



Influence des effets de taille finie sur la propagation d'un front & Distribution de l'énergie libre d'un polymère dirigé en milieu aléatoire

Éric Brunet

► To cite this version:

Éric Brunet. Influence des effets de taille finie sur la propagation d'un front & Distribution de l'énergie libre d'un polymère dirigé en milieu aléatoire. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2000. Français. NNT : . tel-00000922

HAL Id: tel-00000922

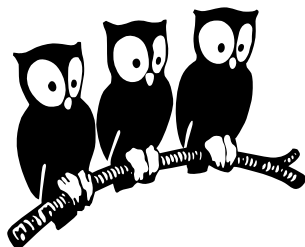
<https://theses.hal.science/tel-00000922>

Submitted on 7 Dec 2001

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

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

ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE
Département de physique



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VII
spécialité : physique théorique

présentée par

Éric Brunet

pour obtenir le grade de docteur de l'université Paris VII

Sujets de la thèse

Influence des effets de taille finie sur la
propagation d'un front
Distribution de l'énergie libre d'un polymère
dirigé en milieu aléatoire

Soutenue le 15 juin 2000

Composition du jury

M. Bernard Derrida	directeur de thèse
M. Henk Hilhorst	
M. Franck Laloë	
M. Pierre Le Doussal	rapporteur
M. Olivier Martin	
M. Henri Orland	rapporteur
Mme Noëlle Pottier	

Table des matières

Avant-propos

vii

I Influence des effets de taille finie sur la propagation d'un front 1

1	Introduction et revue des phénomènes de propagation de fronts	5
1.1	Présentation des fronts	5
1.2	Propriétés des solutions de l'équation de Fisher-Kolmogorov .	7
1.2.1	Vitesse et forme des fronts en translation uniforme . .	7
1.2.2	Analyse linéaire	10
1.2.3	Stabilité des solutions	11
1.2.4	Sélection de la vitesse	13
1.2.5	Mise en place du front	14
1.3	Quelques généralisations de l'équation de Fisher-Kolmogorov .	15
1.3.1	Propagation d'un front dans un milieu instable	15
1.3.2	Autres types de fronts se propageant dans un milieu instable	18
1.3.3	Propagation d'un front dans un milieu stable	20
1.4	Autres problèmes de sélection	21
2	Modèle microscopique de front	25
2.1	Définition du modèle	25
2.2	Champ moyen du modèle microscopique	27
2.3	Simulations numériques	30
2.3.1	Simulations directes	30
2.3.2	Simulations parallèles	32
2.3.3	Mesure de la constante de diffusion	33

3	Corrections logarithmiques	35
3.1	Introduction d'un <i>cut-off</i> dans la queue du front	35
3.2	Résolution du modèle avec <i>cut-off</i>	37
3.3	Simulations numériques	40
3.4	Comparaison avec le modèle microscopique	43
4	Effet des conditions initiales sur la position d'un front d'onde	45
4.1	Introduction de la forme d'échelle	45
5	Conclusion de la première partie	49
 II Distribution de l'énergie libre d'un polymère dirigé en milieu aléatoire		53
6	Introduction des problèmes de polymères dirigés et revue des résultats connus	57
6.1	Présentation des polymères dirigés	57
6.2	Définitions du modèle et des quantités d'intérêt	59
6.2.1	Réseau et polymères	59
6.2.2	Énergie et fonction de partition	59
6.2.3	Polymères dirigés dans un milieu continu	62
6.3	Brève revue des résultats connus sur les polymères dirigés . . .	64
6.3.1	Exposants critiques et distribution des grandes déviations de l'énergie libre	64
6.3.2	L'équation KPZ	65
6.3.3	Le champ moyen	66
6.3.4	La méthode des répliques	68
6.3.5	L' <i>Ansatz</i> de Bethe	70
6.3.6	La fonction de grandes déviations	75
6.3.7	Quelques variantes du modèle	77
7	Limite continue des polymères dirigés. Équivalence avec un problème quantique <i>via</i> la méthode des répliques	79
7.1	Relation vérifiée par $\langle Z^n(\tau) \rangle$ quand n est entier	80
7.2	Équivalence avec le modèle quantique	83
7.2.1	Résumé de la limite continue et généralisation	87
8	Résolution du problème quantique dans le cas d'une dimension spatiale périodique	89
8.1	Énergie libre d'un polymère dirigé sur un cylindre	90
8.2	Écriture d'une équation intégrale	94

8.3	Développement à c petit	96
8.4	Développement à n petit	99
8.5	Digression sur les séries divergentes	101
8.6	Régime d'échelle de la fonction $B(u)$	103
8.7	Cas d'un domaine fini et fermé	107
9	Simulations numériques de polymères dirigés en milieu aléatoire	111
9.1	Mesures numériques des cumulants d'une variable aléatoire . .	111
9.2	Simulations de polymères dirigés sur un cylindre	114
9.3	Simulations de polymères dirigés sur une bande	117
10	Deux méthodes pour obtenir directement un développement limité de l'énergie libre d'un polymère dirigé	121
10.1	Calcul direct perturbatif en β des cumulants de $\log Z(\tau)$. . .	121
10.2	Autre méthode pour calculer un développement en β des cumulants de $\log Z(\tau)$	123
11	Conclusion de la seconde partie	127
	Appendice	133
	Reproduction des articles publiés	135
	<i>Shift in the velocity of a front due to a cutoff</i>	137
	<i>Microscopic models of traveling wave equations</i>	145
	<i>Ground state energy of a non-integer number of particles with δ attractive interactions</i>	151
	<i>Probability distribution of a directed polymer in a random medium</i> .	161
	Bibliographie	174

Avant-propos

Ce mémoire est l'aboutissement de ma thèse de doctorat effectuée sous la direction de Bernard Derrida au Laboratoire de Physique Statistique à Paris. Il est organisé en deux grandes parties indépendantes qui traitent de deux sujets différents ; la première partie (pages 1 à 52) est consacrée à l'influence des détails microscopiques sur la propagation des fronts d'onde dans un milieu instable^{1,2} et la deuxième (pages 53 à 132) au calcul de la distribution de l'énergie libre d'un polymère dirigé en milieu aléatoire^{3,4}. On peut établir quelques ponts entre ces deux sujets (par exemple, la théorie de champ moyen des polymères dirigés peut se reformuler en terme de la propagation d'un front d'onde), mais les deux parties sont suffisamment indépendantes pour qu'il n'y ait pas d'introduction et de conclusion communes, mais plutôt une introduction et une conclusion par partie.

Avril 2000, Éric Brunet

Première partie

Influence des effets de taille finie sur la propagation d'un front

Cette partie est consacrée à l'étude de la vitesse d'un front d'onde se propageant dans un milieu instable quand on prend en compte le bruit et les effets de taille finie. Dans ce but, nous avons étudié un modèle stochastique faisant intervenir N particules et qui est décrit quand N devient très grand par l'équation déterministe d'un front se propageant dans un milieu instable. Cette équation a une famille continue de solutions en translation uniforme avec des vitesses de propagation différentes, mais pour une condition initiale localisée c'est la vitesse dite marginalement stable v^* qui est sélectionnée. Nous avons observé numériquement que le front décrit par le système fini à N particules se déplace à une vitesse v_N proche de v^* et qui en diffère par une quantité d'ordre $1/\log^2 N$.

Un des principaux résultats de ce travail est que cette sélection de la vitesse v^* et cette correction logarithmique peuvent s'expliquer par la présence d'un *cut-off* d'ordre $1/N$ dans la queue du front due à l'aspect discret du modèle fini : en effet, la concentration de particules ne peut pas prendre de valeur non-nulle inférieure à $1/N$. Nous avons par conséquent étudié l'effet d'un *cut-off* ϵ dans un front se propageant dans un milieu instable et, en montrant que la forme du front pouvait s'écrire à l'aide d'une fonction d'échelle, nous avons pu déterminer la vitesse de propagation d'un tel front^{1,2}. En posant $\epsilon = 1/N$, on retrouve que la correction de la vitesse est en $1/\log^2 N$ avec un préfacteur qui est du même ordre de grandeur que pour le problème stochastique à N particules.

Le premier chapitre de cette partie présente les équations décrivant la propagation d'un front et fait une rapide revue des techniques employées et des résultats connus. En particulier, la distinction entre les fronts *pushed* et les fronts *pulled* est rappelée ainsi que les mécanismes de sélection de la vitesse de propagation.

Le reste de cette partie constitue la contribution originale de ce travail. Le deuxième chapitre introduit le modèle microscopique que nous avons étudié et présente les résultats de simulations numériques. Le chapitre 3 explique comment on peut calculer la vitesse de propagation d'un front quand on applique un *cut-off* dans sa queue^{1,2} et montre que ces résultats peuvent s'appliquer au modèle microscopique. Enfin, le chapitre 4 montre comment la méthode employée au chapitre 3 peut être utilisée pour retrouver simplement les résultats de Bramson^{5,6} sur la manière dont la vitesse de propagation aux temps longs converge vers sa valeur asymptotique en fonction des conditions initiales.

Chapitre 1

Introduction et revue des phénomènes de propagation de fronts

1.1 Présentation des fronts

De nombreux phénomènes peuvent être décrits par la propagation d'un front qui sépare deux domaines différents. Pour prendre un exemple simple, tournons-nous vers la biologie et considérons une population d'individus uniformément répartis dans leur habitat. Si à un point donné une mutation favorable se produit, on s'attend à ce que localement la proportion d'individus ayant le nouveau gène augmente et finisse par devenir majoritaire. De plus, ce gène favorable se diffuse au fil des générations grâce aux contacts entre individus voisins et commence à se répandre à partir du point où la mutation a eu lieu. Après une période transitoire un front se forme entre une zone autour de la mutation originale où toute la population a le nouveau gène et une zone plus éloignée où l'ancien gène reste prédominant. Dans le front lui-même, les deux gènes cohabitent. Ce front se déplace sans s'étaler⁷ à une vitesse qui n'a *a priori* rien à voir avec la vitesse des déplacements des individus, jusqu'à ce que le nouveau gène soit prédominant dans tout l'habitat.

Fisher⁷ et Kolmogorov, Petrovsky & Piscounov⁸ ont simultanément présenté en 1937 un modèle pour décrire la propagation de gènes favorables dans une population et la formation d'un front entre deux régions. Leur modèle est décrit en une dimension par l'équation

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + h - h^3, \quad (1.1)$$

où $h(x, t)$ représente la proportion d'individus ayant le gène favorable au point x et à l'instant t . Dans cette équation, le laplacien $\partial^2 h / \partial x^2$ est responsable de la diffusion du gène et le terme $h - h^3$ garantit que dès que le nouveau gène est présent ($h > 0$), sa proportion augmente jusqu'à atteindre $h = 1$. (Dans [7], Fisher utilise plutôt un terme d'interaction de la forme $h - h^2$, mais les solutions de son équation ont exactement les mêmes propriétés que celles de (1.1).)

En plus de ses applications à la biologie, l'équation de Fisher-Kolmogorov et plusieurs de ses variantes ont également beaucoup été utilisées en physique et en chimie pour décrire la propagation de fronts dans des modèles de combustion, de réaction-diffusion, de solidification, de supraconducteurs et même dans le groupe de renormalisation⁹⁻¹⁸. Tous ces modèles qui utilisent l'équation de Fisher-Kolmogorov sont bien sûr des idéalizations de phénomènes réels; par exemple, dans le modèle introduit par Fisher, on s'attend à ce que la diffusion du nouveau gène soit un phénomène aléatoire, que la densité d'individus varie avec la position et le temps, *etc.* De plus, dans l'équation (1.1), la proportion $h(x, t)$ est un paramètre continu, ce qui revient à supposer que la densité de la population est infinie. L'équation de Fisher-Kolmogorov n'est donc en un sens que la limite à grande échelle du phénomène réel, mais on peut s'attendre pour une population importante à ce qu'elle permette effectivement de décrire le front d'avancée du gène favorable. Un des buts de cette partie (chapitre 3) est de montrer qu'en fait un système fini ne tend que très lentement vers sa limite à grande échelle décrite par une équation de type (1.1).

Dans un modèle de type Fisher-Kolmogorov, un des problèmes les plus importants est bien sûr de déterminer la vitesse de propagation du front, mais on peut aussi s'intéresser à la largeur et à la forme de ce front, au temps qu'il faut pour qu'il atteigne sa forme et sa vitesse asymptotiques à partir d'une condition initiale, *etc.* L'aspect le plus frappant de l'équation (1.1) est que la vitesse de propagation du front (qui, rappelons-le, n'a rien à voir avec le mouvement des individus dans le modèle de génétique ou celui des particules de gaz dans un modèle de combustion) *n'est pas fixée* par l'équation mais dépend de la condition initiale. La question se pose alors de savoir quelles sont les vitesses de propagation qui correspondent à des fronts stables et quelle vitesse est effectivement *sélectionnée* par un système physique. Un des résultats de ce travail est que si l'on prend en compte les effets microscopiques, alors il n'y a plus qu'une seule vitesse de propagation possible.

La section 1.2 de ce chapitre d'introduction fait une rapide revue des propriétés de l'équation de Fisher-Kolmogorov et du problème de la sélection de la vitesse. Dans la section 1.3, plusieurs généralisations de cette équation sont présentées; en particulier, la distinction entre les fronts *pushed* et

pulled est introduite^{12,19}. Enfin, la section 1.4 donne quelques exemples de modèles différents où il existe plusieurs solutions stables dont une seule est sélectionnée.

1.2 Propriétés des solutions de l'équation de Fisher-Kolmogorov

Cette section est consacrée à la présentation des propriétés principales de l'équation de Fisher-Kolmogorov (1.1). L'un des intérêts de cette équation est qu'elle est générique : la majorité des propriétés présentées dans cette section peut s'appliquer à d'autres équations décrivant la propagation d'un front dans un milieu instable (la section 1.3 donne quelques unes de ces généralisations). Pour une étude plus approfondie de l'équation de Fisher-Kolmogorov et de ses généralisations, on peut se reporter aux travaux de Ben-Jacob, Dee, Kramer et Langer^{20,21} et aux revues de Ebert et van Saarloos^{17,22}.

1.2.1 Vitesse et forme des fronts en translation uniforme

L'équation (1.1) admet trois solutions uniformes et constantes : deux stables ($h(x, t) = 1$ et $h(x, t) = -1$) et une instable ($h(x, t) = 0$). La solution $h(x, t) = -1$ n'est cependant pas physique si l'on suppose que h est une concentration. On s'intéresse aux propriétés d'un front se propageant depuis le milieu stable $h(x, t) = 1$ vers le milieu instable $h(x, t) = 0$. Contrairement aux solutions de l'équation de la chaleur, il existe des solutions de (1.1) qui décrivent un front en translation uniforme

$$h(x, t) = F_v(x - vt) \quad (1.2)$$

pour les conditions aux limites

$$\begin{cases} \lim_{z \rightarrow -\infty} F_v(z) = 1, \\ \lim_{z \rightarrow +\infty} F_v(z) = 0, \end{cases} \quad (1.3)$$

où la fonction $F_v(z)$ donne la forme d'un tel front se propageant à la vitesse v . Le système est dans la phase stable quand z est très négatif et dans la phase instable pour des très grandes valeurs de z . On s'attend à ce que le milieu stable envahisse le milieu instable et que donc la vitesse de propagation v

soit positive. En insérant (1.2) dans (1.1), on trouve l'équation différentielle que vérifie $F_v(z)$

$$\frac{d^2 F_v}{dz^2} + v \frac{dF_v}{dz} + F_v - F_v^3 = 0. \quad (1.4)$$

Pour une vitesse v donnée, cette équation et les conditions aux bords (1.3) ne définissent $F_v(z)$ qu'à une translation près. Si l'on désire lever cette ambiguïté, on peut par exemple imposer $F_v(0) = 1/2$.

La solution exacte de l'équation différentielle (1.4) n'est connue²⁰ que pour la vitesse $v = 3\sqrt{2}/2$; on peut vérifier facilement que l'on a

$$F_{\frac{3\sqrt{2}}{2}}(z) = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{z}{2\sqrt{2}} \right). \quad (1.5)$$

Pour d'autres valeurs de v , on ne peut déterminer $F_v(z)$ que numériquement. La figure (1.1) montre la solution de l'équation différentielle (1.4) pour trois valeurs de v .

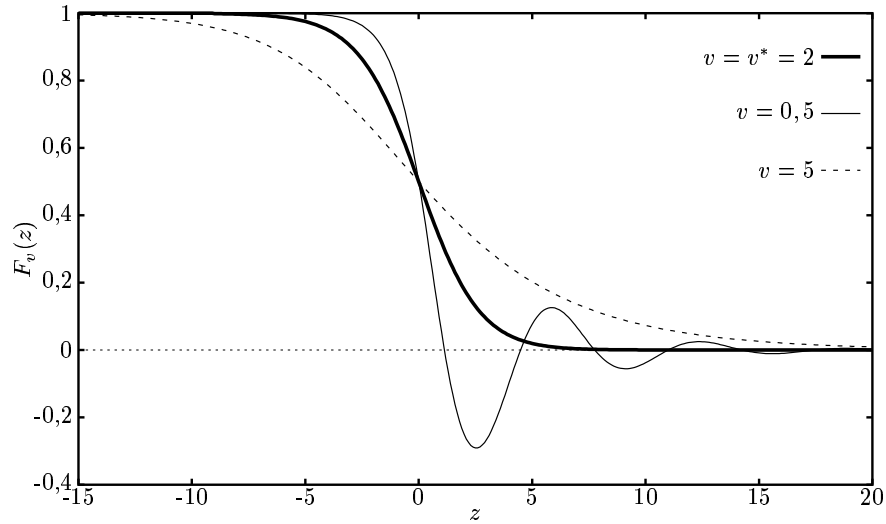


FIG. 1.1 – Trois profils de fronts, solutions de (1.4), pour trois vitesses v différentes.

Une analogie avec un système mécanique permet de voir très simplement qu'il existe une solution à (1.3, 1.4) pour toute valeur positive du paramètre v . Si l'on fait le changement de variables

$$z \iff T, \quad (1.6)$$

$$F_v \iff X, \quad (1.7)$$

et si l'on pose

$$U(X) = \frac{1}{2}X^2 - \frac{1}{4}X^4, \quad (1.8)$$

on voit que (1.4) est l'équation du mouvement d'un objet ponctuel de masse unité soumis à une force de frottement fluide de coefficient v dans le potentiel $U(X)$:

$$\frac{d^2X}{dT^2} = -\frac{d}{dX}U(X) - v\frac{dX}{dT}. \quad (1.9)$$

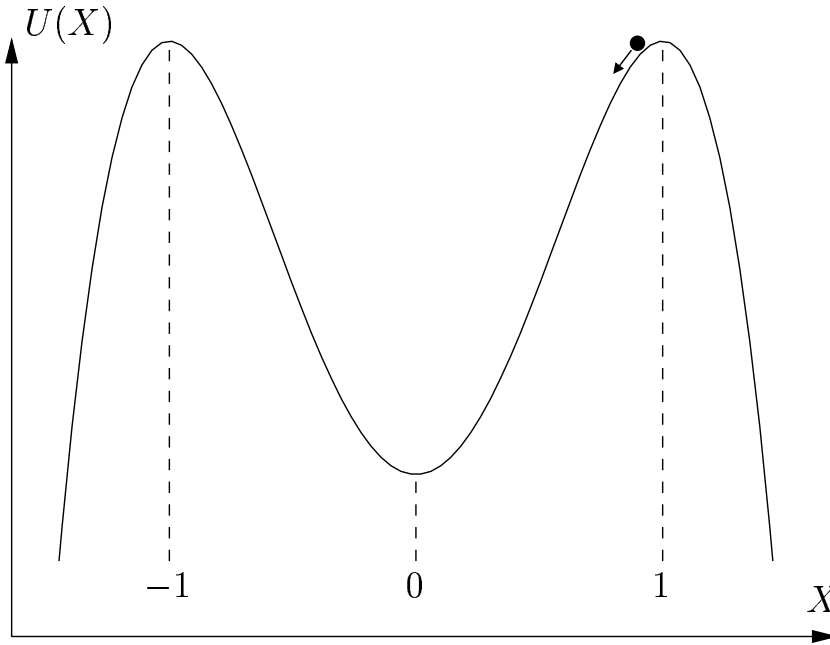


FIG. 1.2 – Analogie mécanique des solutions en translation uniforme de l'équation de Fisher-Kolmogorov : un objet ponctuel se déplace dans un potentiel $U(X)$ avec une force de frottement fluide.

Les conditions limites (1.4) s'interprètent alors en disant que la particule se trouvait au point d'abscisse $X = 1$ dans un passé infiniment lointain et que le mouvement s'achèvera à un temps T infiniment grand au point $X = 0$. La figure 1.2 représente cette particule dans le potentiel $U(X)$ et permet de comprendre facilement les comportements possibles du front. On voit en effet que si le frottement fluide est suffisamment important (*i.e.* si v est assez

grand), la particule tombe dans le puits de potentiel et s'arrête asymptotiquement en $X = 0$ sans jamais passer par des X négatifs. Par contre, si v est trop faible, la particule atteint et dépasse le point $X = 0$ et se met à faire des oscillations amorties autour de 0.

On voit donc que le problème (1.3, 1.4) admet une solution pour tout $v > 0$ et qu'il doit exister une vitesse critique v^* qui sépare les régimes avec ou sans oscillations. Pour une condition initiale physique, on a $h(x, 0) \geq 0$ et il est alors facile de montrer⁹ à partir de (1.1) que la concentration $h(x, t)$ reste positive pour tout t . On doit donc avoir dans ce cas

$$v \geq v^*. \quad (1.10)$$

1.2.2 Analyse linéaire

Pour déterminer cette vitesse minimale v^* qui sépare le régime apériodique du régime avec des oscillations amorties, il suffit de considérer la « queue du front », c'est à dire la région où $F_v(z)$ est très petit. Le terme en F_v^3 dans (1.4) est alors négligeable et l'équation linéarisée a des solutions de la forme

$$F_v(z) = e^{-\gamma z}, \quad (1.11a)$$

où γ est relié à v par la relation

$$v = \gamma + \frac{1}{\gamma}. \quad (1.11b)$$

Le paramètre γ doit avoir une partie réelle strictement positive pour garantir que $F_v(z)$ tend bien vers zéro quand z tend vers l'infini. Si γ a une partie imaginaire non-nulle, la queue du front a un comportement oscillant et prend donc des valeurs négatives. Les cas physiques où $F_v(z)$ reste positif correspondent donc aux γ réels et positifs. En cherchant la valeur minimale atteinte par l'équation (1.11b), on obtient alors facilement la vitesse critique v^* qui sépare les régimes avec et sans oscillations. On trouve

$$\begin{cases} \gamma^* = 1, \\ v^* = 2. \end{cases} \quad (1.12)$$

(Le graphe de l'équation (1.11b) est représenté sur la figure 1.3)

On voit donc que pour toute vitesse supérieure à 2, la forme du front dans la queue est donnée par

$$F_v(z) = Ae^{-\gamma z} + Be^{-\frac{1}{\gamma}z}, \quad (1.13)$$

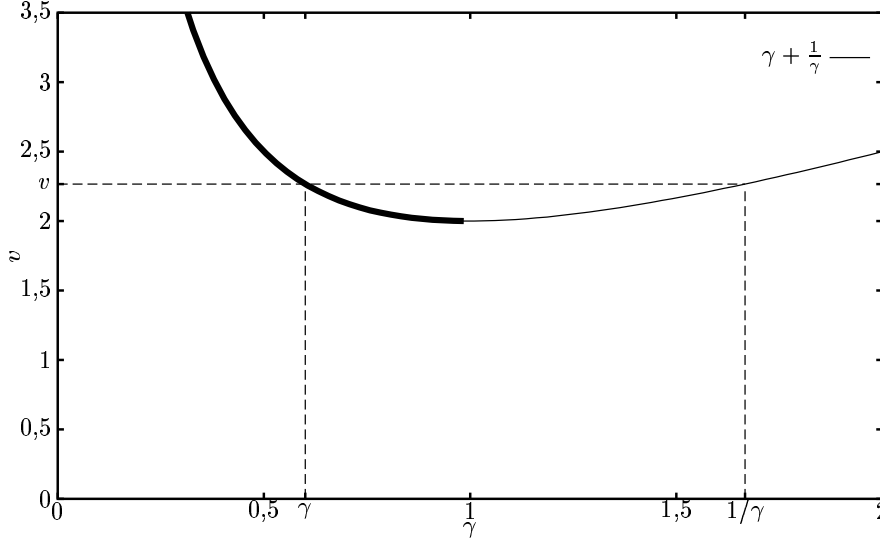


FIG. 1.3 – La vitesse de propagation du front en fonction du taux de décroissance γ . On voit que si γ est réel (pas d'oscillations amorties), la vitesse est nécessairement supérieure à deux. Pour une vitesse donnée, il y a en général deux valeurs de γ qui conviennent et c'est la plus petite qui domine la décroissance du front.

où γ est un nombre réel positif que l'on peut choisir inférieur à 1 et qui est relié à v par l'équation (1.11b). Les coefficients A et B sont déterminés par les non-linéarités de l'équation de Fisher-Kolmogorov. Comme illustré sur la figure 1.3, la décroissance du front est dominée quand z est grand par l'exponentielle la plus lente, à savoir $Ae^{-\gamma z}$. Dans le cas où $v = v^* = 2$, on a $\gamma = 1/\gamma = \gamma^* = 1$ et la solution générale de l'équation linéarisée est plutôt de la forme

$$F_2(z) = (Az + B)e^{-z}. \quad (1.14)$$

1.2.3 Stabilité des solutions

Cette vitesse $v^* = 2$ qui sépare le régime avec oscillations du régime sans oscillations joue un rôle extrêmement important dans l'étude de la stabilité des solutions $F_v(z)$. En effet, on peut montrer^{9,10,20,22} que, si l'on rajoute une perturbation localisée à un front en translation uniforme, alors seules les solutions monotones (qui correspondent donc à $v \geq 2$) sont stables (et donc pertinentes) dans le référentiel se déplaçant avec le front.

Une manière de comprendre ce résultat est de considérer un front se

déplaçant à la vitesse v auquel on ajoute une petite perturbation $\eta(x - vt, t)$:

$$h(x, t) = F_v(x - vt) + \eta(x - vt, t). \quad (1.15)$$

On impose que la perturbation η soit localisée, c'est à dire qu'elle décroisse à l'infini plus vite que ne le fait le front ; en d'autres termes, $\eta(z, t)/F_v(z)$ doit être un nombre petit qui tend vers zéro quand z tend vers l'infini. En effet, si ce n'était pas le cas, la forme du front dans la queue serait dominée par $\eta(z, t)$ pour des z très grands et c'est le comportement de $\eta(z, t)$ qui fixerait la vitesse^{9,10}.

Si l'on utilise (1.15) dans (1.1), on trouve au premier ordre en η

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} + v \frac{\partial \eta}{\partial z} + \eta - 3F_v^2 \eta. \quad (1.16)$$

où $z = x - vt$.

On veut déterminer si une perturbation η croît ou décroît dans ce référentiel. Comme l'équation (1.16) est linéaire, on peut décomposer η en modes propres et chercher des solutions de la forme

$$\eta(z, t) = e^{-Et} \theta(z) e^{-\frac{vz}{2}}. \quad (1.17)$$

Si pour *toutes* les fonctions η de cette forme qui vérifient (1.16) on trouve que le paramètre E a une partie réelle positive, alors toutes les petites perturbations décroissent et la solution F_v est stable. D'un autre côté, dès qu'il existe une solution avec un E ayant une partie réelle négative, alors certaines perturbations croissent et le front F_v est instable. En introduisant (1.17) dans (1.16), on trouve que θ vérifie

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} + \left(\frac{v^2}{4} - 1 + 3F_v^2(z) \right) \right] \theta(z) = E\theta(z). \quad (1.18)$$

On reconnaît l'équation de Schrödinger pour une particule soumise à un certain potentiel. On peut donc reformuler la question de la stabilité d'un front : la solution $F_v(z)$ est stable si et seulement si l'hamiltonien (1.18) n'a que des valeurs propres positives.

Par ailleurs, la perturbation donnée par

$$\eta^{\text{translat.}}(z, t) = \frac{dF_v(z)}{dz} \quad (1.19)$$

est une solution de (1.16) qui reste constante au cours du temps (on peut le vérifier directement à partir de (1.4) ou remarquer que cette perturbation

correspond simplement à une translation infinitésimale du front). Cette solution correspond donc à la valeur propre $E = 0$ de (1.18). Si la fonction (1.19) ne change pas de signe, on s'attend à ce que $E = 0$ soit la valeur propre la plus basse. Dans le cas contraire, on s'attend à ce qu'il existe des solutions de (1.18) avec des E négatifs. On arrive ainsi au résultat que le front qui se déplace à la vitesse v est stable si et seulement si $F_v(z)$ est monotone.

Le raisonnement qui vient d'être présenté est encore loin d'être une démonstration : il faut étudier le spectre continu de l'hamiltonien (1.18) et traiter le cas des solutions de (1.18) qui ne sont pas de carré sommable, mais aucune de ces difficultés n'est insurmontable^{20,22} et le résultat final reste qu'un front $F_v(z)$ est stable si et seulement si il est monotone. Toutes les solutions avec $v < 2$ sont donc instables et tous les fronts qui se propagent à une vitesse $v \geq 2$ sont monotones et stables^{9,10}.

1.2.4 Sélection de la vitesse

Pour une condition initiale donnée, on s'attend à ce qu'un front décrit par l'équation de Fisher-Kolmogorov tende, dans le référentiel qui se déplace avec lui, vers l'une des solutions constantes $F_v(z)$ qui est stable ($v \geq 2$). Une question importante est de déterminer laquelle de ces solutions est effectivement *sélectionnée*. Aronson et Weinberger ont montré^{9,10} que si la condition initiale décroît dans la queue comme $\exp(-\gamma x)$ avec $0 < \gamma \leq 1$, alors le front se déplace asymptotiquement à la vitesse $v = \gamma + 1/\gamma$. Si la condition initiale décroît plus vite que $\exp(-x)$, c'est la vitesse $v = v^* = 2$ qui est sélectionnée.

Une autre manière de formuler ce résultat est de dire que si la condition initiale ressemble à (*i.e.* décroît comme) un des fronts stables $F_v(z)$, ce front est sélectionné, et si elle décroît plus vite que n'importe quel front stable, alors le front $F_{v^*}(z)$ qui correspond à la vitesse *minimale* est sélectionné.

On voit donc que si l'on part d'une perturbation *localisée* dans un milieu instable (une étincelle dans un gaz, ou une mutation favorable dans une population), le front qui se met en place est celui qui avance à la vitesse minimale v^* pour laquelle un front stable existe.

Une manière de comprendre cette sélection du front *marginale* est de considérer une petite perturbation locale $h(x, t) \ll 1$ de l'état instable et de supposer que la vitesse « naturelle » du front est celle du référentiel dans lequel cette perturbation reste d'amplitude constante^{12,20,21}. Comme $h(x, t)$ est petit, on linéarise l'équation (1.1) en supprimant le terme en h^3 et on peut donner la forme générale de $h(x, t)$ à l'aide d'une décomposition en modes

propres

$$h(x, t) = \int dk A(k) e^{ikx - \omega(k)t}, \quad (1.20)$$

où $\omega(k) = k^2 - 1$ dans le cas de l'équation de Fisher-Kolmogorov. Dans le référentiel se déplaçant à la vitesse v , la méthode du col donne pour les temps longs

$$h(vt, t) \approx A(\bar{k}) e^{(i\bar{k}v - \omega(\bar{k}))t}, \quad (1.21a)$$

$$\left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = iv. \quad (1.21b)$$

Si le référentiel se déplace à une vitesse v plus grande que celle du front, la perturbation $h(vt, t)$ doit tendre vers 0. Si l'on va plus lentement, cette perturbation doit croître. À la vitesse critique v^* , l'amplitude de la perturbation doit rester constante. On obtient donc

$$\operatorname{Re}(i\bar{k}v^* - \omega(\bar{k})) = 0, \quad (1.22a)$$

$$\left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = iv^*. \quad (1.22b)$$

Si l'on utilise $\omega(k) = k^2 - 1$, on retrouve $v^* = 2$.

1.2.5 Mise en place du front

À partir d'une condition initiale localisée, le front tend donc vers la solution se déplaçant à la vitesse $v^* = 2$. L'approche de la solution asymptotique est cependant lente : Bramson^{5,6} a étudié précisément quelle était la position du front au temps t en fonction de la condition initiale à $t = 0$. Il a entre autres prouvé que si le front est localisé à $t = 0$ (*i.e.* si l'on a $h(x, 0) = 1$ pour $x < A$ et $h(x, 0) = 0$ pour $x > B$, où A et B sont deux nombres), alors la position $X(t)$ du front est donnée par

$$X(t) = 2t - \frac{3}{2} \log t + O(1). \quad (1.23)$$

De plus, quand la condition initiale décroît exponentiellement avec le taux limite γ^* ,

$$h(x, 0) \approx x^\nu e^{-\gamma^* x}, \quad (1.24)$$

la position est donnée⁶ par

$$X(t) = 2t + \frac{\nu - 1}{2} \log t + O(1) \quad (1.25)$$

pour tout $\nu > -2$. Pour $\nu < -2$, la condition initiale décroît « assez vite » et la position est donnée par (1.23) comme pour une condition initiale localisée. Dans le cas critique $\nu = -2$, la solution est donnée par (1.23) avec une correction supplémentaire en $\log \log t$. La vitesse du front converge donc lentement (en $1/t$ seulement) vers sa valeur asymptotique $v^* = 2$.

1.3 Quelques généralisations de l'équation de Fisher-Kolmogorov

L'équation de Fisher-Kolmogorov (1.1) décrit la propagation d'un front depuis un milieu stable $h(x, t) = 1$ vers un milieu instable $h(x, t) = 0$. Une manière naturelle de généraliser (1.1) est de considérer

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + g(h), \quad (1.26)$$

où $g(h)$ est choisi de manière à ce que $h = 1$ soit une solution stable et $h = 0$ une solution instable ($g(1) = 0$, $g'(1) < 0$ et $g(0) = 0$, $g'(0) > 0$). La section 1.3.1 est consacrée aux équations de la forme (1.26) et la section 1.3.2 présente quelques autres équations utilisées pour décrire la propagation d'un front dans un milieu instable. Enfin, la section 1.3.3 est consacrée aux fronts se propageant dans un milieu stable

1.3.1 Propagation d'un front dans un milieu instable

On s'intéresse aux fronts se propageant dans un milieu instable selon une équation de la forme (1.26). L'équation de Fisher-Kolmogorov est de cette forme et les propriétés qui ont été présentées dans la section précédente sont génériques. Plus précisément, Aronson et Weinberger^{9,10} ont démontré que si

$$\begin{cases} g(0) = g(1) = 0, \\ g(h) > 0 \end{cases} \quad \text{pour tout } 0 < h < 1, \quad (1.27)$$

alors on a les propriétés suivantes^{9,10,17} :

1. il existe une solution de (1.26) en translation uniforme à la vitesse v pour tout $v \geq 2\sqrt{g'(0)}$,

2. une telle solution est stable si et seulement si $v \geq v^*$ pour une certaine vitesse critique v^* ,

3. $2\sqrt{g'(0)} \leq v^* \leq 2 \sup_{0 \leq h \leq 1} \sqrt{\frac{g(h)}{h}},$

4. pour une large classe de conditions initiales, la vitesse de propagation du front tend vers la vitesse *marginale stable* v^* . En particulier, tous les fronts qui, pour un certain γ^* , décroissent à $t = 0$ plus vite que $\exp(-\gamma^*x)$ se propagent asymptotiquement à la vitesse v^* .

De plus, quand la fonction $g(h)$ est telle que l'on a $v^* = 2\sqrt{g'(0)}$, les résultats (1.23, 1.25) se généralisent^{5,6}. En particulier,

5. quand la condition initiale décroît plus vite que $\exp(-\gamma^*x)$, la position du front est donnée par $X_t = 2\sqrt{g'(0)}t - \frac{3}{2\sqrt{g'(0)}} \log t + O(1)$.

