Ce travail achevé, nous avons pu nous pencher sur le problème des quantités à deux temps en ne nous souciant guère des conditions initiales, vu que nous savons désormais qu'elles n'entrainent que des corrections au comportement asymptotique.

Enfin, nous avons, dans le dernier chapitre, véritablement étudié le vieillissement dans le processus de coagulation-diffusion. Les quantités à deux temps nous ont été accessibles en affinant légèrement notre approche et en considérant plutôt une probabilité mixte : la probabilité d'avoir un intervalle vide au temps t à une certaine distance d'une particule au temps s. Cette probabilité est la pierre angulaire de ce dernier chapitre car elle donne accès à la fois à la réponse mais aussi à la corrélation. Il nous suffit de spécifier la bonne condition au bord pour sélectionner soit la réponse, soit la corrélation. Ceci fait, les exposants de vieillissement ont été déterminés mais la relation particulière entre les exposants a et b nous a amenés à proposer une nouvelle forme, plus générale, du rapport fluctuation-dissipation. Comme discuté dans la thèse, cette proposition possède l'avantage de regrouper sous une même formulation l'ensemble des rapports fluctuation-dissipation connus jusqu'alors. Toutefois, son interprétation en toute généralité est encore à découvrir.

Tout au long de cette thèse, d'autres idées ont germé et reste à étudier. En effet, nous avons voulu éprouver la méthode développée dans le processus coagulation-diffusion à des modèles un peu plus compliqués, par exemple par simple ajout d'une réaction de type création spontanée de particules. L'écueil que nous avons rencontré et auquel nous n'avons pas eu le temps de faire face est que pour établir la continuation analytique, la symétrie fait appeler à un noyau et de fait devient très ardue à manipuler.

Nous avons aussi pensé à un problème de transport dans une chaîne de longueur fixée dans laquelle on ajoute des particules par l'un des bords avec un taux de création constant. A l'intérieur de la chaîne, la dynamique serait donnée par les deux réactions coagulation et diffusion. Nous pensons qu'il serait possible d'établir une relation entre le courant de particules à la sortie de la chaîne en fonction du taux de création et que dans la limite où ce taux serait faible nous devrions retrouver la formule de Kubo.

Nous avons enfin évoqué l'idée du même processus de coagulation-diffusion étudiée dans cette thèse mais en y ajoutant un seul site source. Ce faisant, l'invariance par translation spatiale serait brisée mais le souci du noyau qui interviendrait dans la symétrie devrait disparaître. Il faudrait, pour cela, considérer des probabilités à un ou deux intervalles

vides dont l'argument ne serait plus une distance ou une longueur mais un numéro de site.

Appendices

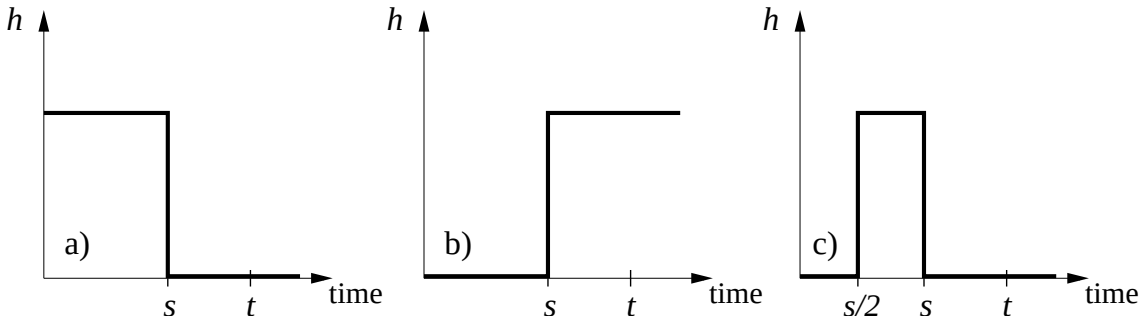


FIGURE A1 – *Plusieurs protocoles pour mesurer des susceptibilités intégrées. On voit la dépendance temporelle de l'amplitude h_0 du champ magnétique spatialement aléatoire h. (a) thermorémanente (TRM) (b) "zero-field cooled" (ZFC) et (c) intermédiaire (Int). Tiré de [Henk10]*

A. Remarques sur le comportement d'échelle des réponses intégrées

Dans cette annexe, nous ne considérons que des systèmes ayant une dynamique avec paramètre d'ordre non conservé et avec une loi d'échelle simple $L(t) \sim t^{1/z}$ de la taille des domaines. Nous introduirons dans un premier temps les différentes définitions de réponses intégrées et verrons dans les sections suivantes la valeur des exposants.

A.1 Définition des diverses réponses intégrées

Tout d'abord, la mesure directe de la fonction de réponse $R(t, s; \mathbf{r})$, définie en (4.17) comme une dérivée fonctionelle n'est pas pratique vu qu'il conduirait à un signal très faible dominé par le bruit (statistique, thermique, initial). Pour éviter ce genre d'écueil, Barrat [Barr98] a proposé d'étudier des réponses *intégrées* à deux temps, en appliquant un champ magnétique h dont la dépendance temporelle est choisie selon différents protocoles, indiqués pour certains dans la figure A1. La réponse intégrée sera ensuite donnée comme une intégrale $\int \mathrm{d}u\, R(t, u)$, avec les limites d'intégration que l'on peut lire dans la Fig. A1. Pour les verres de spins, le désordre intrinsèque spatial des modèles usuellement étudiées permettent d'utiliser un champ magnétique spatialement constant [Cugl02]. Cependant pour les aimants simples, il convient d'utiliser un champ spatialement aléatoire, dans le but de ne pas préférer un des états d'équilibre.

On pourrait s'attendre à ce que la réponse intégrée se comporte comme $s^{-a} f(t/s)$, cependant la réalité est toute autre.

Susceptibilité thermorémanente

Il est important de réaliser que le comportement d'échelle (1.15) de la fonction de réponse à deux temps $R(t, s)$ est déterminée par la différence $\tau = t - s$. Nous savons, voir Fig. 1.11 [Zipp00], qu'il existe une échelle de temps intermédiaire $t_p(s) \sim s^{\zeta}$ avec

$0 < \zeta < 1$ telle que

$$R(t,s) = \begin{cases} R_{\rm gg}(\tau) & ; \text{ si } \tau_{\rm micro} \ll \tau \lesssim t_p \\ R_{\rm age}(t,s) = s^{-1-a} f_R(t/s) & ; \text{ si } t_p \lesssim \tau \end{cases} \tag{A1}$$

où $R_{\rm gg}(\tau)$ est la réponse à l'équilibre. Dans le modèle sphérique avec $2 < d < 4$, on a $\zeta = 4/(d+2)$ pour $T < T_c$ [Zipp00]. Dans la suite de la discussion, nous supposerons que (i) ce résultat peut être pris pour tout aimant simple et (ii) le passage entre le régime d'équilibre et le régime de vieillissement est très rapide.
De plus, le comportement d'échelle de la fonction de réponse $R(t,s)$ sera seulement considérée pour des temps d'attente suffisamment grand par rapport à un temps de référence microscopique (et bien sûr seulement si $t - s \gg t_p(s) \sim s^\zeta$). Pour de très petits s on s'attend à trouver $R(t, \tau_{\rm micro}) \sim t^{-\lambda_{R'}/z}$. Alors qu'il est usuellement supposé que $\lambda_{R'} = \lambda_R$ [Huma91], et que ceci semble s'avérer dans une large majorité de modèles, il n'est cependant pas évident de voir pourquoi les deux limites utilisées dans la définition de ces deux exposants d'autoréponse devraient toujours commuter. Il faut donc introduire une autre échelle de temps t_ϵ telle que $s - t_\epsilon \simeq \tau_{\rm micro}$ et qui décrit le passage entre le régime d'échelle initial et le régime d'échelle de vieillissement. Nous avons dans le régime de vieillissement en généralisant légèrement [Cugl02, Henk03a]

$$\begin{aligned}
\chi_{\rm TRM}(t,s) \;&=\; \int_0^s {\rm d}u\, R(t,u) \;=\; \int_0^s {\rm d}\tau\, R(t,s-\tau) \\
&\simeq \quad \int_0^{t_p} {\rm d}\tau\, R_{\rm age}(t,s-\tau) + \int_{t_p}^{t_\epsilon} {\rm d}\tau\, R_{\rm age}(t,s-\tau) + \int_{t_\epsilon}^{s} {\rm d}\tau\, R(t,\tau_{\rm micro}) \\
&= \quad s\int_0^{t_p/s} {\rm d}v\, R_{\rm age}(t,s(1-v)) + s\int_{t_p/s}^{t_\epsilon/s} {\rm d}v\, R_{\rm age}(t,s(1-v)) + t^{-\lambda_{R'}/z} c_\infty \\
&\overset{s\to\infty}{=} \quad s^{-a}\int_0^1 {\rm d}v\, (1-v)^{-1-a} f_R\left(\frac{t/s}{1-v}\right) + c_\infty\, t^{-\lambda_{R'}/z}
\end{aligned}$$

avec $c_\infty = c_\infty(\tau_{\rm micro})$. Dans la dernière ligne, la limite $s \to \infty$ a été prise. Tous les termes qui seraient venus des régions de transition entre les trois régimes précités ont été négligés. Pour $t - s \ll t_p(s)$, on trouve plutôt que $\chi_{\rm TRM}(t,s) \simeq \int_0^{t_p} {\rm d}\tau\, R_{\rm gg}(t-s+\tau) + \int_{t_p}^{s} {\rm d}\tau\, R(t,\tau_{\rm micro}) \simeq T^{-1}(C_{\rm gg}(0) - C_{\rm gg}(t-s))$ se réduit au corrélateur d'équilibre plus une correction dépendant du temps.