Les deux points 4 et 5 sont particulièrement importants puisque les perturbations d'un milieu instable que l'on peut effectivement observer dans un système physique sont presque toujours des perturbations *locales* (étincelle, mutation, ...). Le front qui se forme alors doit donc se déplacer à la vitesse critique v^* , et, dans le cas où $v^* = 2\sqrt{g'(0)}$, la convergence vers cette vitesse est lente (en $1/t$).

La condition de stabilité d'une solution est la même que dans la section précédente : un front $F_v(z)$ est stable si et seulement si il est monotone^{20,22}. Si l'on linéarise l'équation (1.26) dans la queue, on trouve que le front a des oscillations amorties dès que $v < 2\sqrt{g'(0)}$, ce qui justifie la conclusion 3 de Aronson et Weinberger. Dans le cas de l'équation de Fisher-Kolmogorov, la vitesse critique est exactement donnée par $v^* = 2\sqrt{g'(0)}$. Dans cette situation, qui est la plus courante parmi les systèmes étudiés en physique, la simple analyse de l'équation linéarisée permet de déterminer la vitesse critique et la seule utilité des termes non-linéaires est de *saturer* le front à la valeur $h(x, t) = 1$. Dans la terminologie introduite par Stokes¹⁹, ce type de front est dit « *pulled* » par opposition aux fronts « *pushed* » où l'on a $v^* > 2\sqrt{g'(0)}$ et où il faut tenir compte des termes non-linéaires dans $g(h)$ pour déterminer la stabilité des solutions.

Une autre manière de caractériser les fronts *pushed* et de déterminer la vitesse critique v^* est de considérer la solution générale (1.13) de l'équation linéarisée. Cette solution est la somme de deux termes qui décroissent exponentiellement et dont les coefficients dépendent des non-linéarités. La forme du front dans la queue est bien sûr déterminée par l'exponentielle qui décroît le plus lentement, *sauf quand les non-linéarités font que son coefficient est nul*. Si ce coefficient ne s'annule pour aucune valeur de la vitesse v , le front est *pulled*. S'il s'annule pour une certaine vitesse, le front est *pushed* et v^* est

donné par cette vitesse^{12,20}.

Pour prendre un exemple, on peut considérer l'équation

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{h}{b}(1-h)(b+h), \quad (1.28)$$

où le paramètre b varie entre 0 et 1. L'équation (1.1) correspond à $b = 1$. L'expression (1.28) est normalisée de manière à ce que $g'(0) = 1$.

On peut montrer^{12,20} que (1.28) est de type *pulled* si $\frac{1}{2} \leq b \leq 1$ et de type *pushed* si $0 < b < \frac{1}{2}$. Il est même possible dans ce cas particulier de déterminer v^* :

$$v^* = 2 \quad \text{si } \frac{1}{2} \leq b \leq 1, \quad (1.29a)$$

$$v^* = \sqrt{2b} + \frac{1}{\sqrt{2b}} \quad \text{si } 0 < b < \frac{1}{2}. \quad (1.29b)$$

En effet, quand $0 < b < \frac{1}{2}$, on peut expliciter la solution de (1.28) qui se propage à la vitesse v^* donnée par (1.29b); on trouve

$$h^*(x, t) = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{z}{2\gamma} \right), \quad (1.30)$$

où $z = x - v^*t$ et où $\gamma = \sqrt{2b}$ est le nombre réel, positif et inférieur à 1 qui est relié à v par la relation (1.11b). Quand z est grand, (1.30) se comporte comme $\exp(-z/\gamma)$, et si l'on compare avec l'équation (1.13), on voit que le coefficient A est nul et que la queue du front est dominée par l'exponentielle la plus rapide. Quand $0 < b < \frac{1}{2}$, la solution (1.30) correspond donc bien au front *pushed* marginalement stable^{12,20}.

La figure 1.4 montre la forme du front se propageant à la vitesse $v = 2,1$ quand $b = 1/8$. La vitesse est supérieure à 2 mais inférieure à v^* et, bien qu'il n'y ait pas d'oscillations amorties, le front n'est pas monotone et est donc instable.

Pour une fonction $g(h)$ quelconque vérifiant les conditions (1.27), il n'est en général pas facile de déterminer si le front est *pushed* ou *pulled* et quelle est la valeur de la vitesse critique v^* .

L'hypothèse de stabilité marginale est très puissante et n'a jusqu'à présent jamais été mise en défaut. Cependant, un critère assez différent pour déterminer la vitesse de propagation a récemment été proposé par Chen, Goldenfeld, Oono et Paquette où la distinction *pushed/pulled* n'est plus vraiment pertinente²³⁻²⁵; l'argument des auteurs est que dans un système physique, des perturbations extérieures doivent faire fluctuer l'équation de propagation elle-même. Ils montrent alors qu'il n'y a en général qu'une seule vitesse qui reste

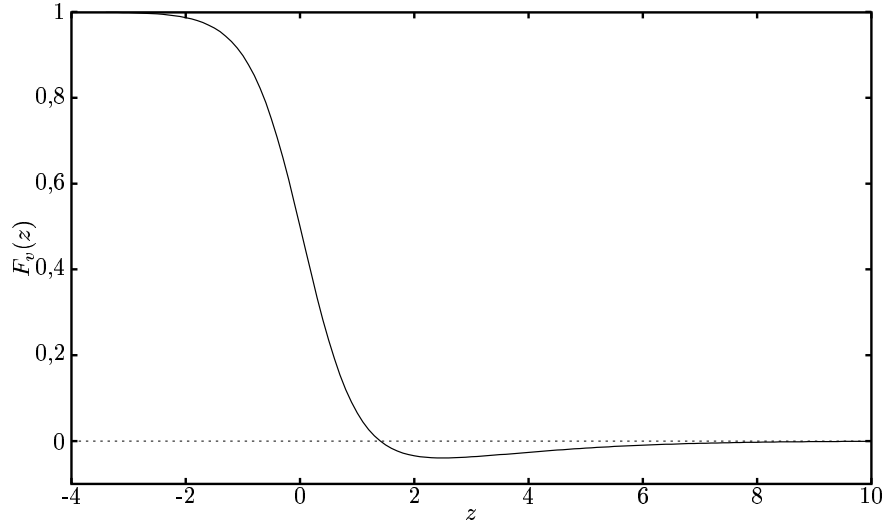


FIG. 1.4 – Forme d'un front *pushed* pour une vitesse $v = 2,1$ comprise entre $2\sqrt{g'(0)}$ et v^* . Il n'y a pas d'oscillations, mais le front n'est pas monotone et est donc instable.

stable pour une certaine classe de petites perturbations, et ils en déduisent que seule cette vitesse a une signification physique et doit être celle qui est sélectionnée. Cet argument est en accord avec notre résultat de [1] où nous avons montré qu'un petit *cut-off* dans la queue du front sélectionne la vitesse marginalement stable (voir chapitre 3).

1.3.2 Autres types de fronts se propageant dans un milieu instable

Bien qu'il n'existe aucune démonstration précise dans le cas général, il semble que le critère de sélection de la vitesse décrit dans la section précédente s'applique à une large classe d'équations décrivant un front se propageant dans un état instable : pour une condition initiale localisée, le front se propage asymptotiquement à la plus petite vitesse pour laquelle il existe une solution stable en translation uniforme (critère de la *stabilité marginale*). Si l'étude de l'équation linéarisée suffit à déterminer cette vitesse critique, le front est dit *pulled* et sinon le front est dit *pushed*. De plus, dans le cas *pulled*, on s'attend^{1,12,17} à retrouver les résultats (1.23, 1.25) de Bramson^{5,6} : pour une condition initiale localisée, la convergence de la vitesse vers sa valeur asymptotique v^* est en $1/t$.

L'hypothèse du mécanisme de sélection de la vitesse a été testée pour plusieurs équations décrivant un front. Par exemple, van Saarloos a étudié¹²

une généralisation de (1.28) :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - \gamma \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + \frac{h}{b}(1-h)(b+h). \quad (1.31)$$

Quand γ est assez petit, les solutions de cette équation forment un front qui est *pushed* ou *pulled* selon la valeur de b . Dans le cas *pushed*, la vitesse critique v^* est, là encore, celle pour laquelle le terme dominant dans la solution générale de l'équation linéarisée a un coefficient nul¹².

Les techniques employées pour l'équation de Fisher-Kolmogorov ne sont pas limitées à des équations aux dérivées partielles. Dans le cadre de la théorie du champ moyen des polymères dirigés en milieu aléatoire, Derrida et Spohn²⁶ ont étudié l'équation

$$G(x, t+1) = \left(\int dh \, \rho(\eta) G(x+\eta, t) \right)^2 \quad (1.32a)$$

avec la condition initiale

$$G(x, 0) = \exp(-e^{-\beta x}), \quad (1.32b)$$

où $\beta > 0$ et où $\rho(\eta)$ est une distribution qui décroît vite à l'infini.

Cette équation décrit la propagation d'un front depuis un milieu stable $G(x, t) = 0$ vers un milieu instable $G(x, t) = 1$ (attention, les milieux stables et instables ne sont pas les mêmes que dans ce qui précède). Cette équation est de type *pulled* et la vitesse marginalement stable v^* peut donc s'obtenir simplement en linéarisant (1.32a) autour de la solution instable $G(x, t) = 1$. Cette vitesse critique est sélectionnée si la condition initiale décroît assez vite vers l'état instable, c'est-à-dire si β est plus grand qu'une certaine valeur critique β^* . Si $\beta < \beta^*$, la vitesse du front (supérieure à v^*) dépend alors de β . Cette constatation a permis de mettre en évidence l'existence d'une transition de phase dans le champ moyen des polymères dirigés en milieu aléatoire. La section 6.3.3 dans l'introduction de la seconde partie de ce travail donne plus de détails sur ce résultat.

Dans le modèle original, l'équation de Fisher-Kolmogorov décrit la propagation d'un gène favorable après une mutation⁷. Il est évident que dans une population réelle ce gène se répandrait au hasard des rencontres selon un processus intrinsèquement *stochastique*. L'équation *déterministe* de Fisher-Kolmogorov n'est en fait qu'une approximation à grande échelle d'un modèle discret plus compliqué. De la même manière, une équation du type Fisher-Kolmogorov apparaît souvent^{11, 14, 15, 27-30} comme la limite d'un modèle microscopique de réaction-diffusion du type $A + B \rightleftharpoons A$. Cependant, la

vitesse de propagation de ces modèles microscopiques ne converge que lentement vers la vitesse du modèle limite^{1,11,27,31}. Dans le chapitre 2, j'étudierai un modèle de front stochastique qui intervient dans le contexte des polymères dirigés^{32,33} et qui est décrit à grande échelle par l'équation (1.32a) et j'expliquerai dans le chapitre 3 pourquoi cette convergence de la vitesse vers la valeur prédite par l'équation limite est lente.

1.3.3 Propagation d'un front dans un milieu stable

On s'intéresse maintenant aux fronts qui se propagent depuis un milieu stable $h(x, t) = 1$ vers un autre milieu stable $h(x, t) = 0$. Ce cas revient à supposer que l'on a $g'(0) < 0$ dans l'équation (1.26) et, si $g(h)$ est une fonction régulière, on voit que (1.26) doit avoir une troisième solution uniforme constante $h(x, t) = h_i$ et que cette solution est instable ($g(h_i) = 0$ et $g'(h_i) > 0$). Pour comprendre les vitesses accessibles à ce type de front, le plus simple est de reprendre l'analogie mécanique présentée dans la section 1.2.1. La figure (1.5) montre le potentiel $U(X)$ correspondant à une fonction $g(h)$ typique pour un front qui se propage d'un milieu stable vers un autre milieu stable.

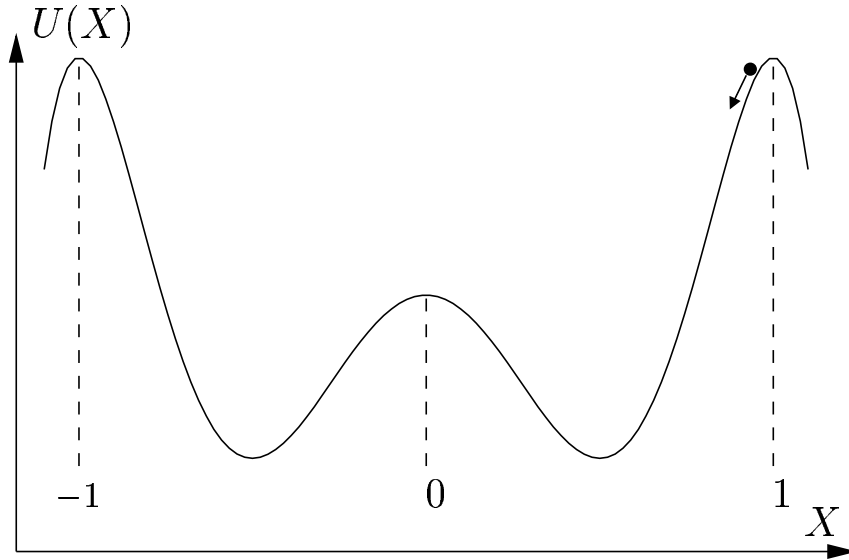


FIG. 1.5 – Analogie mécanique des solutions en translation uniforme pour une équation décrivant la propagation d'un front entre deux milieux stables : un objet ponctuel se déplace dans un potentiel $U(X)$ avec une force de frottement fluide.

On voit facilement que contrairement au cas instable, il n'existe pas de solution pour toutes les valeurs de v : pour un v donné quelconque, la « particule » s'arrête en général dans une des deux vallées et non pas sur la bosse en zéro. En fait, on voit qu'il existe juste *une seule* valeur v_0 de la vitesse telle que la particule s'arrête en 0 sans passer par les X négatifs. Pour une certaine vitesse $v_1 < v_0$, la particule passe une fois par 0 sans s'arrêter, remonte la pente près de $X = -1$, redescend et vient s'arrêter en 0. Pour une vitesse $v_2 < v_1$, la particule passe deux fois par le point $X = 0$ avant de s'y arrêter au troisième passage. On voit en continuant ce raisonnement qu'il existe une infinité *discrète* de vitesses v_i pour lesquelles il existe un front en translation uniforme, et que ce front s'annule exactement i fois (plus une fois à l'infini).

En utilisant le même type d'arguments que dans le cas instable, on peut montrer²² que seule la solution qui se propage à la vitesse v_0 est stable. De plus, toute perturbation de cet état stable tend *exponentiellement rapidement* vers zéro. Contrairement au cas instable (voir (1.23)), la vitesse de propagation du front converge donc très rapidement vers v_0 à partir de conditions initiales quelconques. Cette propriété permet souvent de modéliser des fronts se propageant en milieu stable par une interface fine^{22,34}.

1.4 Autres problèmes de sélection

La principale question dans l'étude des fronts se propageant dans un milieu instable est la détermination de la vitesse asymptotique du front ; il existe une infinité continue de solutions stables et il n'est pas forcément évident de prédire celle qui est sélectionnée. Ce même problème de sélection se retrouve dans plusieurs autres systèmes, en particulier en hydrodynamique. De nombreux travaux ont été consacrés à ces problèmes (voir en particulier les revues de Normand, Pomeau & Verlade³⁵, de Langer³⁶ et de Cross & Hohenberg³⁷) et je vais donc me contenter dans cette section de faire une courte description de quelques modèles importants.

Parmi les systèmes où il faut sélectionner l'une des nombreuses solutions possibles, le plus célèbre est peut-être celui des doigts de Saffman-Taylor³⁸ : si l'on injecte un fluide dans un autre fluide plus visqueux dans un espace à deux dimensions de largeur finie, on observe que l'interface entre les deux fluides forme un doigt qui progresse à une certaine vitesse (voir la figure 1.6). Saffman et Taylor ont pu déterminer analytiquement la forme du doigt dans le régime asymptotique et ont montré comment l'on pouvait relier sa largeur à sa vitesse de propagation. Le problème admet donc un ensemble continu de solutions correspondant à des largeurs différentes. Cependant, on n'observe

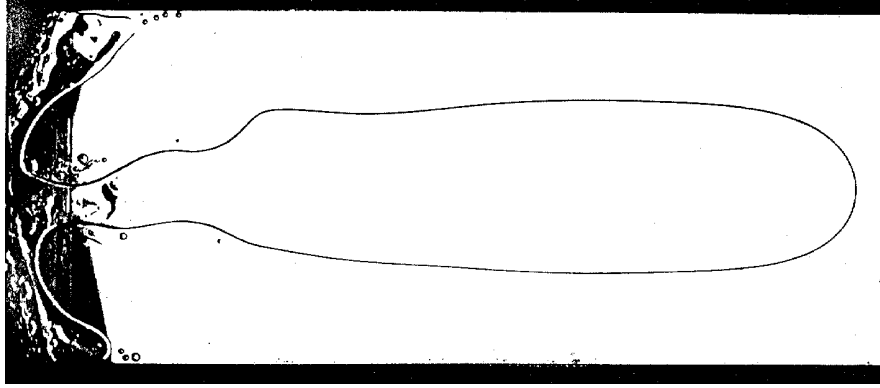


FIG. 1.6 – Doigt formé par de l'air injecté dans une cavité de largeur finie remplie de glycérine. On observe la formation d'un doigt dont la largeur est la moitié de celle de la cavité. Cette figure est empruntée à Saffman et Taylor³⁸.

expérimentalement que des doigts dont la largeur est la moitié de celle de la bande dans laquelle ils se propagent³⁸.

On retrouve également des problèmes de sélection dans les phénomènes de convection de type Rayleigh-Bénard^{35,37} : supposons que l'on chauffe par le bas un liquide initialement au repos ; un gradient vertical de température s'établit, le liquide chaud a tendance à remonter et une instabilité apparaît. Sous certaines conditions (faible épaisseur de liquide, bonne zone de température), un régime permanent s'établit où les courants de convection forment des rouleaux régulièrement espacés dans le liquide. L'apparition de ces rouleaux peut être décrite par l'équation de Swift-Hohenberg^{39,40}

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -2\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + (\epsilon - 1)h - h^3, \quad (1.33)$$

où $0 < \epsilon < 1$ et où $h(x, t)$ est une quantité reliée à la vitesse verticale du fluide.

Pour un système de petite taille, les conditions aux bords imposent la longueur d'onde de la structure périodique formée par les rouleaux de convection. Cependant, quand le système est grand, il existe une solution périodique stable de (1.33) pour toutes les longueurs d'onde dans un certain intervalle, et toutes les solutions stables sont de cette forme. Si l'on part de la situation instable $h(x, 0) = 0$ et que l'on ajoute une perturbation localisée, une structure périodique stationnaire envahit la zone instable comme l'illustre la figure 1.7. Le problème est alors de déterminer quelle est la longueur d'onde choisie par le système lors de la construction de la structure périodique. Comme dans le cas de l'équation de Fisher-Kolmogorov, c'est la solution marginalement stable qui est sélectionnée pour une perturbation initiale localisée^{20,21,36}.

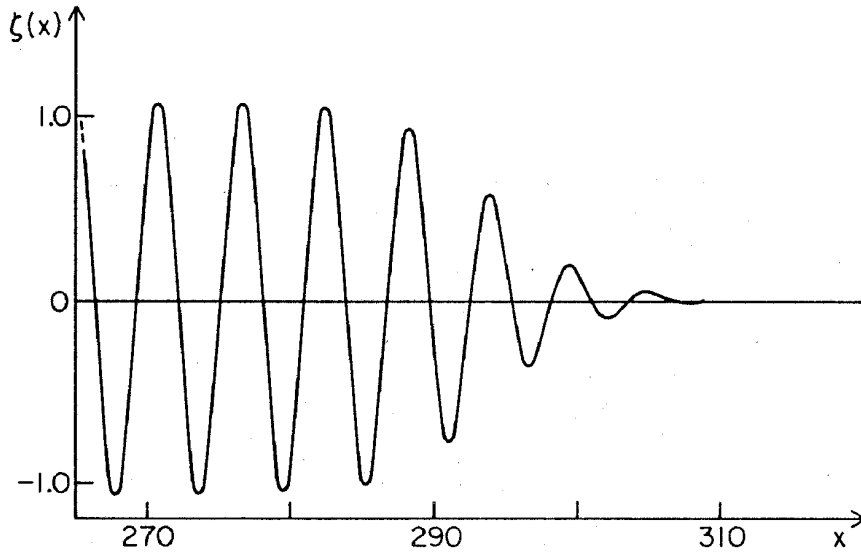


FIG. 1.7 – Formation d'oscillations selon l'équation (1.33). Cette figure est empruntée à Langer³⁶.

L'équation Swift-Hohenberg (1.33) peut également décrire le front de solidification dans un matériau en surfusion^{36,37}. Considérons un domaine en deux dimensions (pour simplifier) tel qu'à $t = 0$ le matériau soit sous forme liquide pour $z > 0$ et sous forme solide pour $z < 0$. La phase solide envahit la phase liquide, mais il n'y a pas en général de solution stable telle que le front de solidification reste rectiligne ; c'est l'instabilité de Mullins-Sekerka^{22,36,41}. Par contre, il existe des fronts stables non-rectilignes se propageant avec une vitesse constante. La forme de chacun de ces fronts dans le référentiel qui se déplace avec lui est une structure périodique qui est une solution stationnaire stable de l'équation (1.33). Si l'on perturbe localement la condition rectiligne initiale et que l'on observe l'interface solide/liquide dans le référentiel qui se déplace avec le front, on voit une telle structure périodique se former au cours du temps selon l'équation de Swift-Hohenberg. La longueur d'onde de cette structure n'est *a priori* pas déterminée, mais on peut l'obtenir par un argument de stabilité marginale^{36,37,42}.

Quand ϵ est petit, on peut écrire une équation sur l'amplitude des oscillations dans les solutions de l'équation (1.33) en posant

$$h(x, t) = 2\sqrt{\frac{\epsilon}{3}} \operatorname{Re} (A(X, \tau)e^{ix}), \quad (1.34)$$

où $X = \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon}x$ et $\tau = \epsilon t$. On peut alors montrer^{12,21,36} qu'au premier ordre non-nul en ϵ , l'amplitude complexe $A(X, \tau)$ est solution de l'équation de

Ginzburg-Landau

$$\frac{\partial A}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 A}{\partial X^2} + A - |A|^2 A. \quad (1.35)$$

Mis à part le fait que la variable $A(X, \tau)$ est maintenant complexe, on retrouve l'équation de Fisher-Kolmogorov.

Chapitre 2

Modèle microscopique de front

Ce chapitre est consacré à l'étude que nous avons faite^{1,2} d'un modèle microscopique relié aux polymères dirigés³³ et dont l'approximation de champ moyen est une équation de type Fisher-Kolmogorov qui décrit la propagation d'un front *pulled* dans un milieu instable. Grâce à une reformulation du modèle, on peut effectuer des simulations numériques avec beaucoup de particules (de l'ordre de $N \approx 10^{14}$), ce qui permet de constater que la vitesse de propagation v_N de ce système est proche de la vitesse marginalement stable v^* du champ moyen et que la différence entre ces deux vitesses est d'ordre $1/\log^2 N$. Le modèle étant stochastique, la position des particules est une quantité aléatoire et l'on mesure une constante de diffusion qui semble décroître en $1/\log^3 N$. Une explication pour la correction de la vitesse en $1/\log^2 N$ est proposée dans le chapitre suivant.

2.1 Définition du modèle

On considère N particules de positions $X_1(t), X_2(t), \dots, X_N(t)$ se déplaçant sur une droite. Le temps t est discret et, à chaque pas de temps, le système tout entier est mis à jour ; pour chaque indice $k = \{1, \dots, N\}$, on choisit au hasard deux particules dans le système au temps t et on note la position de celle qui est la plus à droite. À ce nombre on ajoute une contribution aléatoire η et la valeur obtenue est la nouvelle position de la particule k . La règle d'évolution du système est donc

$$X_k(t+1) = \max \left(X_{k'}(t), X_{k''}(t) \right) + \eta, \quad (2.1)$$

où k' , k'' et η sont trois nombres aléatoires tirés de manière indépendante à chaque pas de temps et pour chacune des particules k . Les indices k' et k''

sont des entiers choisis entre 1 et N , et η est tiré selon une certaine distribution $\rho(\eta)$.

Pour une distribution $\rho(\eta)$ qui décroît suffisamment vite à l'infini, on peut se convaincre qu'une des conséquences du processus d'évolution (2.1) est que les particules restent groupées et ont un mouvement collectif. En effet, supposons qu'au temps t les particules soient réparties en deux groupes de taille $\frac{1}{2}N$ assez éloignés l'un de l'autre. Au temps $t + 1$, chacune des N particules sera près de l'un ou de l'autre groupe selon la position de ses deux ancêtres k' et k'' . Il suffit qu'un de ces deux ancêtres soit dans le groupe le plus à droite pour que la particule au temps $t + 1$ soit située près de ce groupe. On voit donc qu'au temps $t + 1$ on a en moyenne environ $\frac{3}{4}N$ particules près du groupe de droite contre $\frac{1}{4}N$ près du groupe de gauche. Le groupe le plus à gauche se vide donc petit à petit au profit de celui de droite et toutes les particules se retrouvent rapidement dans la même région. On peut alors interpréter la zone de largeur finie où se trouvent les particules comme un front qui sépare deux milieux. Plus précisément, si l'on pose (voir figure (2.1))

$$h(x, t) = \frac{1}{N} \left(\begin{array}{c} \text{Nombre de particules à} \\ \text{droite de } x \text{ à l'instant } t \end{array} \right), \quad (2.2)$$

on voit que $h(x, t)$ est une fonction décroissante qui vérifie $h(-\infty, t) = 1$ et $h(+\infty, t) = 0$ et telle que la zone (le front) où $h(x, t)$ prend des valeurs intermédiaires est très localisée.

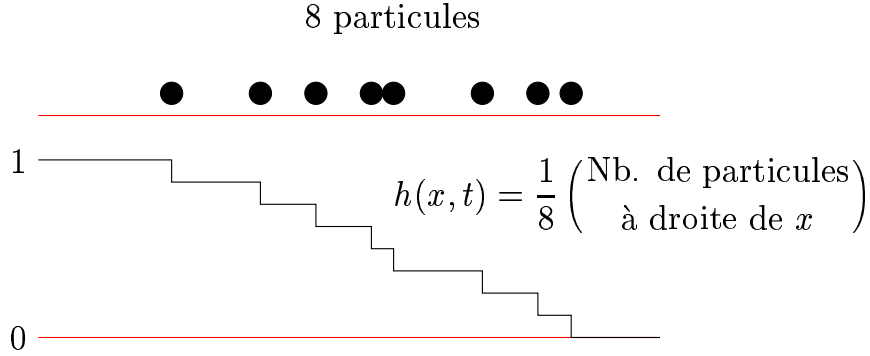


FIG. 2.1 – Interprétation du modèle de particules en terme de front.

On peut alors définir la position du front comme, par exemple, la position moyenne des particules, ou comme le point où le front passe par la valeur $1/2$ ou par toute autre valeur ; parce que le front est localisé dans une région finie de taille constante, toutes ces définitions ne diffèrent dans la limite des temps longs que par une quantité d'ordre 1 qui est donc négligeable si l'on veut mesurer la vitesse.

Ce modèle a été introduit³² dans le contexte des polymères dirigés comme une variante du champ moyen : on considère un réseau aléatoire avec N sites par ligne d'ordonnée t tel que chaque site k est relié à deux ancêtres k' et k'' pris au hasard sur la ligne précédente. On donne à chaque site une énergie aléatoire $-\eta$ et l'on considère sur ce réseau un polymère dirigé (l'ordonnée t augmente à chaque pas) dont l'énergie est la somme des énergies des sites visités. L'équation (2.1) permet alors de calculer l'énergie minimale $E_0(k, t) = -X_k(t)$ d'un polymère dirigé de longueur t et arrivant au site k (voir la figure 2.2 et la section 6.3.7 dans l'introduction de la seconde partie de ce travail).

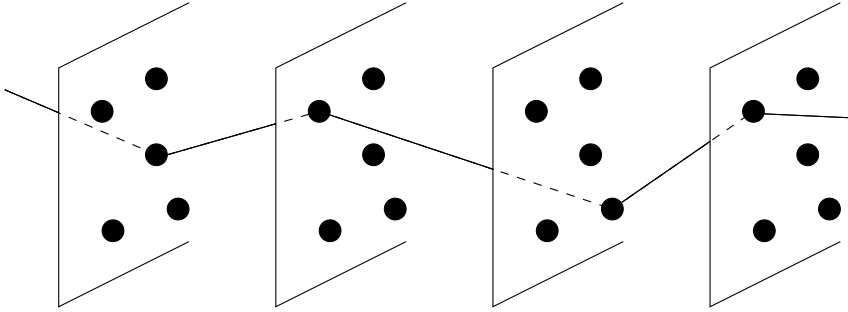


FIG. 2.2 – Un polymère dirigé dans un réseau où chaque site au pas t est relié à deux sites aléatoires du pas $t - 1$.

Dans un domaine complètement différent des polymères dirigés, l'équation (2.1) peut être interprétée comme un modèle très simple et *très* optimiste de génétique ; on considère une population où chaque génération est composée de N individus et l'on suppose que chaque nouveau-né a deux parents aléatoires dans la génération précédente. Tous les individus à la génération t sont caractérisés par un nombre $X_k(t)$ qui mesure leur adaptation à l'environnement et chaque enfant hérite de son parent le plus adapté et subit une mutation η .

Enfin, si l'on pose $\eta = 1$ et que l'on change la dynamique pour ne mettre à jour qu'une seule particule à chaque pas de temps, l'équation (2.1) intervient également dans le calcul du plus grand exposant de Lyapunov dans un modèle de sphères dures⁴³.

2.2 Champ moyen du modèle microscopique

À chaque pas de temps, toutes les particules changent de position de manière indépendante. La distribution de la position d'une particule k au

temps $t+1$ est donc entièrement déterminée par la donnée de $h(x, t)$ et peut s'écrire

$$\text{Prob}(X_k > x) = 1 - \int dy \rho(y) \left(1 - h(x - y, t)\right)^2. \quad (2.3)$$

En effet, la probabilité qu'une particule ait une position inférieure à x au temps $t+1$ est égale à la probabilité de choisir un nombre y et deux ancêtres k' et k'' tels que $X_{k'} + y$ et $X_{k''} + y$ soient tous les deux inférieurs à x . Comme la probabilité que $X_{k'} + y$ soit inférieur à x est donnée par $1 - h(x - y, t)$, on trouve l'expression (2.3).

Pour un $h(x, t)$ fixé, la probabilité (2.3) est simplement la valeur moyenne de $h(x, t+1)$:

$$\langle h(x, t+1) \mid h(x, t) \rangle = \text{Prob}(X_k > x). \quad (2.4)$$

Bien que les positions des particules à l'instant $t+1$ soient choisies de manière indépendante, ces positions sont néanmoins corrélées à travers la donnée de $h(x, t)$ et le problème (2.1) est compliqué à résoudre pour un N arbitraire. Cependant, dans la limite où N tend vers l'infini, $h(x, t+1)$ est confondu avec sa valeur moyenne et l'on peut écrire

$$\begin{aligned} h(x, t+1) &= 1 - \int dy \rho(y) \left(1 - h(x - y, t)\right)^2, \\ &= \int dy \rho(y) \left(2h(x - y, t) - h^2(x - y, t)\right). \end{aligned} \quad (2.5)$$

À un changement de variable près, l'équation de champ moyen (2.5) est la même que l'équation (1.32a) présentée dans le chapitre précédent. Cette équation décrit la propagation d'un front depuis le milieu stable $h(x, t) = 1$ vers le milieu instable $h(x, t) = 0$ et, en utilisant les résultats de la section 1.2.2 dans l'introduction de cette partie, on voit que la vitesse de propagation du front pour une condition initiale localisée est la vitesse marginalement stable v^* . Pour obtenir cette vitesse, on linéarise l'équation (2.5) et l'on cherche des solutions de la forme

$$h(x, t) \approx e^{-\gamma(x-vt)}, \quad (2.6)$$

et l'on trouve facilement que v est reliée à γ par la relation

$$v(\gamma) = \frac{1}{\gamma} \log \left(2 \int dy \rho(y) e^{\gamma y} \right). \quad (2.7)$$

L'équation de dispersion (2.7) est l'analogue de la relation $v(\gamma) = \gamma + (1/\gamma)$ que l'on obtient pour l'équation de Fisher-Kolmogorov (relation (1.11b)). La vitesse marginalement stable $v^* = v(\gamma^*)$ est alors la vitesse minimale pour laquelle il existe un γ réel positif tel que (2.7) est vérifiée.

$$\left. \frac{dv(\gamma)}{d\gamma} \right|_{\gamma=\gamma^*} = 0. \quad (2.8)$$

Par exemple, si l'on prend une distribution $\rho(y)$ gaussienne

$$\rho(y) = \frac{1}{\sqrt{2\sigma\pi}} e^{-\frac{1}{2\sigma}y^2}, \quad (2.9)$$

on trouve

$$\gamma^* = \sqrt{\frac{2 \log 2}{\sigma}}, \quad (2.10a)$$

$$v^* = \sqrt{2\sigma \log 2}. \quad (2.10b)$$

On considérera surtout dans la suite la distribution $\rho(y)$ définie par

$$\rho(y) = p\delta(1-y) + (1-p)\delta(y), \quad (2.11)$$

où p est un nombre réel compris entre 0 et 1. L'équation (2.7) devient alors

$$v(\gamma) = \frac{1}{\gamma} \log \left(2pe^\gamma + 2(1-p) \right), \quad (2.12)$$

et on peut vérifier que (2.12) admet un minimum unique quand $0 < p < \frac{1}{2}$. La table 2.1 donne γ^* et v^* pour plusieurs valeurs de p .

p	0,05	0,25	0,45
γ^*	2,751 111...	2,553 244...	4,051 851...
v^*	0,451 818...	0,810 710...	0,979 187...

TAB. 2.1 – Valeurs numériques de γ^* et v^* pour plusieurs p .

Quand $p \geq \frac{1}{2}$, la fonction (2.12) est monotone décroissante et la valeur minimale est obtenue pour un γ^* infini :

$$\gamma^* = +\infty, \quad (2.13a)$$

$$v^* = 1. \quad (2.13b)$$

La forme du front décroît dans ce cas plus vite qu'une exponentielle ; par exemple, on voit facilement que, pour $p = 1$, toutes les particules sont réunies au même point et que l'on a $h(x, t) = \theta(-x + t)$. Dans la suite de ce travail, je supposerai toujours que la fonction (2.12) admet un minimum pour une valeur finie de γ et donc que $p < \frac{1}{2}$.

2.3 Simulations numériques

En utilisant les résultats présentés dans l'introduction, on sait que le champ moyen du modèle (2.1) peut se propager à toutes les vitesses supérieures à v^* et que pour une condition initiale localisée, la vitesse v^* est sélectionnée. Dans le modèle stochastique (2.1) avec un nombre fini N de particules, la vitesse est une quantité aléatoire susceptible de fluctuer. Cependant, dans la limite où N est grand, on s'attend à ce que la forme et la vitesse typiques du front dans le modèle aléatoire soient proches de la forme et de la vitesse du front dans le modèle de champ moyen. Le problème est qu'il existe une infinité de solutions au champ moyen et qu'il faut déterminer laquelle est sélectionnée. On peut remarquer que lorsque N est fini, la condition initiale du front est nécessairement localisée : il existe une position au delà de laquelle on a $h(x, 0) = 0$. Il est donc raisonnable de penser que la vitesse marginalement stable v^* du champ moyen est sélectionnée et que l'on a

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} v_N = v^*. \quad (2.14)$$

On peut vérifier numériquement que l'hypothèse (2.14) est vérifiée et essayer de déterminer un équivalent de la correction $v^* - v_N$ quand N tend vers l'infini. Le modèle (2.1) étant stochastique, on sait de plus que la position du front fluctue autour de sa position moyenne et il est intéressant de connaître la constante de diffusion D_N qui caractérise ces fluctuations. Les quantités v_N et D_N sont définies par

$$v_N = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle X_t \rangle}{t}, \quad (2.15a)$$

$$D_N = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle X_t^2 \rangle - \langle X_t \rangle^2}{t}, \quad (2.15b)$$

où X_t est la position du front au temps t et où $\langle x \rangle$ est la valeur moyenne de x prise sur des réalisations indépendantes du système.

2.3.1 Simulations directes

L'approche la plus simple est de simuler directement l'équation (2.1). On part à $t = 0$ avec N particules placées à l'origine ($X_k = 0$ pour tout k) et, en réalisant plusieurs simulations indépendantes du système, on mesure la position moyenne $\langle X_t \rangle$ du front pour tous les pas de temps compris entre 1 et 50 000 et pour plusieurs distributions $\rho(y)$. En regardant l'allure de $\langle X_t \rangle$

en fonction de t , on voit que pendant les premiers pas de temps les particules s'étalent et le front s'approche de sa forme finale. Cette phase est très différente du régime asymptotique qui nous intéresse, et il est beaucoup plus facile de mesurer la vitesse du front si l'on élimine ce régime transitoire. On mesure donc la vitesse à l'instant t en calculant la quantité

$$v_N(t) = \frac{\langle X_t \rangle - \langle X_{5\,000} \rangle}{t - 5\,000}. \quad (2.16)$$

Si l'on calcule la moyenne de la position du front sur quelques dizaines de réalisations du système, on constate que la vitesse $v_N(t)$ calculée par (2.16) est stabilisée sur tout l'intervalle de temps. On peut donc facilement estimer à partir de ces données la vitesse moyenne v_N . Cette méthode employée pour mesurer les vitesses de propagation est très semblable à celle utilisée dans la seconde partie de ce travail pour obtenir l'énergie libre d'un polymère dirigé. Le chapitre 9 explique plus en détail cette méthode.

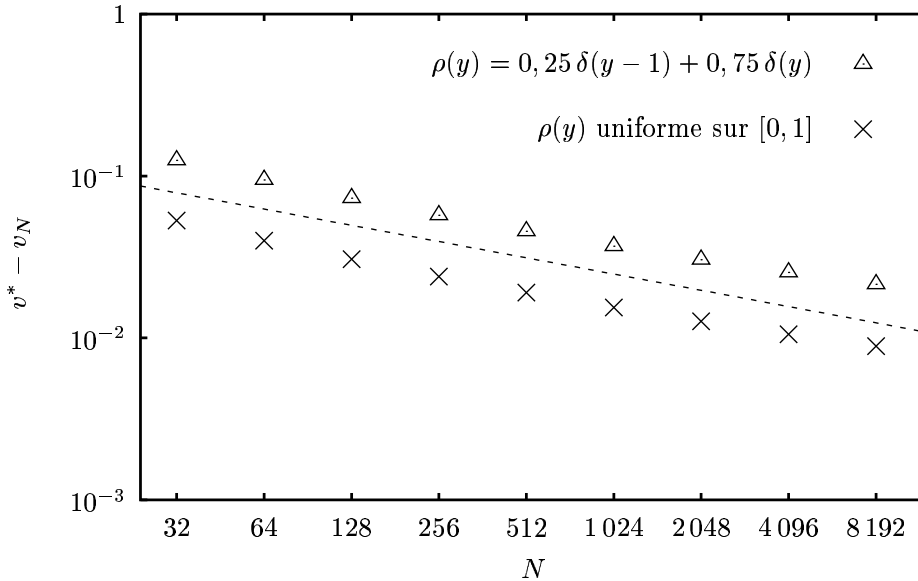


FIG. 2.3 – Différence $v^* - v_N$ en fonction de N pour deux systèmes décrits par (2.1) avec deux distributions $\rho(y)$ différentes. La ligne droite représente une décroissance en $N^{-1/3}$. Cependant, allez voir aussi la figure 2.4

La figure 2.3 représente la différence $v^* - v_N$ mesurée pour des valeurs de N allant de 32 à 8192 et pour deux distributions $\rho(y)$: la distribution uniforme sur l'intervalle $[0; 1]$ et la distribution (2.11) pour $p = 0,25$. Il semble

sur cette figure que la quantité $v^* - v_N$ tend vers zéro comme $N^{-1/3}$. Cependant, si on regarde plus attentivement, on détecte une légère courbure pour les N les plus grands. Il faudrait cependant connaître la vitesse pour des valeurs de N très supérieures à 8 192 pour pouvoir confirmer ou infirmer cette loi de décroissance, mais comme la durée de ces simulations numériques augmente linéairement avec le nombre de particules N , il est *a priori* difficile de simuler des N très grands. Cependant, lorsque la distribution $\rho(y)$ est de la forme (2.11), il est possible de rendre le calcul très parallèle et d'obtenir des valeurs de N beaucoup plus grandes. Cette nouvelle méthode est exposée dans la section suivante et permet de constater que malgré les apparences, la décroissance *n'est pas* en $N^{-1/3}$.

2.3.2 Simulations parallèles

Si l'on suppose que la distribution $\rho(y)$ est de la forme (2.11), les positions $X_k(t)$ des N particules du modèle sont des nombres entiers. Plutôt que de simuler les $X_k(t)$, on peut alors simuler directement la quantité $h(x, t)$ pour x entier qui compte la proportion de particules en x ou à droite de x (voir l'équation (2.2)). Par ailleurs, on peut constater numériquement que la largeur du front (la distance entre la particule la plus à gauche et la particule la plus à droite) est d'ordre $\log N$. On voit donc que l'on peut décrire complètement le front avec $\approx \log N$ nombres (les $h(x, t)$ différents de 0 et de 1) plutôt qu'avec N nombres (les positions des N particules).

De plus, la simulation des $h(x, t)$ est assez facile. À chaque pas de temps t , on connaît $h(x, t)$ pour tout x et l'on peut grâce à (2.4) calculer la valeur moyenne $\langle h(x, t+1) \rangle$ et donc la probabilité qu'une particule se trouve à l'instant $t+1$ à une certaine position x . Comme toutes les particules sont placées indépendamment les unes des autres, il suffit d'avoir un générateur de nombres aléatoires distribués selon une loi binômiale pour tirer au hasard la configuration au temps $t+1$. La complexité de cette méthode croît comme $\log N$ et permet donc de simuler des N extrêmement grands^{1,2}.

La figure 2.4 présente des résultats numériques obtenus en utilisant cette méthode pour trois valeurs de p et pour des systèmes allant jusqu'à des tailles $N = 10^{14}$. On y voit assez clairement que le comportement de $v^* - v_N$ n'est pas en $N^{-1/3}$ mais plutôt en $1/\log^2 N$. Le chapitre 3 présente un calcul qui permet d'expliquer ce comportement en $1/\log^2 N$ et qui donne une valeur du préfacteur qui est du bon ordre de grandeur.

Dans ce modèle de propagation de front, la vitesse d'un système fini diffère donc de manière significative de la vitesse du champ moyen. Nous pensons que ce résultat est générique²⁷ et il est possible qu'une correction aussi importante soit observable dans un système réel.

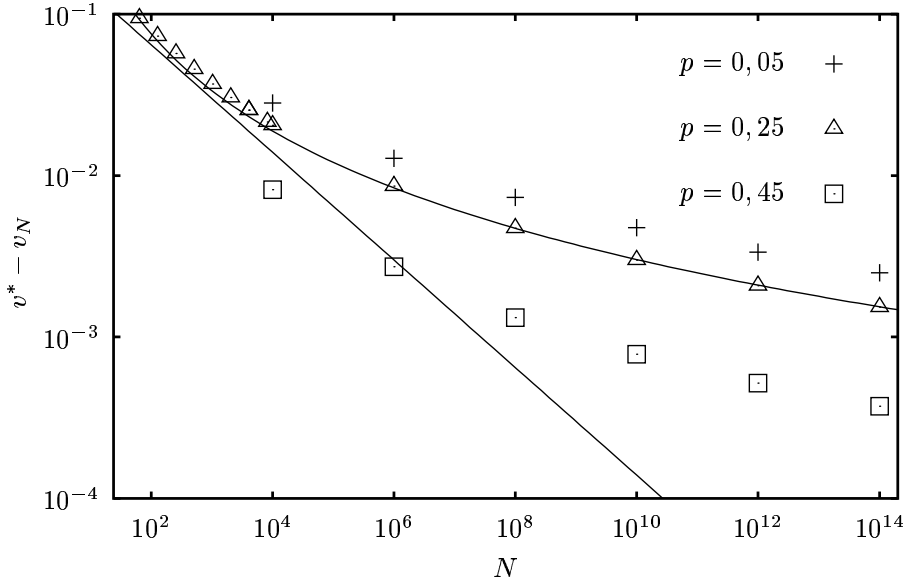


FIG. 2.4 – Différence $v^* - v_N$ en fonction de N pour des systèmes décrits par 2.1 et pour plusieurs valeurs du paramètre p . La technique employée est celle décrite dans la section 2.3.2 qui permet d'obtenir de très grandes valeurs de N . La ligne droite représente une décroissance en $N^{-1/3}$ et la ligne courbe une décroissance en $1/\log^2 N$.

2.3.3 Mesure de la constante de diffusion

En utilisant le même programme qui simule (2.1) de manière parallèle, on peut essayer de mesurer la constante de diffusion D_N qui caractérise les fluctuations de la position X_t du système (voir l'équation (2.15)). Cette quantité est notablement plus compliquée à obtenir que la vitesse moyenne v_N : là où il faut quelques dizaines de réalisations indépendantes du système pour avoir une très bonne précision sur v_N , plusieurs centaines de réalisations sont nécessaires pour obtenir D_N . La figure 2.5 donne D_N en fonction de N pour trois valeurs de p . Il semble que D_N tende vers zéro comme $1/\log^3 N$, mais nous n'avons pas réussi à trouver une explication de ce résultat.

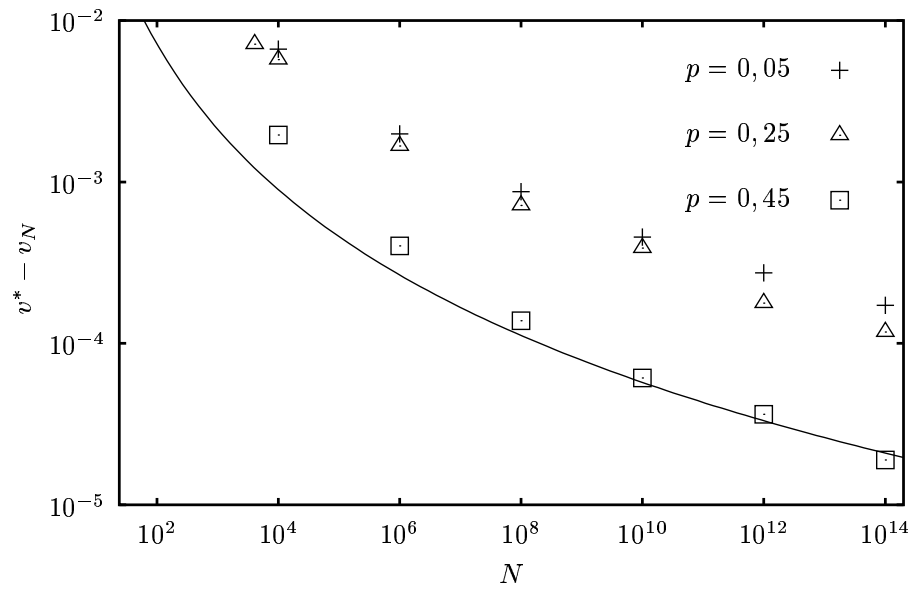


FIG. 2.5 – Constante de diffusion D_N du modèle (2.1) en fonction de N pour plusieurs valeurs du paramètre p . La ligne représente une décroissance en $1/\log^3 N$.

Chapitre 3

Corrections logarithmiques

Quand le nombre N de particules tend vers l'infini, le modèle microscopique présenté dans le chapitre précédent est décrit par la propagation d'un front *pulled* dans un milieu instable :

$$h(x, t + 1) = \int dy \rho(y) \left(2h(x - y, t) - h^2(x - y, t) \right). \quad (3.1)$$

Pour une condition initiale localisée, ce front se déplace à la vitesse marginalement stable $v^* = v(\gamma^*)$ qui minimise la fonction

$$v(\gamma) = \frac{1}{\gamma} \log \left(2 \int dy \rho(y) e^{\gamma y} \right). \quad (3.2)$$

En simulant le modèle microscopique à N particules, nous avons vu dans la section 2.3.2 du chapitre précédent que sa vitesse v_N diffère de v^* par une quantité d'ordre $1/\log^2 N$ (figure 2.4). Je vais présenter dans ce chapitre les résultats de [1, 2] où nous avons montré que cette correction peut s'expliquer par la présence d'un *cut-off* ϵ dans la queue du front. La première section de ce chapitre motive l'introduction de ce *cut-off* et précise le nouveau modèle ainsi obtenu. Le calcul de la correction de la vitesse due à ce *cut-off* est présenté dans la section 3.2 et est vérifié numériquement dans la section 3.3. Enfin, la section 3.4 revient sur le modèle microscopique du chapitre précédent et compare les vitesses du modèle stochastique et du modèle avec *cut-off*.

3.1 Introduction d'un *cut-off* dans la queue du front

Comme pour tous les modèles de type Fisher-Kolmogorov, les solutions en translation uniforme de l'équation de champ moyen (3.1) tendent expo-

nentiellement vers zéro dans la queue du front et la vitesse de propagation est entièrement déterminée par le taux de cette décroissance (voir le chapitre d'introduction de cette partie). La situation est cependant très différente dans le cas du modèle microscopique à N particules. En effet, $h(x, t)$ est alors la proportion de particules à droite de x (équation (2.2)) et le front passe brutalement de la valeur $h(x, t) = 1/N$ à la valeur $h(x, t) = 0$. Le comportement de la queue du front dans le modèle microscopique est donc très différent de celui dans le modèle (3.1) obtenu pour $N = \infty$ et l'on s'attend à ce que les conséquences soient importantes sur la vitesse sélectionnée.

Cette différence de comportement dans la queue du front permet à elle seule d'expliquer la correction à la vitesse en $1/\log^2 N$ qui est numériquement mise en évidence dans le chapitre précédent^{1,2}. On est donc amené à étudier une version modifiée de l'équation (3.1) où l'on rajoute un *cut-off* d'ordre ϵ dans la queue du front :

$$h(x, t + 1) = \begin{cases} \int dy \rho(y) (2h(x - y, t) - h^2(x - y, t)) & \text{Si ce nombre est} \\ & \text{supérieur à } \epsilon, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.3)$$

Si notre hypothèse est exacte, la vitesse du front décrit par (3.3) quand $\epsilon = 1/N$ doit donner la vitesse moyenne du front à N particules.

On peut imposer le même genre de *cut-off* à des équations où le temps est continu. Par l'exemple, dans le cas de l'équation de Fisher-Kolmogorov, on peut écrire

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + (h - h^3)a(h) \quad (3.4a)$$

où $a(h)$ vérifie

$$\begin{cases} a(h) = 1 & \text{si } h > \epsilon, \\ a(h) \ll 1 & \text{si } h \ll \epsilon. \end{cases} \quad (3.4b)$$

Dans (3.4), la concentration $h(x, t)$ est décrite par l'équation de Fisher-Kolmogorov quand $h(x, t) > \epsilon$ et tend rapidement vers zéro dès que $h(x, t)$ devient plus petit que ϵ .

Cette idée d'ajouter un *cut-off* au champ moyen pour tenir compte de l'aspect discret du modèle microscopique est assez naturelle. Elle avait déjà été essayée dans un modèle de réaction diffusion²³ où les auteurs avaient observé numériquement que la vitesse du front avec *cut-off* tend très lentement

vers la vitesse sans *cut-off*. Dans un modèle assez différent décrivant l'évolution d'une population de virus⁴⁴⁻⁴⁶, les auteurs reproduisent des résultats expérimentaux en ajoutant un *cut-off* dans les équations d'évolution pour interdire à une fraction de virus d'avoir une descendance.

3.2 Résolution du modèle avec *cut-off*

Dans nos articles [1,2] qui sont reproduits en appendice, nous avons montré comment l'on pouvait calculer la vitesse d'un modèle de type Fisher-Kolmogorov auquel on ajoute un *cut-off* ϵ . Le résultat final est

$$v_\epsilon \approx v^* - \frac{\pi^2 \gamma^{*2} v''(\gamma^*)}{2 \log^2 \epsilon}, \quad (3.5)$$

où $v^* = v(\gamma^*)$ est la vitesse critique du modèle sans *cut-off*. Par exemple, dans le cas de l'équation de Fisher-Kolmogorov, $v(\gamma)$ est donné par (2.7) et le résultat général (3.5) se simplifie en

$$v_\epsilon \approx 2 - \frac{\pi^2}{\log^2 \epsilon}. \quad (3.6)$$

Nous avons obtenu (3.5) dans nos articles [1,2] en prenant comme exemple l'équation de Fisher-Kolmogorov et donc en étudiant (3.4) (voir les deux articles qui sont reproduits dans l'appendice de ce travail). Je vais reprendre ici les principales étapes de ce calcul dans le cadre du modèle (3.3).

Comparaison des vitesses

Les simulations numériques du chapitre précédent montrent que la vitesse du modèle fini est inférieure à la vitesse marginalement stable v^* du champ moyen. Si notre hypothèse est correcte, on s'attend à ce que la vitesse v_ϵ du modèle avec un *cut-off* ϵ soit elle aussi inférieure à v^* :

$$v \leq v^*. \quad (3.7)$$

On peut comprendre cette inégalité en comparant un front $h_\epsilon(x, t)$ décrit par la dynamique (3.3) pour un certain ϵ non-nul avec un front $h(x, t)$ décrit par l'équation sans *cut-off*. Si ces deux fronts ont la même condition initiale, il est facile de constater par une récurrence sur le temps que l'on a $h_\epsilon(x, t) \leq h(x, t)$ pour tout x et pour tout t . De plus, on peut toujours considérer que la condition initiale du modèle avec *cut-off* est localisée; même si $h_\epsilon(x, 0)$ n'est pas localisée, alors $h_\epsilon(x, 1)$ l'est. Le modèle sans *cut-off* se déplace donc à la vitesse marginalement stable v^* et on obtient finalement l'inégalité (3.7).

Forme du front dans la queue

Déterminons maintenant la forme du front dans la queue. À cause du *cut-off* ϵ , le front décrit par (3.3) ne peut pas avoir une décroissance exponentielle. Cependant, il existe toute une région où l'on a

$$\epsilon < h(x, t) \ll 1 \quad (3.8)$$

et où le front $h(x, t)$ est décrit par les équations linéarisées. Dans cette région, on peut reprendre l'analyse linéaire de la section 1.2.2 de l'introduction de cette partie et l'on trouve que les fronts en translation uniforme sont de la forme

$$h(x, t) = F_v(z) = A_1 e^{-\gamma_1 z} + A_2 e^{-\gamma_2 z}, \quad (3.9)$$

où z est la position dans le référentiel se déplaçant à la vitesse du front :

$$z = x - vt, \quad (3.10)$$

et où $v_\epsilon = v(\gamma_1) = v(\gamma_2)$ avec $v(\gamma)$ donnée par la relation de dispersion (3.2). Comme la vitesse v_ϵ est inférieure à la vitesse marginalement stable v^* , les deux racines γ_1 et γ_2 sont nécessairement des nombres complexes conjugués. En écrivant $\gamma_{\{1,2\}}$ sous la forme $\gamma_r \pm i\gamma_i$ et en ajustant l'origine des z pour faire disparaître la phase, on trouve donc que le front est de la forme

$$h(x, t) = \frac{A}{\gamma_i} \sin(\gamma_i z) e^{-\gamma_r z} \quad (3.11)$$

dans la région (3.8).

Si ϵ est assez petit, $h(x, t)$ doit ressembler au front sans *cut-off* et l'on s'attend à avoir $\gamma_i \ll 1$ et $\gamma_r \approx \gamma^*$. Au premier ordre, la vitesse v_ϵ est donc donnée par

$$v_\epsilon \approx v^* + \frac{1}{2}(\gamma_r \pm i\gamma_i - \gamma^*)^2 v''(\gamma^*). \quad (3.12)$$

Comme v_ϵ est un nombre réel plus petit que v^* , on voit facilement à partir de (3.12) que l'on doit avoir

$$\gamma_r - \gamma^* \ll \gamma_i, \quad (3.13)$$

et l'on trouve finalement

$$v_\epsilon \approx v^* - \frac{\gamma_i^2}{2} v''(\gamma^*). \quad (3.14)$$

Il ne reste donc qu'à déterminer γ_i en fonction de ϵ .

Détermination de γ_i

La formule (3.11) n'est valable que lorsque $h(x, t)$ est suffisamment grand devant ϵ . À une certaine distance z_0 le front devient d'ordre ϵ

$$\frac{A}{\gamma_i} \sin(\gamma_i z_0) e^{-\gamma_r z_0} \propto \epsilon, \quad (3.15)$$

et, quand z est supérieur à z_0 , le front tend rapidement vers zéro. Comme γ_i est petit, on voit que z_0 doit être grand et $\gamma_i z_0$ proche de π :

$$\gamma_i z_0 \approx \pi - \gamma_i \delta z_0. \quad (3.16)$$

Dans cette expression, δz_0 est l'ordre de grandeur de la distance sur laquelle le front $h(x, t)$ passe d'une valeur d'ordre ϵ à une valeur nulle (ou petite devant ϵ). Cette distance δz_0 est essentiellement donnée par la largeur de la distribution $\rho(y)$ et ne dépend pas de ϵ au premier ordre.

Si l'on utilise (3.16) dans l'équation (3.15), on obtient

$$A \delta z_0 e^{-\gamma_r z_0} \propto \epsilon. \quad (3.17)$$

Au premier ordre, le nombre A ne dépend pas de ϵ . En effet, loin du *cut-off*, dans la région où $h(x, t)$ est grand devant ϵ , on s'attend à retrouver la forme du front sans *cut-off*. Celle-ci s'écrit (voir (1.14) dans l'introduction de cette partie)

$$(Az + B)e^{-\gamma^* z}, \quad (3.18)$$

où A et B sont fixés par les non-linéarités du problème et par l'origine des z . Sachant que $\gamma_r \approx \gamma^*$, si l'on compare (3.18) avec (3.11) pour $\gamma_i z$ petit on voit que $B = 0$ pour notre choix des origines et que la constante A dans les équations (3.11–3.17) est bien la même que dans (3.18).

Puisque les nombres A et δz_0 sont au premier ordre indépendants de ϵ , on obtient en prenant le logarithme de (3.17)

$$\log \epsilon = -\gamma_r z_0 + O(1), \quad (3.19)$$

et, en utilisant $\gamma^* \approx \gamma_r$,

$$z_0 \approx -\frac{\log \epsilon}{\gamma^*}. \quad (3.20)$$

En reportant dans (3.16), on obtient finalement

$$\gamma_i \approx -\frac{\pi \gamma^*}{\log \epsilon}. \quad (3.21)$$

Résultat final et forme d'échelle

Si l'on reporte (3.21) dans l'expression (3.14), on retrouve l'expression annoncée par (3.5). On peut aussi utiliser (3.11) pour obtenir la forme du front dans la région (3.8) :

$$h(x, t) = A \frac{\log \epsilon}{\pi \gamma^*} \sin \left(\frac{\pi \gamma^*}{\log \epsilon} z \right) e^{-\gamma^* z}, \quad (3.22)$$

où A est déterminée par les non-linéarités du modèle.

3.3 Simulations numériques

Le modèle (3.3) est assez difficile à simuler pour une distribution $\rho(y)$ quelconque. En effet, la position x peut en général prendre des valeurs quelconques et il faut trouver une manière efficace de discrétiser la fonction $h(x, t)$ pour la représenter dans la mémoire de l'ordinateur. Cependant, quand $\rho(y)$ est de la forme (2.11)

$$\rho(y) = p\delta(1 - y) + (1 - p)\delta(y), \quad (3.23)$$

et que la condition initiale est une marche d'escalier, alors la quantité $h(x, t)$ n'est non-nulle que pour des valeurs entières de x et est donc définie par un nombre discret de valeurs. De plus, dans la queue du front, $h(x, t)$ ne peut pas avoir une valeur non-nulle inférieure au *cut-off* ϵ . Près de la région stable $h(x, t) = 1$, le front tend très vite vers 1 (beaucoup plus vite qu'une exponentielle). La précision de la machine est rapidement atteinte et les valeurs de $h(x, t)$ qui sont trop proches de 1 sont remplacées par des 1 dans la mémoire de l'ordinateur. On voit donc qu'à tout instant t le front est entièrement décrit par un nombre fini de valeurs différentes de 0 et de 1. De plus, la vitesse de propagation étant entièrement déterminée par la décroissance du front dans la queue, la perte de précision numérique près de la zone stable n'a aucune influence sur les résultats finaux.

Le modèle (3.3) que l'on simule est déterministe et ne fait intervenir qu'un nombre fini de valeurs non-triviales. On observe numériquement qu'après une période transitoire le système se bloque sur un cycle périodique dans le temps : il existe deux nombres T et ΔX tels que l'on a $h(x, t) = h(x + \Delta x, t + T)$ pour tout x et tout t assez grand. La vitesse du front est alors donnée par le rapport $\Delta X/T$. Par exemple, pour $p = 0,25$ et $\epsilon = 10^{-5}$, on trouve

$$v_\epsilon = \frac{343}{431}. \quad (3.24)$$

On voit donc que par une simulation numérique relativement simple (qui ne dure que quelques fractions de secondes), on peut obtenir l'expression *exacte* de la vitesse du front².

La figure 3.1 donne pour deux valeurs de ϵ la vitesse du front en fonction de p . La vitesse minimale du modèle sans *cut-off* (pour $\epsilon = 0$) est également donnée à titre de référence. On remarque que le système a tendance à se déplacer à des vitesses correspondant à des nombres rationnels simples ; par exemple, pour $\epsilon = 1/64$, la vitesse reste égale à $1/2$ pour p variant entre 0,107 et 0,132. Dans la liste des vitesses les plus probables viennent ensuite $v = 1/3$ et $v = 2/3$, puis $v = 1/4$, $v = 3/4$, *etc.* Pour un ϵ plus petit, les paliers de vitesses sont moins longs et dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$ la fonction $v(p)$ devient strictement croissante.

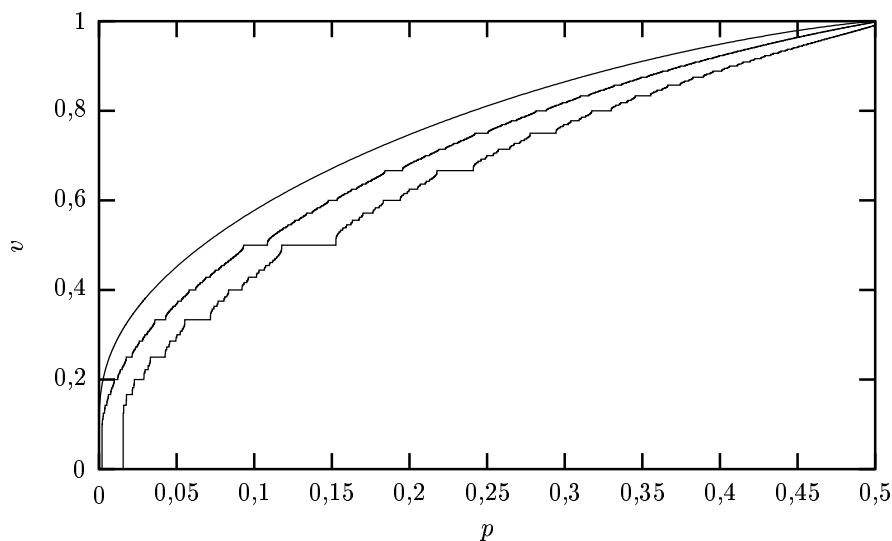


FIG. 3.1 – Vitesse du front en fonction du paramètre p pour un *cut-off* $\epsilon = 1/64$ (courbe du bas), un *cut-off* $\epsilon = 1/512$ (courbe du milieu) et pour le modèle sans *cut-off* (courbe du haut).

Pour un ϵ fini, la fonction $v(p)$ est assez intéressante d'un point de vue analytique. Elle est manifestement croissante au sens large et la mesure des points où la fonction est rationnelle est non-nulle. Numériquement, on ne peut observer que des vitesses rationnelles. Analytiquement, il serait intéressant de déterminer

- si tous les rationnels entre 0 et 1 sont atteints,
- s'il existe des valeurs de p pour lesquelles la vitesse $v(p)$ est irrationnelle,
- si l'ensemble de ces valeurs a une mesure nulle ou non,
- si la fonction $v(p)$ est continue (ce qui impliquerait que tous les irra-

tionnels entre 0 et 1 soient atteints).

(Par un argument simple d'analyse, on peut cependant montrer qu'il n'existe pas de fonction croissante au sens large dont l'image est l'ensemble des rationnels entre 0 et 1.)

Comme prévu par notre calcul, on remarque sur la figure 3.1 que la vitesse du modèle (3.3) avec un *cut-off* ϵ tend vers la vitesse minimale v^* du modèle sans *cut-off* quand $\epsilon \rightarrow 0$. La figure 3.2 compare la prédiction (3.5) aux données numériques sur un graphe où est représentée pour trois valeurs de p la différence $v^* - v$ en fonction de ϵ . L'accord est excellent dès que ϵ est plus petit que 10^{-4} .

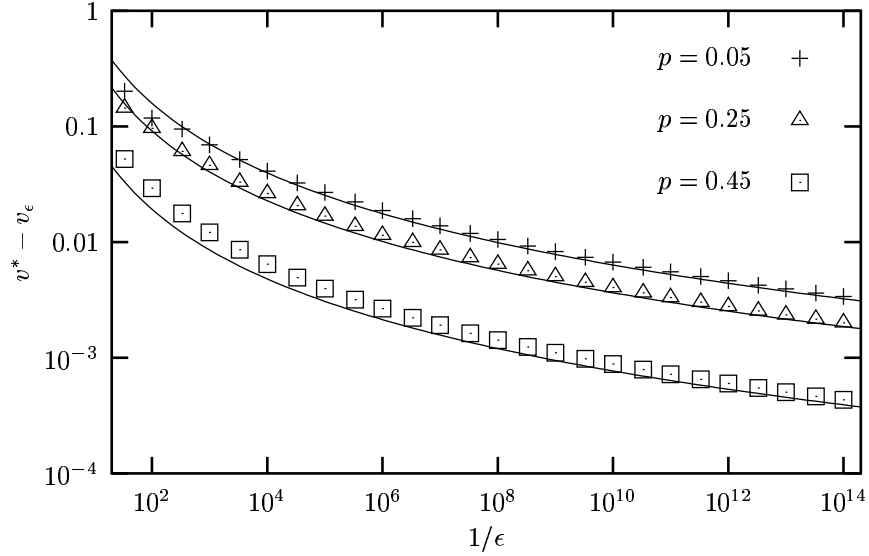


FIG. 3.2 – Différence entre la vitesse minimale v^* du modèle sans *cut-off* et la vitesse du modèle avec un *cut-off* ϵ en fonction de $1/\epsilon$ pour trois valeurs du paramètre p . Les lignes représentent la prédiction (3.5).

La figure 3.3 permet de vérifier la prédiction (3.22) sur la forme d'échelle du front dans le régime stationnaire ; la quantité $e^{\gamma^* z} h(x, t)$ y est représentée en fonction de $z = x - X_t$ (où $X_t \approx vt$ est la position du front) pour $p = 0,25$ et pour plusieurs valeurs de ϵ . On voit clairement que pour des z assez grands, cette forme de front est bien donnée par une arche de sinus dont la hauteur et la largeur sont proportionnelles à $|\log \epsilon|$.

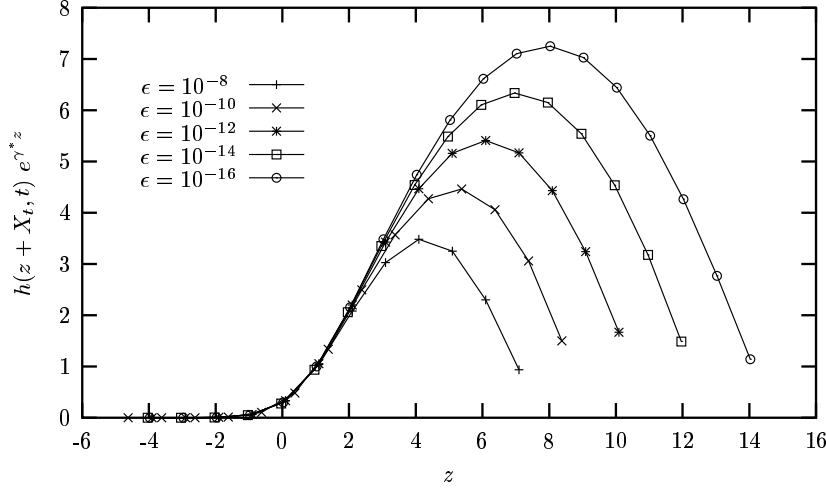


FIG. 3.3 – Pour $p = 0,25$ et pour plusieurs valeurs du *cut-off* ϵ , forme normalisée du front en fonction de z où z est l'abscisse relative à la position X_t du front.

3.4 Comparaison avec le modèle microscopique

Comme expliqué dans l'introduction de ce chapitre, on s'attend à ce que la vitesse du modèle stochastique soit en première approximation donnée par la vitesse du modèle déterministe avec *cut-off* quand ce *cut-off* vaut $\epsilon = 1/N$. La figure 3.4 compare les simulations numériques présentées dans le chapitre précédent (voir la figure 2.4 page 33) à la prédiction (3.5). Sans être parfait, l'accord entre les deux modèles est très bon. La différence de vitesse $v^* - v_N$ entre le champ moyen et le modèle stochastique à N particules semble donc être en $K/\log^2 N$, où l'ordre de grandeur du coefficient K peut être obtenu grâce à (3.5) en calculant la vitesse du modèle déterministe avec un *cut-off* $\epsilon = 1/N$. Il reste possible cependant que l'accord entre le modèle stochastique et le modèle avec *cut-off* devienne meilleur pour des N beaucoup plus grands et que la prédiction (3.5) soit asymptotiquement exacte.

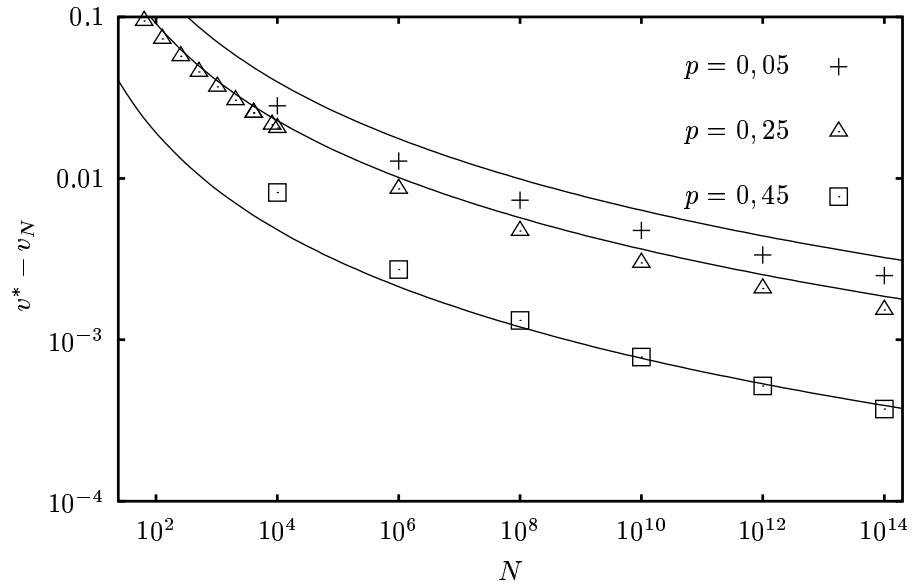


FIG. 3.4 – Comparaison entre la vitesse du modèle stochastique à N particules (obtenue numériquement) et celle du modèle déterministe avec un *cut-off* $\epsilon = 1/N$ (calculée à partir de (3.5)).

Chapitre 4

Effet des conditions initiales sur la position d'un front d'onde

Dans le chapitre précédent, j'ai expliqué comment nous avons déterminé la vitesse de propagation d'un front avec un *cut-off* ϵ en montrant que le front prend une forme d'échelle dans sa queue¹. Plus précisément, nous avons montré que dans le régime asymptotique le front se met sous la forme

$$h(x, t) = \log \epsilon \, F\left(\frac{x - X_t}{\log \epsilon}\right) e^{-\gamma^*(x - X_t)} \quad (4.1)$$

pour une certaine fonction F , où $X_t = X_0 + vt$ est la position du front.