En résumé, on s'attend à ce que la limite pour les grands temps d'attente $s \to \infty$ l'aimantation thermorémanente se comporte comme $M_{\rm TRM}(t,s) = h\chi_{\rm TRM}(t,s)$ et sa susceptibilité

$$\chi_{\rm TRM}(t,s) = s^{-a} f_M(t/s) + c_\infty\, t^{-\lambda_{R'}/z} \tag{A2}$$

where c_∞ est une constante. La fonction d'échelle $f_M(y)$ peut être calculée une fois que $f_R(y)$ est connue.

Dans la pratique, il apparaît que, pour la croissance de domaines dans les aimants simples, la première correction au comportement d'échelle dominant de $\chi_{\rm TRM}$ est très importante.

Susceptibilité "Zero-field Cooled"

Dans le cas de la susceptibilité ZFC (pour "zero field cooled"), l'intégration peut devenir singulière proche d'une des limites d'intégration (voir Fig. A1b). Dans certains cas, cela peut même générer des termes qui dominent le régime de vieillissement. Pour analyser ceci, il est intéressant d'utiliser la règle de somme

$$\chi_{\rm FC}(t) = \int_0^t {\rm d}u\, R(t,u) = \chi_{\rm TRM}(t,s) + \chi_{\rm ZFC}(t,s) \tag{A3}$$

où $\chi_{FC}(t)$ corresponds à un champ magnétique. Nous analysons dans la suite $\chi_{\rm FC}(t)$ et ensuite déduisons $\chi_{\rm ZFC}(t,s)$ de cette règle de somme (A3) puis le résultat (A2) pour la susceptibilité thermorémanente.

Modèle de classe S

Physiquement, il est communément accepté [Bray00, Bouch00, Cugl02] que l'évolution des systèmes de cette classe se fait par la formation de domaines ordonnés puis par le mouvement des parois de domaines, voir Fig. 1.6 pour une illustration dans le modèle d'Ising-Glauber. Nous perturbons maintenant le système avec une champ aléatoire de moyenne nulle $\overline{h_{\mathbf{i}}} = 0$ [Barr98], par exemple un champ $h_{\mathbf{i}} = \pm h$. Considérons d'abord le cas où $T = 0$. Alors, puisque les spins à l'intérieur d'un amas sont complètement ordonnés, la seule contribution à $\chi_{\rm FC}$ vient des spins proches des parois entre domaines ordonnés. Etant donné les parois sont de dimensions $(d-1)$, la densité est $\rho_{\rm I}(t) \sim (L(t))^{d-1}/(L(t))^d = L(t)^{-1}$. A partir de [Barr98], on a sur un réseau $\Lambda \in \mathbb{Z}^d$ avec $\mathcal{N}$ sites où $\langle..\rangle$ représente la moyenne thermique et la barre la moyenne sur le champ aléatoire

$$\chi_{\rm FC}(t) = \frac{1}{\mathcal{N}\,h^2}\overline{\left\langle \sum_{\mathbf{i}\in\Lambda} \sigma_{\mathbf{i}}(t) h_{\mathbf{i}} \right\rangle} = \frac{1}{\mathcal{N}\,h^2}\overline{\left\langle \sum_{\mathbf{i}\in \text{ interfaces}} \sigma_{\mathbf{i}}(t) h_{\mathbf{i}} \right\rangle} \sim L(t)^{-1} w(t) \tag{A4}$$

avec $w(t)$ représentant la largeur de l'interface. Pour une température finie $T > 0$, l'ordre à l'intérieur d'un amas n'est pas parfait et donc il reste une contribution résiduelle à la susceptibilité. Nous avons alors le théorème fluctuation-dissipation pour les temps longs

$$\chi_{\rm FC}(t) \simeq \chi_0 + L(t)^{-1} w(t) \;\;,\;\; T\chi_0 = 1 - M_{\rm eq}^2 \tag{A5}$$

où $M_{\rm eq}$ est l'aimantation à l'équilibre. La dynamique d'une interface à $(d-1)$ dimensions dans un système de dimension d ($d \geq 2$) peut se décrire par un modèle de hauteur ("height model" dans [Abra89]) de variables de hauteur $v_{\mathbf{j}} \in \mathbb{R}$ avec un hamiltonien $\mathcal{H}[v] = -\frac{\tau}{2}\sum_{(\mathbf{j},\mathbf{j}')} (v_{\mathbf{j}} - v_{\mathbf{j}'})^2$ où τ est la tension de surface effective [Abra89] et où les intéractions avec le plus proche voisin ont été considérées. Si la dynamique (non conservée) de ce modèle est décrite par une équation de Langevin, le carré de la largeur de l'interface a été montré par Abraham and Upton comme se comportant au temps longs comme [Abra89]

$$w(t)^2 = \langle v_{\mathbf{0}}(t)^2 \rangle \sim \left\{ \begin{array}{lll} t^{1/2} & ; & \text{si } d = 2 \\ \ln t & ; & \text{si } d = 3 \end{array} \right. . \tag{A6}$$

En insérant ceci dans (A4), nous avons finalement pour $\chi_{\rm FC}$ dans le cas des modèles de classe S (par exemple le modèle de Glauber-Ising pour $d > 1$)

$$\chi_{\rm FC}(t) - \chi_0 \sim \begin{cases} t^{-1/4} & ; \text{ si } d = 2 \\ t^{-1/2}(\ln t)^{1/2} & ; \text{ si } d = 3 \end{cases} \tag{A7}$$

lorsque $t \to \infty$ et lorsque la température est supérieure à la température de rugosité $T > T_R$. Pour des dimensions $d \geq 4$, et généralement si $T < T_R$, on s'attend à une interface plate avec $w(t) \sim \text{constant}$.

Modèle de classe L

La principale différence par rapport à la classe S vient du fait que, bien que des amas corrélés de taille $L(t) \sim t^{1/z}$ se forment, des fluctuations persistent à l'intérieur de ces amas. Ainsi il est naturel de considérer une largeur $w(t) \sim L(t)$ ce qui conduit à $\chi_{\rm FC}(t) \sim \text{constant}$.

Pour résumer, nous avons vu que pour des temps longs [Henk04b]

$$\chi_{\rm FC}(t) = \chi_0 + \chi_1 t^{-A} \quad , \quad A = \begin{cases} z^{-1} - \kappa & ; \text{ classe S} \\ 0 & ; \text{ classe L} \end{cases} \tag{A8}$$

où $\kappa \geq 0$ décrit la largeur de l'interface $w(t) \sim t^{\kappa}$ pour les systèmes de classe S, voir (A6). Il apparaît également que le comportement de $\chi_{\rm FC}(t)$ est indépendant du temps d'attente s. Nous insérons ceci dans la règle de somme (A3). Les termes constants (χ_0 pour la classe L, $\chi_0 + \chi_1$ pour la classe S) peut se trouver à partir du théorème fluctuation-dissipation statique. Le résultat final est [Henk05]

$$\begin{aligned} \chi_{\rm ZFC}(t,s) &= \chi_{\rm FC}(t) - \chi_{\rm TRM}(t,s) \\ &= \begin{cases} \frac{1}{T}\left(1 - M_{\rm eq}^2\right) + \chi_1 t^{-A} - s^{-a} f_M(t/s) & ; \text{ pour la classe S} \\ \frac{1}{T}\left(1 - M_{\rm eq}^2\right) - s^{-a} f_M(t/s) & ; \text{ pour la classe L} \end{cases} \end{aligned} \tag{A9}$$

Il faut noter que pour la classe S, le terme $\sim t^{-A}$ peut complètement masquer les contributions venant du vieillissement. La simple observation du comportement d'échelle dynamique de $\chi_{\rm ZFC}(t,s)$ n'est pas nécessairement suffisante pour exclure ceci. Dans les verres, il est habituel de décomposer $\chi_{\rm ZFC}(t,s) = \chi_{\rm st}(t-s) + \chi_{\rm age}(t,s)$ en une partie "stationnaire" et un terme de vieillissement. De la même façon, la décomposition de l'autocorrélateur $C(t,s) = C_{\rm st}(t-s) + C_{\rm age}(t,s)$ est fait de telle façon que $\chi_{\rm st}(t)$ et $C_{\rm st}(t)$ satisfassent le TFD. Ceci implique que $C_{\rm st}(t-s)$ agit comme une correction au terme d'échelle $C_{\rm age}(t,s)$, cependant il n'est pas toujours évident que les autres termes ne soient pas, aussi, plus grand. Enfin, il est aussi tenter de décomposer la fonction de réponse $R(t,s) = R_{\rm st}(t-s) + R_{\rm age}(t,s)$ au lieu de la formulation eq. (A1), mais cette décomposition n'est pas nécessaire pour déduire les formes d'échelle (A9) de la susceptibilité ZFC.

Susceptibilité intermédiaire

Ayant vu que $\chi_{\rm TRM}(t,s)$ et $\chi_{\rm ZFC}(t,s)$ peuvent présenter des difficultés d'interprétation, une solution naturelle serait d'éviter les limites $s \approx 0$ et $s \approx t$. Une solution possible est d'utiliser le protocole "intermédiaire" présenté dans Fig. A1c. En effet, dans ce cas l'intégration conduit à [Henk04b, Henk05]

$$\chi_{\rm Int}(t,s) = s^{-a} f_{\rm Int}(t/s) + {\rm o}\left(t^{-\lambda_{R'}/z}\right) \ . \tag{A10}$$

Nous rappelons que toutes corrections au comportement d'échelle de la fonction de réponse $R(t,s)$ ont été négligées.