Cette idée d'utiliser une fonction d'échelle pour représenter la forme d'un front décrit par une équation du type Fisher-Kolmogorov nous a permis¹ de calculer l'influence des conditions initiales sur la forme et sur la vitesse de propagation de ce front et de retrouver les prédictions (1.23, 1.25) de Bramson^{5,6}. Je vais me contenter de présenter ici les grandes étapes de ce calcul ; les détails techniques se trouvent dans l'appendice de notre article [1] qui est reproduit à la fin de ce travail page 137.

4.1 Introduction de la forme d'échelle

On suppose que la condition initiale du front décroît au moins aussi vite que

$$h(x, 0) \approx x^\nu e^{-\gamma^* x}, \quad (4.2)$$

pour un certain ν donné. En utilisant les résultats présentés dans les sections 1.2.2 et 1.2.4 de l'introduction de cette partie, on s'attend dans le

régime asymptotique à ce que le front se déplace à la vitesse marginalement stable v^* et que sa forme soit donnée dans sa queue par

$$h(x, t) = A(x - X_t)e^{-\gamma^*(x - X_t)} \quad (4.3)$$

avec $X_t = v^*t$.

Quand t est fini, la forme du front dépend du temps et doit ressembler à la condition initiale (4.2) pour des t petits et à la forme finale (4.3) dans la limite des t grands. En s'inspirant de la fonction d'échelle (4.1), on cherche $h(x, t)$ sous la forme

$$h(x, t) = At^\alpha G\left(\frac{x - X_t}{t^\alpha}\right) e^{-\gamma^*(x - X_t)}, \quad (4.4)$$

où la position X_t dépend *a priori* de manière non-triviale du temps mais est telle que X_t/t tend vers v^* quand t tend vers l'infini. En reportant (4.4) dans l'équation de Fisher-Kolmogorov linéarisée, on trouve que l'on doit avoir

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad (4.5a)$$

$$X_t \approx v^*t - \frac{\beta}{\gamma^*} \log t, \quad (4.5b)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} G + \frac{\xi}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} G + \left(\beta - \frac{1}{2}\right) G = 0, \quad (4.5c)$$

où $\xi = (x - X_t)/\sqrt{t}$ est l'argument de la fonction G .

Pour des temps longs (des ξ petits), $h(x, t)$ doit être de la forme (4.3). On en déduit

$$G(0) = 0, \quad (4.6a)$$

$$G'(0) = 1. \quad (4.6b)$$

Avec ces deux conditions, il n'y a qu'une seule solution $G(\xi)$ à l'équation différentielle (4.5c) pour un β fixé. On peut alors prouver que cette solution n'est partout positive (et donc physiquement acceptable) que si $\beta \leq 3/2$. Dans la limite où ξ est grand, on peut calculer le comportement asymptotique de $G(\xi)$. On trouve¹

$$G(\xi) \propto \xi^{1-2\beta}. \quad (4.7)$$

Ce comportement à ξ grand doit correspondre à la condition initiale du front (t petit). Quand cette condition initiale est donnée par (4.2), on voit que ν et β sont reliés par

$$\nu = 1 - 2\beta. \quad (4.8)$$

La figure 4.1 représente à plusieurs instants t la quantité $e^{\gamma^* z} h(x, t)$ en fonction de $z = x - X_t$ pour un front dont la condition initiale décroît comme $x^{-1} e^{-\gamma^* x}$. D'après ce qui précède, cette quantité est simplement donnée dans la queue du front par $\sqrt{t} G(z/\sqrt{t})$, où $G(\xi)$ est la solution de (4.5c) pour $\beta = 1$. Quand le temps t devient grand, le front se rapproche de sa forme asymptotique $e^{\gamma^* z} h(x, t) = z$ pour des z petits. On peut comparer la fonction d'échelle représentée sur la figure 4.1 à celle obtenue pour un front avec un *cut-off* ϵ (figure 3.3).

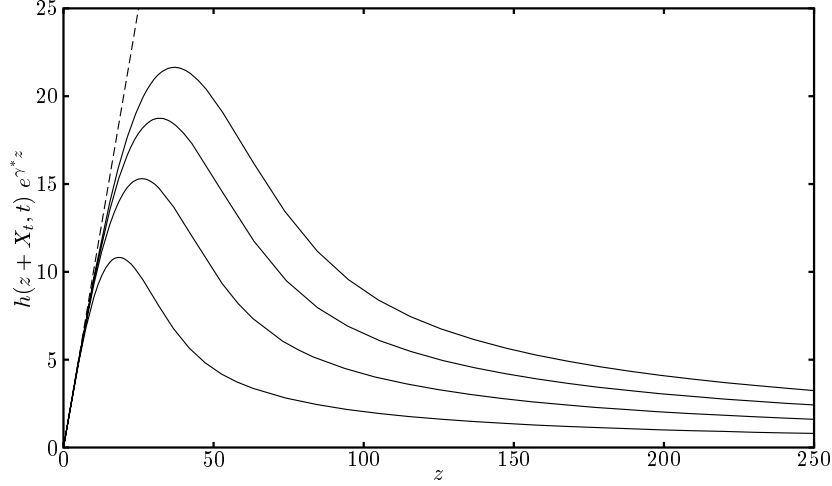


FIG. 4.1 – Forme normalisée du front en fonction de $z = x - X_t$ aux instants 100, 200, 300 et 400 quand la condition initiale décroît comme $x^{-1} e^{-\gamma^* x}$.

En utilisant (4.5b) et (4.8), on en déduit que pour $\nu > -2$ (ce qui correspond à $\beta < 3/2$), la position du front est

$$X_t \approx v^* - \frac{1 - \nu}{2\gamma^*} \log t. \quad (4.9)$$

Pour $\nu < -2$, le résultat est le même que pour une condition initiale localisée ; on l'obtient en posant $\nu = -2$ dans (4.9) :

$$X_t \approx v^* - \frac{3}{2\gamma^*} \log t. \quad (4.10)$$

La forme du front est alors donnée par la fonction $G(\xi)$ qui est solution de (4.5c) pour $\beta = \frac{3}{2}$. La figure 4.2 représente $e^{\gamma^* z} h(x, t)$ en fonction de $z = x - X_t$ pour un tel front.

Les résultats (4.9) et (4.10) sont identiques aux résultats (1.23) et (1.25) de Bramson^{5,6}.

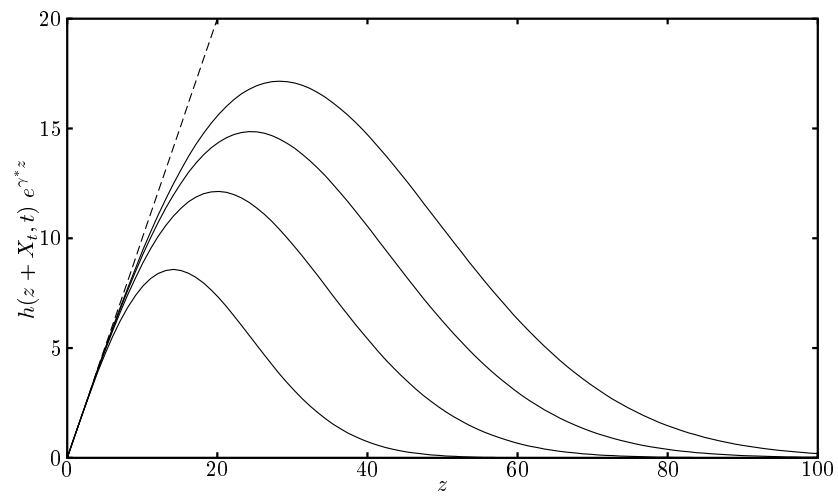


FIG. 4.2 – Forme normalisée du front en fonction de $z = x - X_t$ aux instants 100, 200, 300 et 400 quand la condition initiale décroît plus vite que $x^{-2}e^{-\gamma^* x}$.

Chapitre 5

Conclusion de la première partie

Les modèles de propagation des fronts permettent de décrire un grand nombre de systèmes en biologie, en chimie ou en physique (propagation de gènes, réaction-diffusion, combustion, ...) ⁹⁻¹⁸. Parmi tous ces modèles, on distingue habituellement deux grandes catégories de fronts ; ceux qui se propagent dans un état stable et ceux qui se propagent dans un état instable. La première catégorie a des propriétés relativement simples : il n'existe qu'une seule vitesse de propagation possible (et une seule forme du front) et le système tend exponentiellement vite vers son régime asymptotique ²². À l'opposé, les fronts se déplaçant dans un milieu instable sont beaucoup plus complexes et intéressants : il existe une infinité continue de solutions stables en translation uniforme et il faut déterminer laquelle de ces solutions est sélectionnée. Pour une certaine famille d'équations ressemblant à l'équation de Fisher-Kolmogorov (équation (1.1) dans l'introduction de cette partie), Aronson et Weinberger ^{9,10} ont montré que pour une condition initiale localisée (ou qui décroît suffisamment vite à l'infini), c'est la solution qui correspond à la vitesse *marginale*ment stable v^* qui est sélectionnée (sections 1.2 et 1.3). Parmi ces équations étudiées par Aronson et Weinberger, on trouve qu'il existe deux types de fronts se propageant dans un milieu instable : les fronts *pulled*, où il suffit de faire une analyse linéaire de la queue du front pour déterminer la vitesse v^* , et les fronts *pushed* où il faut résoudre l'équation non-linéaire pour calculer v^* . Cependant, il n'existe en général pas de critère simple qui permette d'affirmer si tel front est *pushed* ou *pulled* ni, dans le premier cas, quelle est la valeur de v^* . Ce résultat sur la sélection de la vitesse de propagation marginalement stable, pour une condition initiale localisée, semble pouvoir se généraliser à toutes les équations décrivant la propagation d'un front dans un milieu instable ; c'est l'*hypothèse de stabilité marginale* ^{12, 17, 20, 21}.

L'objectif de cette partie a été d'étudier l'effet des détails du système à l'échelle microscopique sur la vitesse de propagation du front d'onde. En effet,

l'équation de Fisher-Kolmogorov est obtenue⁷ en prenant la limite $N \rightarrow \infty$ d'un système fini où N individus interagissent (chapitre 2). En particulier, la valeur du front s'interprète comme la *proportion* d'individus possédant un certain gène. Dans la limite où N est grand, le modèle est déterministe et cette proportion est un nombre continu compris entre 0 et 1, alors que dans le modèle stochastique fini, c'est un nombre discret qui ne peut pas en particulier prendre des valeurs entre 0 et $1/N$. Comme la vitesse de propagation dans le modèle continu est entièrement déterminée par la décroissance exponentielle du front dans sa queue (chapitre 1), et comme il ne peut pas y avoir une telle décroissance dans le modèle fini, il est intéressant d'étudier l'effet des détails microscopiques sur la vitesse de propagation des fronts.

Notre travail a permis de montrer que dans le cas d'un front *pulled*, ce caractère discret du système fini a une influence considérable sur la vitesse de propagation du front. En particulier, si l'on prend en compte ces effets de taille finie en ajoutant un *cut-off* ϵ dans la queue du front, nous avons montré que la vitesse marginalement stable v^* du front sans *cut-off* est automatiquement sélectionnée quelle que soit la condition initiale^{1,2} (chapitre 3). De plus, la vitesse de propagation v_ϵ du modèle avec un *cut-off* ϵ converge de manière étonnamment lente vers la vitesse marginalement stable v^* quand ϵ tend vers zéro : en écrivant la forme du front dans sa queue à l'aide d'une fonction d'échelle (équation (3.22) et figure 3.3), nous avons montré que la différence $v^* - v_\epsilon$ est d'ordre $(\log \epsilon)^{-2}$ avec un certain préfacteur que nous savons calculer¹ (équation (3.5)). On voit donc qu'en plus de sélectionner la vitesse marginalement stable, la présence d'un *cut-off* dans la queue du front introduit une correction importante à cette vitesse.

Nos résultats sur le modèle continu avec *cut-off* peuvent s'appliquer aux systèmes microscopiques. En effet, nous avons considéré un modèle stochastique simple qui fait intervenir N particules en mouvement sur une ligne (chapitre 2). Dans la limite où N tend vers l'infini, la proportion de particules à droite d'un certain point x évolue au cours du temps selon une équation qui décrit la propagation d'un front *pulled* dans un état instable (équation (2.5)). Quand N est fini, le front ne peut manifestement pas prendre une valeur non-nulle plus petite que $1/N$. On s'attend donc, quand N est grand, à ce que la vitesse moyenne de ce front soit donnée par l'équation continue (pour $N \rightarrow \infty$) à laquelle on ajoute un *cut-off* $\epsilon = 1/N$ (équation (3.3)).

Faire une telle vérification numérique n'est *a priori* pas évident : d'un côté notre résultat ne s'applique que pour des *cut-off* assez petits et donc des N assez grands, et d'un autre côté il est difficile de simuler plus de 10^4 ou 10^5 particules individuellement. Si l'on se contente de faire des mesures pour des N aussi petits, les résultats obtenus sont compatibles avec une correction de la vitesse qui décroît en $N^{-1/3}$ (figure 2.3 section 2.3.1). Pour

avoir un résultat numérique plus fin, il faut être capable de simuler le système pour des valeurs de N beaucoup plus grandes. Un des avantages du modèle que nous avons étudié est que ce dernier est discret dans l'espace et dans le temps et que les N particules se trouvent toutes dans une région comportant typiquement $\approx \log N$ sites. Il est alors possible de simuler non pas les N particules individuellement, mais les $\approx \log N$ sites qui en ont au moins une. En utilisant cette technique, nous avons été capables de mesurer la vitesse de notre modèle pour des tailles allant jusqu'à 10^{14} particules (section 2.3.2).

Les résultats numériques ainsi obtenus sont en bon accord avec nos prédictions théoriques. En particulier, on observe très clairement que la différence entre la vitesse marginalement stable v^* du modèle déterministe et celle du système à N particules n'est pas en $N^{-1/3}$ mais décroît comme $(\log N)^{-2}$. (Il est cependant possible qu'il y ait en fait une superposition de deux régimes, avec une correction en loi de puissance pour des N petits et une correction logarithmique pour des N plus grands⁴⁷.) Le préfacteur que nous avons calculé à partir de l'équation déterministe avec *cut-off* n'est cependant pas parfait : il est du bon ordre de grandeur, mais il faudrait simuler des systèmes beaucoup plus grands (peut-être de l'ordre de $N = 10^{30}$) pour savoir avec certitude si le préfacteur dans notre prédiction est asymptotiquement correct ou non. À la suite de notre article, Kessler, Ner et Sander³¹ ont étudié cette question en considérant un autre modèle microscopique que l'on peut également simuler pour des grandes valeurs de N . Leurs résultats indiquent que la correction à la vitesse est bien compatible avec une loi en $(\log N)^{-2}$, mais que le préfacteur semble en gros deux fois plus petit que celui prédit par notre théorie déterministe. Une extension intéressante de ce travail serait donc d'étudier plus en détail ces modèles stochastiques pour déterminer la bonne valeur de ce préfacteur et vérifier si notre prédiction donne juste un ordre de grandeur ou une valeur exacte.

Un résultat inattendu de ce travail est que l'aspect stochastique du modèle fini n'a pas une influence déterminante sur la valeur de la vitesse à laquelle se propage le système ; pour trouver que la vitesse marginalement stable est sélectionnée avec une correction en $(\log N)^{-2}$, il suffit de prendre en compte l'aspect discret du modèle en ajoutant un *cut-off* à l'équation déterministe qui décrit le front à grande échelle. (pour $N \rightarrow \infty$). Cependant, dans le modèle stochastique, la position du front est manifestement une variable aléatoire et ses fluctuations ne peuvent pas être décrites par le simple ajout d'un *cut-off* à l'équation de propagation. Numériquement, on mesure effectivement une constante de diffusion qui semble décroître en $(\log N)^{-3}$. Une autre possibilité d'extension du travail présenté dans cette partie serait d'expliquer cette nouvelle loi logarithmique.

La seconde contribution de ce travail a été de retrouver par une méthode

simple les résultats de Bramson sur la manière dont la vitesse d'un front converge vers sa valeur asymptotique en fonction des conditions initiales. Bramson a en effet démontré^{5,6} que pour une condition initiale localisée, la position d'un front *pulled* décrit par une équation de type Fisher-Kolmogorov est de la forme $X_t = v^*t - \lambda \log t + O(1)$ où v^* est la vitesse asymptotique et λ un nombre positif (équation (1.23) et section 1.3.1). La correction à la vitesse est donc en $1/t$ et l'approche du régime asymptotique est très lente. Comme pour l'argument de stabilité marginale, il semble que ce résultat sur la convergence lente de la vitesse ne soit pas une propriété particulière de l'équation de Fisher-Kolmogorov mais puisse s'appliquer à toutes les équations décrivant la propagation d'un front *pulled* dans un état instable^{1,17}. (Par contre, pour les fronts se propageant dans un état stable ou pour les fronts de type *pushed*, la convergence vers l'état asymptotique est exponentiellement rapide²².)

Nous avons retrouvé¹ ces résultats de Bramson en utilisant une méthode similaire à celle employée pour déterminer la vitesse d'un front avec un *cut-off* ϵ ; en effet, l'étape déterminante de ce calcul est de montrer que la forme du front en fonction du temps peut s'écrire à l'aide d'une fonction d'échelle dans le référentiel en mouvement avec le front. On peut alors retrouver la correction à la vitesse en $1/t$ en ajustant le paramètre de cette fonction d'échelle pour qu'elle corresponde aux conditions initiales (chapitre 4). Cette méthode a été beaucoup généralisée depuis et étendue à d'autres types d'équations par Ebert et van Saarloos¹⁷.

Tous les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus en considérant des fronts dans un espace en une dimension. On peut facilement définir l'équation de Fisher-Kolmogorov dans un espace de dimension supérieure en remplaçant le $\partial^2/\partial x^2$ dans l'équation (1.1) par l'opérateur laplacien. Beaucoup de propriétés de l'équation en une dimension sont conservées ; en particulier la vitesse de propagation est déterminée par une analyse linéaire dans la queue du front. Je pense que l'ajout d'un *cut-off* dans la queue d'un front en deux dimensions ou plus a un effet semblable à ce qu'on obtient en une dimension, mais cela reste à vérifier.

Deuxième partie

Distribution de l'énergie libre d'un polymère dirigé en milieu aléatoire

Cette partie est consacrée à l'étude des fluctuations de l'énergie libre d'un polymère dirigé en milieu aléatoire. En résolvant les équations données par la méthode des répliques et l'Ansatz de Bethe, nous avons pu calculer exactement les premiers cumulants de l'énergie libre d'un polymère dirigé en $1 + 1$ dimensions dans le cas où la dimension transversale est finie et périodique^{3,4}. De plus, nous avons montré qu'il existait un régime d'échelle où l'on pouvait calculer toute la distribution de l'énergie libre⁴. Ce régime d'échelle est caractérisé par une certaine fonction $G(\beta)$ qui est universelle⁴⁸⁻⁵⁰ pour les problèmes décrits par l'équation KPZ (Kardar-Parisi-Zhang)⁵¹.

Le premier chapitre de cette partie (chapitre 6) est consacré à la présentation et à la définition des polymères dirigés en milieu aléatoire et à une courte revue des travaux qui leur ont été consacrés. Pour un panorama plus complet sur tous ces travaux, on peut se reporter aux revues récentes de Halpin-Healy & Zhang⁵² et de Krug⁵³.

Le chapitre 7 rappelle la relation classique⁵⁴ entre le calcul des répliques d'un polymère dirigé et un modèle de particules quantiques en interaction. Ce calcul est refait ici de manière précise, afin de pouvoir donner les expressions exactes qui relient les paramètres du problème quantique à ceux du polymère dirigé.

Les trois chapitres suivants constituent la partie originale de ce travail. Dans le chapitre 8, je présente nos résultats exacts^{3,4} sur l'énergie libre d'un polymère dirigé sur un cylindre ou sur une bande. Le chapitre 9 est consacré à la comparaison de ces résultats exacts avec des simulations numériques et le chapitre 10 présente deux techniques permettant de calculer directement un développement de l'énergie libre d'un polymère dirigé sans passer par la méthode des répliques.

Chapitre 6

Introduction des problèmes de polymères dirigés et revue des résultats connus

6.1 Présentation des polymères dirigés

Un polymère dirigé est une ligne qui s'étend dans une certaine direction donnée tout en ayant la possibilité de faire des écarts transversaux. On suppose que le milieu dans lequel s'étend ce polymère est aléatoire, au sens que chaque point offre plus ou moins de « résistance » au passage du polymère et que les points de faible ou de forte résistance sont distribués aléatoirement. Le polymère dirigé a alors tendance à faire des écarts par rapport à sa direction privilégiée pour passer par certaines régions particulières du milieu. On voit donc qu'il s'agit d'un modèle de système désordonné en équilibre.

Une réalisation physique possible d'un polymère dirigé est donnée par des modèles d'Ising ferromagnétiques en deux dimensions où l'interaction entre spins voisins est légèrement aléatoire⁵⁴⁻⁵⁷. En dessous de la température critique, le système tend à s'organiser pour former de grands domaines homogènes. Le polymère dirigé est alors la ligne d'interface qui sépare deux de ces domaines. Pour diminuer la surface de contact et donc minimiser l'énergie du système, cette interface doit être la plus rectiligne possible. Par ailleurs, à cause du caractère aléatoire de l'interaction entre spins, il est avantageux pour l'interface de s'éloigner de la ligne droite pour passer par certaines régions particulièrement avantageuses (des « pièges ») qui seraient à portée.

Pour prendre un deuxième exemple très simple et concret de polymère dirigé, on peut considérer ce qui se passe quand on déchire une feuille de

papier : la ligne de la déchirure (le « polymère ») est dirigée dans une direction particulière mais n'est pas exactement rectiligne parce que le papier n'est pas parfait : le polymère dirigé passe par les défauts de fabrication (là où le papier est moins épais) et évite les endroits plus solides. Bien sûr, cette modélisation est très simpliste : le polymère dirigé est défini comme un problème d'équilibre tandis que l'on s'attend dans cet exemple à ce que les aspects *dynamiques* de la déchirure aient beaucoup d'importance sur la forme finale de la fracture. Cependant, des expériences de papier déchiré ont effectivement été menées^{52,58} sur plusieurs sortes de papiers de différentes tailles et ont montré que la largeur de la déchirure d'une feuille de longueur τ se comporte comme $\tau^{0.67 \pm 0.05}$, ce qui est compatible avec la valeur $\tau^{2/3}$ attendue dans un polymère dirigé (voir la revue de la section 6.3).

Dans ces deux exemples, les polymères dirigés sont des lignes dans un espace à deux dimensions. On peut aussi considérer des polymères dirigés dans des espaces de dimension supérieure. Ainsi, les lignes de vortex dans des supraconducteurs de type II au dessus du premier champ critique sont globalement alignées avec le champ magnétique appliqué mais peuvent être piégées par les défauts du matériau. Ces lignes se modélisent donc bien⁵⁹ par des polymères dirigés dans un espace à trois dimensions.

Dans la suite de ce travail, pour bien particulariser la direction dans laquelle s'étend préférentiellement le polymère par rapport aux dimensions transversales, on parlera d'espaces à $1 + 1$ dimensions ou $2 + 1$ dimensions plutôt que d'espaces à deux ou trois dimensions.

Plusieurs autres réalisations physiques ont été proposées⁵², mais c'est surtout pour leur intérêt théorique que les polymères dirigés ont reçu beaucoup d'attention ces dernières années ; ces modèles sont parmi les plus simples de la théorie des systèmes désordonnés en équilibre. On peut les étudier analytiquement, tester certaines techniques comme la *méthode des répliques* et il existe quelques résultats exacts qui sont présentés dans la revue de la section 6.3. Certains de ces résultats permettent de mieux comprendre des systèmes désordonnés plus compliqués ; par exemple, la théorie de champ moyen des polymères dirigés présente une transition de phase^{26,60} très semblable à celle des verres de spins (voir la section 6.3). De plus⁵⁵⁻⁵⁷, les polymères dirigés sont, à grande échelle, dans la classe d'universalité de l'équation KPZ introduite⁵¹ par Kardar, Parisi et Zhang pour décrire des phénomènes de croissance. L'étude des polymères dirigés peut donc permettre de prédire des propriétés de certains systèmes hors d'équilibre comme, bien sûr, des problèmes de croissance (en particulier les modèles d'Eden et de déposition balistique), mais aussi des problèmes d'écoulement non-turbulent de fluides (équation de Burgers, modèle ASEP).

6.2 Définitions du modèle et des quantités d'intérêt

Je vais donner dans cette section la définition d'un modèle de polymère dirigé sur un réseau en $1 + 1$ dimensions et présenter les quantités d'intérêt. C'est ce modèle sur réseau qui est simulé numériquement dans le chapitre 9 et qui est utilisé dans le chapitre 7 pour illustrer la méthode des répliques. La fin de cette section est consacrée aux polymères dirigés définis dans le continu.

6.2.1 Réseau et polymères

On considère un réseau plan carré et régulier repéré par des coordonnées entières (k, τ) . Chacun des sites du réseau sur une ligne donnée τ est relié à un certain nombre de sites de la ligne $\tau - 1$ précédente. Par exemple, dans le modèle que je vais considérer tout au long de cette partie, chaque site (k, τ) est relié aux deux sites $(k, \tau - 1)$ et $(k + 1, \tau - 1)$.

Un polymère dirigé $\mathcal{P}$ est alors un chemin sur ce réseau tel que la deuxième coordonnée (τ) augmente à chaque pas. La figure 6.1 donne deux exemples de polymères dirigés : l'un sur le réseau que je viens de définir (figure 6.1a) et l'autre que sur un réseau légèrement différent où chaque site (k, τ) est relié aux trois points $(k - 1, \tau - 1)$, $(k, \tau - 1)$ et $(k + 1, \tau - 1)$ (figure 6.1b).

Je supposerai toujours dans ce qui suit que le réseau est régulier et de dimension deux. Pour compléter la définition du milieu, il faut donner les conditions aux bords dans la direction des k (la *dimension transversale*). Les deux géométries le plus souvent étudiées sont celle où la dimension transversale s'étend indéfiniment dans les deux directions, et celle où elle est finie, de taille N et périodique (*i.e.* $k \equiv k + N$). On peut aussi considérer le modèle où la largeur du système est finie, de taille N , avec des bords infranchissables.

6.2.2 Énergie et fonction de partition

À chacun des sites du réseau on attribue une énergie aléatoire $\eta(k, \tau)$. On définit alors l'énergie $H(\mathcal{P})$ d'un polymère dirigé comme la somme des énergies de tous les sites visités.

$$H(\mathcal{P}) = \sum_{(k, \tau) \in \mathcal{P}} \eta(k, \tau). \quad (6.1)$$

Les énergies aléatoires sont choisies de manière indépendante sur tous les sites du réseau selon une certaine distribution $\rho(\eta)$ donnée qui décroît rapidement à l'infini. On pourra par exemple supposer que $\rho(\eta)$ est gaussienne.

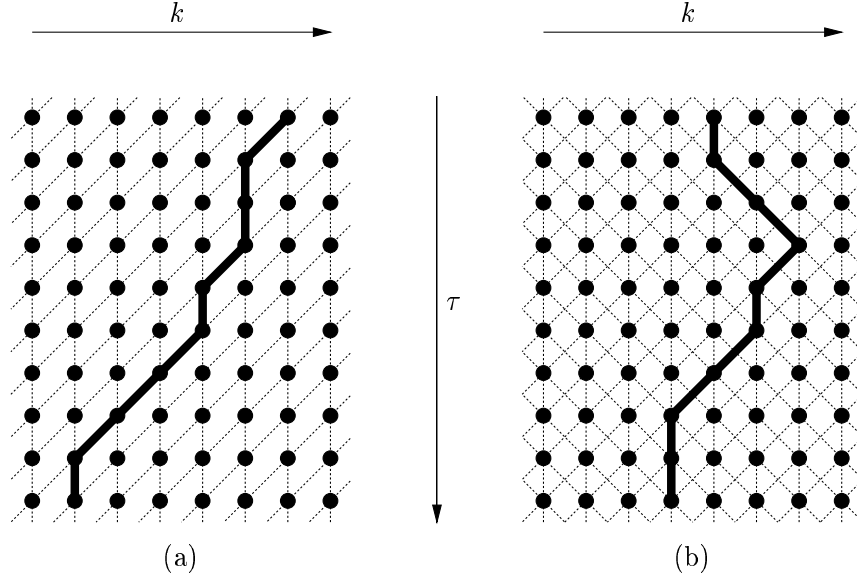


FIG. 6.1 – Deux exemples de polymères dirigés dans des réseaux réguliers de géométries différentes.

On s'intéresse aux propriétés statistiques d'un polymère dirigé de longueur τ partant d'un point particulier du réseau. On considère donc la fonction de partition $Z(\tau)$ définie comme la somme des poids de Boltzmann sur toutes les configurations :

$$Z(\tau) = \sum_{\mathcal{P}} e^{-\beta H(\mathcal{P})}. \quad (6.2)$$

β est l'inverse de la température et la somme se fait sur tous les polymères dirigés $\mathcal{P}$ commençant à l'origine $(0, 0)$ et finissant en un point quelconque d'ordonnée τ . Quand la température s'approche de zéro (β grand), la somme est dominée par le polymère d'énergie minimale. À l'autre extrême, quand la température est grande (β petit), tous les polymères ont un poids équivalent dans la définition de $Z(\tau)$. Il faut noter que la largeur de la distribution $\rho(\eta)$ joue très exactement le même rôle que l'inverse de la température. On peut donc, quitte à faire une mise à l'échelle du paramètre β , supposer *sans aucune perte de généralité* que la distribution $\rho(\eta)$ a un écart-type égal à un. Dans le même ordre d'idées, décaler le centre de la distribution $\rho(\eta)$ revient simplement à multiplier $Z(\tau)$ par une constante à la puissance τ . On peut donc se limiter, toujours sans perte de généralité, aux distributions $\rho(\eta)$ qui ont une moyenne égale à zéro.

À partir de la fonction de partition, on peut calculer de nombreuses pro-

priétés d'équilibre du modèle. Ainsi, l'énergie moyenne par unité de longueur d'un très long polymère est donnée par

$$-\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\log Z(\tau)}{\tau}. \quad (6.3)$$

La quantité $\lim_{\tau \rightarrow \infty} (\log Z)/\tau$ est (à une constante multiplicative près) l'énergie libre par unité de longueur du système.

L'énergie libre $\log Z$ d'un polymère dirigé est une variable aléatoire qui dépend des énergies sur chacun des sites du réseau ; la moyenne n'a été faite que sur toutes les configurations possibles du polymère sur un réseau où *le bruit est fixé*. Pour connaître les valeurs typiques de $\log Z$, on considère plutôt l'énergie libre par unité de longueur moyennée sur *toutes les réalisations possibles du désordre* :

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \log Z(\tau) \rangle}{\tau}. \quad (6.4)$$

Il apparaît que la quantité (6.4) est égale à l'énergie libre $\lim_{\tau \rightarrow \infty} (\log Z)/\tau$ où la moyenne sur le désordre n'a pas été prise ; C'est la propriété d'*auto-moyennage*⁶¹. On peut s'en convaincre facilement dans le cas où la direction transversale est finie : si l'on imagine que l'on découpe un très long polymère en beaucoup de grands morceaux, on voit que les différents morceaux sont essentiellement non-corrélés. L'énergie libre totale est alors une somme de variables aléatoires indépendantes, ce qui justifie de faire une moyenne sur toutes les réalisations du désordre.

L'objectif est donc de calculer dans ce problème la moyenne *sur le désordre* $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle \log Z \rangle / \tau$ de l'énergie libre par unité de longueur. On peut également s'intéresser aux fluctuations $(\langle \log^2 Z \rangle - \langle \log Z \rangle^2)/\tau$ de cette énergie libre, aux cumulants d'ordre supérieur et même à sa distribution complète.

En plus de la fonction de partition totale $\log Z(\tau)$ qui est la somme des poids de Boltzmann de tous les polymères dirigés arrivant à l'ordonnée τ , il est pratique de considérer aussi la fonction de partition partielle $Z(k, \tau)$ qui ne compte que les polymères dirigés arrivant au point de coordonnées (k, τ) . On a manifestement

$$Z(\tau) = \sum_k Z(k, \tau), \quad (6.5)$$

et l'on peut facilement écrire une relation de récurrence sur les $Z(k, \tau)$:

$$Z(k, \tau + 1) = \left(Z(k, \tau) + Z(k + 1, \tau) \right) e^{-\beta \eta(k, \tau + 1)}. \quad (6.6)$$

Cette récurrence est une traduction directe de la définition du réseau où chaque site $(k, \tau + 1)$ est relié aux deux sites (k, τ) et $(k + 1, \tau)$. Comme les $Z(k, \tau)$ ne dépendent que des énergies sur les sites d'ordonnées inférieures ou égales à τ , on voit que le contenu de la parenthèse est indépendant de l'exponentielle. On peut donc prendre facilement la moyenne sur le désordre de l'équation (6.6), sommer sur les k et obtenir, dans le cas où la dimension transversale est infinie ou périodique,

$$\langle Z(\tau) \rangle = 2^\tau \langle e^{-\beta\eta} \rangle^{\tau+1}. \quad (6.7)$$

(Cette expression doit être corrigée dans la situation où la dimension transversale est finie avec deux bords. Voir la section 9.3 pour plus de détails.) Cependant, s'il est très simple de déterminer la quantité $(\log \langle Z \rangle)/\tau$, le calcul de la moyenne $\langle \log Z \rangle / \tau$ et des fluctuations de l'énergie libre est autrement plus compliqué.

Il existe beaucoup de variantes dans la définition du modèle. La figure 6.1 donne déjà deux exemples de réseaux, mais il est facile d'en imaginer d'autres qui soient plans et réguliers. On peut aussi changer la distribution des énergies des sites, introduire des corrélations à courte portée, mettre les énergies aléatoires sur les liens plutôt que sur les sites, *etc.* On s'attend à ce que de telles modifications à l'échelle *microscopique* dans la définition du modèle ne changent pas de manière qualitative le comportement à *grande échelle* (par exemple les exposants critiques) du polymère dirigé. C'est l'idée d'universalité que l'on peut tester numériquement⁶² et qui permet d'unifier dans un seul modèle des problèmes aussi différents que des lignes de vortex dans un supraconducteur ou des interfaces entre domaines de spins.

6.2.3 Polymères dirigés dans un milieu continu

Puisque l'on s'attend à ce que les propriétés à grande échelle des polymères dirigés ne dépendent pas des détails du réseau sous-jacent, il est naturel de faire *abstraction* de ce réseau et de définir directement le modèle dans le continu.