Enfin il est possible d'étudier le comportement de la réponse linéaire à une perturbation harmonique de pulsation ω. En utilisant, les mêmes techniques que nous avons évoquées dans le cas de la susceptibilité thermorémanente, il est possible de montrer que la partie dissipative $\chi''(\omega,t)$ se comporte comme

$$\chi''(\omega,t) = \int_0^t {\rm d}u R(t,u)\sin(\omega(t-u)) = \chi''_{\rm st}(\omega) + t^{-a}\chi''_2(\omega t) + {\rm O}(t^{-\lambda_{R'}/z}) \tag{A11}$$

où $\chi''_{\rm st}$ est la partie stationnaire.

A.2 Valeurs des exposants hors équilibre

Valeurs des exposants de vieillissement a et b

Rappelons maintenant la valeur des exposants a et b pour les sytèmes avec état initial désordonné et avec paramètre d'ordre non conservé (modèle A). Pour l'exposant b, on a généralement [Bray94, Godr02]

$$b = \left\{ \begin{array}{lcl} 0 & ; & \text{pour la classe S} \\ 0 & ; & \text{pour la classe L et } T < T_c \\ a & ; & \text{pour la classe L et } T = T_c \end{array} \right. . \tag{A12}$$

Un résultat explicite peut être donné pour l'exposant a [Henk03a]

$$a = \left\{ \begin{array}{lcl} 1/z & ; & \text{pour la classe S} \\ (d-2+\eta)/z & ; & \text{pour la classe L} \end{array} \right. \tag{A13}$$

pour des dimensions $d < d_c$, où d_c est la dimension critique supérieure.
Preuve : Pour les systèmes de classe S, on utilise un argument qui stipule que, pour des aimants simples, les observables, telles que les susceptibilités, devraient se décomposer [Bouch00]

$$\chi''(\omega,t) = \chi''_{\rm eq}(\omega) + L(t)^{-1}\chi''_{\rm age}(\omega t) \ . \tag{A14}$$

Ici, $\chi''_{\rm age}$ représente la réponse d'une seule paroi de domaines. Etant donné que les domaines devraient avoir une taille $L(t)$, ils occupent un volume $\sim L(t)^d$ et une surface

$L(t)^{d-1}$, ainsi leur densité devrait se comporter comme $1/L(t)$. En comparant (A11) et $L(t) \sim t^{1/z}$ ceci donne la première partie de (A13).

Pour les systèmes de classe L, il n'est plus question de parois de domaines bien définies mais il est possible de considérer

$$\chi''(\omega, t) = \chi''_{\rm eq}(\omega) + L(t)^{-(d-2+\eta)} \chi''_{\rm age}(\omega t) \tag{A15}$$

à partir duquel la seconde partie de (A13) suit. L'hypothèse de départ est que toutes les longueurs d'échelle sont mesurées par la taille des domaines $L(t)$. Il est alors envisageable de postuler que le corrélateur spin-spin s'exprime comme $C(t, \mathbf{r}) \approx C_{\rm qs}(L(t), \mathbf{r}) \sim r^{-(d-2+\eta)} c(r/L(t))$, où c est une fonction d'échelle. La contribution à la susceptibilité par unité de volume V devrait alors être $\chi_{\rm qs} \sim V^{-1} \int_V {\rm d}\mathbf{r}\, C_{\rm qs}(L(t), \mathbf{r}) \sim L(t)^{-(d-2+\eta)}$ ce qui termine la démonstration. q.e.d.

L'argument ci-dessus pour la classe L repose, cependant, sur des suppositions heuristiques. Nous rappelons donc tous les essais sur des modèles spécifiques. Premièrement, pour la dynamique critique hors équilibre, il est connu [Godr02, Cala05] que $a = b = 2\beta/\nu z = (d - 2 + \eta)/z$, en accord avec (A13). Deuxièmement, la solution exacte du modèle sphérique trempé à $T < T_c$ [Godr00b] donne $a = d/2 - 1$, ce qui avec $z = 2$ et $\eta = 0$ reproduit (A13). Troisièmement, pour le modèle sphérique avec paramètre d'ordre conservé trempé à $T = T_c$ on a $z = 4$, $\eta = 0$ et $a = b = (d-2)/4$ [Baum07b]. Finalement, pour le modèle XY en $2D$, l'approximation d'onde de spin [Bert01] donne $a = b = \eta/2$, là encore en accord avec (A13) puisque $z = 2$. Ces résultats semblent rester correct même si l'approximation des ondes de spins n'est plus valable, [Bert01, Abri04a, Lei07].

Il faut ici mentionner que les résultats ci-dessus, surtout eq. (A13) pour l'exposant a, ne sont pas toujours acceptés. Basé sur leur analyse de la susceptibilité ZFC Corberi, Lippiello and Zannetti [Corb02, Corb03, Corb05] ont utilisé une expression différente de la forme d'échelle $\chi_{\rm ZFC}(t, s) = \chi_0 + s^{-a_\chi} f(t/s)$ et en particulier ne reconnaissent pas la distinction entre classe S et classe L. Avec l'appui de leurs études numériques et de plusieurs modèles résolus exactement, ils proposent

$$a_\chi = \frac{n}{z} \frac{d - d_L}{d_U - d_L} \tag{A16}$$

où $d_{U,L}$ sont les dimensions critiques supérieures et inférieures et pour un paramètre d'ordre scalaire ($n = 1$) ou vectoriel ($n = 2$). Alors que a_χ décrit bien phénoménologiquement le comportement algébrique dominant $\sim t^{-A}$ de $\chi_{\rm ZFC}$ dans (A9), ils posent que $a_\chi \stackrel{!}{=} a$ [Corb02, Corb03, Corb05] devrait aussi décrire le comportement d'échelle de la fonction de réponse. Si leur proposition est juste, cela implique que les arguments utilisés pour déduire (A13) sont incorrects et que donc l'interprétation physique derrière eux l'est aussi, à savoir la cinétique des domaines.

Tout étant en accord pour les modèles de classe L, une discussion plus approfondie sur les modèles de classe S est nécessaire.

En effet, une inspection plus fine des modèles de classe S montre plusieurs difficultés par rapport à l'identification $a \stackrel{?}{=} a_\chi$ proposé par Corberi *et al.*.

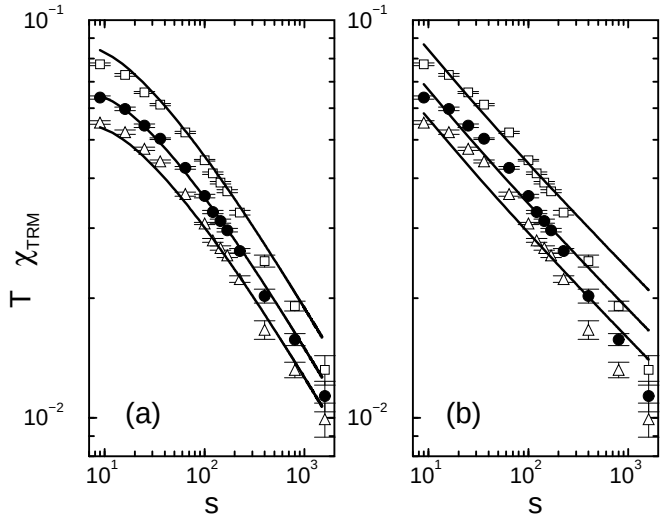


FIGURE A2 – *Comportement d'échelle de la susceptibilité thermorémanente du modèle d'Ising en deux dimensions trempé à* $T = 1.5$ *en fonction du temps d'attente* s*, pour différentes valeurs de* $y = t/s$ *(carrés :* $y = 5$*, cercles :* $y = 7$ *et triangles* $y = 9$*). L'exposant d'autoréponse* $\lambda_R = 1.26$ *a été utilisé et nous avons supposé que* $a = 1/2$ *dans (a) et* $a = 1/4$ *dans (b). d'après [Henk03a].*

– Premièrement, on considère des systèmes de classe S au dessus de leur température de rugosité telle que l'exposant κ de la largeur de de la paroi est positif $\kappa > 0$, et donc $A < a = 1/z$, voir (A8). On pourrait alors être tenté d'interpréter le premier terme $\sim t^{-A}$ dans la forme d'échelle (A9) comme une fonction d'échelle $f(t/s)$ de la fonction de réponse à deux temps. Cependant, comme $t^{-A} = s^{-A}(t/s)^{-A}$, cette interprétation mènerait à la conclusion que $\lambda_R/z = A < 1/z$, en contradiction avec l'inégalité de Yeung-Rao-Desai (1.19) pour tous les systèmes à croissance de domaines avec $d \geq 2$. Ainsi, il y a une raison conceptuelle qui infirme l'interprétation de Corberi *et al.* à propos de $\chi_{\rm ZFC}$.
– Deuxièmement, nous décrivons quelques tests quantitatifs dans le modèles d'Ising à deux dimensions où $a = 1/2$ alors que $a_\chi = 1/4$.