On considère donc qu'un polymère joignant le point $(0, 0)$ au point (x, t) est une fonction $y(s)$ telle que $y(0) = 0$ et $y(t) = x$. (Étant donné que le polymère est « dirigé », il ne passe qu'une seule fois à une ordonnée donnée et on peut donc prendre une fonction.) L'énergie de ce polymère est alors donnée par

$$H(\mathcal{P}) = \int_0^t ds \left[\left(\frac{\partial y}{\partial s} \right)^2 + \eta(y(s), s) \right]. \quad (6.8)$$

En présence du seul premier terme dans cette expression, la ligne $y(s)$ serait une marche aléatoire. C'est une traduction directe du fait que dans le modèle discret, chaque site d'une ligne est relié aux sites proches de la ligne précédente. Le second terme représente l'énergie associée à chaque point (y, s) du milieu. Comme dans le modèle sur réseau, on choisit cette énergie selon une distribution qui vérifie

$$\langle \eta(y, s) \rangle = 0, \quad (6.9a)$$

$$\langle \eta(y, s) \eta(y', s') \rangle = \delta(y - y') \delta(s - s'). \quad (6.9b)$$

La fonction de partition $Z(x, t)$ des polymères reliant le point $(0, 0)$ au point (x, t) est alors donnée par une intégrale de chemin sur toutes les fonctions $y(s)$ telles que $y(0) = 0$ et $y(t) = x$:

$$Z(x, t) = \int_{y(0)=0}^{y(t)=x} \mathcal{D}y(s) \exp \left(-\beta \int_0^t ds \left[\left(\frac{\partial y}{\partial s} \right)^2 + \eta(y(s), s) \right] \right). \quad (6.10)$$

On peut calculer $\langle Z^n \rangle$ à partir de cette expression et retrouver^{52, 63} l'équivalence présentée dans la section 6.3.4 entre les polymères dirigés et un problème quantique. Si l'on dérive (6.10) par rapport au temps, on trouve

$$\frac{\partial}{\partial t} Z(x, t) = \frac{1}{4\beta} \Delta Z(x, t) - \beta \eta(x, t) Z(x, t), \quad (6.11)$$

et si l'on fait dans (6.11) le changement de variables $h(x, t) = \log Z(x, t)$, on obtient l'équation KPZ

$$\frac{\partial}{\partial t} h(x, t) = \frac{1}{4\beta} \Delta h(x, t) + \left(\frac{\partial}{\partial x} h(x, t) \right)^2 - \beta \eta(x, t). \quad (6.12)$$

Il faut cependant noter qu'une expression comme (6.10) suppose en fait l'existence d'un réseau sous-jacent ; une intégrale de chemin est essentiellement une manière pratique d'écrire dans le continu des relations bien définies seulement quand les quantités sont discrètes. Par exemple, quand on essaie de calculer $\langle Z^n \rangle$ à partir de (6.10), la relation (6.9b) fait apparaître la quantité $\delta(0)$. On doit alors soit faire explicitement intervenir la taille a du réseau⁶³ et remplacer $\delta(0)$ par $1/a$, soit calculer en fait $\langle Z^n \rangle / \langle Z \rangle^n$ et observer⁴ que les $\delta(0)$ se « simplifient ». D'autres difficultés (en particulier liées au bruit $\eta(x, t)$) sont présentes dans la formulation continue des polymères dirigés et disparaissent si l'on fait l'effort de faire une formulation sur réseau.

D'un autre côté, si l'on s'intéresse uniquement aux propriétés à grande échelle (aux exposants) des polymères dirigés, l'écriture du problème sous la

forme d'une intégrale de chemin (6.10) permet de ne pas avoir à décrire les détails du réseau. Pour faire le lien avec l'équation KPZ et obtenir les exposants critiques des polymères dirigés, c'est la formulation dans le continu qui est la plus adaptée. Cependant, je vais dans le chapitre 9 de ce travail comparer des simulations numériques avec les résultats de [3, 4] sur la distribution de l'énergie libre. Dans ce cas, la formulation (6.10) n'est pas suffisante pour pouvoir faire le lien direct (avec tous les préfacteurs) entre simulation et théorie ; il faut choisir un réseau comme au début de cette section.

6.3 Brève revue des résultats connus sur les polymères dirigés

6.3.1 Exposants critiques et distribution des grandes déviations de l'énergie libre

Les polymères dirigés ont surtout été étudiés dans le cas où les dimensions transversales s'étendent à l'infini. On définit alors habituellement les deux exposants ν et ω qui donnent respectivement le comportement de la largeur $W(\tau)$ du polymère et des fluctuations de son énergie libre

$$W(\tau) \sim \tau^\nu, \quad (6.13a)$$

$$\langle \log^2 Z(\tau) \rangle - \langle \log Z(\tau) \rangle^2 \sim \tau^{2\omega}. \quad (6.13b)$$

Quelle que soit la dimension de l'espace, ces deux exposants vérifient^{54, 55} la relation d'échelle

$$\omega = 2\nu - 1, \quad (6.14)$$

et en dimension $1 + 1$, on a $\nu = 2/3$ et $\omega = 1/3$ quelle que soit la température^{55–57, 64, 65}. Ce comportement en $\tau^{2/3}$ de la largeur est à comparer au $\tau^{1/2}$ que l'on aurait obtenu dans le cas sans impuretés où le problème est une simple marche aléatoire ; le polymère fait des écarts plus importants pour aller chercher des sites favorables. Comme l'on connaît en $1 + 1$ dimensions le comportement de la valeur moyenne de l'énergie libre, on peut mesurer la probabilité d'une *grande déviation*^{52, 66, 67}. La figure 6.2 (empruntée à Halpin-Healy⁶⁶) représente le logarithme de la densité de probabilité de $(\log Z - \langle \log Z \rangle)/\tau^{1/3}$ mesurée sur 50 000 réalisations et prise pour trois longueurs τ différentes. Comme il se doit, les données correspondant aux trois longueurs se rassemblent sur une même courbe qui est asymétrique et donc différente de la gaussienne.

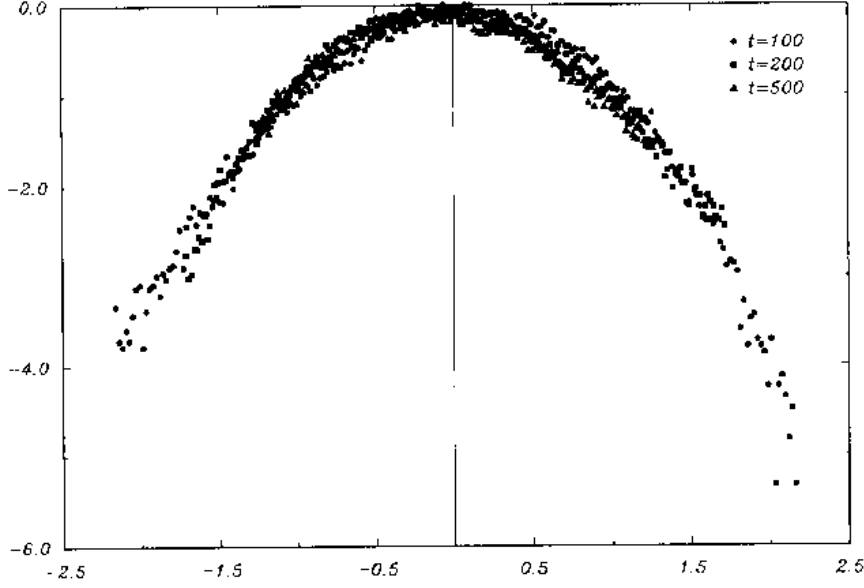


FIG. 6.2 – Cette figure (empruntée à Halpin-Healy⁶⁶) représente le logarithme de la densité de probabilité des fluctuations normalisées (par un facteur $\tau^{1/3}$) de l'énergie libre pour un polymère dirigé en $1 + 1$ dimensions. Les données ont été prises à trois longueurs τ différentes dans 50 000 réalisations du désordre.

Quand l'espace est de dimension supérieure à $1 + 1$, la valeur de ν n'est connue que numériquement : à température nulle, on a⁵² $\nu_{2+1} \approx 0.624$ et $\nu_{3+1} \approx 0.585$. Quand la dimension de l'espace est strictement supérieure à $2 + 1$, il existe^{60,68} une température critique au delà de laquelle le polymère dirigé se comporte comme une simple marche aléatoire ($\nu = 1/2$) et où l'énergie libre recuite coïncide avec l'énergie libre gelée : $\langle \log Z \rangle / \tau = (\log \langle Z \rangle) / \tau$. En dessous de cette température, l'exposant ν est supérieur à $1/2$ et décroît avec la dimension de l'espace^{62,64,69}. Cette transition de phase est encore présente^{26,32,33,60} dans *l'approximation de champ moyen* du modèle (qui, en un sens, correspond à un espace de dimension infiniment grande). Par contre, la question de savoir s'il existe ou non une *dimension critique supérieure* au delà de laquelle l'exposant ν vaudrait $1/2$ quelle que soit la température n'a pas encore été tranchée^{53,61}.

6.3.2 L'équation KPZ

Pour un polymère dirigé vu à grande échelle, l'énergie libre $h(x, t) = \log Z(x, t)$ est solution de l'équation KPZ (voir par exemple la section 6.2.3

sur les polymères dirigés dans un milieu continu). Cette équation a été introduite⁵¹ pour décrire le profil rugueux d'une surface en train de croître sous l'effet d'un bruit. Pour des temps t longs, les fluctuations de hauteur d'une telle surface sur un substrat de taille L se mettent sous la forme d'échelle^{52,53}

$$\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 \approx L^{2\alpha} f^2\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (6.15a)$$

où l'on a

$$f(x) \rightarrow \text{constante} \quad \text{si } x \rightarrow \infty, \quad (6.15b)$$

$$f(x) \approx x^{\alpha/z} \quad \text{si } x \rightarrow 0. \quad (6.15c)$$

Ces relations permettent de relier les exposants ω et ν des polymères dirigés aux exposants α et z de l'équation KPZ : quand la taille du substrat tend vers l'infini, on a

$$\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 \approx t^{2\alpha/z} \approx \langle \log^2 Z \rangle - \langle \log Z \rangle^2 \approx t^{2\omega}, \quad (6.16)$$

d'où

$$\omega = \frac{\alpha}{z}. \quad (6.17a)$$

De plus, dans le régime d'échelle (6.15) la largeur du polymère joue le rôle de la taille du substrat. Sachant que cette largeur croît comme t^ν , on obtient facilement

$$\nu z = 1. \quad (6.17b)$$

6.3.3 Le champ moyen

La difficulté principale dans ce calcul des propriétés statistiques de Z vient du fait que dans la relation de récurrence (6.6), les deux termes $Z(k, \tau)$ et $Z(k+1, \tau)$ à l'intérieur de la parenthèse sont corrélés. On peut faire une *approximation de champ moyen* du modèle et supposer que ces deux termes sont en fait indépendants. Ceci revient à considérer comme sur la figure 6.3 que le polymère dirigé se trouve sur un arbre.

Ce modèle est censé reproduire les propriétés des polymères dirigés quand la dimension d de l'espace tend vers l'infini. L'énergie libre dans ce modèle a été calculée exactement^{26,32,33,60} de deux manières différentes ; la première utilise la méthode des *répliques à symétrie brisée* introduite⁷⁰ par Parisi dans

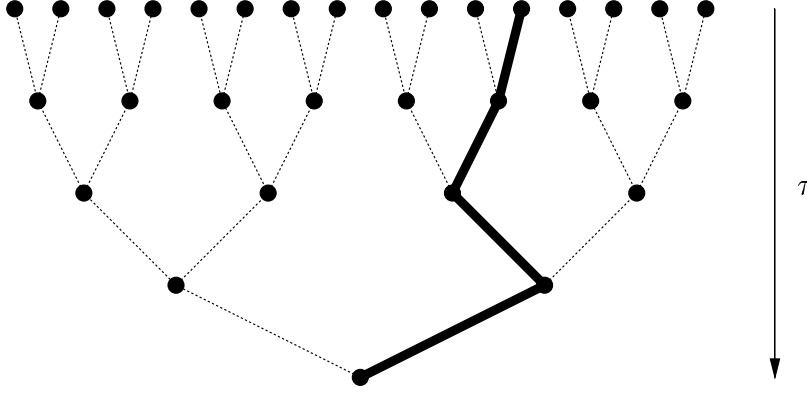


FIG. 6.3 – Polymère dirigé sur un arbre de Cayley. À chaque étape, le polymère dirigé peut venir de gauche ou de droite, mais les deux côtés sont indépendants. On obtient ainsi un champ moyen du problème.

le contexte des verres de spins et a permis de mettre en évidence des similitudes entre le champ moyen des polymères dirigés et le champ moyen de modèles de verres de spins. La seconde méthode ramène le calcul de l'énergie libre à la sélection de la vitesse de propagation d'un front dans une équation de type Fisher-Kolmogorov (voir la première partie de ce travail). En effet, si l'on pose

$$G(x, \tau) = \langle \exp(-e^{-\beta x} Z(\tau)) \rangle, \quad (6.18)$$

et que l'on utilise (6.6) et le fait que les deux termes à l'intérieur de la parenthèse sont indépendants dans le champ moyen, on voit que $G(x, \tau)$ vérifie la relation de récurrence

$$G(x, \tau + 1) = \left(\int dh \, \rho(\eta) G(x + \eta, \tau) \right)^2 \quad (6.19a)$$

et la condition initiale

$$G(x, 0) = \exp(-e^{-\beta x}). \quad (6.19b)$$

($\rho(\eta)$ est la distribution des énergies aléatoires.)

La fonction $G(x, \tau)$ reste comprise entre 0 et 1, et l'on a

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} G(x, \tau) = 0, \quad (6.20a)$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} G(x, \tau) = 1. \quad (6.20b)$$

L'équation (6.19a) décrit la propagation d'un front où l'état stable $G(x, \tau) = 0$ envahit l'état instable $G(x, \tau) = 1$. Comme pour l'équation de Fisher-Kolmogorov, ce front est de type *pulled* et la vitesse de propagation peut donc s'obtenir en linéarisant les équations (6.19) autour de la position instable (voir la section 1.3 de l'introduction de la première partie). L'inverse β de la température n'intervient pas dans la relation de récurrence mais seulement dans la condition initiale $G(x, 0)$. Derrida et Spohn ont pu alors en déduire²⁶ qu'il existe une température critique en dessous de laquelle la condition initiale tend suffisamment rapidement vers l'état instable $G = 1$ et où la vitesse *marginalelement stable* est sélectionnée. Au dessus de cette température, la vitesse dépend de β . Il est alors possible de relier la vitesse de propagation du front à l'énergie libre par unité de longueur et de montrer ainsi l'existence d'une transition de phase dans les polymères dirigés.

Il est remarquable et parfaitement inattendu que cette transition de phase des polymères dirigés en champ moyen, qui est assez semblable à celle que l'on trouve dans les verres de spins, soit simplement donnée par le problème de la sélection de la vitesse dans une équation de type Fisher-Kolmogorov.

6.3.4 La méthode des répliques

Alors qu'il est facile (équation (6.7)) de calculer dans un modèle de polymère dirigé la valeur moyenne $\langle Z \rangle$ de la fonction de partition, la détermination des moments $\langle \log Z \rangle$, $\langle \log^2 Z \rangle$, *etc.* de l'énergie libre est nettement plus problématique. Une méthode pour calculer toutes ces quantités simultanément consiste à essayer de déterminer $\langle Z^\epsilon(\tau) \rangle$ pour un petit ϵ . On peut alors faire un développement du logarithme de cette quantité autour de $\epsilon = 0$:

$$\begin{aligned} \log \langle Z^\epsilon \rangle &= \log \left\langle 1 + \epsilon \log Z + \frac{\epsilon^2}{2} \log^2 Z + \frac{\epsilon^3}{6} \log^3 Z + O(\epsilon^4) \right\rangle \quad (6.21) \\ &= \epsilon \langle \log Z \rangle + \epsilon^2 \frac{\langle \log^2 Z \rangle - \langle \log Z \rangle^2}{2} \\ &\quad + \epsilon^3 \frac{\langle \log^3 Z \rangle - 3 \langle \log^2 Z \rangle \langle \log Z \rangle + 2 \langle \log Z \rangle^3}{6} + O(\epsilon^4). \\ &= \epsilon \langle \log Z \rangle + \frac{\epsilon^2}{2} \langle \log^2 Z \rangle_c + \frac{\epsilon^3}{6} \langle \log^3 Z \rangle_c + O(\epsilon^4). \end{aligned}$$

On voit donc que le k -ième terme du développement de $\log \langle Z^\epsilon \rangle$ en puissances de ϵ donne le k -ième cumulant de $\log Z(\tau)$ que je noterai dorénavant $\langle \log^k Z \rangle_c$.

Bien évidemment, il est tout aussi difficile de calculer $\langle Z^\epsilon(\tau) \rangle$ pour ϵ petit que de calculer $\langle \log Z(\tau) \rangle$. Par contre, nous allons voir qu'il est relativement plus simple de calculer $\langle Z^n(\tau) \rangle$ quand n est un entier naturel.

Que gagne-t-on à faire ce calcul pour n entier ? L'idée est que si l'on arrive à donner une expression de $\langle Z^n(\tau) \rangle$ valable pour *toutes les valeurs entières et positives de n* , alors il doit être possible de deviner la valeur $\langle Z^n(\tau) \rangle$ pour un n réel ou complexe quelconque, en particulier petit. C'est la méthode des répliques, introduite⁷¹ par Edwards et Anderson pour résoudre un problème de verre de spins.

Le calcul des moments entiers $\langle Z^n(\tau) \rangle$ est souvent difficile, mais le principal problème de cette méthode est évidemment le prolongement de la fonction $\langle Z^n(\tau) \rangle$ (calculée pour un n entier) à des valeurs de n quelconques. D'un point de vue mathématique, il existe un théorème qui permet de déterminer de manière unique la distribution de $Z(\tau)$ à partir de ses moments entiers $\langle Z^n(\tau) \rangle$ si ceux-ci ne croissent pas trop vite avec n . Ce théorème est malheureusement le plus souvent inapplicable parce que les moments croissent trop vite et qu'en pratique l'on n'a jamais $\langle Z^n(\tau) \rangle$ mais plutôt la limite de $\frac{1}{\tau} \log \langle Z^n(\tau) \rangle$ quand τ tend vers l'infini. Il faudra donc faire une hypothèse de simplicité sur la dépendance en n et *deviner* toute la fonction $\langle Z^n(\tau) \rangle$ (pour n réel quelconque) à partir des seuls moments entiers positifs.

À grande échelle, le calcul de $\langle Z^n(\tau) \rangle$ pour un long polymère dirigé en dimension $d + 1$ se ramène⁵⁴ à la détermination de l'énergie libre d'un problème de mécanique quantique en dimension d où n particules interagissent avec un potentiel δ attractif. Quand $d = 1$, l'hamiltonien de ce problème est de la forme

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \gamma \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j), \quad (6.22)$$

et la relation entre l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ du fondamental de (6.22) (où L est la taille — éventuellement infinie — de l'espace) et $\langle Z^n \rangle$ est donnée par

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle}{\tau} = -E_0(n, L, \gamma) + nK(\gamma, L) \quad (6.23)$$

où $K(\gamma, L)$ est un terme qui dépend des paramètres du système mais pas du nombre n de particules. On peut en fait déterminer cette correction linéaire en considérant le cas $n = 1$ dans la formule précédente et en remarquant que, lorsqu'il y a une seule particule, on a $nE_0(1, L, \gamma) = nE_0(1, L, 0) = E_0(n, L, 0)$. On obtient alors finalement

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle - n \log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} = E_0(n, L, 0) - E_0(n, L, \gamma). \quad (6.24)$$

Cette équivalence sera établie en détail dans le chapitre 7 pour le réseau en $1 + 1$ dimensions introduit dans la section 6.2.1 afin de pouvoir donner

précisément les relations entre le nombre de sites N et l'inverse β de la température dans les polymères dirigés, et la taille L de l'espace et l'amplitude γ de l'interaction dans le modèle quantique. Bien que l'équivalence avec (6.22) soit toujours vraie à grande échelle, les relations précises entre tous ces paramètres dépendent en effet du réseau sur lequel on définit les polymères dirigés.

L'hamiltonien (6.22) a été introduit par Lieb et Liniger pour décrire le comportement d'un gaz de bosons en une dimension. Dans leurs travaux, le coefficient γ est négatif (ce qui correspond à un potentiel répulsif) et la limite qu'ils considèrent est la limite thermodynamique $n \rightarrow \infty$. Dans ce cadre, l'Ansatz de Bethe⁷² a permis aux auteurs de calculer l'énergie du fondamental⁷³ et le spectre d'excitation⁷⁴. D'autres travaux⁷⁵⁻⁷⁷ ont plus tard complété l'étude de ce modèle de gaz de bosons.

La situation est très différente dans le contexte des polymères dirigés où l'on s'intéresse au cas d'un potentiel attractif $\gamma \geq 0$. De plus, pour appliquer la méthode des répliques au calcul de l'énergie libre d'un polymère, la limite intéressante est la limite où n « tend » vers 0. Il faudra donc, à partir de l'expression de $E_0(n, L, \gamma)$ pour n entier, trouver un moyen de définir la valeur de cette quantité pour un n quelconque, puis faire un développement de $E_0(n, L, \gamma)$ en puissances du paramètre continu n . Les coefficients de ce développement donneront alors, grâce à (6.21), les cumulants de l'énergie libre $\log Z(\tau)$.

6.3.5 L'Ansatz de Bethe

L'hamiltonien (6.22) a été résolu en une dimension pour un espace fini et périodique^{73,74} (ce qui correspond à un polymère dirigé sur un cylindre), pour un espace fini à deux frontières⁷⁵ (polymère dirigé sur une bande) et pour un espace infini⁵⁴ (polymère dirigé sur le plan). Dans les trois cas, la résolution a été faite en utilisant l'Ansatz de Bethe⁷².

Cette méthode consiste à chercher sous une forme particulière les fonctions d'onde propres $\psi(x_1, \dots, x_n)$ de l'hamiltonien (6.22) et à ajuster les paramètres pour que ces fonctions d'onde soient effectivement des fonctions propres de $\mathcal{H}$. Dans les domaines où les x_i sont tous différents deux à deux, la solution ressemble à des ondes planes (les particules sont « libres »). On choisit donc pour Ansatz l'expression suivante : dans la région définie par

$$x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n, \quad (6.25a)$$

on pose

$$\psi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\mathcal{P} \in \sigma_n} a(\mathcal{P}) e^{\lambda_{\mathcal{P}(1)}x_1 + \dots + \lambda_{\mathcal{P}(n)}x_n}. \quad (6.25b)$$

La somme est effectuée sur toutes les permutations $\mathcal{P}$ de $\{1, \dots, n\}$. La valeur de ψ dans les autres régions de l'espace est obtenue par symétrie.

Par exemple, pour $n = 2$, la fonction ψ est de la forme

$$\psi(x_1, x_2) = \begin{cases} ae^{\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2} + a'e^{\lambda_1 x_2 + \lambda_2 x_1} & \text{si } x_1 \leq x_2, \\ ae^{\lambda_1 x_2 + \lambda_2 x_1} + a'e^{\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2} & \text{si } x_1 \geq x_2. \end{cases} \quad (6.26)$$

On peut utiliser la fonction escalier $\theta(x)$ (définie par $\theta(x) = 1$ si $x > 0$ et $\theta(x) = 0$ sinon) pour écrire une expression de $\psi(x_1, x_2)$ valable partout :

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) = & \theta(x_2 - x_1) (ae^{\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2} + a'e^{\lambda_1 x_2 + \lambda_2 x_1}) \\ & + \theta(x_1 - x_2) (ae^{\lambda_1 x_2 + \lambda_2 x_1} + a'e^{\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2}). \end{aligned} \quad (6.27)$$

On voit aisément sur cette expression comment $\psi(x_1, x_2)$ peut être une fonction propre de l'hamiltonien (6.22) : quand on applique l'opérateur laplacien sur ψ , les dérivées de la fonction $\theta(x)$ font apparaître des fonctions $\delta(x_1 - x_2)$ qui doivent compenser exactement le $\delta(x_1 - x_2)$ de l'hamiltonien.

Le même mécanisme se répète pour un n quelconque. Si l'on veut écrire une expression de $\psi(x_1, \dots, x_n)$ valable pour tous les x_i , on est obligé de faire intervenir beaucoup de fonctions $\theta(x_i - x_j)$ qui sont transformées par l'action du laplacien en fonctions $\delta(x_i - x_j)$. On doit alors ajuster l'énergie $E(n, L, \gamma)$ et les $a(\mathcal{P})$ de manière à ce que la fonction $\psi(x_1, \dots, x_n)$ vérifie l'équation aux valeurs propres

$$\mathcal{H}\psi(x_1, \dots, x_n) = E(n, L, \gamma)\psi(x_1, \dots, x_n). \quad (6.28)$$

On peut alors montrer⁷⁵ qu'il faut prendre :

$$E(n, L, \gamma) = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha^2, \quad (6.29a)$$

$$a(\mathcal{P}) = \prod_{1 \leq \alpha < \beta \leq n} \left(1 + \frac{\gamma}{\lambda_{\mathcal{P}(\alpha)} - \lambda_{\mathcal{P}(\beta)}} \right). \quad (6.29b)$$

On a donc une famille de solutions indexées par les « moments » $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ qui doivent être des nombres tous différents deux à deux. Les conditions sur la géométrie de l'espace imposent alors des restrictions supplémentaires sur les valeurs des λ_α accessibles.

Cas d'un domaine fini et périodique

Pour un domaine fini périodique de taille L (*i.e.* tel que $x \equiv x + L$), on doit avoir la propriété de périodicité suivante : si

$$x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_{n-1}, \quad (6.30a)$$

alors

$$\psi(x_1, \dots, x_{n-1}, L) = \psi(0, x_1, \dots, x_{n-1}). \quad (6.30b)$$

Traduite en terme des λ_i et des $a(\mathcal{P})$, cette condition s'écrit

$$a(\mathcal{P} \circ \mathcal{C})e^{\lambda_{\mathcal{P}(1)}L} = a(\mathcal{P}), \quad (6.31)$$

où $\mathcal{C}$ est la permutation cyclique de $\{1, \dots, n\}$ (*i.e.* $\mathcal{C}(1) = 2, \mathcal{C}(2) = 3, \dots, \mathcal{C}(n) = 1$).

Si l'on combine (6.31) et (6.29b), on obtient pour tout $1 \leq \alpha \leq n$

$$e^{\lambda_\alpha L} = \prod_{\substack{1 \leq \beta \leq n \\ \beta \neq \alpha}} \frac{\lambda_\alpha - \lambda_\beta + \gamma}{\lambda_\alpha - \lambda_\beta - \gamma}. \quad (6.32)$$

On voit aisément que lorsque $\gamma \rightarrow 0$, on retrouve les solutions d'un système de bosons libres, à savoir

$$e^{\lambda_\alpha L} = 1 \quad \text{ou} \quad \lambda_\alpha = \frac{2in_\alpha\pi}{L}, \quad (6.33)$$

où les n_α sont des entiers (les « nombres d'onde »). Yang et Yang ont prouvé⁷⁸ que pour tout ensemble donné de nombres d'onde $\{n_\alpha\}$, il existe une unique solution de (6.32) telle que $\lambda_\alpha \rightarrow 2in_\alpha\pi/L$ quand $\gamma \rightarrow 0$.

L'état fondamental du système de bosons libres (quand $\gamma = 0$) est non-dégénéré et tel que tous les moments λ_α sont nuls. On s'attend donc à obtenir l'état fondamental du système de n bosons en interaction en prenant la solution $\{\lambda_\alpha\}$ de (6.32) telle que chacun des λ_α tende vers zéro quand γ tend vers zéro. Cet état fondamental doit de plus être non-dégénéré, ce qui implique que les moments λ_α soient symétriques : $\{\lambda_\alpha\} = \{-\lambda_\alpha\}$. L'énergie du fondamental est alors donnée par (6.29a).

Dans le chapitre 8, je montrerai comment nous avons pu^{3,4} calculer le développement limité de l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ à partir des relations (6.29a, 6.32), et obtenir ainsi les premiers cumulants de l'énergie libre d'un polymère dirigé sur un cylindre.

Cas d'un domaine fini à bords

On peut aussi considérer le cas où l'espace dans le problème (6.22) est fini et de longueur L avec deux frontières infranchissables en $x = 0$ et $x = L$. La fonction d'onde $\psi(x_1, \dots, x_n)$ de l'état fondamental du problème quantique doit alors vérifier

$$\psi(0, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad (6.34a)$$

$$\psi(x_1, x_2, \dots, L) = 0, \quad (6.34b)$$

où les x_i sont tels que $0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_n \leq L$. Il se trouve qu'il n'y a pas de solution à ce problème qui prenne la forme de l'Ansatz de Bethe (6.25). Cependant, Gaudin a montré⁷⁵ qu'une superposition de 2^n fonctions d'onde de la forme (6.25) permet de résoudre le problème. Cette superposition s'écrit

$$\psi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\epsilon_1=\pm 1} \dots \sum_{\epsilon_n=\pm 1} b(\epsilon_1, \dots, \epsilon_n) \psi_{\epsilon_1 \lambda_1, \dots, \epsilon_n \lambda_n}(x_1, \dots, x_n), \quad (6.35)$$

où $\psi_{\epsilon_1 \lambda_1, \dots, \epsilon_n \lambda_n}(x_1, \dots, x_n)$ est donnée par (6.25) avec (6.29b). Cette fonction décrit manifestement un état propre de l'hamiltonien (6.22) avec une énergie donnée par (6.29a). On voit de plus que l'on peut, sans perte de généralité, supposer que tous les moments λ_α ont une partie imaginaire positive.

Il ne reste maintenant plus qu'à choisir les paramètres pour que les deux équations (6.34) soient vérifiées. La première de ces équations va fixer les valeurs de $b(\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)$, et la deuxième va mettre des contraintes sur les moments λ_α . On trouve finalement⁷⁵

$$e^{2\lambda_\alpha L} = \prod_{\substack{1 \leq \beta \leq n \\ \beta \neq \alpha}} \frac{\lambda_\alpha - \lambda_\beta + \gamma}{\lambda_\alpha - \lambda_\beta - \gamma} \frac{\lambda_\alpha + \lambda_\beta + \gamma}{\lambda_\alpha + \lambda_\beta - \gamma}, \quad (6.36)$$

où les $\{\lambda_\alpha\}$ sont des nombres tous différents de partie imaginaire positive. Comme dans le cas d'un domaine fini périodique, si on fait tendre γ vers 0, on retrouve bien les états propres de bosons libres dans une boîte fermée de taille L :

$$e^{2\lambda_\alpha L} = 1 \quad \text{ou} \quad \lambda_\alpha = \frac{in_\alpha \pi}{L}, \quad (6.37)$$

où les n_α sont des entiers strictement positifs. Dans l'état fondamental du système sans interactions, tous les λ_α valent $i\pi/L$. On s'attend donc à ce que l'état fondamental du problème en interaction soit obtenu en prenant la solution $\{\lambda_\alpha\}$ de (6.36) telle que chacun des λ_α tende vers $i\pi/L$ quand γ tend vers 0. L'énergie du fondamental est alors donnée par (6.29a).

Nous sommes en train d'adapter la méthode utilisée dans le cas des conditions périodiques et la dernière section du chapitre 8 présente quelques résultats préliminaires.

Cas d'un domaine infini

Si l'on suppose que la dimension transversale s'étend indéfiniment dans les deux directions, on peut expliciter^{54, 63} la fonction d'onde de l'état fondamental de l'hamiltonien (6.22). On trouve, pour tout $x_1, \dots, x_n$,

$$\psi(x_1, \dots, x_n) = e^{-\frac{\gamma}{2} \sum_{\alpha < \beta} |x_\beta - x_\alpha|}. \quad (6.38)$$

Pour reprendre les notations utilisées au début de cette section, cela revient à dire que les moments $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ sont donnés par

$$\lambda_\alpha = -\frac{n - (2\alpha - 1)}{2} \gamma \quad (6.39)$$

pour $1 \leq \alpha \leq n$, et que tous les $a(\mathcal{P})$ sont nuls sauf celui où $\mathcal{P}$ est l'identité.

Cette solution a bien toutes les propriétés voulues pour être l'état fondamental : elle ne dépend que des différences entre les x_i , ne s'annule jamais et tend vers zéro quand la distance entre les x_i devient grande.

L'énergie du fondamental est alors donnée par (6.29a). On trouve

$$E_0(n, \infty, \gamma) = \frac{n - n^3}{24} \gamma^2. \quad (6.40)$$

Rappelons que jusqu'ici, n est le nombre entier de particules du modèle quantique. On vient donc de montrer que pour des polymères dirigés en milieu aléatoire en $1 + 1$ dimensions quand la dimension spatiale est infinie, on a *pour n entier*,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle - n \log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} = \frac{n^3 - n}{24} \gamma^2. \quad (6.41)$$

Pour appliquer la méthode des répliques, le choix le plus simple est de *supposer* que l'équation précédente est également *valable pour un n quelconque*. On peut alors faire un développement à n petit et l'on obtient

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \log Z \rangle - \log \langle Z \rangle}{\tau} = -\frac{\gamma^2}{24}, \quad (6.42a)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \log Z^3 \rangle_c}{\tau} = \frac{\gamma^2}{4}, \quad (6.42b)$$

et tous les autres cumulants sont négligeables devant τ . Ceci permet de retrouver que les fluctuations de l'énergie libre sont typiquement d'ordre $\tau^{1/3}$ comme annoncé au début de cette revue.

Il faut néanmoins noter que la formule (6.41), obtenue pour tout n entier positif, ne *peut pas être correcte pour un n quelconque* : en effet, si l'on dérive deux fois (6.41) par rapport à n , on obtient

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \left(\frac{\langle Z^n \log^2 Z \rangle}{\langle Z^n \rangle} - \frac{\langle Z^n \log Z \rangle^2}{\langle Z^n \rangle^2} \right) = \frac{n}{4} \gamma^2. \quad (6.43)$$

Le membre de gauche de cette équation est forcément positif pour toute valeur de n . En effet, on peut vérifier que ce terme est essentiellement la moyenne d'un nombre positif :

$$\frac{\langle Z^n \log^2 Z \rangle}{\langle Z^n \rangle} - \frac{\langle Z^n \log Z \rangle^2}{\langle Z^n \rangle^2} = \frac{1}{\langle Z^n \rangle} \left\langle Z^n \left(\log Z - \frac{\langle Z^n \log Z \rangle}{\langle Z^n \rangle} \right)^2 \right\rangle, \quad (6.44)$$

tandis que le membre de droite dans (6.43) est négatif quand n est négatif. La relation (6.41) est donc peut-être vraie si $n \geq 0$, mais ne peut en aucun cas être vraie pour $n < 0$. Cette difficulté montre les limitations de la méthode des répliques où l'on doit à partir d'une expression valable pour tout entier positif essayer de déduire une expression valable pour tout réel. Même quand l'expression valable pour les entiers positifs est simple (ici, un polynôme du troisième degré), le prolongement de la fonction peut parfois être plus compliqué que prévu.

6.3.6 La fonction de grandes déviations

Une fois que l'on a obtenu $\langle Z^n(\tau) \rangle$ pour un n réel quelconque, on peut calculer tous les cumulants de $\log Z(\tau)$ et la fonction de grandes déviations f . C'est une fonction convexe, positive, telle que $f(0) = 0$, qui permet d'obtenir la probabilité $\rho_\tau(\log Z)$ que l'énergie libre $\log Z(\tau)$ d'un long polymère de taille τ ait une certaine valeur « extraordinaire » différente de sa valeur moyenne. Cette probabilité est donnée pour les grands τ par la relation

$$\rho_\tau(\log Z) \propto e^{-\tau f\left(\frac{\log Z - \langle \log Z(\tau) \rangle}{\tau}\right)}, \quad (6.45)$$

où l'on voit bien que la probabilité pour que $(\log Z)/\tau$ soit très différent de sa valeur moyenne est exponentiellement faible quand τ est grand.

Dans le cas où la dimension transversale est finie, si l'on imagine que l'on « découpe » un très long polymère en beaucoup de longs « morceaux » de taille égale, on voit bien que les « morceaux » sont essentiellement indépendants les uns des autres et que l'énergie libre du polymère est la somme des énergies libres des morceaux. Comme la somme de τ variables aléatoires indépendantes et de même distribution a une densité de probabilité qui s'écrit

avec une fonction de grandes déviations⁷⁹ comme dans (6.45), il est très raisonnable de supposer qu'il existe une telle fonction dans les modèles de polymères dirigés.

On peut relier la distribution ρ_τ à $\langle Z^n(\tau) \rangle$:

$$\langle Z^n(\tau) \rangle = \frac{\int dF \rho_\tau(F) e^{nF}}{\int dF \rho_\tau(F)}, \quad (6.46)$$

et l'on trouve facilement par une méthode du col que pour des grands τ on a

$$\frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle}{\tau} = n \frac{\langle \log Z \rangle}{\tau} + n x_0(n) - f(x_0(n)), \quad (6.47)$$

où $x_0(n)$ est tel que

$$f'(x_0(n)) = n. \quad (6.48)$$

En utilisant le résultat (6.24) de la méthode des répliques, on voit que l'on peut donner une expression paramétrée de la fonction de grandes déviations :

$$x = \left. \frac{\partial E_0(n, L, \gamma)}{\partial n} \right|_{n=0} - \frac{\partial E_0(n, L, \gamma)}{\partial n}, \quad (6.49a)$$

$$f(x) = E_0(n, L, \gamma) - n \frac{\partial E_0(n, L, \gamma)}{\partial n}, \quad (6.49b)$$

et donc finalement obtenir grâce à (6.45) la distribution de $\log Z$ pour un grand polymère de longueur τ en fonction de $E_0(n, L, \gamma)$.

On peut par exemple essayer d'appliquer ce résultat à la solution (6.41) de Kardar pour un polymère dirigé dans un plan : *si l'on suppose que cette solution est vraie pour tout $n \geq 0$* , on trouve que pour tout $x \geq 0$ la fonction de grandes déviations est donnée par

$$f(x) = \frac{4\sqrt{2}}{3\gamma} x^{3/2}, \quad (6.50)$$

et, en utilisant (6.45), on obtient^{80, 81} pour un grand τ la distribution de $\log Z$ quand $\log Z > \langle \log Z \rangle$:

$$\rho(\log Z) \propto e^{-\tau \frac{4\sqrt{2}}{3\gamma} \left(\frac{\log Z}{\tau} - \frac{\langle \log Z \rangle}{\tau} \right)^{3/2}} = e^{-\frac{4\sqrt{2}}{3\gamma} \left(\frac{\log Z - \langle \log Z \rangle}{\tau^{1/3}} \right)^{3/2}}. \quad (6.51)$$

L'hypothèse que (6.41) est vraie pour $n \geq 0$ permet donc de retrouver la valeur $1/3$ de l'exposant ω . De plus, les données numériques présentées sur la figure 6.2 (page 65) ne sont pas du tout incompatibles avec (6.51).

6.3.7 Quelques variantes du modèle

Comme déjà mentionné dans la section (6.2), on s'attend à ce que les exposants critiques et les propriétés à grande échelle des polymères dirigés ne dépendent pas des détails à petite échelle. Il n'est cependant pas toujours facile de savoir si deux modèles donnés sont bien dans la même classe d'universalité. Par exemple, Zhang a établi^{52, 82} que si l'on met sur chaque site une énergie $\eta(k, \tau)$ distribuée selon une loi de puissance

$$\rho(\eta) \propto \eta^{-\mu} \quad \text{pour } \eta > \epsilon \text{ et } 0 \text{ sinon,} \quad (6.52)$$

où μ et ϵ sont deux paramètres positifs, alors, si $\mu < 6$ en dimension $1 + 1$, les polymères dirigés *ont des propriétés à grande échelle différentes que dans le cas où $\rho(\eta)$ est gaussien* : l'exposant ν ne vaut plus $2/3$ mais se met à dépendre continûment de μ jusqu'à atteindre la valeur $\nu = 1$ quand μ s'approche de 3. (Quand $\mu \leq 3$, la distribution $\rho(\eta)$ a une variance infinie et le problème change encore de comportement.) Il semble par contre que, si $\mu \geq 6$, la distribution décroît « assez vite » et que les propriétés à grande échelle sont les mêmes que pour une distribution gaussienne, exponentielle ou bornée⁸².

Une autre variante proposée par Zhang^{52, 80, 81} consiste à donner des valeurs complexes aux énergies de sites. Ce modèle peut servir à décrire le transport d'électrons dans des métaux très désordonnés et il semblerait⁵² qu'en $1 + 1$ dimensions les exposants critiques ν et ω soient les mêmes que dans le cas où les énergies sont réelles. Cependant, le fondamental du problème quantique associé est apparemment très différent, et savoir si les deux problèmes sont ou non dans la même classe d'universalité reste une question ouverte.

On peut aussi essayer d'apporter des modifications au réseau. Le cas correspondant au champ moyen où le polymère dirigé se trouve sur un arbre a déjà été discuté section 6.3.3. Cook et Derrida ont proposé une variante du champ moyen où le nombre de sites à une ordonnée τ donnée est fixé à une valeur finie N . Dans ce modèle, chaque site d'ordonnée τ est relié à deux sites *pris au hasard* de l'ordonnée $\tau - 1$. Il y a donc 2^τ chemins de longueur τ arrivant en un point donné, et si τ est assez petit et N assez grand, ces chemins ont une forte probabilité d'être indépendants comme dans le champ moyen. Dans le cas où la température est nulle (et où il faut donc trouver le polymère d'énergie minimale), on peut voir que le problème devient équivalent au modèle où N particules se déplacent sur une ligne avec la dynamique décrite dans le chapitre 2 de la première partie de ce travail. En effet, si l'on appelle $X_k(\tau)$ l'énergie optimale d'un polymère arrivant au

point (k, τ) , on voit que l'on a la relation

$$X_k(\tau + 1) = \min \left(X_{k'}(\tau), X_{k''}(\tau) \right) + \eta(k, \tau + 1), \quad (6.53)$$

où k' et k'' sont les numéros des sites de la ligne τ qui sont reliés à $(k, \tau + 1)$. À un petit changement de variable près, c'est bien l'équation (2.1) étudiée dans le chapitre 2, et l'on voit aisément que la vitesse de propagation de ce front est égale à l'énergie optimale par unité de longueur d'un polymère de longueur τ .

Chapitre 7

Limite continue des polymères dirigés. Équivalence avec un problème quantique *via* la méthode des répliques

Comme le rappelle la section 6.3.4 du chapitre précédent, les moments de la fonction de partition d'un très long polymère dirigé en milieu aléatoire sont donnés à grande échelle⁵⁴ par

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle - n \log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} = E_0(n, L, 0) - E_0(n, L, \gamma), \quad (7.1)$$

où $E_0(n, L, \gamma)$ est l'énergie du fondamental du problème quantique où n particules interagissent dans un espace de taille L et dont l'hamiltonien est de la forme (en une dimension)

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \gamma \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j). \quad (7.2)$$

Cette équivalence classique est exacte^{52,63} si l'on définit les polymères dirigés dans le *continu*. Dans ce chapitre, je vais la redémontrer en détail dans le cas du modèle sur *réseau* défini dans la section 6.2 du chapitre d'introduction quand le nombre N de sites est grand et la température élevée (β faible). Le but de ce calcul est d'obtenir les relations précises (mais variables uniquement à grande échelle) entre les paramètres L et γ du problème quantique et les paramètres N et β du polymère dirigé, ce qui permettra au chapitre 9 de comparer nos résultats exacts^{3,4} présentés dans le chapitre 8 à des simulations numériques directes de polymères dirigés sur un réseau.

La transcription (7.1) vers le modèle quantique se fait en deux étapes : je rappellerai dans une première section comment le calcul de $\langle Z^n(\tau) \rangle$ quand n est entier se ramène à celui de la fonction de partition d'un système où *plusieurs* polymères dirigés interagissent dans un milieu *non-aléatoire*. Je rappellerai ensuite dans une seconde section comment, à grande échelle, le calcul de $\langle Z^n(\tau) \rangle$ se réduit quand τ est grand à trouver l'énergie du fondamental du problème quantique (7.2).

7.1 Relation vérifiée par $\langle Z^n(\tau) \rangle$ quand n est entier

On part de la relation de récurrence (6.6) qui permet de calculer la fonction de partition $Z(k, \tau)$ d'un polymère dirigé s'arrêtant au point (k, τ) :

$$Z(k, \tau + 1) = \left(Z(k, \tau) + Z(k + 1, \tau) \right) e^{-\beta \eta(k, \tau + 1)}, \quad (7.3)$$

où l'on peut décider sans perte de généralité que les $\eta(k, \tau)$ sont des nombres aléatoires distribués de manière indépendante avec une moyenne nulle et une variance égale à un :

$$\langle \eta(k, \tau) \rangle = 0, \quad (7.4a)$$

$$\langle \eta(k, \tau) \eta(k', \tau') \rangle = \delta_k^{k'} \delta_\tau^{\tau'}. \quad (7.4b)$$

On veut calculer $\langle Z^n(\tau) \rangle$ pour tout n entier positif. On a déjà pour $n = 1$ (relation (6.7) dans le chapitre d'introduction)

$$\langle Z(\tau) \rangle = \left(2 \langle e^{-\beta \eta} \rangle \right)^\tau. \quad (7.5)$$

Pour calculer $\langle Z^n(\tau) \rangle$ pour $n \geq 2$, on définit

$$Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau) = \left\langle Z(k_1, \tau) \dots Z(k_n, \tau) \right\rangle. \quad (7.6)$$

On a manifestement

$$\langle Z^n(\tau) \rangle = \sum_{k_1, \dots, k_n} Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau), \quad (7.7)$$

et on peut aisément écrire à partir de (7.3) une récurrence sur les Z_n :

$$Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau + 1) = \sum_{d_i \in \{0, 1\}} Z_n(k_1 + d_1, \dots, k_n + d_n; \tau) \left\langle \prod_{i=1}^n e^{-\beta \eta(k_i, \tau + 1)} \right\rangle. \quad (7.8)$$

(La somme est effectuée sur les 2^n termes obtenus en donnant à chacun des d_i la valeur 0 ou 1.)

La valeur moyenne du produit d'exponentielles dans l'expression précédente peut s'écrire simplement quand tous les $k_1, \dots, k_n$ sont différents; en effet, les termes du produit sont alors indépendants les uns des autres et le résultat est simplement $\langle \exp(-\beta\eta) \rangle^n$. Dans le cas général, ce n'est cependant pas le cas et il faut alors classer les $k_1, \dots, k_n$ en autant de groupes que nécessaire de manière à ce que deux abscisses k_i et k_j soient égales si et seulement si elles sont dans le même groupe. Si l'on note alors $n_1, n_2, \text{ etc.}$ le nombre d'éléments dans chacun de ces groupes, on voit que l'on a

$$\left\langle \prod_{i=1}^n e^{-\beta\eta(k_i, \tau+1)} \right\rangle = \prod_j \langle e^{-\beta n_j \eta} \rangle = \langle e^{-\beta\eta} \rangle^n \prod_j \frac{\langle e^{-\beta n_j \eta} \rangle}{\langle e^{-\beta\eta} \rangle^{n_j}}. \quad (7.9)$$

(On a utilisé $\sum_j n_j = n$.) On trouve donc finalement,

$$Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau+1) = \sum_{d_i \in \{0,1\}} Z_n(k_1 + d_1, \dots, k_n + d_n; \tau) \langle e^{-\beta\eta} \rangle^n \prod_j \frac{\langle e^{-\beta n_j \eta} \rangle}{\langle e^{-\beta\eta} \rangle^{n_j}}. \quad (7.10)$$

On voit qu'à chaque étape, la quantité $Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau)$ est multipliée par un certain facteur (en l'occurrence $\langle \exp(-2\beta\eta) \rangle / \langle \exp(-\beta\eta) \rangle^2$) à chaque fois qu'*exactement* deux des $k_1, \dots, k_n$ ont la même valeur, par un autre facteur ($\langle \exp(-3\beta\eta) \rangle / \langle \exp(-\beta\eta) \rangle^3$) à chaque fois qu'*exactement* trois des $k_1, \dots, k_n$ ont la même valeur, *etc.*

Une autre manière d'interpréter (7.10) est de dire que si $Z(\tau)$ est la fonction de partition d'un polymère dirigé de longueur τ en milieu aléatoire, alors le calcul de $\langle Z^n(\tau) \rangle$ se réduit au calcul de la fonction de partition d'un modèle où n polymères dirigés évoluent dans un milieu *non*-aléatoire, et où le système gagne une certaine énergie quand exactement deux polymères passent par le même point, une autre énergie quand exactement trois polymères passent par le même point, *etc.*

La situation se simplifie un peu quand la distribution $\rho(\eta)$ des énergies de sites est gaussienne :

$$\rho(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\eta^2}. \quad (7.11)$$

On peut alors facilement calculer les valeurs moyennes apparaissant dans l'expression (7.10)

$$\langle e^{-\beta n_j \eta} \rangle = e^{\frac{1}{2}\beta^2 n_j^2}, \quad (7.12)$$

et le produit dans (7.10) devient égal à

$$\prod_j \frac{\langle e^{-\beta n_j \eta} \rangle}{\langle e^{-\beta \eta} \rangle^{n_j}} = e^{\beta^2 \sum_j \frac{n_j^2 - n_j}{2}}. \quad (7.13)$$

Parmi n_j abscisses toutes égales entre elles, on peut choisir $(n_j^2 - n_j)/2$ paires différentes. Si l'on somme sur tous les j , on voit que l'on obtient le nombre de paires de deux éléments identiques que l'on peut prendre parmi les n abscisses $k_1, \dots, k_n$. On a donc l'égalité

$$\prod_j \frac{\langle e^{-\beta n_j \eta} \rangle}{\langle e^{-\beta \eta} \rangle^{n_j}} = e^{\beta^2 \sum_i \frac{n_i^2 - n_i}{2}} = e^{\beta^2 \sum_{i < j} \delta_{k_i}^{k_j}}, \quad (7.14)$$

et la récurrence sur les Z_n devient simplement *dans le cas donc où les énergies sont distribuées selon une gaussienne*

$$Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau + 1) = \sum_{d_i \in \{0,1\}} Z_n(k_1 + d_1, \dots, k_n + d_n; \tau) e^{\frac{1}{2} n \beta^2 + \beta^2 \sum_{i < j} \delta_{k_i}^{k_j}}. \quad (7.15)$$

Cette dernière équation signifie que si $Z(\tau)$ est la fonction de partition d'un polymère dirigé dans un milieu aléatoire gaussien, alors le calcul de $\langle Z^n(\tau) \rangle$ se réduit à celui de la fonction de partition d'un modèle où n polymères dirigés évoluent dans un milieu *non*-aléatoire, et où l'énergie du système est donnée par le *nombre de croisements* entre deux polymères. (Étant entendu que, par exemple, lorsque quatre polymères se croisent en un point, on compte six croisements.) Plus précisément, l'équation (7.15) est la récurrence obtenue pour la fonction de partition du modèle suivant :

- on prend le *même réseau* que dans le modèle aléatoire ;
- une configuration est la donnée de n polymères dirigés (l'ordonnée τ ne peut que croître) sur ce réseau commençant à l'origine $(0,0)$ et finissant en un point quelconque d'ordonnée τ (la longueur de chacun de ces polymères est donc τ) ;
- le système a d'une part une énergie $-\frac{1}{2}\beta$ pour chacun des sites visités ;
- le système a d'autre part une énergie $-\beta$ à chaque fois que deux polymères se croisent. (Les polymères ont donc tendance à s'attirer.)

Le cas gaussien est donc plus simple à étudier que le cas où la distribution $\rho(\eta)$ est quelconque. En effet, pour calculer $\langle Z^n(\tau) \rangle$, il suffit d'étudier un modèle avec n polymères où les interactions ne font intervenir que deux polymères en même temps, alors qu'avec d'autres distributions, il faut tenir compte des interactions à trois, quatre, *etc.*, polymères. Cependant, on

s'attend à ce que la contribution des croisements à trois polymères ou plus devienne négligeable à grande échelle et à ce que les exposants ne dépendent pas de la distribution exacte des énergies tant que celle-ci décroît assez vite à l'infini. (Voir cependant section 6.3.7 les problèmes posés par les distributions en loi de puissance.) Pour simplifier la discussion, je supposerai donc dans le reste de ce travail que la distribution $\rho(\eta)$ est gaussienne.

7.2 Équivalence avec le modèle quantique

À partir de la récurrence sur les $Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau)$ donnée par la relation (7.15) quand les énergies sont distribuées selon une gaussienne, on peut établir le résultat connu que dans la limite continue, le calcul de $\langle Z^n(\tau) \rangle$ se réduit au calcul de l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ du fondamental dans le modèle (7.2) de n particules quantiques en interaction δ .

Pour prendre cette limite continue, on se donne un petit paramètre ϵ qui représente la distance entre deux sites voisins sur une ligne du réseau. On peut alors passer des variables discrètes (k, τ) à des variables continues (x, t) en posant

$$x = k\epsilon, \quad (7.16a)$$

$$t = \frac{1}{4}\tau\epsilon^2. \quad (7.16b)$$

La mise à l'échelle (7.16) suppose que le réseau du polymère dirigé a un grand nombre N de sites sur la dimension transversale. Si l'on est dans un cas où ce nombre est fini, alors l'abscisse x du polymère varie dans un domaine de taille L avec

$$L = N\epsilon. \quad (7.17)$$

On verra plus bas que pour prendre la limite continue, il faut aussi supposer que β (l'inverse de la température) est petit.

On peut maintenant définir une fonction régulière $Y(x, t)$ qui donne la forme à *grande échelle* de $Z(k, \tau)$

$$Y(x, t) = Y(k\epsilon, \frac{1}{4}\tau\epsilon^2) = \frac{Z(k - \frac{\tau}{2}, \tau)}{2^\tau e^{\frac{1}{2}\beta^2\tau}}. \quad (7.18)$$

(La présence du terme $\frac{\tau}{2}$ dans les arguments de Z et la division par $2^\tau e^{\frac{1}{2}\beta^2\tau}$ permettent de simplifier les expressions qui suivent.) L'objectif est d'approcher l'équation discrète (7.15) par une équation continue plus maniable. Si

l'on insère (7.26) dans l'équation (7.3), on obtient facilement

$$Y(x, t + \frac{1}{4}\epsilon^2) = \frac{1}{2} \left(Y(x - \frac{\epsilon}{2}, t) + Y(x + \frac{\epsilon}{2}, t) \right) e^{-\beta\eta(k, \tau+1) - \frac{\beta^2}{2}}. \quad (7.19)$$

On peut alors définir $Y_n(x_1, \dots, x_n; t)$ sur le modèle de la définition (7.6) de $Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau)$:

$$Y_n(x_1, \dots, x_n; t) = \left\langle Y(x_1, t) \dots Y(x_n, t) \right\rangle, \quad (7.20)$$

et on peut facilement vérifier que la récurrence (7.15) sur les $Z_n(k_1, \dots, k_n; \tau)$ se traduit en terme des $Y_n(x_1, \dots, x_n; t)$ par

$$Y_n(x_1, \dots, x_n; t + \frac{1}{4}\epsilon^2) = \frac{1}{2^n} \sum_{d_i = \pm 1} Y_n(x_1 + \frac{\epsilon}{2}d_1, \dots, x_n + \frac{\epsilon}{2}d_n, t) e^{\beta^2 \sum_{i < j} \delta_{k_i}^{k_j}}. \quad (7.21)$$

Jusqu'à ce point, *aucune* approximation n'a été faite : on a juste fait un changement de variable, et l'expression (7.21) est exacte pour les valeurs discrètes de x et t qui correspondent en utilisant (7.16) à des points (k, τ) du réseau. On va maintenant développer (7.21) pour ϵ petit. Au premier ordre non-nul (à l'ordre ϵ^2), le membre de gauche fait apparaître la dérivée de Y_n par rapport au temps et la somme dans le membre de droite donne le laplacien de Y_n . La seule partie de (7.18) qui peut poser problème dans ce développement est l'argument de l'exponentielle. Pour comprendre la limite des symboles $\delta_{k_i}^{k_j}$, considérons deux fonctions $z(k)$ (définie pour k entier) et $y(x)$ (définie pour x réel), telles que

$$y(x) = y(k\epsilon) = z(k). \quad (7.22)$$

Alors, si la fonction $y(x)$ est régulière et ϵ est assez petit, on a

$$\sum_k z(k) \approx \frac{1}{\epsilon} \int dx y(x). \quad (7.23)$$

De même, si l'on rajoute un symbole de Kronecker, on a

$$\sum_k z(k) \delta_k^{k'} = z(k') = y(x') = \int dx y(x) \delta(x' - x), \quad (7.24)$$

où $x' = k'\epsilon$. En comparant ces deux équations, on voit que l'on doit prendre au premier ordre en ϵ

$$\delta_k^{k'} \approx \epsilon \delta(x' - x). \quad (7.25)$$

Pour que le premier terme non-nul du développement en puissances de ϵ de l'exponentielle dans (7.21) soit lui aussi d'ordre ϵ^2 , on voit qu'il faut que β^2 soit d'ordre ϵ . On pose donc

$$\beta^2 = \frac{1}{4}\gamma\epsilon. \quad (7.26)$$

On peut maintenant développer (7.21) pour ϵ petit. On obtient, au premier ordre non-nul (à l'ordre ϵ^2),

$$\frac{\partial}{\partial t} Y_n(x_1, \dots, x_n; t) \approx \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} Y_n + \gamma \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j) Y_n. \quad (7.27)$$

Si l'on compare (7.17) et (7.26), on voit que l'expression approchée (7.27) devient exacte dans la limite où le nombre de sites N tend vers l'infini et où le paramètre β tend vers 0 de telle manière que $N\beta^2$ reste fixe.

On a donc ramené dans cette limite le calcul de $Z_n(\tau)$ par l'équation discrète (7.15) à la résolution de l'équation aux dérivées partielles (7.27). On voit facilement que cette équation est complètement équivalente au problème quantique d'hamiltonien $\mathcal{H}$ donné par l'équation (7.2). En effet, si l'on appelle $\Psi_i(x_1, \dots, x_n)$ les fonctions d'onde propres de $\mathcal{H}$ associées aux énergies $E_i(n, L, \gamma)$,

$$\mathcal{H}\Psi_i(x_1, \dots, x_n) = E_i(n, L, \gamma)\Psi_i(x_1, \dots, x_n), \quad (7.28)$$

et si l'on décompose $Y_n(x_1, \dots, x_n; 0)$ sur la base des $\Psi_i(x_1, \dots, x_n)$,

$$Y_n(x_1, \dots, x_n; 0) = \sum_i a_i \Psi_i(x_1, \dots, x_n), \quad (7.29)$$

alors on a à tout instant t

$$Y_n(x_1, \dots, x_n; t) \approx \sum_i a_i e^{-E_i(n, L, \gamma)t} \Psi_i(x_1, \dots, x_n). \quad (7.30)$$

(Le symbole $\approx$ est là pour rappeler que l'on travaille au premier ordre non-nul en ϵ .) Pour presque toute condition initiale $Y_n(x_1, \dots, x_n; 0)$, tous les nombres a_i sont non-nuls (l'expression « presque toute » est ici prise au sens de la théorie de la mesure; les a_i sont non-nuls avec une probabilité un si l'on prend une condition initiale aléatoire.)

Dans les deux dernières équations on a supposé implicitement que les Ψ_i formaient une base dénombrable, ce qui est le cas quand l'espace des x est fini (périodique ou non) de taille L . Pour de telles géométries, il y a un *gap* entre l'énergie du fondamental et l'énergie du premier état excité. On voit

alors facilement que dans la limite des temps longs, seul contribue le terme faisant intervenir l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ du fondamental, les autres termes étant exponentiellement plus petits. À une constante multiplicative près, on a donc quand t est grand

$$Y_n(x_1, \dots, x_n; t) \simeq e^{-E_0(n, L, \gamma)t}. \quad (7.31)$$

Quand l'espace des x est infini, il existe un continuum d'états propres au problème quantique, et la somme sur i dans les équations (7.29) et (7.30) devrait plutôt être une intégrale. Comme il n'y a plus alors de *gap* entre le fondamental et les états excités, il est plus difficile d'extraire le comportement exact de Y_n dans la limite des temps longs, mais on s'attend⁶³ à ce qu'il soit de la forme

$$Y_n(x_1, \dots, x_n; t) \simeq \frac{1}{t^\alpha} e^{-E_0(n, L, \gamma)t} \quad (7.32)$$

pour une certaine constante α .

Le comportement est donc légèrement différent selon que la dimension transversale est finie ou infinie, mais on voit que quelle que soit la géométrie de l'espace, on a

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\log Y_n(x_1, \dots, x_n; t)}{t} \approx -E_0(n, L, \gamma). \quad (7.33)$$

On peut alors utiliser les relations (7.18, 7.20) pour relier le comportement de $Z(\tau)$ à l'énergie $E_0(n)$. On trouve (toujours pour ϵ petit)

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle}{\tau} - n\left(\frac{1}{2}\beta^2 + \log 2\right) \approx -\frac{\epsilon^2}{4} E_0(n, L, \gamma). \quad (7.34)$$

Comme expliqué dans la section 6.3.4 de l'introduction, on peut réécrire cette expression comme

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle - n \log \langle Z \rangle}{\tau} \approx \frac{\epsilon^2}{4} (E_0(n, L, 0) - E_0(n, L, \gamma)). \quad (7.35)$$

Reste à calculer $E_0(n, L, \gamma)$. Cette énergie dépend bien sûr du nombre de répliques n , de la taille L de la dimension spatiale (L peut être infinie) et de l'interaction γ , mais aussi de la géométrie de l'espace (finie avec deux frontières, finie et périodique, infinie avec zéro ou une frontière...). Cependant, si l'on fait une mise à l'échelle des x par un facteur λ dans l'hamiltonien 7.2, on voit facilement qu'on a la relation

$$\lambda^2 E_0(n, L, \gamma) = E_0\left(n, \frac{L}{\lambda}, \gamma\lambda\right). \quad (7.36)$$

La quantité $E_0(n, L, \gamma)$ ne dépend donc de manière non-triviale que du produit γL . Si on applique (7.36) pour $\lambda = \epsilon/2$ et qu'on utilise les relations (7.17) et (7.26), on peut exprimer le membre de droite de (7.35) en fonction seulement des paramètres N et β du problème de polymère dirigé

$$\frac{\epsilon^2}{4} \left(E_0(n, L, 0) - E_0(n, L, \gamma) \right) = E_0(n, 2N, 0) - E_0(n, 2N, 2\beta^2). \quad (7.37)$$

On voit donc, comme on pouvait s'y attendre, que le résultat final ne dépend pas du choix du facteur d'échelle ϵ .

7.2.1 Résumé de la limite continue et généralisation

On vient donc de voir que *dans la limite où le nombre N de sites devient grand et où le paramètre β tend vers 0 de manière à ce que $N\beta^2$ soit constant*, pour calculer le n -ième cumulant de la fonction de partition d'un modèle de polymère dirigé sur réseau en $1 + 1$ dimensions en milieu aléatoire, on est amené à considérer le modèle quantique où n particules interagissent dans un espace de taille L selon l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \gamma \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j), \quad (7.38)$$

et où la géométrie de l'espace (droite, anneau, segment, *etc.*) dans le problème quantique est la même que celle de la dimension transversale dans le modèle de polymère dirigé. On appelle $E_0(n, L, \gamma)$ l'énergie du fondamental de ce problème quantique.

Dans le cas du modèle présenté dans le chapitre d'introduction où chacun des sites (k, τ) est relié aux sites $(k, \tau - 1)$ et $(k + 1, \tau - 1)$ de la ligne précédente, on trouve dans cette limite

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle - n \log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} \approx E_0(n, 2N, 0) - E_0(n, 2N, 2\beta^2), \quad (7.39)$$

Cette équivalence entre les polymères dirigés vus à grande échelle et le problème (7.38) se généralise facilement à d'autres réseaux; par exemple, dans le modèle où chaque site (k, τ) est relié aux trois sites $(k - 1, \tau - 1)$, $(k, \tau - 1)$ et $(k + 1, \tau - 1)$ de la ligne précédente, on peut refaire les calculs de ce chapitre et on trouve

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{\log \langle Z_3^n(\tau) \rangle - n \log \langle Z_3(\tau) \rangle}{\tau} \approx E_0 \left(n, \sqrt{\frac{3}{2}} N, 0 \right) - E_0 \left(n, \sqrt{\frac{3}{2}} N, \sqrt{\frac{3}{2}} \beta^2 \right). \quad (7.40)$$

Les relations (7.39) et (7.40) sont utilisées au chapitre 9 pour comparer nos résultats exacts à des simulations numériques.

Chapitre 8

Résolution du problème quantique dans le cas d'une dimension spatiale périodique

Ce chapitre est consacré à la présentation des résultats des articles [3, 4] où nous avons calculé les premiers cumulants par unité de longueur de l'énergie libre d'un très long polymère dirigé sur un cylindre et mis en évidence l'existence d'un régime d'échelle dans lequel on peut déterminer toute la distribution de cette énergie libre. Le point de départ de ce calcul est la relation qui existe à grande échelle entre les moments entiers $\langle Z^n \rangle$ de la fonction de partition et l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ du fondamental d'un problème quantique où n particules interagissent avec une fonction δ

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \gamma \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j), \quad (8.1a)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\log \langle Z^n(\tau) \rangle - n \log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} = E_0(n, L, 0) - E_0(n, L, \gamma). \quad (8.1b)$$

(Voir la section 6.3.4 de l'introduction.) Si l'on arrive à écrire un développement de (8.1b) en puissances de n , on trouve que les cumulants de $\log Z$ sont donnés par les coefficients du développement de $E_0(n, L, \gamma)$

$$\begin{aligned} E_0(n, L, 0) - E_0(n, L, \gamma) &= n \frac{\langle \log Z \rangle - \log \langle Z \rangle}{\tau} + \frac{n^2}{2} \frac{\langle \log^2 Z \rangle_c}{\tau} \\ &\quad + \frac{n^3}{6} \frac{\langle \log^3 Z \rangle_c}{\tau} + O(n^4). \end{aligned} \quad (8.2)$$

Dans le cas qui nous intéresse ici où le polymère dirigé est sur un cylindre, les particules quantiques se déplacent sur un cercle et on peut calculer l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ en résolvant les équations de l'Ansatz de Bethe donnée dans

la section 6.3.5 de l'introduction

$$e^{\lambda_\alpha L} = \prod_{\substack{1 \leq \beta \leq n \\ \beta \neq \alpha}} \frac{\lambda_\alpha - \lambda_\beta + \gamma}{\lambda_\alpha - \lambda_\beta - \gamma}, \quad (8.3a)$$

$$E_0(n, L, \gamma) = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha^2, \quad (8.3b)$$

$$\{\lambda_\alpha\} = \{-\lambda_\alpha\}, \quad (8.3c)$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \lambda_\alpha = 0. \quad (8.3d)$$

où les λ_α sont tous différents.

L'équivalence (8.1) n'est exacte que pour des polymères dirigés définis dans le continu ou dans la limite où la température $1/\beta$ et le nombre de sites N sur la dimension transversale du réseau deviennent grands en gardant $N\beta^2$ constant. Dans ce dernier cas, nous avons vu au chapitre 7 comment l'on peut relier les paramètres N et β du polymère dirigé aux paramètres L et γ du problème de mécanique quantique.

La première section de chapitre est consacrée à la présentation des résultats des articles [3, 4]. Dans les cinq sections suivantes, je donnerai une ébauche de notre démonstration (sans reprendre tous les détails techniques) et je développerai certains points particuliers (pour une discussion plus précise, on peut se reporter aux deux articles reproduits en appendice). Enfin, je présenterai dans la dernière section de ce chapitre des résultats préliminaires sur le cas d'un polymère dirigé sur une bande.

8.1 Énergie libre d'un polymère dirigé sur un cylindre

Notre premier résultat est qu'à partir des équations (8.3), nous avons pu écrire une expression exacte³ des premiers termes de l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ en puissances de n

$$\begin{aligned} L^2 E_0(n, L, \gamma) = n \left[c + \frac{c^2}{6} \right] - \frac{n^2}{2} c^{3/2} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda^2 e^{-\frac{\lambda^2}{2}}}{\tanh \frac{\lambda\sqrt{c}}{2}} + \\ \frac{n^3}{6} c^2 \left[2 - 3 \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda^2 e^{-\frac{\lambda^2}{2}}}{\tanh \frac{\lambda\sqrt{c}}{2}} \left(\int_0^\lambda d\mu e^{-\frac{\mu^2}{2}} \frac{2 \cosh \frac{\lambda\mu}{2} - 2}{\tanh \frac{\mu\sqrt{c}}{2}} + \right. \right. \\ \left. \left. \int_\lambda^{+\infty} d\mu e^{-\frac{\mu^2}{2}} \frac{e^{-\frac{\lambda\mu}{2}} - 2}{\tanh \frac{\mu\sqrt{c}}{2}} \right) \right] + O(n^4), \end{aligned} \quad (8.4)$$

où le paramètre c est donné par

$$c = \frac{\gamma L}{2}. \quad (8.5)$$

Cette relation permet donc en utilisant l'équation (8.2) (et éventuellement les résultats du chapitre 7) d'obtenir le comportement des trois premiers cumulants de l'énergie libre d'un très long polymère dirigé sur un cylindre. Dans le chapitre 9, je comparerai ces cumulants à des simulations numériques.

De plus, nous avons également montré⁴ que dans le régime où c est grand et n d'ordre $c^{-1/2}$, l'expression de l'énergie prend la forme d'échelle

$$E_0(n, L, \gamma) = \frac{n\gamma^2}{24} - \frac{\sqrt{\gamma}}{2\sqrt{2\pi}L^{3/2}}G(-n\sqrt{2\pi L\gamma}), \quad (8.6)$$

où $G(x)$ est définie de manière implicite par

$$x = -\sum_{p=1}^{+\infty} \frac{\epsilon^p}{p^{3/2}}, \quad (8.7a)$$

$$G(x) = -\sum_{p=1}^{+\infty} \frac{\epsilon^p}{p^{5/2}}. \quad (8.7b)$$

Si l'on fixe γ et que l'on prend L grand, on voit que ce régime d'échelle permet de calculer la fonction de grande déviation (et donc la distribution de probabilité de $\log Z(\tau)$) pour des écarts d'ordre $1/L$. En effet, si l'on utilise (8.6) dans les expressions (6.49) qui donnent la fonction de grande déviation, on obtient

$$x = \frac{\gamma}{2L} \left(1 - G'(-n\sqrt{2\pi L\gamma}) \right), \quad (8.8a)$$

$$f(x) = n \left(x - \frac{\gamma}{2L} \right) - \frac{\sqrt{\gamma}}{2\sqrt{2\pi}L^{3/2}}G(-n\sqrt{2\pi L\gamma}). \quad (8.8b)$$

Cette expression n'est valable que lorsque $n\sqrt{L\gamma}$ est d'ordre 1, ce qui correspond à des valeurs de x d'ordre $1/L$. En utilisant (6.45),

$$\rho_\tau(\log Z) \propto e^{-\tau f\left(\frac{\log Z - \langle \log Z(\tau) \rangle}{\tau}\right)}, \quad (8.9)$$

l'expression de $f(x)$ permet de prédire pour des grandes valeurs de L la probabilité que $(\log Z)/\tau$ ait une valeur donnée qui diffère de sa valeur moyenne par une quantité d'ordre $1/L$.

L'expression (8.8) de $f(x)$ peut aussi s'écrire

$$f(x) = -\frac{\sqrt{\gamma}}{2\sqrt{\pi}L^{3/2}}H\left(1 - \frac{2L}{\gamma}x\right). \quad (8.10)$$

où la fonction $H(x)$ est définie comme dans [83]

$$y = G'(x), \quad (8.11a)$$

$$H(y) = \frac{1}{\sqrt{2}}(G(x) - xG'(x)). \quad (8.11b)$$

La figure 8.1 (empruntée à Derrida et Appert⁸³) représente le logarithme de la fonction $H(x)$.

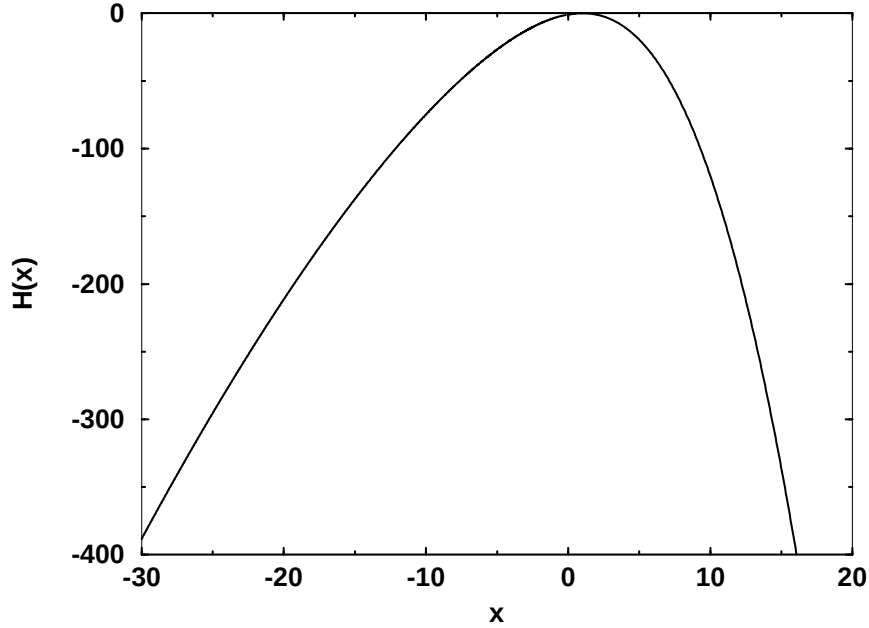


FIG. 8.1 – Forme d'échelle (8.11) de la fonction qui donne les grandes déviations de $\log Z(\tau)$ pour un polymère τ . Cette figure est empruntée à Derrida et Appert⁸³.