1. Un premier essai utilise l'aimantation thermorémanente $M_{\rm TRM}(t,s) = h\chi_{\rm TRM}(t,s)$. La théorie de l'invariance d'échelle locale [Henk10] fixe la forme de la fonction d'échelle $f_M(y)$ [Henk02, Henk03a]

$$f_M(y) = r_0 y^{-\lambda_R/z}{}_2F_1\left(1+a, \frac{\lambda_R}{z} - a; \frac{\lambda_R}{z} - a + 1; y^{-1}\right) \qquad \text{(A17)}$$

où ${}_2F_1$ est une fonction hypergéométrique et r_0 une constante de normalisation non-universelle et la première correction est écrite en terme de $r_1 s^{-\lambda_R/z}(t/s)^{-\lambda_R/z}$, où r_1 est une autre constante non-universelle. En fixant $y = t/s$, on adapte les constantes $r_{0,1}$ aux données, avec soit $a = 1/2$ soit $a = 1/4$. Le résultat est

montré dans la figure A2, où nous avons utilisé les données de $y = 7$ pour le fit initial ($r_0 \simeq 1.76, r_1 \simeq -1.84$ pour $a = 1/2$ et $r_0 \simeq 0.22, r_1 \simeq 0.09$ pour $a = 1/4$). Les lignes en trait plein donne les prédictions de l'invariance d'échelle locale pour la fonction d'échelle. Nous voyons clairement dans Fig. A2a que pour $a = 1/2$ les données sont très bien reproduites par la théorie alors qu'avec $a = 1/4$ il n'en n'est rien. Dans la Fig. A2b, on remarque de grandes déviations entre les prédictions de l'IEL et les données. Des études similaires ont été conduites sur le modèle sphérique [Henk03a] et sur le modèle de Potts en deux dimensions à q-états [Lore07].

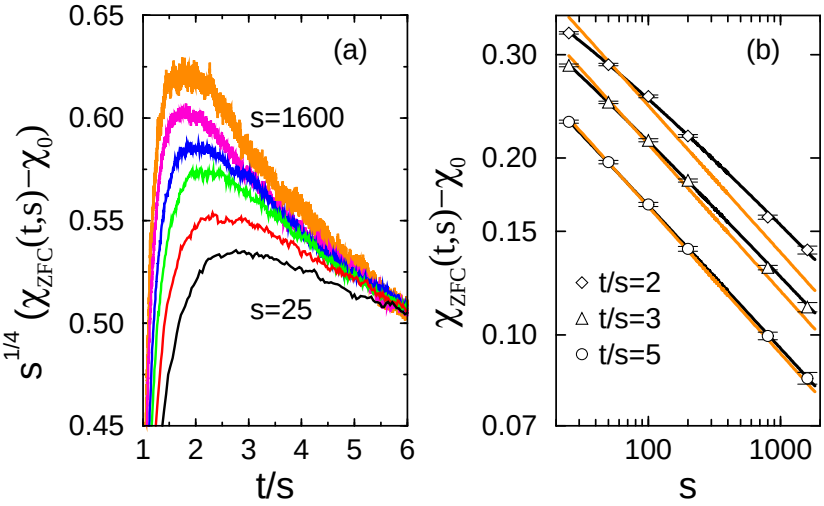


FIGURE A3 – *(a) Comportement d'échelle de $\chi_{\rm ZFC}(t)$ en fonction de t/s dans le modèle d'Ising en deux dimensions à $T = 1.5$, pour différents temps d'attente $s = 25, 50, 100, 200, 800, 1600$ (de bas en haut). (b) Comparaison des données avec les fit $\chi_{\rm ZFC}(t,s) - \chi_0 = a_0 s^{-1/4} + a_1 s^{-1/2}$ (lignes noires) et $\chi_{\rm ZFC}(t,s) - \chi_0 = a_0 s^{-1/4}$ (lignes grises). Les données pour $t/s = 2$ et $t/s = 3$ sont multipliés par un facteur 1.4 et 1.2, respectivement. Tiré de [Henk10].*

2. Nous nous penchons maintenant sur l'analyse de $\chi_{\rm ZFC}(t,s)$. Du fait de la règle de somme (A3), il est suffisant d'analyser le comportement de la susceptibilité FC $\chi_{\rm FC}(t)$.Le comportement d'échelle de $\chi_{\rm ZFC}(t)$ est montré dans la Fig. A3a qui expose clairement qu'à coté du terme FC $\sim t^{-1/4}$, il existe un second terme, pour des valeurs allant jusqu'à $y \approx 5$. L'ordre de ce terme correctif est étudié dans la Fig. A3b, avec pour résultat un ordre $s^{-1/2}$, comme attendu par (A2) avec $a = 1/2$, alors que le comportement d'échelle prôné par Corberi *et al.* [Corb05] ne reproduit pas les données pour $y = 2$ ou $y = 3$.
3. Enfin, nous montrons dans la figure A4 le comportement d'échelle de la réponse intermédiaire (A10). Alors que pour $a = 1/2$ on obtient un bon accord, les données ne sont pas reproduites pour $a = 1/4$. Le bon comportement d'échelle de $\chi_{\rm Int}(t,s)$ a aussi été testé pour le modèle sphérique [Henk04b].

%

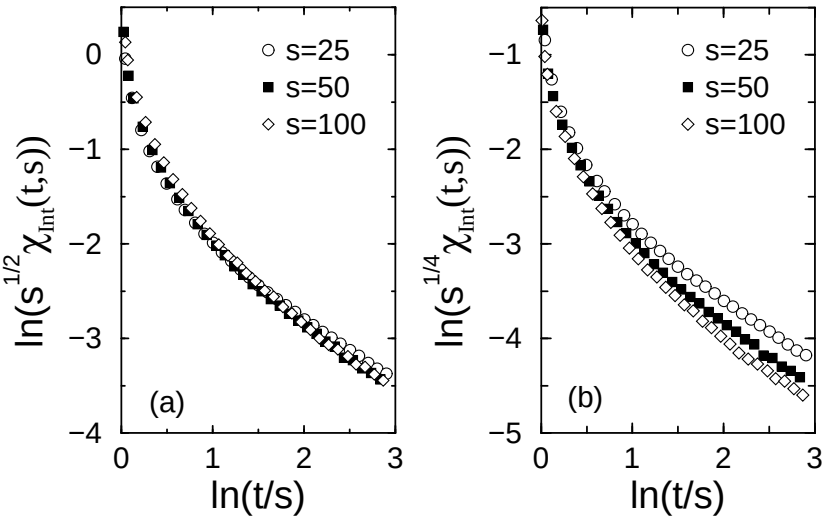


FIGURE A4 – *Comportement d'échelle de $\chi_{\rm Int}(t)$ en fonction de t/s du modèle d'Ising en $2D$ à $T = 1.5$, pour (a) $a = 1/2$ et (b) $a = 1/4$. Tiré de [Henk10].*

4. La valeur de a peut être testé en calculant la fonction de réponse $R(t, s)$ directement [Chat03, Ricc03, Lipp05]. Dans la Fig. A5, nous montrons les données de la fonction d'autoréponse $R(t, s)$ dans le modèle d'Ising bidimensionnel trempé à $T = 1.667 < T_c$. Alors que pour $a = 1/2$ on obtient un très bon accord avec les données, il n'en est rien lorsque l'on suppose que $a = 1/4$.

En conclusion, les données numériques du modèle d'Ising en deux dimensions montrent clairement que le terme dominant dans $\chi_{\rm ZFC}(t, s)$ pour les temps longs n'est pas directement relié au comportement d'échelle de la fonction d'autoréponse. L'exposant a_χ étudié par Corberi *et al.* devrait plutôt être identifié avec l'exposant $A \neq a$, comme défini dans l'eq. (A8).

Valeurs de l'exposant d'autocorrélation en dessous de T_c

Il existe un argument qui produit la limite supérieure $\lambda_{C'} \leq \frac{5}{4}$ dans le modèle d'Ising-Glauber à $2D$, dû à Fisher and Huse [Fish88]. Même s'il requiert un certain nombre de suppositions, les estimations listées dans le tableau A1 respectent cette inégalité, si $\lambda_C = \lambda_{C'}$. Cette annexe s'inspire largement de [Henk10].

B. Analyse des corrélateurs

Nous donnons dans cette appendice les éléments du calcul des corrélateurs qui diffèrent des modèles BPCPD et BPCD [Paes04a, Baum05].
Tout d'abord, nous considérons la fonction de Green $b(t, \mathbf{r})$, voir l'éq. (2.24). Dans le

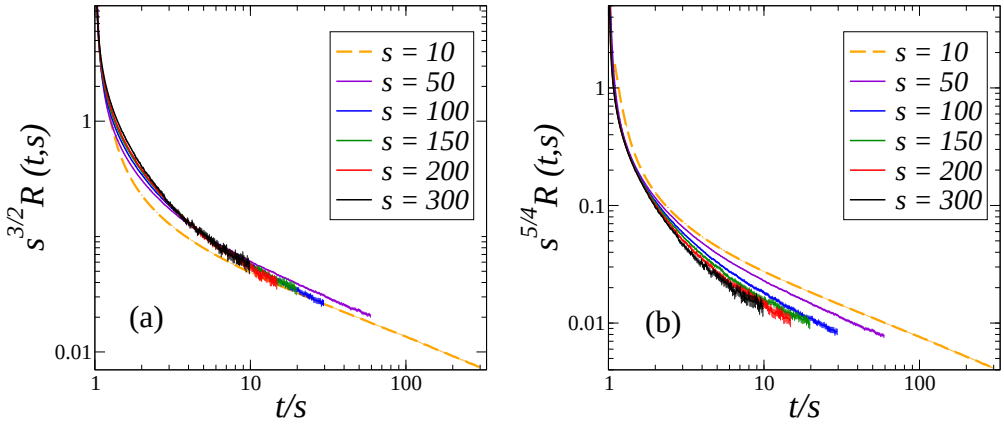


FIGURE A5 – *Comportement d'échelle de la fonction de réponse du modèle d'Ising à deux dimensions à* $T = 1.666$*, avec un exposant de vieillissement supposé égal à (a)* $a = 1/2$ *et (b)* $a = 1/4$*. Les temps d'attente utilisés sont* $s = [10, 50, 100, 150, 200, 300]$*. Tiré de [Henk10].*

model	d	λ_C	a	Refs.
Ising	2	1.25	–	[Fish88]
		$\simeq 1.24$	–	[Huma91]
		1.246(20)	–	[Liu91]
		1.24(2)	1/2	[Lore07]
	3	$\simeq 1.59$	–	[Huse89]
		1.60(2)	0.5	[Henk03b]
Potts-3	2	1.19(3)	0.49	[Lore07]
		1.22(2)	–	[Corb06]
Potts-8	2	1.25(1)	0.51	[Lore07]
XY	3	1.7(1)	1/2	[Abri04b]
spherical	> 2	$d/2$	$d/2 - 1$	[Newm90, Godr00b]
spherical, long-range	$> \sigma$	$d/2$	$d/\sigma - 1$	[Canna01]