Ce régime d'échelle est très certainement universel en $1 + 1$ dimensions avec des conditions périodiques sur la dimension spatiale pour les systèmes tels que les polymères dirigés qui sont décrits par l'équation KPZ. Dans les modèles de type ASEP (*Asymmetric Simple Exclusion Process*), qui sont eux-aussi décrits par l'équation KPZ, N particules se déplacent en faisant des sauts aléatoires et sans se dépasser sur un anneau de taille L . Les sauts

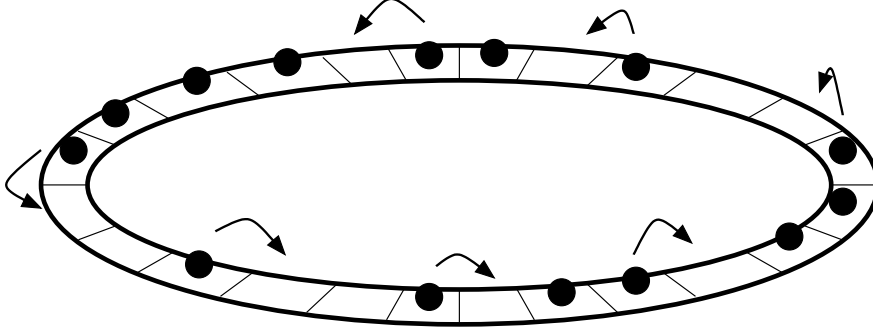


FIG. 8.2 – Un exemple de modèle ASEP avec 14 particules sur 24 sites. Ici $\rho = \frac{1}{2}$ (les particules ne peuvent sauter que vers la droite). Seules les particules avec un site vide devant elles peuvent se déplacer.

se font vers la droite avec une probabilité $\frac{1}{2} + \rho$ ou vers la gauche avec une probabilité $\frac{1}{2} - \rho$ où le paramètre d'asymétrie ρ est *strictement* positif. Des travaux récents^{48, 49, 83} ont montré que le courant intégré $Y(t)$ (c'est-à-dire le nombre de sauts de particules depuis le début de l'histoire du système) vérifie lorsque t est grand la relation

$$\log \langle e^{\alpha Y(t)} \rangle \propto \Lambda(\alpha)t, \quad (8.12)$$

où l'expression exacte de $\Lambda(\alpha)$ en fonction de α , du nombre de particules N , de la taille L et de l'asymétrie ρ peut être calculée. De plus, lorsque L est grand et α d'ordre $L^{-3/2}$, la quantité $\Lambda(\alpha)$ se met sous la forme

$$\Lambda(\alpha) - \alpha K_1 = K_2 G(\alpha K_3), \quad (8.13)$$

où $G(x)$ est la fonction donnée par (8.7) et où K_1 , K_2 et K_3 ne dépendent pas de α .

L'équation (8.12) doit bien sûr être rapprochée de la relation

$$\log \langle Z^n(\tau) \rangle \propto -E_0(n, L, \gamma)\tau, \quad (8.14)$$

entre la fonction de partition des polymères dirigés et l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$. Si l'on utilise l'équation KPZ pour décrire le modèle ASEP et le modèle de polymère dirigé, on voit⁵² que les quantités $Y(t)/L$ et $\log Z(\tau)$ jouent des rôles similaires dans les deux problèmes. En comparant (8.12) et (8.14), on en déduit que n correspond à αL et $E_0(n, L, \gamma)$ à $-\Lambda(\alpha)$. Dans le régime d'échelle (L grand et $n \sim L^{-1/2}$ ou $\alpha \sim L^{-3/2}$), les relations (8.6) et (8.13) sont donc identiques aux constantes près.

Nous avons donc dans la classe KPZ deux modèles en $1 + 1$ dimensions avec une dimension transversale (ou spatiale) finie et périodique qui sont

très différents l'un de l'autre, mais dont les fonctions de grande déviation dans un certain régime sont toutes les deux caractérisées par la même fonction $G(x)$ (ou si l'on préfère $H(x)$). Dans des simulations numériques de plusieurs modèles de croissance, des résultats récents ont montré que la fonction de grande déviation est compatible^{50,83} avec la fonction $G(x)$. Tous ces résultats indiquent donc que $G(x)$ est une propriété universelle des modèles de type KPZ en $1 + 1$ dimensions avec une dimension spatiale périodique.

8.2 Écriture d'une équation intégrale

Les résultats (8.4, 8.6) ont été obtenus en écrivant une équation intégrale où n apparaît comme un paramètre continu. Pour reprendre les conventions de notations de nos deux travaux^{3,4}, on fait dans (8.3) le changement de variable

$$q_\alpha = \frac{L}{2}\lambda_\alpha, \quad (8.15a)$$

$$c = \frac{\gamma L}{2}. \quad (8.15b)$$

Les équations couplées deviennent alors

$$e^{2q_\alpha} = \prod_{\substack{1 \leq \beta \leq n \\ \beta \neq \alpha}} \frac{q_\alpha - q_\beta + c}{q_\alpha - q_\beta - c}, \quad (8.16)$$

et l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ s'écrit

$$E_0(n, L, \gamma) = -\frac{2}{L^2} \sum_{\alpha=1}^n q_\alpha^2. \quad (8.17)$$

On voit sous cette forme que l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ ne dépend de manière non-triviale que des deux paramètres n et c , ce qui avait déjà été remarqué sous une autre forme à la fin de la section 7.2.

On ne peut pas prendre directement la limite $n \rightarrow 0$ dans l'équation (8.16) car n y apparaît manifestement comme un entier : c'est le nombre de racines q_α . Il faut donc réécrire (8.16) de manière à ce que n apparaisse comme un paramètre continu. Une première tentative consiste à définir le polynôme

$$P(X) = \prod_{1 \leq \alpha \leq n} (X - q_\alpha). \quad (8.18)$$

L'équation (8.16) de l'Ansatz de Bethe se traduit alors par la condition que l'expression

$$\frac{e^X P(X - c) + e^{-X} P(X + c)}{P(X)} \quad (8.19)$$

est une fonction analytique de X . (Cette fonction est manifestement méromorphe. Grâce à (8.16), le numérateur s'annule là où le dénominateur s'annule, et le dénominateur n'a pas de zéro multiple.) De plus, comme dans l'état fondamental les q_α tendent vers 0 quand c tend vers 0, le polynôme $P(X)$ tend vers X^n quand c tend vers zéro. Enfin, l'état fondamental étant symétrique, le polynôme $P(X)$ est soit pair, soit impair selon la parité de n .

Comme expliqué dans l'appendice D de [4], ces propriétés permettent déjà d'obtenir un développement à c petit du polynôme $P(X)$ et de l'énergie. On trouve, comme l'avait déjà remarqué Gaudin⁸⁴, qu'au premier ordre $P(X\sqrt{c})$ est proportionnel au n -ième polynôme de Hermite. Nous avons pu continuer le développement et montrer qu'à n'importe quel ordre en c , le polynôme $P(X\sqrt{c})$ peut s'écrire comme une combinaison linéaire des premières dérivées du n -ième polynôme de Hermite, avec des coefficients qui s'expriment simplement en fonction de n . Nous avons alors donné un développement en puissances de c des racines q_α (qui s'écrit simplement en fonction des racines du polynôme de Hermite) et finalement nous avons pu écrire un développement à c petit de l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$. On peut ainsi prouver que pour tout entier positif n , on a

$$E_0(n, L, \gamma) = -\frac{2}{L^2} n(n-1) \left(\frac{c}{2} + \frac{c^2}{12} + \frac{nc^3}{180} + O(c^4) \right). \quad (8.20)$$

On peut de plus montrer qu'à tout ordre du développement à c petit, l'expression obtenue est polynômiale en n . Si l'on suppose que l'expression (8.20) valable pour tout n entier positif reste exacte pour un n quelconque, l'équation (8.2) permet d'obtenir un développement limité en c des cumulants de l'énergie libre $\log Z(\tau)$.

Cependant, cette méthode avec les polynômes de Hermite devient rapidement compliquée et ne permet d'obtenir que quelques termes des développements limités des cumulants de $\log Z$. Pour aller plus loin, nous avons introduit la fonction $B(u)$ définie par

$$B(u) = \frac{1}{n} e^{\frac{c}{4}(u^2-1)} \sum_{1 \leq \alpha \leq n} \left(\prod_{\substack{1 \leq \beta \leq n \\ \beta \neq \alpha}} \frac{q_\alpha - q_\beta + c}{q_\alpha - q_\beta} \right) e^{q_\alpha(u-1)}. \quad (8.21)$$

Cette quantité est essentiellement la transformée de Laplace du rapport $P(X+c)/P(X)$: en effet, si X est un réel positif assez grand, on a

$$\frac{P(X+c)}{P(X)} = 1 + nc \int_0^{+\infty} du e^{-uX} e^{-\frac{c}{4}u^2 - \frac{c}{2}u} B(1+u). \quad (8.22)$$

Une conséquence directe de cette expression combinée avec la propriété de parité de $P(X)$ est que $B(u)$ vérifie l'équation intégrale^{3,4}

$$B(1+u) - B(1-u) = nc \int_0^u dv e^{-\frac{c}{2}(v^2-uv)} B(1-v) B(1+u-v), \quad (8.23a)$$

et les deux conditions

$$B(1) = 1, \quad (8.23b)$$

$$E_0(n, L, \gamma) = \frac{2}{L^2} \left(\frac{n^3 c^2}{6} + \frac{nc^2}{12} + \frac{nc}{2} - nB''(1) \right). \quad (8.23c)$$

De plus, étant donné que dans l'état fondamental les q_α tendent vers 0 comme $\sqrt{c}$ quand c tend vers 0, on sait que tous les termes du développement de $B(u)$ en puissances de c sont des polynômes en u .

Ces quatre propriétés de $B(u)$ n'ont rien à voir avec l'Ansatz de Bethe ; elles sont juste une manière très compliquée d'écrire qu'il existe un polynôme $P(X)$ avec certaines propriétés (pair ou impair, de degré n et tendant vers X^n quand c tend vers 0) relié à $B(u)$ par (8.22). La condition de l'Ansatz de Bethe peut cependant s'écrire avec ces notations de manière extrêmement simple : on montre en effet que (8.16) est équivalent à

$$B(u) = B(-u). \quad (8.23d)$$

Les quatre équations (8.23) valables pour un entier n quelconque peuvent paraître compliquées, mais leur immense avantage est que n y apparaît très simplement comme un terme dans une multiplication. Il est donc naturel de supposer que ces quatre relations restent valables pour un n quelconque et d'essayer de les utiliser directement pour calculer $E_0(n, L, \gamma)$ perturbativement en c ou en n .

8.3 Développement à c petit

On s'attend à ce que les racines q_α soient des fonctions analytiques du paramètre c , au moins pour c assez petit, et ce quel que soit l'entier n . La fonction $B(u)$ admet donc un développement limité autour de $c = 0$. On pose

$$B(u) = B_0(u) + cB_1(u) + c^2B_2(u) + \dots \quad (8.24)$$

On sait que chaque terme $B_k(u)$ du développement est un polynôme pair en u , et si l'on connaît tous les termes jusqu'à l'ordre $k-1$ inclus, l'équation (8.23a) donne explicitement $B_k(1+u) - B_k(1-u)$. On voit donc que l'on doit juste résoudre à tout ordre une équation du type

$$B_k(1+u) - B_k(1-u) = \text{« un certain polynôme en } u \text{ »}. \quad (8.25)$$

Sachant que $B_k(u)$ est un polynôme pair et que $B_k(1) = 0$ pour $k > 0$, on peut prouver que l'équation (8.25) n'admet qu'une seule solution. Le programme **Mathematica** suivant permet de calculer facilement cette solution :

```
PseudoIntegrate[p_, var_] := Block[
  { i, j, result = 0, nterms, coef, clist, sum = 0 },
  clist = CoefficientList[p, var];
  nterms = Length[clist];
  For[i = nterms, i > 0, i -= 2,
    coef = clist[[i]]/i;
    For[j = i, j > 0, j -= 2,
      clist[[j]] -= coef * Binomial[i, j-1];
    ];
    result = result + coef/2 var^i;
    sum += coef;
  ];
  Collect[result - sum/2, var, Expand]
]
```

Par exemple, `PseudoIntegrate[n u, u]` donne :

$$\frac{-n}{4} + \frac{nu^2}{4}. \quad (8.26)$$

En reportant à chaque étape le résultat de **PseudoIntegrate** dans l'équation (8.23a), on voit que l'on peut facilement calculer le développement de $B(u)$ en puissances de c jusqu'à un ordre donné arbitraire. Le programme suivant permet d'automatiser ce calcul :

```
Expansion[maxorder_] := Block[ { B, BB, i },
  B[0] = 1;
  For[i = 1, i <= maxorder, i++,
    BB[i-1] = Sum[ Expand[
      (B[j] /. u -> 1-v) *
      (B[i-1-j] /. u -> 1+u-v)
    ], {j, 0, i-1} ];
    B[i] = PseudoIntegrate[ Sum[ Expand[
```

```

      n v BB[i- 1-j] (-1/2 (v^2 - u v))^j /j!
    ], {j, 0, i-1}
  ] /. v^k_ -> u^k / k, u ];
];
Sum[B[i] c^i, {i, 0, maxorder}]
]

```

(Notes : `BB[i]` contient le terme d'ordre c^i du développement de $B(1 - v)B(1 + u - v)$. Pour gagner en vitesse d'exécution, l'intégrale sur v est effectuée « à la main ».)

Par exemple, `Expansion[5]` donne le développement de $B(u)$ en puissances de c jusqu'à l'ordre 5 :

$$\begin{aligned}
B(u) = & 1 + c \left[\frac{-n}{4} + \frac{nu^2}{4} \right] + c^2 \left[\frac{n}{96} + \frac{n^2}{48} + \left(\frac{-n}{48} - \frac{n^2}{24} \right) u^2 + \left(\frac{n}{96} + \frac{n^2}{48} \right) u^4 \right] \\
& + c^3 \left[\frac{-n}{960} - \frac{n^2}{1440} - \frac{n^3}{1152} + \left(\frac{7n}{2880} + \frac{n^2}{360} + \frac{n^3}{384} \right) u^2 + \right. \\
& \quad \left. \left(\frac{-n}{576} - \frac{n^2}{288} - \frac{n^3}{384} \right) u^4 + \left(\frac{n}{2880} + \frac{n^2}{720} + \frac{n^3}{1152} \right) u^6 \right] \\
& + c^4 \left[\frac{17n}{107520} - \frac{19n^2}{193536} + \frac{157n^3}{1935360} + \frac{n^4}{46080} + \right. \\
& \quad \left(\frac{-31n}{80640} + \frac{13n^2}{241920} - \frac{113n^3}{483840} - \frac{n^4}{11520} \right) u^2 + \\
& \quad \left(\frac{7n}{23040} + \frac{17n^2}{69120} + \frac{41n^3}{138240} + \frac{n^4}{7680} \right) u^4 + \\
& \quad \left(\frac{-n}{11520} - \frac{n^2}{3840} - \frac{n^3}{4608} - \frac{n^4}{11520} \right) u^6 + \\
& \quad \left. \left(\frac{n}{107520} + \frac{19n^2}{322560} + \frac{47n^3}{645120} + \frac{n^4}{46080} \right) u^8 \right] \\
& + c^5 \left[\frac{-31n}{967680} + \frac{1591n^2}{29030400} - \frac{4099n^3}{116121600} + \frac{23n^4}{4838400} - \frac{n^5}{2764800} + \right. \\
& \quad \left(\frac{127n}{1612800} - \frac{3029n^2}{29030400} + \frac{7691n^3}{116121600} - \frac{17n^4}{9676800} + \frac{n^5}{552960} \right) u^2 + \\
& \quad \left. \left(\frac{-31n}{483840} + \frac{11n^2}{322560} - \frac{79n^3}{2322432} - \frac{n^4}{72576} - \frac{n^5}{276480} \right) u^4 + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{7n}{345600} + \frac{19n^2}{691200} + \frac{13n^3}{921600} + \frac{11n^4}{691200} + \frac{n^5}{276480} \right) u^6 + \\
& \left(\frac{-n}{322560} - \frac{n^2}{71680} - \frac{113n^3}{7741440} - \frac{n^4}{138240} - \frac{n^5}{552960} \right) u^8 + \\
& \left(\frac{n}{4838400} + \frac{11n^2}{5806080} + \frac{83n^3}{23224320} + \frac{61n^4}{29030400} + \frac{n^5}{2764800} \right) u^{10} \Bigg] \\
& + O(c^6). \tag{8.27}
\end{aligned}$$

En utilisant (8.23c) on peut alors facilement extraire un développement limité de l'énergie. En utilisant un peu plus de termes que pour l'équation (8.27), on obtient

$$\begin{aligned}
E_0(n, L, \gamma) = & -\frac{n(n-1)}{L^2} \left(c + \frac{c^2}{6} + \frac{c^3 n}{90} - c^4 \left[\frac{n}{630} - \frac{n^2}{756} \right] \right. \\
& + c^5 \left[\frac{n}{3150} - \frac{29n^2}{56700} + \frac{n^3}{5400} \right] \\
& - c^6 \left[\frac{n}{12474} - \frac{137n^2}{748440} + \frac{13n^3}{99792} - \frac{n^4}{35640} \right] \\
& + c^7 \left[\frac{691n}{28378350} - \frac{2407n^2}{34749000} + \frac{25853n^3}{364864500} \right. \\
& \quad \left. - \frac{621161n^4}{20432412000} + \frac{691n^5}{154791000} \right] \\
& \left. \right) + O(c^8). \tag{8.28}
\end{aligned}$$

8.4 Développement à n petit

Pour traiter le cas n petit, on suppose que $B(u)$ se développe en puissances de n

$$B(u) = 1 + nb_1(u) + n^2 b_2(u) + n^3 b_3(u) + \dots \tag{8.29}$$

et on reporte dans (8.23a). Comme dans le cas du développement à c petit, les $b_k(u)$ sont des fonctions paires de u s'annulant en $u = 1$, et on voit que l'on doit résoudre à tous les ordres une équation de la forme

$$b_k(1+u) - b_k(1-u) = \varphi_k(u), \tag{8.30}$$

où les $\varphi_k(u)$ peuvent être calculés à partir des ordres précédents. Ainsi, au premier ordre, on doit résoudre

$$b_1(1+u) - b_1(1-u) = c \int_0^u dv e^{-\frac{c}{2}(v^2-uv)}. \quad (8.31)$$

Ce qui rend ce développement beaucoup plus difficile que le précédent, c'est que les $\varphi_k(u)$ et les $b_k(u)$ ne sont absolument pas des polynômes en u . Du coup, l'équation (8.30) ne détermine $b_k(u)$ qu'à une fonction paire et périodique de période 2 près, et le problème se pose de choisir la bonne solution. Ainsi, nous avons montré que la solution générale de (8.31) est donnée par

$$b_1(u) = \sqrt{c} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\cosh \frac{\lambda u \sqrt{c}}{2} - \cosh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}}{\sinh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}} e^{-\frac{\lambda^2}{2}} + F_1(u, c), \quad (8.32)$$

où $F_1(u, c)$ est une fonction arbitraire paire et périodique en u de période 2 et s'annulant pour $u = 1$.

L'indétermination sur $F_1(u, c)$ peut être en partie levée grâce au développement à c petit de la section précédente : en effet, la série composée des termes proportionnels à n dans (8.27) doit donner $b_1(u)$ en puissances de c :

$$\begin{aligned} b_1(u) = & c \left[-\frac{1}{4} + \frac{u^2}{4} \right] + c^2 \left[\frac{1}{96} - \frac{u^2}{48} + \frac{u^4}{96} \right] + c^3 \left[\frac{-1}{960} + \frac{7u^2}{2880} - \frac{u^4}{576} + \frac{u^6}{2880} \right] \\ & + c^4 \left[\frac{17}{107520} - \frac{31u^2}{80640} + \frac{7u^4}{23040} - \frac{u^6}{11520} + \frac{u^8}{107520} \right] \\ & + c^5 \left[\frac{-31}{967680} + \frac{127u^2}{1612800} - \frac{31u^4}{483840} + \frac{7u^6}{345600} - \frac{u^8}{322560} + \frac{u^{10}}{4838400} \right] \\ & + O(c^6). \end{aligned} \quad (8.33)$$

On sait donc que chaque ordre du développement de $b_1(u)$ en puissances de c est polynômial en u . Comme $F_1(u, c)$ est périodique en u de période deux, on voit qu'il faut que *tous les ordres du développement de $F_1(u, c)$ en puissances de c soient nuls*.

On a par conséquent envie de prendre $F_1(u, c) = 0$ et c'est effectivement le choix que nous avons fait dans nos deux articles. Cependant, il existe beaucoup de fonctions $F_1(u, c)$ singulières en $c = 0$ qui ont un développement limité identiquement nul, et le choix $F_1(u, c) = 0$ n'est pas facile à justifier ; on peut en effet vérifier à partir de l'expression (8.32) que la série (8.33) a un *rayon de convergence nul*, et que la fonction $b_1(u)$ n'est donc pas analytique en c . On ne peut donc pas utiliser un critère d'analyticité pour choisir $F_1(u, c)$.

D'un autre côté, l'intégrale dans (8.32) définit une fonction analytique en u qui croît lentement (comme $\log|u|$) quand $u \rightarrow \pm i\infty$. Si l'on impose que $F_1(u, c)$ soit également analytique (et périodique) en u et ait une croissance lente à l'infini sur l'axe imaginaire, on voit que la seule solution est de prendre $F_1(u, c) = 0$. On peut alors montrer que l'expression (8.32) est la resommée de Borel de la série formelle (8.33).

Ces critères de croissance sur l'axe imaginaire des u ne sont pas très satisfaisants et il serait intéressant de trouver une justification plus physique. La difficulté du choix d'une solution se retrouve à tous les ordres du calcul, et nous avons décrit dans nos articles une procédure pour sélectionner la solution analytique qui croît le moins vite sur l'axe imaginaire. Cette méthode permet alors en théorie de calculer les $b_i(u)$ jusqu'à un ordre arbitraire. En pratique, les expressions deviennent rapidement trop difficiles à manipuler pour effectivement mener les calculs. On peut néanmoins écrire le deuxième ordre

$$b_2(u) = c \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\cosh \frac{\lambda u \sqrt{c}}{2} - \cosh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}}{\sinh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}} e^{-\frac{\lambda^2}{2}} \left(\int_0^\lambda d\mu e^{-\frac{\mu^2}{2}} \frac{2 \cosh \frac{\lambda \mu}{2} - 2}{\tanh \frac{\mu \sqrt{c}}{2}} + \int_\lambda^{+\infty} d\mu e^{-\frac{\mu^2}{2}} \frac{e^{-\frac{\lambda \mu}{2}} - 2}{\tanh \frac{\mu \sqrt{c}}{2}} \right), \quad (8.34)$$

et en utilisant la relation (8.23c) et les expressions de $b_1(u)$ et $b_2(u)$, on trouve alors facilement les trois premiers ordres donnés par l'équation (8.4) du développement de $E_0(n, L, \gamma)$ en puissances de n .

Nous n'avons pas réussi à trouver une méthode pour produire de manière simple tout le développement de la fonction $B(u)$ en puissances de n , mais nous avons par contre pu calculer exactement $B(u)$ dans le régime d'échelle « c grand et $n \sim c^{-1/2}$ ». Ce calcul est présenté dans la section 8.6 après quelques remarques sur les problèmes de séries divergentes rencontrés dans cette section.

8.5 Digression sur les séries divergentes

La grosse difficulté du calcul présenté dans la section précédente est que le développement de $B(u)$ (ou de $E_0(n, L, \gamma)$) en puissances de c a un rayon de convergence nul quand n est petit alors que chaque terme de ce développement est un polynôme en n . (Des résultats préliminaires semblent indiquer qu'en fait cette série converge si et seulement si n est un entier positif.) Cela signifie que si l'on veut calculer $B(u)$ pour, par exemple, $n = 1, 5$, il ne suffit pas de substituer n dans (8.27). De même, il ne suffit pas de prendre la série

des termes proportionnels à n dans le développement de $B(u)$ en puissances de c pour obtenir le comportement de $B(u)$ pour n petit : une telle série est divergente, et il faut la resommer.

On peut assez facilement construire des exemples simples qui possèdent ces propriétés inhabituelles. Considérons

$$f(n, c) = 1 + cn + c^2 n(n-1) + c^3 n(n-1)(n-2) + c^4 n(n-1)(n-2)(n-3) + \dots \quad (8.35)$$

Cette fonction de c est manifestement bien définie et est analytique pour tout entier positif n . En fait, quand n est entier, $f(n, c)$ est un polynôme en c . De plus, comme pour $B(u)$, chaque terme du développement de $f(n, c)$ en puissances de c est un polynôme en n .

Cependant, pour toute valeur non-entière de n , la série (8.35) a un terme général qui croît comme factorielle et a donc un rayon de convergence nul. De plus, si l'on essaie d'extraire de cette série le terme proportionnel en n , on obtient encore une série divergente.

On peut cependant resommer (8.35). Il est facile de vérifier que pour tout entier n positif, on a :

$$f(n, c) = \int_0^{+\infty} dt e^{-t} (1 + ct)^n. \quad (8.36)$$

Sous cette forme, il n'y a plus aucune difficulté à donner une valeur fractionnaire à n à condition que c soit un réel positif. On peut aussi si on le désire faire des développements limités à n petit :

$$f(n, c) = 1 + n \int_0^{+\infty} dt e^{-t} \log(1 + ct) + O(n^2). \quad (8.37)$$

On voit donc que bien que les deux formes (8.35) et (8.36) soient équivalentes quand n est un entier, seule l'expression resommée (8.36) peut être prolongée à n petit. Cette difficulté est probablement très courante dans les systèmes désordonnés et est déjà présente dans le modèle le plus simple que l'on puisse imaginer : un spin unique dans un champ magnétique aléatoire. La fonction de partition de ce problème est donnée par

$$Z = 2 \cosh c\eta, \quad (8.38)$$

où η est une variable aléatoire gaussienne telle que $\langle \eta^2 \rangle = 1$, et c est un réel positif qui représente l'amplitude du champ ou l'inverse de la température. Pour tout nombre complexe n , on peut calculer $\langle Z^n \rangle$

$$\langle Z^n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta (2 \cosh c\eta)^n e^{-\frac{\eta^2}{2}}. \quad (8.39)$$

Si n est un entier positif, on peut écrire le cosh comme une somme de deux exponentielles, développer le contenu de la parenthèse à la puissance n et intégrer séparément les $n + 1$ termes obtenus. $\langle Z^n \rangle$ est alors dans ce cas une somme finie de termes de la forme $\exp(\lambda c^2)$

$$\langle Z^n \rangle = \sum_{k=0}^n C_n^k e^{\frac{c^2}{2}(2k-n)^2}, \quad (8.40)$$

et est donc développable en puissances de c avec un rayon de convergence infini. On peut même vérifier que mis à part un facteur global 2^n , chaque ordre de ce développement est polynômial en n .

Par contre, dès que n n'est plus un entier positif, $\langle Z^n \rangle$ n'est plus développable en puissances de c ; en fait, (8.39) n'est même plus alors bien définie dès que c n'est pas réel : si c a une partie imaginaire, $\cosh ch$ n'est plus un réel positif et on ne sait pas élever ce nombre à une puissance n fractionnaire. (Ou alors il faut choisir un domaine du plan complexe sur lequel on définit le logarithme, et il restera quand même une direction dans laquelle il n'est pas défini.) On peut vérifier de la même manière que l'énergie libre $\langle \log Z \rangle$ n'est pas analytique en $c = 0$. La fonction (8.36) n'est alors simplement que la *resommée de Borel* de son développement en puissances de c .

On voit donc que les difficultés rencontrées dans la section précédente sont génériques. Si l'on ne peut calculer $\langle Z^n \rangle$ qu'en puissances du bruit c , il ne faut pas espérer pouvoir extraire de ce développement une série de $\langle \log Z \rangle$ avec un rayon de convergence non-nul.

8.6 Régime d'échelle de la fonction $B(u)$

Nous avons montré dans [4] que si l'on fait le changement de variables

$$\beta(u) = \frac{1}{2K\sqrt{\pi}} e^{-\frac{u^2}{4}} B\left(1 + \frac{u}{\sqrt{c}}\right), \quad (8.41a)$$

$$\epsilon = 2Kn\sqrt{\pi c}, \quad (8.41b)$$

où K est un certain nombre, alors dans la limite où c est grand et où ϵ reste d'ordre 1, l'équation intégrale (8.23a) devient simplement

$$\beta(u) = H(u) + \epsilon \int_0^{+\infty} dv \beta(u-v)\beta(-v), \quad (8.42a)$$

avec

$$H(u) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-\frac{u^2}{4}}. \quad (8.42b)$$

La fonction $\beta(u)$ est entièrement définie par ces deux relations et ne dépend que de u et ϵ . En utilisant les définitions (8.41) et les relations (8.23b, 8.23c), on peut relier l'énergie et n à $\beta(u)$:

$$n = \frac{\epsilon}{\sqrt{c}}\beta(0), \quad (8.43a)$$

$$L^2 E_0(n, L, \gamma) = \frac{n^3 c^2}{3} + \frac{n c^2}{6} - 2\epsilon\sqrt{c}\beta''(0). \quad (8.43b)$$

On voit donc que dans ce régime « c grand et $n \sim c^{-1/2}$ », il suffit pour obtenir l'énergie de calculer $\beta(0)$ et $\beta''(0)$ à partir de (8.42).

L'équation (8.42a) est bien sûr beaucoup plus agréable que sa contrepartie (8.23a) : parce que le membre de gauche dans (8.42a) est simple, si l'on essaye de développer $\beta(u)$ en puissances de ϵ il n'y a pas d'ambiguïté à lever à chaque étape du calcul comme on en a dans le développement de $B(u)$. En fait, la résolution pour n petit du problème de mécanique quantique serait grandement simplifiée si l'on pouvait dès le début écrire l'équation (8.42a). En utilisant (8.21), on voit qu'on aurait pu définir $\beta(u)$ directement en fonction des solutions q_α de l'Ansatz de Bethe. Si l'on insère la définition (8.41a) dans la relation intégrale (8.23a), on voit sans faire la moindre approximation que la fonction $\beta(u)$ vérifie la relation

$$\beta(u) - \beta(-u) = \epsilon \int_0^u dv \beta(u-v)\beta(-v). \quad (8.44)$$

Cette relation est plus simple que celle sur les $B(u)$, mais la condition $B(u) = B(-u)$ (qui est la condition de l'Ansatz de Bethe) s'écrit de manière compliquée en terme des $\beta(u)$.

Si, à partir de la relation (8.42a), on forme la combinaison $\beta(u) - \beta(-u)$, on voit qu'il suffit de supposer que $H(u)$ soit pair pour retrouver (8.44). On aurait donc pu, sans supposer que c est grand, définir la fonction $H(u)$ par (8.42a) et dire que cette fonction est nécessairement paire. Puis, en utilisant l'Ansatz de Bethe, on aurait pu calculer $H(u)$ en fonction de u , c et ϵ et obtenir (au premier ordre, et pour la bonne valeur de K)

$$H(u) = \frac{e^{-\frac{u^2}{4}}}{2\sqrt{\pi}} + \epsilon \frac{e^{-\frac{u^2}{4}}}{4\pi} \int_0^{+\infty} d\lambda \left(\frac{1}{\tanh \frac{\lambda\sqrt{c}}{2}} - 1 \right) \left(\cosh \frac{\lambda u}{2} - 1 \right) e^{\frac{-\lambda^2}{2}} + O(\epsilon^2). \quad (8.45)$$

On peut alors montrer qu'à tous les ordres en ϵ , ce $H(u)$ tend bien dans la limite où c est grand vers ce qui est annoncé dans l'équation (8.42b). Cette méthode fonctionne mais n'est pas plus simple que celle que nous avons

suivie dans [4]. Ce qui est curieux, c'est que bien que l'on puisse définir un $H(u)$ exact (sans se placer dans le régime d'échelle) en puissances de ϵ , on ne peut pas à partir de (8.42a) écrire un $H(u)$ pour n entier en fonction des solutions $\{q_\alpha\}$ de l'Ansatz de Bethe : l'intégrale dans (8.42a) diverge. Je crois que cette fonction $H(u)$ n'existe que pour un n fractionnaire assez petit.

La première étape du calcul de $\beta(0)$ et $\beta''(0)$ à partir de (8.42a) consiste à montrer que la fonction $\beta(u)$ vérifie l'équation intégrale

$$\beta(u) = H(u) + \epsilon \int_0^{+\infty} dv H(u-v)\beta(v). \quad (8.46)$$

Nous avons montré dans [4] l'équivalence entre (8.42a) et (8.46) de manière algébrique. Je vais ici présenter l'esquisse d'une démonstration plus graphique qui fait un lien avec les marches aléatoires.

Développons $\beta(u)$ en puissances de ϵ :

$$\beta(u) = \beta_0(u) + \epsilon\beta_1(u) + \epsilon^2\beta_2(u) + \dots \quad (8.47)$$

Si l'on part de (8.46), on peut facilement donner l'expression de tous les $\beta_k(u)$. Par exemple, on a

$$\beta_2(u) = \int_0^{+\infty} dv_1 \int_0^{+\infty} dv_2 H(v_1)H(v_2-v_1)H(u-v_2). \quad (8.48)$$

Si l'on suppose que $H(u)$ est une densité de probabilité ($H(u) \geq 0$ et $\int H = 1$) qui représente la probabilité pour un marcheur de faire un pas de longueur u , alors on voit que $\beta_2(u)$ est la probabilité qu'un marcheur qui fait trois pas sur une ligne de manière à ce que les deux positions intermédiaires aient des abscisses positives aille de 0 à u . La quantité v_1 est alors la position à la fin du premier pas et v_2 celle à la fin du second. De même, $\beta_k(u)$ est la probabilité équivalente pour un trajet en $k+1$ pas. La figure 8.3 donne un exemple d'une telle marche en six pas ($k=5$). Considérons la position intermédiaire (en excluant donc 0 et u) la plus proche de l'origine. Sur la figure, il s'agit de la position v_2 . Supposons que l'on fixe v_2 et que l'on impose qu'il reste la position intermédiaire la plus proche de l'origine, et regardons ce que devient la probabilité d'aller de 0 à u en six pas avec ces contraintes supplémentaires. La probabilité d'aller de v_2 à u en quatre pas et en restant au dessus de v_2 est exactement $\beta_3(u-v_2)$. Comme $H(u)$ est une fonction paire, la probabilité d'aller de 0 à v_2 en deux pas et en restant au dessus de v_2 est égale, en allant à reculons, à la probabilité d'aller de v_2 à 0 et vaut donc $\beta_1(-v_2)$. Si on laisse maintenant varier le numéro du pas où la position

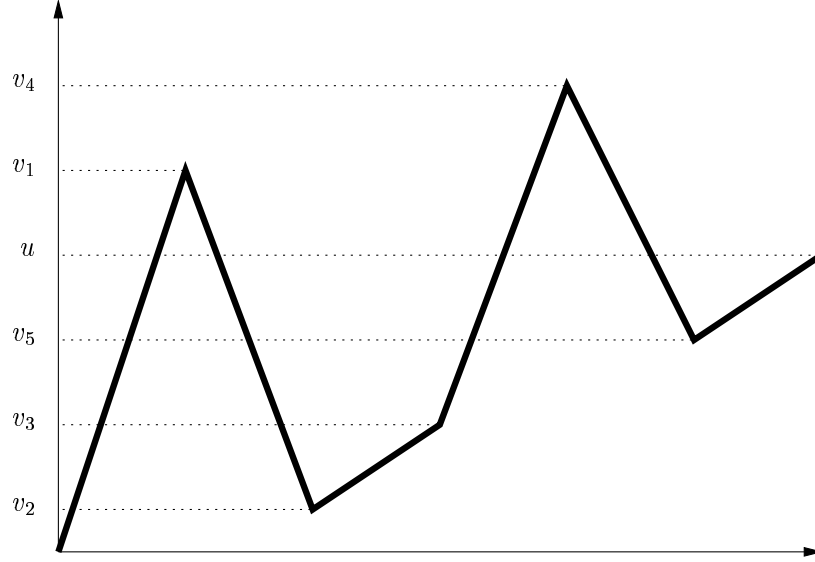


FIG. 8.3 – Exemple de marche aléatoire « positive » menant de 0 à u en six pas.

est la plus proche de l'origine et la valeur de cette position, on décrit tous les chemins de $\beta_5(u)$. On voit donc que l'on a :

$$\begin{aligned} \beta_5(u) = \int_0^{+\infty} dv \left(\beta_5(u-v)\beta_0(-v) + \beta_4(u-v)\beta_1(-v) + \dots \right. \\ \left. + \beta_0(u-v)\beta_5(-v) \right). \end{aligned} \quad (8.49)$$

On peut aisément généraliser ce calcul à un k quelconque, et si l'on resomme $\epsilon^k \beta_k(u)$ on obtient bien (8.42a).