TABLE A1 – *Exposant d'autocorrélation* λ_C *et exposant de vieillissement* a *pour un système de spins trempé à* $T < T_c$ *à partir d'un état initial décorrélé et avec un paramère d'ordre non conservé. La partie supérieure contient les modèles de classe S et la partie basse les modèles de classe L. La valeur de l'exposant* $a = 1/2$ *dans le modèle d'Ising* $2D$ *a été discuté précédemment. D'après [Henk10].*

régime de vieillissement ($t, s \gg 1$ et $t - s \gg 1$), seules les petites valeurs de $\mathbf{q}$ contribueront. Ainsi,

$$b(t,\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d}\int_B \mathrm{d}^d\mathbf{q}\, e^{(\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega(\mathbf{q})t)} \overset{t\to\infty}{=} \frac{t^{-d/\eta}}{(2\pi)^d}\int_{\mathbb{R}^d}\mathrm{d}^d\mathbf{q}\, e^{\left(\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}t^{-1/\eta}-\|\mathbf{q}\|^\eta c\right)} \tag{B1}$$

De cette relation, nous pouvons identifier la variable d'échelle $\xi = \mathbf{r}t^{-1/\eta}$ et accédons directement à l'exposant dynamique $z = \eta$.

Pour le calcul explicite du corrélateur dans le modèle BCPL, il nous faut évaluer l'éq. (2.29). Nous trouvons pour l'autocorrélateur

– Cas où $d = \eta$:

$$C(t,s;\mathbf{0}) = \alpha\rho_0 B_0 \int_{\frac{t-s}{2}}^{\frac{t+s}{2}} \mathrm{d}\tau\, \tau = \alpha\rho_0 B_0 \ln\left(\frac{t/s+1}{t/s-1}\right) = f_C(t/s) \qquad \text{(B2)}$$

où $B_0 = \frac{2^{1-d}\Gamma(d/\eta)}{\eta c^{d/\eta}\pi^{d/2}\Gamma(d/2)}$ et nous extrayons directement les exposants $b = 0$ et $\lambda_C = d$.

– Cas où $d \neq \eta$:

$$\begin{aligned} C(t,s;\mathbf{0}) &= \frac{\alpha\rho_0 B_0}{1-d/\eta}\left(\left(\frac{t+s}{2}\right)^{1-d/\eta} - \left(\frac{t-s}{2}\right)^{1-d/\eta}\right) \\ &\simeq \frac{\alpha\rho_0 B_0}{2^{-d/\eta}}\, s^{1-d/\eta}\left(\frac{t}{s}\right)^{-d/\eta} \end{aligned} \qquad \text{(B3)}$$

Dans la seconde ligne de l'équation précédente, nous avons regardé la forme asymptotique obtenue lorsque $t/s \to \infty$. Nous lisons alors les exposants $b = -1 + d/\eta$ et $\lambda_C = d$.

Les fonctions d'échelle dépendant du temps et de l'espace peuvent être trouvées de manière tout à fait similaire au cas local du modèle BCPD. Nous donnons ici seulement les résultats

$$C(t,s;\mathbf{r}) = \alpha\rho_0 B_0\left(C_{-1}\left(\frac{\mathbf{r}}{\left(\frac{t-s}{2}\right)^{1/\eta}}\right)\left(\frac{t-s}{2}\right)^{1-d/\eta} - C_{-1}\left(\frac{\mathbf{r}}{\left(\frac{t+s}{2}\right)^{1/\eta}}\right)\left(\frac{t+s}{2}\right)^{1-d/\eta}\right) \qquad \text{(B4)}$$

où la fonction C_{-1} s'écrit

$$C_{-1}(\mathbf{r}t^{-1/\eta}) = t^{d/\eta}B_0^{-1}\int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}^d\mathbf{q}\ \ e^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, e^{-|\mathbf{q}|^\eta t}\,(c|q|^\eta)^{-1} \qquad \text{(B5)}$$

Pour le BPCPL, en utilisant la transformée de Laplace sur l'éq (2.31) et en appliquant une analyse en tout point similaire à ce qui a été fait par Godrèche et Luck dans [Godr02], nous évaluons $F(t,\mathbf{0})$ dans les différents cas puis nous utilisons l'éq (2.32) pour calculer le corrélateur connexe. Les cas les plus intéressants sont lorsque $\alpha \leq \alpha_C$ et $d > \eta$

1. $\underline{\alpha < \alpha_C \text{ et } d > \eta :}$ ici, $F(t,\mathbf{0}) = \frac{\alpha_C\rho_0^2}{\alpha_C - \alpha}$ et la fonction d'échelle s'écrit

$$f_C(y) = \frac{\alpha\alpha_C\rho_0^2 B_0}{(\alpha-\alpha_C)\left(\frac{2d}{\eta}-2\right)2^{-d/\eta}}\left[(y+1)^{1-d/\eta} - (y-1)^{1-d/\eta}\right] \qquad \text{(B6)}$$

2. $\underline{\alpha = \alpha_C :}$
   Pour $\eta < d < 2\eta$, $F(t,\mathbf{0}) = \frac{\rho_0^2}{\alpha_C B_0 |\Gamma(1-d/\eta)|\Gamma(d/\eta)} t^{d/\eta - 1}$ et la fonction d'échelle prend la forme

$$f_C(y) = \frac{\rho_0^2}{|\Gamma(1-d/\eta)|\Gamma(d/\eta)d/\eta} \left(\frac{y+1}{2}\right)^{-d/\eta} {}_2F_1\left(\frac{d}{\eta}, \frac{d}{\eta}; \frac{d}{\eta}+1; \frac{2}{y+1}\right) \quad \text{(B7)}$$

   Pour $d > 2\eta$

$$f_C(y) = \frac{\rho_0^2 B_0 \eta}{A_2 2^{-d/\eta+2}(d-\eta)\,(d-2\eta)} \left[2(d-2\eta)\,(y-1)^{1-d/\eta} - \eta(y-1)^{2-d/\eta} + \eta(y+1)^{2-d/\eta}\right] \quad \text{(B8)}$$

   où $A_2 = \left(2\int_B \frac{\mathrm{d}^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}(2\omega(\mathbf{q}))^{-2}\right)^{-1}$.

3. $\underline{\alpha > \alpha_C \text{ ou } d < \eta :}$ $F(t,\mathbf{0})$ montre un comportement exponentiel et il n'y a pas de comportement d'échelle dans ces cas.

Il reste les fonctions d'échelle dépendant du temps et de l'espace. Elles peuvent être déterminées à partir de l'éq (2.32). Nous en donnons la forme selon les cas

1. $\underline{\alpha < \alpha_C \text{ et } d > \eta :}$

$$C(t,s;\mathbf{r}) = \alpha\rho_0 B_0 \left(C_{-1}\left(\frac{\mathbf{r}}{\left(\frac{t-s}{2}\right)^{1/\eta}}\right)\left(\frac{t-s}{2}\right)^{1-d/\eta} - C_{-1}\left(\frac{\mathbf{r}}{\left(\frac{t+s}{2}\right)^{1/\eta}}\right)\left(\frac{t+s}{2}\right)^{1-d/\eta}\right) \quad \text{(B9)}$$

2. $\underline{\alpha = \alpha_C :}$
   Pour $\eta < d < 2\eta$

$$C(t,s;\mathbf{r}) = \frac{\rho_0^2}{|\Gamma(1-d/\eta)|\Gamma(d/\eta)} \left(\frac{\frac{t}{s}+1}{2}\right)^{-d/\eta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n\left(\mathbf{r}\left(\frac{t+s}{2}\right)^{-1/\eta}\right)\left(\frac{\frac{t}{s}+1}{2}\right)^n}{n!(n+d/\eta)} \quad \text{(B10)}$$

   où C_n est défini par

$$C_n(\mathbf{r}t^{-1/\eta}) = t^{d/\eta} B_0^{-1} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{d}^d\mathbf{q}\ \ e^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, e^{-|\mathbf{q}|^\eta t}\, (c|q|^\eta)^n \quad \text{(B11)}$$

   Pour $d > 2\eta$

$$C(t,s;\mathbf{r}) = \frac{\rho_0^2}{4A_2} B_0 s^{2-d/\eta} \left(\frac{\frac{t}{s}+1}{2}\right)^{-d/\eta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n\left(\mathbf{r}\left(\frac{t+s}{2}\right)^{-1/\eta}\right)\left(\frac{\frac{t}{s}+1}{2}\right)^n}{n!(n+2)} \quad \text{(B12)}$$

C. Modèle sphérique critique

Nous analysons ici le passage vers le régime de vieillissement dans le modèle sphérique critique. Introduit par Berlin and Kac [Berl52], ses spins $S_\mathbf{x} \in \mathbb{R}$ sont des variables réelles

sur les noeuds d'un réseau hypercubique Λ à d dimensions qui obéissent à la contrainte sphérique

$$\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} S_{\mathbf{x}}^2 = \mathcal{N} \tag{C1}$$

où $\mathcal{N}$ est le nombre total de spins. La dynamique est donnée par une équation stochastique de Langevin

$$\partial_t S(t,\mathbf{r}) = \nabla_{\mathbf{r}}^2 S(t,\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\ln g(t)\right) S(t,\mathbf{r}) + \eta(t,\mathbf{r}) \tag{C2}$$

où $\eta(t,\mathbf{r})$ est un bruit gaussien centré de telle sorte que

$$\langle \eta(t,\mathbf{r})\eta(t',\mathbf{r}')\rangle = 2T_c\delta(t-t')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{C3}$$

et $g(t)$ agit comme un multiplicateur de Lagrange pour forcer la contrainte sphérique. De la référence [Godr00b] nous tirons tous les résultats dont nous avons besoin. Nous utilisons un état initial dont la température est infinie. L'autocorrélation s'écrit alors

$$C(t,s) = \langle S(t,\mathbf{r})S(s,\mathbf{r})\rangle = \frac{1}{\sqrt{g(t)g(s)}}\left(f\left(\frac{t+s}{2}\right) + 2T_c\int_0^s \mathrm{d}t' f\left(\frac{t+s}{2}-t'\right) g(t')\right) \tag{C4}$$

où $g(t)$ est la solution de l'équation intégrale de Volterra

$$g(t) = f(t) + 2T_c\int_0^t \mathrm{d}t' f(t-t')g(t') \tag{C5}$$

et pour des intéractions à courte portée, $f(t)$ s'écrit (I_0 est la fonction de Bessel modifiée)

$$f(t) = \int_B \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{-2\omega(\mathbf{q})t} = \left(e^{-4t}I_0(4t)\right)^d \tag{C6}$$

Finalement, la température critique T_c est donnée par

$$T_c(d) = \left(2\int_0^\infty \mathrm{d}t\left(e^{-4t}I_0(4t)\right)^d\right)^{-1} \tag{C7}$$

Enfin, nous rappelons les fonctions d'échelle de l'autocorrélateur et de l'autoréponse [Godr00b, Godr02]

$$\begin{aligned} f_C(y) &= T_c\frac{4(4\pi)^{-d/2}}{(d-2)(y+1)}y^{1-d/4}(y-1)^{1-d/2} && 2<d<4, \\ f_C(y) &= T_c\frac{2(4\pi)^{-d/2}}{d-2}\left((y-1)^{1-d/2}-(y+1)^{1-d/2}\right) && d>4 \end{aligned} \tag{C8}$$

De la même façon que dans le corps du chapitre deux, nous définissons le temps de passage du régime quasistationnaire vers le régime de vieillissement. Dans la figure C1, nous avons représenté l'évolution de $\tau_{\mathrm{ageing}}(s) \sim s^\zeta$ en fonction du temps d'attente s. La courbe en trait plein montre la solution numérique de l'équation intégrale de Volterra (C5) et la courbe de symboles représente la forme asymptotique (C8). Cette illustration montre bien que $\tau_{\mathrm{ageing}}(s)$ présente qualitativement le même genre de comportement que le BCPL. Les valeurs obtenues pour l'exposant ζ ont été ajoutées au tableau 2.3.

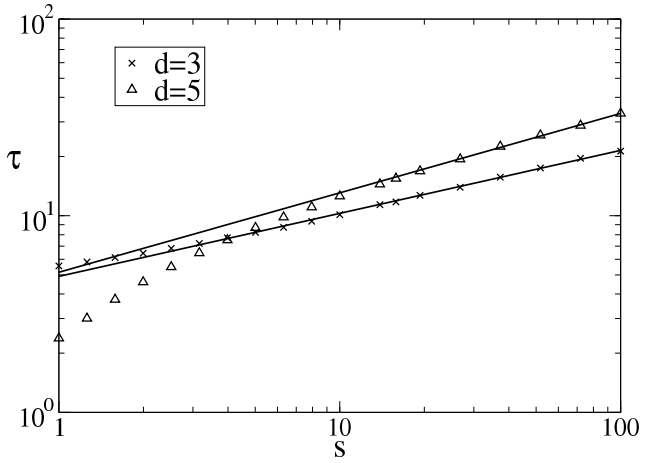


FIGURE C1 – *Temps de passage vers le régime de vieillissement dans le modèle sphérique à la température critique $T = T_c$. Il est représenté en fonction du temps d'attente s pour différentes valeurs de la dimension d. La courbe en trait plein représente la courbe de tendance $\tau_{\rm ageing}(s) = 4.9 \cdot s^{0.32}$ pour $d = 3$ et $\tau_{\rm ageing}(s) = 5.2 \cdot s^{0.40}$ dans le cas où $d = 5$.*

D. Quelques intégrales

Nous donnons ici une liste de quelques identités impliquant le noyau $\mathcal{W}$ et la fonction d'erreur erf

$$\sqrt{2}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'}{\sqrt{\pi}^3}\,\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z') = 0 \tag{D1}$$

$$\sqrt{2}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{\pi}}\iint_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'}{\pi}\,\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z') = \frac{1}{2}\Big[\mathrm{erf}(x) - \mathrm{erf}(x+z)\Big] \tag{D2}$$

$$\sqrt{2}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}y'}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi}\,\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z') = \frac{1}{2}\Big[\mathrm{erf}(y) - \mathrm{erf}(y+z)\Big] \tag{D3}$$

$$\sqrt{2}\iint_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}z'}{\sqrt{\pi}}\,\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z') = \mathrm{erf}(z) \tag{D4}$$

$$\begin{aligned}4\sqrt{2}\iint_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}z'}{\sqrt{\pi}}\,\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(x',y',z') &= \mathrm{erf}(x) - \mathrm{erf}(x+z)\\ &+\mathrm{erf}(y) - \mathrm{erf}(y+z) + \mathrm{erf}(x)\mathrm{erf}(y) - \mathrm{erf}(x+z)\mathrm{erf}(y+z)\end{aligned} \tag{D5}$$

$$\begin{aligned}4\sqrt{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y'}{\sqrt{\pi}}\iint_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi}\,\mathcal{W}_{\ell_0}(x+x'+y'-z', y-y', z+z')&\\ = \mathrm{erfc}(z)\mathrm{erfc}(x+y+z)&\end{aligned} \tag{D6}$$

$$2\sqrt{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y'}{\sqrt{\pi}}\iint_{0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x'\mathrm{d}z'}{\pi}\,\tilde{\mathcal{W}}_{\ell_0}(-x'-y'+z',y',-z') = -\mathrm{erf}(z)\mathrm{erfc}(x+y+z) \tag{D7}$$

Bibliographie

[Abra89] D.B. Abraham89 et P.J. Upton, Phys. Rev. **B39**, 736 (1989)

[Abramowitz] M. Abramovitz and I.A. Stegun, Handbook of mathematical functions, Dover (New York 1965)

[Abri04a] S. Abriet and D. Karevski, Eur. Phys. J. **B37**, 47 (2004)

[Abri04b] S. Abriet and D. Karevski, Eur. Phys. J. **B41**, 79 (2004)

[Agha05] A. Aghamohammadi and M. Khorrami, Eur. Phys. J. **B47** (2005) 583

[Alca94] F.C. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel and V. Rittenberg, Ann. of Phys. **230** (1994) 250

[Alle79] S.M. Allen and J.W. Cahn, Acta. Metall. **27**, 1085 (1979).

[Amar90] J.G. Amar and F. Family, Phys. Rev. **A41**, 3258 (1990).

[Andr69] T. Andrews (1869) *Phil. Trans. Roy. Soc. Lon.* **159** 575-590.

[Andreanov06] A. Andreanov and A. Lefèvre, Europhys. Lett. **76**, 919 (2006).

[Arez07] J.J. Arezon, A.J. Bray, L.F. Cugliandolo and A. Sicilia, Phys. Rev. Lett. **98** (2007), 145701

[Balb95] D. Balboni, P.-A. Rey and M. Droz, Phys. Rev. **E52** (1995) 6220

[Bara09] A.C. Barato and H. Hinrichsen, J. Stat. Mech. P02020 (2009).

[Barg54] V. Bargmann, Ann. of Math. **56**, 1 (1954).

[Bark03] G.T. Barkema and E. Carlon, Phys. Rev. **E68**, 036113 (2003).

[Barr98] A. Barrat, Phys. Rev. **E57**, 3629 (1998)

[Baum05] F. Baumann, M. Henkel, M. Pleimling and J. Richert, J. Phys. A : Math. Gen. **38**, 6623 (2005).

[Baum06a] F. Baumann, S. Stoimenov and M. Henkel, J. Phys. A : Math. Gen. **39**, 4095 (2006).

[Baum07a] F. Baumann, S.B. Dutta and M. Henkel, J. Phys. A : Math. Gen. **40**, 7389 (2007).

[Baum07b] F. Baumann and A. Gambassi, J. Stat. Mech. P01002 (2007).

[Baum07c] F. Baumann and M. Henkel, J. Stat. Mech. P01012 (2007)

[Baum07d] F. Baumann, *Vieillissement et comportement d'échelle dynamique hors équilibre*, thèse Nancy & Erlangen (2007)

[Baum09] F. Baumann and M. Henkel, `en préparation`.

[benA98] D. ben Avraham, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 4756

[benA90] D. ben Avraham, M. Burschka and C.R. Doering, J. Stat. Phys. **60** (1990) 695

[benA00] D. ben Avraham and S. Havlin, *Diffusion and reactions in fractals and disordered systems*, Cambridge University Press, (Cambridge 2000)

[Berc09] B. Berche, M. Henkel et R. Kenna *cond-mat/0905.1886.*

[Berl52] T.H. Berlin and M. Kac, Phys. Rev. **86**, 821 (1952)

[Bert01] L. Berthier, P.C.W. Holdsworth and M. Selitto, J. Phys. A : Math. Gen. **34**, 1805 (2001)

[Bouch00] J.P. Bouchaud *Ageing in glassy systems : experiments, models and open questions*, dans M.E. Cates et M.R. Evans, editeurs, *Soft and fragile matter*, Bristol, IOP Press (2000)

[Bram80] M. Bramson and D. Griffeath, Ann. of Probability **8** (1980) 183

[Bray90] A.J. Bray, J. Phys. A : Math. Gen. **22** L67 (1990).

[Bray91] A.J. Bray, K. Humayun and T.J. Newman, Phys. Rev. **B43**, 3699 (1991)

[Bray94] A.J. Bray, Adv. Phys. **43**, 357 (1994).

[Bray00] A.J. Bray, *Coarsening dynamics of non-equilibrium phase-transitions*, dans M.E. Cates et M.R. Evans, editeurs, *Soft and fragile matter*, Bristol, IOP Press (2000)

[Brus83] S.G. Brush, *Statistical Physics and the Atomic Theory of Matter*, Princeton University Press, (Princeton 1983)

[Burs89] M.A. Burschka, C.R. Doering and D. ben Avraham, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 700 ; C.R. Doering and M.A. Burschka, Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 245

[Cagn22] C. Cagniard de la Tour (1822) *Ann. Chim. Phys.* **21** 127-132 ; *Supplément, ibid.*, 178-182.

[Cala02] P. Calabrese et A. Gambassi, Phys. Rev. **B66**, 212407 (2002)

[Cala02b] P. Calabrese et A. Gambassi, Phys. Rev.**E66**, 066101 (2002)

[Cala05] P. Calabrese et A. Gambassi, J. Phys. A : Math. Gen. **38**, R133 (2005)

[Cano68] J. Canosa, Journal of Mathematical Physics **10**, 10 (1968)

[Canna01] S.A. Cannas, D.A. Stariolo and F.A. Tamarit, Physica **A294**, 362 (2001)

[Card96] J.L. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Mechanics*, Cambridge University Press, (Cambridge, 1996).

[Cham06] C. Chamon, L.F. Cugliandolo and H. Yoshino, J. Stat. Mech. **P01006** (2006).

[Chat03] C. Chatelain, J. Phys. A : Math. Gen. **36**, 10739 (2003)

[Chat11] C. Chatelain, T. Tomé and M.J. de Oliveira, J. Stat. Mech. (2011) at press, `arxiv:1012.3360`

[Coni89] A. Coniglio and M. Zannetti, Europhys. Lett. **10**, 575 (1989).

[Corb02] F. Corberi, E. Lippiello and M. Zannetti, Phys. Rev. **E65**, 046136 (2002)

[Corb03] F. Corberi, E. Lippiello and M. Zannetti, Phys. Rev. **E68**, 046131 (2003)

[Corb05] F. Corberi, E. Lippiello and M. Zannetti, Phys. Rev. **E72**, 028103 (2005)

[Corb06] F. Corberi, E. Lippiello and M. Zannetti, Phys. Rev. **E74**, 041106 (2006)

[Cris03] A. Crisanti and F. Ritort, J. Phys. **A36** R181 (2003).

[Cipe00] L. Cipelletti, S. Manley, R.C. Ball, D.A. Weitz, Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 2275.

[Cox85] J. T. Cox et D. Griffeath, *The Annals of Probability*, **13**, 4, 1108 (1985).

[Cugl93] L.F. Cugliandolo and J. Kurchan, Phys. Rev. Lett. **71**, 173 (1993)

[Cugl94] L.F. Cugliandolo, J. Kurchan and G. Parisi, J. Physique **I4** (1994) 1641

[Cugl02] L.F. Cugliandolo, dans *Slow Relaxation and non equilibrium dynamics in condensed matter*, Les Houches Session 77 July 2002, J-L Barrat, J Dalibard, J Kurchan, M V Feigel'man eds, Springer(Heidelberg 2003) (`cond-mat/0210312`).

[Dahm95] S.R. Dahmen, J. Phys. **A28** (1995) 905

[Datta87] S. Dattagupta, *Relaxation phenomena in condensed matter physics*, Academic Press (London 1987).

[deDo76] C. de Dominicis, J. Physique Colloque **37**, 247 (1976).

[Delo02] O. Deloubrière and F. van Wijland, Phys. Rev. **E65**, 0461041 (2002).

[Derr91] B. Derrida, C. Godr'eche and I. Yekutieli, Phys. Rev. **A44**, 6241 (1991).

[Doer92] C.R. Doering, Physica **A188**, 386 (1992).

[Doi76] M. Doi, J. Phys. A : Math. Gen. **9**, 1465 and 1479 (1976).

[Dura09] X. Durang and M. Henkel, J. Phys. **A42** (2009) 395004.

[Dura10] X. Durang, J.-Y. Fortin, D. Del Biondo, M. Henkel and J. Richert, J. Stat. Mech. (2010) P04002

[Dutta08] S.B. Dutta, J. Phys. A : Math. Theor. **41**, 395002, (2008).

[Ebbi08] M. Ebbinghaus, H. Grandclaude and M. Henkel, Eur. Phys. J. **B63**, 81 (2008)

[Eins56] A. Einstein, *Investigations on the theory of the Brownian movements*, Dover, 1956, réédition

[Elga08] V. Elgart and M. Pleimling, Phys. Rev. **E77**, 051134 (2008).

[Enss04] T. Enss, M. Henkel, A. Picone and U. Schollwöck, J. Phys. A : Math. Gen. **37**, 10479 (2004).

[Fish88] D.S. Fisher and D.A. Huse, Phys. Rev. **B38**, 373 (1998)

[Godr00a] C. Godrèche et J.M. Luck, J. Cond. Math. Gen. **33**, 9141 (2000)

[Godr00b] C. Godrèche et J.M. Luck, J. Phys. A : Math. Gen. **33**, 9141 (2000).

[Godr02] C. Godrèche et J.M. Luck, J. Phys. : Condens. Matter **14**, 1589 (2002).

[Godr03] C. Godrèche, F. Krzakala and F. Ricci-Tersenghi, J. Stat. Mech. P04007 (2004)

[Gryn95] M.D. Grynberg and R.B. Stinchcombe, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 1242 ; Phys. Rev. **E52** (1995) 6013

[Henk95] M. Henkel, E. Orlandini and G.M. Schütz, J. Phys. **A28** (1995) 6335

[Henk97] M. Henkel, E. Orlandini and J. Santos, Ann. of Phys. **259** (1997) 163

[Henk01] M. Henkel and H. Hinrichsen, J. Phys. **A34** (2001) 1561

[Henk02] M. Henkel, Nucl. Phys. **B641**, 405 (2002).

[Henk03a] M. Henkel, M. Paessens and M. Pleimling, Europhys. Lett. **62**, 644 (2003)

[Henk03b] M. Henkel et M. Pleimling, Phys. Rev. **E68**, 065101R (2003)

[Henk04] M. Henkel and H. Hinrichsen, J. Phys. A : Math. Gen. **37**, R117 (2004).

[Henk04b] M. Henkel, M. Paessens and M. Pleimling, Phys. Rev. **E69**, 056109 (2004).

[Henk05] M. Henkel et M. Pleimling, Phys. Rev. **E72**, 028104 (2005)

[Henk06] M. Henkel and M. Pleimling, Europhys. Lett. **76**, 561 (2006).

[Henk07] M. Henkel, J. Phys. : Condens. Matter **19**, 065101 (2007).

[Henk07b] M. Henkel and F. Baumann, J. Stat. Mech. P07015 (2007).

[Henk08] M. Henkel, H. Hinrichsen and S. Lübeck, *Non-equilibrium phase transitions*, vol. 1, Springer (Heidelberg 2008).

[Henk09a] M. Henkel, H. Hinrichsen and S. Lübeck, *Non-equilibrium phase transitions Vol. 1 : absorbing phase transitions*, Springer (Heidelberg 2009)

[Henk10] M. Henkel and M. Pleimling, *Non-equilibrium phase transitions Vol. 2 : ageing and dynamical scaling far from equilibrium*, Springer (Heidelberg 2010)

[Hinr99] H. Hinrichsen and M. Howard, Eur. Phys. J. **B7**, 635 (1999).

[Hinr06] H. Hinrichsen, Physica **A361**, 462 (2006).

[Heri02] D. Hérisson et M. Ocio, Phys. Rev. Lett. **88**, 257201 (2002)

[Heri04] D. Hérisson et M. Ocio, Eur. Phys. J. **B40**, 283 (2004)

[Houch02] B. Houchmandzadeh, Phys. Rev. **E66** (2002) 052902

[Howa97] M. Howard and U.C. Täuber, J. Phys. A : Math. Gen. **30**, 7721 (1997).

[Huan87] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley (New-York 1987)

[Huma91] K. Humayun et A.J. Bray, J. Phys. A : Math. Gen. **24**, 1915 (1991)

[Huse86] D.A. Huse, Phys. Rev. **B34**, 7845 (1986)

[Huse89] D.A. Huse, Phys. Rev. **B40**, 304 (1989)

[Jans92] H.-K. Janssen, in G. Györgyi et *al.* (eds) *From Phase transitions to Chaos*, World Scientific (Singapour 1992), p. 68.

[Jans99] H.-K. Janssen, K. Oerding, F. van Wijland and H. Hilhorst, Eur. Phys. J. **B7**, 137 (1999).

[Jans04] H.-K. Janssen, F. van Wijland, O. Deloubrière and U.C. Täuber, Phys. Rev. **E70**, 056114 (2004).

[Kada75] L.P. Kadanoff dans C. Domb and M.S. Green (eds) *Phase transitions and critical phenomena*, Vol. 5A, New-York (1975).

[Kim00] B. Kim and A. Latz, Europhys. Lett. **53**, 660 (2001)

[Khor03] M. Khorrami, A. Aghamohammadi and M. Alimohammadi, J. Phys. **A36** (2003) 345

[Kock03] J. Kockelkoren and H. Chaté, Phys. Rev. Lett. **90**, 125701 (2003).

[Kope90] R. Kopelman, C.S. Li and Z.-Y. Shi, J. Luminescence **45** (1990) 40

[Krap10] P.L Krapivsky, S. Redner and E. Ben-Naim, *A Kinetic View of Statistical Physics*, Cambridge University Press (2010)

[Kreb95] K. Krebs, M.P. Pfannmüller, B. Wehefritz and H. Hinrichsen, J. Stat. Phys. **78** (1995) 1429

[Kroo93] R. Kroon, H. Fleurent and R. Sprik, Phys. Rev. **E47** (1993) 2462

[Kubo92] R. Kubo, M. Toda et N. Hashitume, *Statistical Physics II. Non equilibrium Statistical Mechanics*, Springer-Verlag (1992)

[Kurch01] J. Kurchan, Aspects théoriques du vieillissement, dans P. Lemoine (éd), *Vieillissement des métaux, céramiques et matériaux granulaires*, EDP Sciences (Les Ulis 2001) ; p. 1

[Lee94] B.P. Lee, J. Phys. **A27** (1994) 2633

[Lei07] X.W. Lei and B. Zheng, Phys. Rev. **E75**, 040104R (2007)

[Lipp05] E. Lippiello, F. Corberi and M. Zannetti, Phys. Rev. **E71**, 036104 (2005)

[Liu91] F. Liu and G.F. Mazenko, Phys. Rev. **44**, 9185 (1991)

[Lore07] E. Lorenz and W. Janke, Europhys. Lett. **77**, 10003 (2007)

[Lube] I. Lubashevsky, R. Friedrich and A. Heuer `arXiv:0905.4472`

[Lush86] A.A. Lushnikov, Sov. Phys. JETP **64** (1986) 811 and Phys. Lett. **A120** (1987) 135

[Marr99] J. Marro and R. Dickman, *Non-equilibrium phase transitions in lattice models*, Cambridge University Press (Cambridge 1999)

[Mass00] Th. Masser and D. ben-Avraham, Phys. Lett. **A275** (2000) 382

[Mayer07] P. Mayer and P. Sollich, J. Phys. **A40** (2007) 5823

[Metz00] R. Metzler and J.Klafter, Phys.Rep **339**, 1 (2000)

[Mobi01] M. Mobilia and P.-A. Bares, Phys. Rev. **E64** (2001) 066123

[Mobi02] M. Mobilia, Phys. Rev. **E65** (2002) 046127

[Muna06a] R. Munasinghe, R. Rajesh, R. Tribe and O. Zaboronski, Comm. Math. Phys. **268** (2006) 717

[Muna06b] R. Munasinghe, R. Rajesh and O. Zaboronski, Phys. Rev. **E73** (2006) 051103

[Newm90] T.J. Newman and A.J. Bray, J. Phys. A : Math. Gen. **23**, 4491 (1990)

[Nyqu28] H. Nyquist, *Thermal agitation of electric charge in conductors*, Phys. Rev. **32**, 110-113 (1928)

[Odor06] G. Ódor, J. Stat. Mech (2006) L11002

[Odor08] G. Ódor, *Universality in non-equilibrim lattice systems*, World Scientific (Singapour 2008)

[Odor10] G. Ódor, private communication (2010)

[Paes04a] M. Paessens and G.M. Schütz, J. Phys. A : Math. Gen. **37**, 4709 (2004).

[Paes04b] M. Paessens, `cond-mat/0406598`.

[Pari88] G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley (Massachussets 1988)

[Park05a] S.-C. Park and H. Park, Phys. Rev. **E71**, 016137 (2005).

[Park05b] S.-C. Park and H. Park,Phys. Rev. Lett. **94**, 065701 (2005).

[Paul99] W. Paul and J. Baschnagel, *Stochastic processes : from physics to finance*, Springer (Heidelberg 1999).

[Pesch94] I. Peschel, V. Rittenberg and U. Schulze, Nucl. Phys. **B430**, 633 (1994).

[Pico02] A. Picone and M. Henkel, J. Phys. A : Math. Gen. **35**, 5575 (2002).

[Pico04] A. Picone and M. Henkel, Nucl. Phys. **B688**, 217 (2004).

[Pott07] N. Pottier, *Physique statistique hors d'équilibre : processus irréversibles linéraires*, EDP Sciences (2007)

[Pras89] J. Prasad and R. Kopelman, Chem. Phys. Lett. **157** (1989) 535

[Priv96] V. Privman (Ed.), *Nonequilibrium statistical mechanics in one dimension*, Cambridge University Press, (Cambridge 1996)

[Prud86] A.P. Prudnikov, Yu.A. Brychkov and O.I. Marichev, *Integrals and series*, vol. 2, Gordon and Breach (New York 1986)

[Rama04] J.J. Ramasco, M. Henkel, M.A. Santos and C. da Silva Santos, J. Phys. **A37** (2004) 10497

[Racz85] Z. Rácz, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1707

[Rey99] P.-A. Rey and J.L. Cardy, J. Phys. **A32** (1999) 1585

[Ricc03] F. Ricci-Tersenghi, Phys. Rev. **E68**, 065104R (2003)

[Rosh05] F. Roshani and M. Khorrami, J. Phys. Cond. Matt. **17** (2005) S1269

[Rute95] A.D. Rutenberg and A.J. Bray, Phys. Rev. **E51**, R1641 (1995).

[Russ06] R.M. Russo, E.J. Mele, C.L. Kane, I.V. Rubtsov, M.J. Therien and D.E. Luzzi, Phys. Rev. **B74** (2006) 041405(R)

[Samk93] S.G. Samko, A.A. Kilbas and O.I. Marichev, *Fractional integrals and derivatives : theory and applications*, Gordon and Breach (New York 1993)

[Sawy78] S. Sawyer et J. Fleischman, Proc. Nat. Acad. Sci., U.S.A. **76** 872 (1978)

[Sche03] G. Schehr and P. Le Doussal, Phys. Rev. **E68**, 046101 (2003).

[Schu00] G.M. Schütz, in C. Domb and J.L. Lebowitz (Eds.) *Phase transitions and Critical Phenomena*, Vol 19, p.1, Academic Presse (New York 2000)

[Shle95] M.F. Shlesinger, G.M. Zaslavsky and U. Frisch (éd), *Lévy flights and related topics in physics*, Springer (Heidelberg 1995).

[Szol04] A. Szolnoki, cond-mat/0408114.

[Spou88] J.L. Spouge, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 871 ; erratum **60** (1988) 1885

[Sriv09] A. Srivastava and J. Kuno, Phys. Rev. **B79** (2009) 205407

[Stru78] L.C.E. Struik, *Physical ageing in amorphous polymers and other materials*, Elsevier (Amsterdam 1978).

[Take09] K.A. Takeuchi, M. Kuroda, H. Chaté and M. Sano, Phys. Rev. Lett. **99**, 234503 (2009) – err. **103**, 089901(E) (2009) ; and Phys. Rev. **E80**, 051116 (2009).

[Thom88] C.J. Thompson, *Classical equilibrium statistical mechanics*, Elsevier (Amsterdam 1988)

[Torn83] D.C. Torney and H.M. McConnell, J. Phys. Chem. **87** (1983) 1941

[Tous83] D. Toussaint and F. Wilczek, J. Chem. Phys. **78** (1983) 2642

[Vinc07] E. Vincent, in M. Henkel, M. Pleimling and R. Sanctuary (eds) *Ageing and the glass transition*, Springer (Heidelberg 2007), p. 7.

[Walt09] J.C. Walter, *Etude numérique des corrections d'échelle au comportement dominant à l'équilibre et hors de l'équilibre*, thèse Nancy (2009)

[Yeun96] C. Yeung, M. Rao and R.C. Desai, Phys. Rev. **E53** 3073 (1996)

[Youn01] W.R. Young, A.J. Roberts and G. Stuhne, Nature **412**, 328 (2001).

[Zinn96] J. Zinn-Justin, *Quantum field theory and critical phenomena*, 3rd edition, Oxford University Press (Oxford 1996).

[Zipp00] W. Zippold, R. Kühn and H. Horner, Eur. Phys. J. **B13**, 531 (2000).