La fonction $H(u)$ définie par (8.42b) étant bien paire dans le cas qui nous intéresse, on arrive à la conclusion que les équations (8.42a) et (8.46) sont effectivement équivalentes. Mais bien que la relation (8.46) soit une simplification considérable de (8.42a), il n'est toujours pas évident de déterminer $\beta(0)$ et $\beta''(0)$. Pour effectuer ce calcul dans [4], nous avons utilisé la technique de Wiener-Hopf⁸⁵ : si l'on introduit la fonction $\beta^*(u)$

$$\beta^*(u) = \frac{-1}{2\pi\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-iqu} \log \left(1 - \epsilon \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{iqu} H(u) \right), \quad (8.50)$$

on peut montrer que pour tout $X > 0$, on a

$$\epsilon \int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta^*(u) = \log \left(1 + \epsilon \int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta(u) \right). \quad (8.51)$$

On voit que pour relier les dérivées de $\beta(u)$ en zéro à celles de $\beta^*(u)$, il suffit de développer (8.51) en puissances de $1/X$. On trouve alors que les relations (8.43) se transforment en

$$n = \frac{\epsilon}{\sqrt{c}} \beta^*(0), \quad (8.52a)$$

$$L^2 E_0(n, L, \gamma) = \frac{nc^2}{6} - 2\epsilon\sqrt{c}\beta^{*''}(0), \quad (8.52b)$$

et après avoir calculé $\beta^*(0)$ et $\beta^{*''}(0)$ à partir de (8.50) et (8.42b), on trouve finalement le résultat (8.6) annoncé dans le chapitre précédent.

La preuve de la relation (8.51) est assez intéressante en elle même (voir appendice B de [4]), mais ce que nous avons trouvé déroutant, c'est que la fonction $\beta^*(u)$ qui finalement après bien des détours permet de calculer l'énergie (8.52) peut en fait *s'exprimer de manière simple quand n est un entier en fonction des racines q_α de l'Ansatz de Bethe*. En effet, en utilisant (8.22), (8.41) et (8.51), on peut montrer que

$$\epsilon \int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta^*(u) = \log P(X\sqrt{c} + \frac{c}{2}) - \log P(X\sqrt{c} - \frac{c}{2}), \quad (8.53)$$

et si l'on utilise la définition (8.18) du polynôme $P(X)$, on obtient finalement

$$\epsilon\beta^*(u) = \frac{2 \sinh \frac{u\sqrt{c}}{2}}{u} \sum_{1 \leq \alpha \leq n} e^{\frac{q_\alpha u}{\sqrt{c}}}. \quad (8.54)$$

On voit donc que lorsque n est entier, la fonction $\beta^*(u)$ a une expression relativement simple si on la compare par exemple à la définition (8.21) de $B(u)$. Cette constatation nous amène à penser qu'il y a peut-être une manière plus directe d'arriver au résultat où l'on commencerait par définir $\beta^*(u)$ par (8.54) et où l'on montrerait que dans le régime d'échelle c grand et $n \sim c^{-1/2}$ on a la relation (8.50) avec $H(u)$ donnée par (8.42b). Toutes nos tentatives en ce sens ont néanmoins échoué, en partie à cause de cette propriété bizarre que la fonction $H(u)$ n'est pas définie quand n est un entier.

8.7 Cas d'un domaine fini et fermé

La méthode qui vient d'être présentée semble s'appliquer au cas où la dimension transversale est finie et a deux frontières (polymère dirigé sur une bande). On part de la solution (6.36) de l'Ansatz de Bethe :

$$e^{2\lambda_\alpha L} = \prod_{\substack{1 \leq \beta \leq n \\ \beta \neq \alpha}} \frac{\lambda_\alpha - \lambda_\beta + \gamma}{\lambda_\alpha - \lambda_\beta - \gamma} \frac{\lambda_\alpha + \lambda_\beta + \gamma}{\lambda_\alpha + \lambda_\beta - \gamma}, \quad (8.55)$$

où l'on sait que les n variables λ_α ont une partie imaginaire positive et tendent vers $i\pi$ quand γ tend vers 0. L'énergie du fondamental peut alors être obtenue grâce à la relation (6.29a).

On peut s'arranger pour que la formulation de ce problème ressemble beaucoup à celle du cas périodique. Si l'on fait le changement de variable

$$q_\alpha = L\lambda_\alpha, \quad (8.56a)$$

$$q_{\alpha+n} = -L\lambda_\alpha, \quad (8.56b)$$

pour tout $1 \leq \alpha \leq n$, et

$$c = \gamma L, \quad (8.57)$$

on trouve que (6.36) est équivalent à

$$e^{2q_\alpha} = \frac{2q_\alpha - c}{2q_\alpha + c} \prod_{\substack{1 \leq \beta \leq 2n \\ \beta \neq \alpha}} \frac{q_\alpha - q_\beta + c}{q_\alpha - q_\beta - c} \quad (8.58)$$

pour tout $1 \leq \alpha \leq 2n$. (Attention : le produit sur β va jusqu'à $2n$.) Grâce à (6.29a) on peut alors exprimer l'énergie en fonction des q_α :

$$E_0^{\text{bords}}(n, L, \gamma) = -\frac{1}{4L^2} \sum_{\alpha=1}^{2n} q_\alpha^2. \quad (8.59)$$

Il « suffit » alors de trouver la solution de (8.58) qui vérifie les conditions additionnelles

$$\{q_\alpha\} = \{-q_\alpha\}, \quad (8.60a)$$

$$\lim_{c \rightarrow 0} q_\alpha = \pm i\pi. \quad (8.60b)$$

On voit donc que trouver le fondamental d'un système de n bosons en interaction δ dans une boîte de taille L est *presque* équivalent à trouver celui de $2n$ bosons en interaction δ sur un anneau de taille $2L$. Les deux seules différences sont la présence d'un terme supplémentaire dans (6.36) par rapport à (6.32), et le fait qu'on cherche la solution où les racines tendent vers $\pm i\pi$ et non plus vers 0.

Il semble que la méthode utilisée dans le cas périodique (chapitre 8 et [3, 4]) peut s'adapter au cas présent, mais les expressions sont plus compliquées et nous n'avons pas encore tout calculé. On peut néanmoins donner

les premiers ordres du développement limité de l'énergie à c petit

$$L^2 E_0^{\text{bords}}(n, L, \gamma) = \frac{n\pi^2}{2} - \frac{n(n-1)}{4} \left(3c + c^2 \left[\frac{1}{6} + \frac{n}{4\pi^2} \right] + \right. \quad (8.61)$$

$$\left. c^3 \left[\frac{n}{90} - \frac{n}{12\pi^2} + \frac{n(3n+2)}{32\pi^4} \right] + O(c)^4 \right)$$

et à n petit

$$L^2 E_0^{\text{bords}}(n, L, \gamma) = n \left[\frac{\pi^2}{2} + \frac{3c}{4} + \frac{c^2}{24} \right] + \quad (8.62)$$

$$\frac{n^2}{2} \frac{c^{3/2}}{4\pi^2} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda e^{-\frac{\lambda^2}{4}}}{\tanh \frac{\lambda\sqrt{c}}{2}} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(e^{-\frac{\lambda^2}{4}} \sin \frac{\pi\lambda}{\sqrt{c}} \right) \times$$

$$\left((c\lambda^2 - 8\pi^2) \sin \frac{\pi\lambda}{\sqrt{c}} - 6\pi\lambda\sqrt{c} \cos \frac{\pi\lambda}{\sqrt{c}} \right) + O(n^3).$$

Attention, les expressions (8.61) et (8.62) sont des résultats préliminaires obtenus par une méthode assez compliquée. À ce stade, la probabilité d'une erreur de calcul n'est pas du tout négligeable. Cependant, des simulations numériques présentées au chapitre 9 donnent des résultats en très bon accord avec (8.62).

Il sera intéressant de résoudre complètement ce problème à deux frontières et de voir s'il existe comme dans le cas périodique un *régime d'échelle* où l'énergie s'exprime simplement (comme dans (8.6)) à l'aide d'une certaine fonction $G^{\text{bords}}(\beta)$ *a priori* différente de la fonction $G(\beta)$ du cas périodique. On s'attend à ce que cette fonction $G^{\text{bords}}(\beta)$ soit elle aussi une fonction universelle des problèmes de la classe KPZ définis sur un segment.

Chapitre 9

Simulations numériques de polymères dirigés en milieu aléatoire

Ce chapitre est consacré à la présentation de simulations numériques du modèle de polymère dirigé défini dans la section 6.2 de l'introduction. Ce modèle est caractérisé par deux paramètres : le nombre de sites N sur la dimension transversale et l'inverse de la température β . Dans la limite où N est grand et β d'ordre $1/\sqrt{N}$, la méthode des répliques permet d'écrire la relation (7.39) entre la fonction de partition $Z(\tau)$ du polymère et l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ du fondamental du problème quantique (7.38). Le chapitre 8 explique comment l'on peut calculer les trois premiers ordres du développement de $E_0(n, L, \gamma)$ en puissances de n quand la dimension transversale est périodique et donne le développement à l'ordre deux quand la dimension transversale a deux frontières (équations (8.4) et (8.62)).

La première section de ce chapitre présente un calcul qui donne la raison des difficultés qu'il y a à mesurer numériquement le troisième cumulant de l'énergie libre, et les sections 9.2 et 9.3 comparent les prévisions du chapitre 8 à des simulations numériques sur les polymères dirigés sur un cylindre (dimension transversale périodique) ou sur une bande (condition à deux frontières).

9.1 Mesures numériques des cumulants d'une variable aléatoire

Imaginons que l'on veuille mesurer les trois premiers cumulants d'une certaine variable aléatoire x . Pour ce faire, on construit $\mathcal{N}$ réalisations *indé-*

pendantes notées $x_1, \dots, x_{\mathcal{N}}$ de la variable x , et on pose

$$A_k = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} x_i^k. \quad (9.1)$$

On a bien $\langle A_k \rangle = \langle x^k \rangle$, et la distribution de A_k est concentrée autour de sa valeur moyenne quand $\mathcal{N}$ est grand. On peut alors donner des approximations des premiers cumulants de x à l'aide des nombres A_k :

$$\langle x \rangle \approx A_1, \quad (9.2a)$$

$$\langle x^2 \rangle_c \approx A_2 - A_1^2, \quad (9.2b)$$

$$\langle x^3 \rangle_c \approx A_3 - 3A_1A_2 + 2A_1^3. \quad (9.2c)$$

On peut déjà remarquer qu'à cause des corrélations entre les quantités A_1 , A_2 et A_3 , les valeurs moyennes des membres de droite des équations (9.2b) et (9.2c) sont différentes des membres de gauche. Un calcul précis montre en effet que

$$\langle A_2 - A_1^2 \rangle = \frac{\mathcal{N} - 1}{\mathcal{N}} \langle x^2 \rangle_c, \quad (9.3a)$$

$$\langle A_3 - 3A_1A_2 + 2A_1^3 \rangle = \frac{(\mathcal{N} - 1)(\mathcal{N} - 2)}{\mathcal{N}^2} \langle x^3 \rangle_c. \quad (9.3b)$$

Pour cette raison, il est parfois recommandé de corriger (9.2b) et d'utiliser plutôt

$$\langle x^2 \rangle_c \approx \frac{\mathcal{N}}{\mathcal{N} - 1} (A_2 - A_1^2) \quad (9.4)$$

comme approximation du second cumulant de x . Une telle correction n'est cependant pas utile. En effet, si l'on calcule la distance quadratique moyenne entre les cumulants de x et leurs approximations (9.2), on peut évaluer l'erreur typique commise. En mettant **Mathematica** à contribution, on trouve

$$\langle (A_1 - \langle x \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \langle x^2 \rangle_c, \quad (9.5a)$$

$$\langle (A_2 - A_1^2 - \langle x^2 \rangle_c)^2 \rangle = \frac{(\mathcal{N} - 1)^2}{\mathcal{N}^3} \langle x^4 \rangle_c + \frac{2\mathcal{N} - 1}{\mathcal{N}^2} \langle x^2 \rangle_c^2, \quad (9.5b)$$

$$\begin{aligned} \langle (A_3 - 3A_1A_2 + 2A_1^3 - \langle x^3 \rangle_c)^2 \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \langle x^6 \rangle_c + \left[\frac{9}{\mathcal{N}} + O\left(\frac{1}{\mathcal{N}^2}\right) \right] \langle x^2 \rangle_c \langle x^4 \rangle_c \\ &\quad + \left[\frac{9}{\mathcal{N}} + O\left(\frac{1}{\mathcal{N}^2}\right) \right] \langle x^3 \rangle_c^2 \\ &\quad + \left[\frac{6}{\mathcal{N}} + O\left(\frac{1}{\mathcal{N}^2}\right) \right] \langle x^2 \rangle_c^3 \end{aligned} \quad (9.5c)$$

(pour (9.5c), les coefficients entre crochets sont des fonctions rationnelles de $\mathcal{N}$ que l'on peut calculer exactement.) La distance quadratique moyenne varie donc comme $1/\mathcal{N}$ et l'erreur typique commise dans les approximations (9.2) est d'ordre $1/\sqrt{\mathcal{N}}$. On voit donc que cette erreur typique est beaucoup plus grande que la correction d'ordre $1/\mathcal{N}$ dans (9.4), sauf peut-être pour des très petites valeurs de $\mathcal{N}$.

On peut donc (comme on pouvait s'y attendre) obtenir une précision d'ordre $1/\sqrt{\mathcal{N}}$ en faisant $\mathcal{N}$ mesures de x . Cependant, des difficultés apparaissent quand la variable x est elle même une somme de τ variables aléatoires telle que l'on ait

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle x(\tau)^k \rangle_c}{\tau} = m_k. \quad (9.6)$$

(On a bien un comportement du type (9.6) quand $x(\tau)$ est la somme de τ variables indépendantes. Les équations (9.9) de la section suivante montrent qu'on est également dans ce cas pour les cumulants $\log Z(\tau)$ d'un polymère dirigé.) Si l'on fait $\mathcal{N}$ réalisations indépendantes de $x(\tau)$, il est naturel d'approcher m_1 par $A_1(\tau)/\tau$ où τ est « assez grand », m_2 par $(A_2(\tau) - A_1^2(\tau))/\tau$, etc.

On peut alors grâce à (9.5) estimer l'erreur commise

$$\left\langle \left(\frac{A_1}{\tau} - m_1 \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}\tau} m_2, \quad (9.7a)$$

$$\left\langle \left(\frac{A_2 - A_1^2}{\tau} - m_2 \right)^2 \right\rangle \approx \frac{2}{\mathcal{N}} m_2^2, \quad (9.7b)$$

$$\left\langle \left(\frac{A_3 - 3A_1A_2 + 2A_1^3}{\tau} - m_3 \right)^2 \right\rangle \approx \frac{6\tau}{\mathcal{N}} m_2^3. \quad (9.7c)$$

On voit donc qu'il est facile de mesurer m_1 : il suffit de faire un grand nombre de mesures $\mathcal{N}$ ou d'attendre longtemps (*i.e.* avoir de grands τ). Pour mesurer m_2 , attendre longtemps n'apporte rien : la seule manière d'améliorer la précision est de faire un grand nombre de mesures. Et en ce qui concerne m_3 , faire des longues simulations *détérior*e la précision des résultats. Ce dernier point est très gênant car il faut souvent en pratique simuler les systèmes à des temps longs pour se placer dans un régime asymptotique où la limite (9.6) est atteinte. On voit donc que si l'on veut mesurer le troisième cumulant m_3 , il faut faire des simulations *les plus courtes possible qui permettent d'être dans le régime asymptotique*, et faire un nombre de réalisations indépendantes du système grand devant le temps τ . Il n'est pas bon de faire des simulations plus longues que nécessaire.

9.2 Simulations de polymères dirigés sur un cylindre

J'ai réalisé des simulations numériques du modèle de polymère dirigé de la section (6.2) pour un nombre de sites N variant entre 25 et 160 et un bruit d'intensité β variant de 0,1 à 0,4. Pour chacun des systèmes étudiés, la relation de récurrence (6.6) a permis de calculer les valeurs de $\log Z(\tau) - \log \langle Z(t) \rangle$ pour les τ compris entre 1 et 50 000 et tous les résultats ont été moyennés sur un certain nombre $\mathcal{N}$ de réalisations du désordre (entre 20 000 et 1 000 000 selon le système). Dans toutes ces simulations, le polymère part d'un point unique donné à $\tau = 0$ (autrement dit, on a $Z(x, 0) = \delta_x^0$), et l'on utilise l'expression (6.7) qui donne dans le cas gaussien

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} = \frac{\beta^2}{2} + \log 2. \quad (9.8)$$

Si l'on fait le lien entre l'expression (8.4) qui donne les trois premiers ordres du développement en puissances de n de l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ et la relation (7.39), on obtient dans la limite où le nombre de sites N est grand et β d'ordre $1/\sqrt{N}$,

$$4N^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \log Z \rangle - \log \langle Z \rangle}{\tau} \approx -c - \frac{c^2}{6}, \quad (9.9a)$$

$$4N^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \log^2 Z \rangle_c}{\tau} \approx c^{3/2} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda^2 e^{-\frac{\lambda^2}{2}}}{\tanh \frac{\lambda\sqrt{c}}{2}}, \quad (9.9b)$$

$$4N^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \log^3 Z \rangle_c}{\tau} \approx 3c^2 \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda^2 e^{-\frac{\lambda^2}{2}}}{\tanh \frac{\lambda\sqrt{c}}{2}} \left[\int_0^\lambda d\mu e^{-\frac{\mu^2}{2}} \frac{2 \cosh \frac{\lambda\mu}{2} - 2}{\tanh \frac{\mu\sqrt{c}}{2}} + \int_\lambda^{+\infty} d\mu e^{-\frac{\mu^2}{2}} \frac{e^{-\frac{\lambda\mu}{2}} - 2}{\tanh \frac{\mu\sqrt{c}}{2}} \right] - 2c^2, \quad (9.9c)$$

où

$$c = 2N\beta^2. \quad (9.10)$$

En moyennant sur les $\mathcal{N}$ réalisations du désordre on peut facilement calculer des valeurs approchées des trois premiers moments de $\log Z(\tau) - \log \langle Z(\tau) \rangle$ et donc, en utilisant des relations similaires à (9.2), les trois premiers cumulants de l'énergie libre. Si l'on trace alors les rapports $m_k(\tau) = \langle \log^k Z(\tau) \rangle_c / \tau$ en fonction de la longueur τ des polymères, on constate que ces quantités tendent comme prévu vers une certaine limite finie, mais très lentement

(courbe du haut sur la figure 9.1). Ceci est dû au fait que l'état initial (à $\tau = 0$) du polymère dirigé est très loin du régime asymptotique, et que les effets des valeurs atypiques obtenues pour les petits τ ne s'estompent qu'en $1/\tau$. Comme il est délicat d'augmenter le nombre de pas (*i.e.* la valeur maximale de τ) dans les simulations à cause des raisons expliquées dans la section précédente, il vaut mieux se débarrasser des effets transitoires en supprimant les contributions des 5 000 premières itérations. On calcule donc plutôt

$$m_k(\tau) = \frac{\langle \log^k Z(\tau) \rangle_c - \langle \log^k Z(5000) \rangle_c}{\tau - 5000}, \quad (9.11)$$

pour $\tau > 5000$. La figure 9.1 montre sur un exemple que cette méthode élimine effectivement la majeure partie des effets de la période transitoire ; en soustrayant la contribution des 5 000 premières itérations, on obtient des données qui ont déjà convergé vers leur valeur limite pour des τ assez petit d'ordre 10 000.

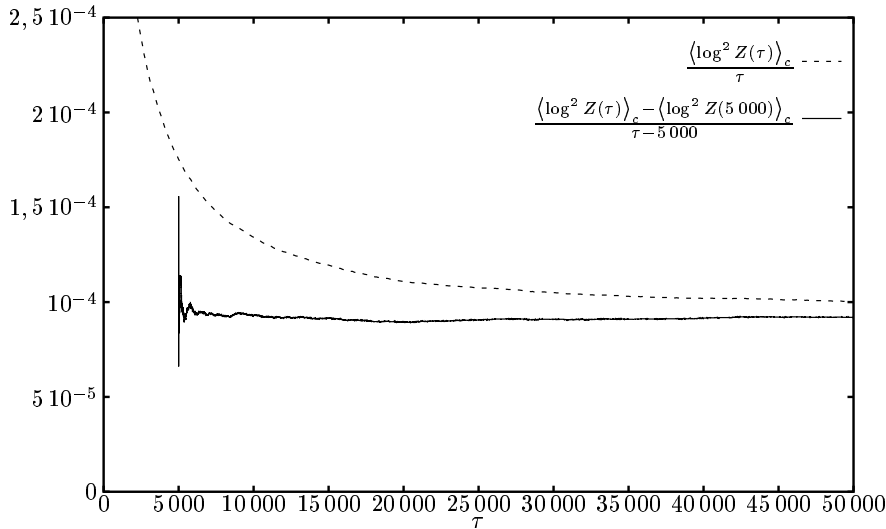


FIG. 9.1 – Pour un système où $N = 160$ et $\beta = 0, 1$, le second cumulant de l'énergie libre par unité de longueur en fonction de la longueur τ . La première courbe montre les données « brutes », et la seconde ce que l'on obtient en éliminant les 5 000 premières itérations.

Les données représentées sur la figure 9.1 sont assez représentatives de la qualité générale des résultats numériques : les mesures des premiers cumulants sont souvent légèrement meilleures, les troisièmes cumulants sont en moyenne plus bruités mais, pour tous les résultats présentés dans ce chapitre, on voit « à l'œil nu » que les différents $m_k(\tau)$ ont bien convergé. Pour

obtenir des résultats nets, il a fallu moyenner sur un grand nombre $\mathcal{N}$ de réalisations du désordre. Il est assez instructif de voir ce que l'on obtient si l'on se contente de moyenner sur seulement quelques centaines de mesures. La figure 9.2 représente des résultats obtenus pour un certain système avec seulement $\mathcal{N} = 665$ réalisations du désordre. On voit très nettement le phénomène expliqué dans la première section de ce chapitre : pour le premier cumulant la statistique est très bonne et va en s'améliorant avec τ . Il y a un bruit assez faible mais uniforme pour le second cumulant et les résultats sont très mauvais pour le troisième cumulant et *empirent* quand la longueur τ augmente.

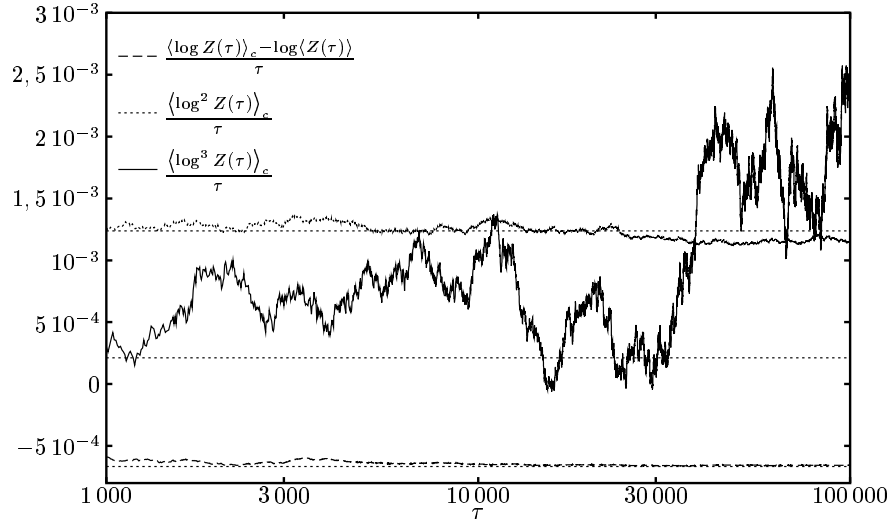


FIG. 9.2 – Pour un système où $N = 50$ et $\beta = 0.2$, les trois premiers cumulants de l'énergie libre d'un polymère de longueur τ en fonction de τ (l'échelle des τ est logarithmique). La moyenne n'est faite que sur un petit nombre (quelques centaines) de réalisations du désordre. Les lignes horizontales représentent les valeurs théoriques données par les équations (9.9).

Pour extraire des approximations des valeurs limites des cumulants par unité de longueur de l'énergie libre, j'ai moyenné la quantité $m_k(\tau)$ sur tous les τ compris entre 10 000 et 50 000. Les écarts-type des $m_k(\tau)$ sur le même intervalle donnent des estimations des erreurs commises. Tous les résultats obtenus par la méthode ainsi décrite sont réunis sur la figure 9.3 où sont représentés pour tous les systèmes étudiés $4N^2$ fois les valeurs limites des $m_k(\tau)$ en fonction du paramètre $c = 2N\beta^2$. Les barres d'erreur sont souvent invisibles parce qu'elles sont la plupart du temps plus petites que les symboles eux-mêmes. Pour vérifier que les résultats ne dépendent pas des détails du modèle, j'ai aussi étudié un système où les énergies aléatoires de chaque site

du réseau ont une distribution non-gaussienne de moyenne nulle et de variance égale à un (plus précisément, la distribution telle que $\eta(k, \tau) = \pm 1$ avec une probabilité 1/2) et un autre système avec un réseau légèrement différent où chaque site a trois voisins (au lieu de deux) sur la ligne précédente (système « à trois ancêtres » sur la figure 9.3). Dans ce dernier cas, l'équation (7.40) du chapitre 7 permet de voir qu'il faut prendre $c = 3N\beta^2/4$ et qu'il faut multiplier tous les résultats par $3N/2$ pour se placer sur la même échelle que dans le cas à deux ancêtres. Enfin, toujours sur la figure 9.3, les lignes représentent les prédictions de^{3,4} résumées par les équations (9.9). L'agrément entre la théorie et les simulations est très bon sauf peut-être pour le système $N = 100$ et $\beta = 0.4$ où β n'est sans doute pas assez petit pour que l'approximation continue soit bonne.

9.3 Simulations de polymères dirigés sur une bande

La section (8.7) du chapitre précédent présente des résultats préliminaires sur les deux premiers cumulants de l'énergie libre d'un polymère dirigé en $1+1$ dimensions quand la direction transversale est de taille finie et a deux frontières. Si l'on fait le lien entre l'expression (8.62) donnée par la résolution de l'Ansatz de Bethe et l'expression (7.39) valable à grande échelle, on obtient

$$4N^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \log Z \rangle - \log \langle Z \rangle}{\tau} = -\frac{3c}{4} - \frac{c^2}{24}, \quad (9.12a)$$

$$4N^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \log^2 Z \rangle_c}{\tau} = \frac{c^{3/2}}{4\pi^2} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda e^{-\frac{\lambda^2}{4}}}{\tanh \frac{\lambda\sqrt{c}}{2}} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(e^{-\frac{\lambda^2}{4}} \sin \frac{\pi\lambda}{\sqrt{c}} \right) \times \\ \left((c\lambda^2 - 8\pi^2) \sin \frac{\pi\lambda}{\sqrt{c}} - 6\pi\lambda\sqrt{c} \cos \frac{\pi\lambda}{\sqrt{c}} \right), \quad (9.12b)$$

où c est donné par

$$c = 4N\beta^2. \quad (9.13)$$

(Attention, la valeur de c n'est pas la même que dans la section précédente.)

Pour comparer les résultats des simulations numériques avec les expressions (9.12), il faut connaître $\langle Z(\tau) \rangle$. On peut vérifier que l'on a

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} = \frac{\beta^2}{2} + \log \left(2 \cos \frac{\pi}{2N+1} \right). \quad (9.14)$$

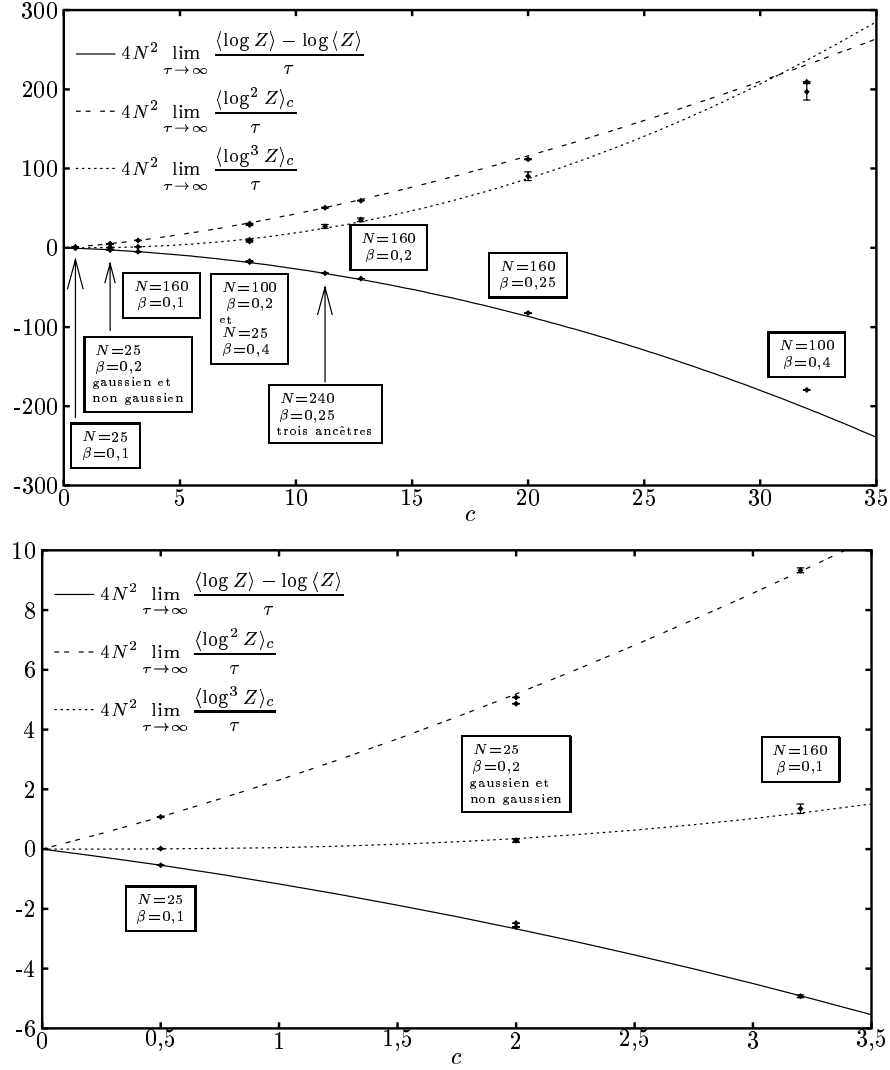


FIG. 9.3 – $4N^2$ fois les trois premiers cumulants par unité de longueur de l'énergie libre d'un polymère dirigé sur un réseau périodique de largeur N et de bruit β en fonction du paramètre $c = 2N\beta^2$. Les lignes représentent les prévisions données par (9.9) et les points les résultats des simulations numériques. Les données « trois ancêtres » ont été mesurées sur un réseau légèrement différent, et un des systèmes a été simulé pour un bruit gaussien et un bruit non-gaussien. La figure du bas est simplement un agrandissement de la figure du haut pour les petites valeurs de c .

L'expression est légèrement différente que dans le cas (9.8) d'un polymère sur un cylindre.

Sur la figure 9.4 sont représentées les prévisions (9.12) et les résultats

de la simulation de quatre systèmes différents. Le nombre de réalisations indépendantes du désordre varie entre 5 000 et 12 000, soit beaucoup moins que dans la section précédente ; comme on ne mesure que les deux premiers cumulants, on peut se permettre de moyenner sur un nombre assez restreint de réalisations.

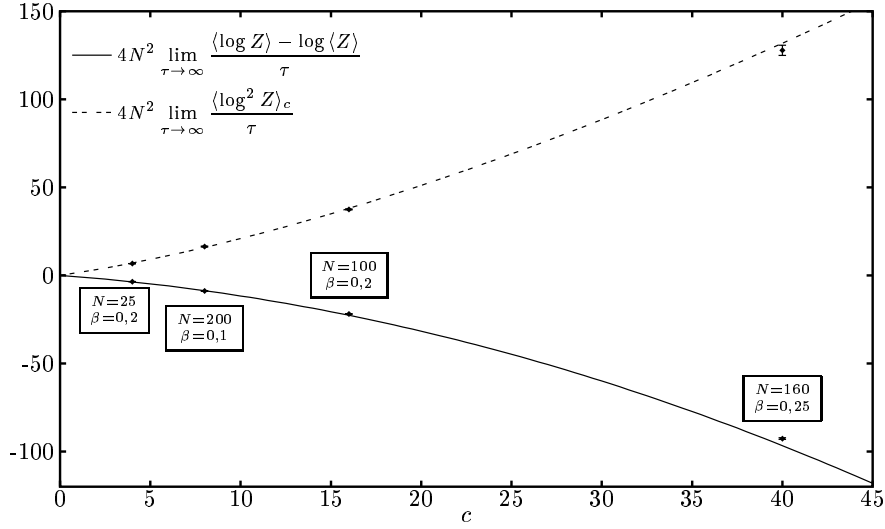


FIG. 9.4 – $4N^2$ fois les deux premiers cumulants par unité de longueur de l'énergie libre d'un polymère dirigé sur un réseau fini non-périodique de taille N et de bruit β en fonction du paramètre $c = 4N\beta^2$. Les lignes représentent les prévisions données par (9.12) et les points les résultats des simulations numériques.

Comme dans la section précédente, l'accord entre la prévision (9.12) et les mesures numérique est très bon.

Chapitre 10

Deux méthodes pour obtenir directement un développement limité de l'énergie libre d'un polymère dirigé

Ce chapitre est consacré à la présentation de deux méthodes pour calculer directement un développement en puissances de β des premiers cumulants de l'énergie libre d'un polymère dirigé en milieu aléatoire sur réseau. La première de cette méthode semble plus adaptée au cas où la dimension transversale est infinie (mais fonctionne en théorie pour toutes les géométries). La seconde méthode ne marche que si la dimension transversale est finie et périodique.

10.1 Calcul direct perturbatif en β des cumulants de $\log Z(\tau)$

Considérons un système où le polymère dirigé part d'un point donné $(0, 0)$. La fonction de partition d'un polymère de longueur τ s'écrit

$$Z(\tau) = \sum_{\mathcal{P}} e^{-\beta \sum_{\alpha=0}^{\tau} \eta(\mathcal{P}(\alpha), \alpha)}. \quad (10.1)$$

La somme est faite sur tous les polymères partant du point $(0, 0)$ et arrivant à l'ordonnée τ . La longueur de ces polymère est donc bien τ et le nombre de sites visités est $\tau + 1$. On a noté par $\mathcal{P}(\alpha)$ l'abscisse du site par où passe le polymère à l'ordonnée α .

On peut développer (10.1) en puissances de β . Au second ordre on obtient

$$\begin{aligned} Z(\tau) = \sum_{\mathcal{P}} 1 - \beta \sum_{\mathcal{P}} \sum_{\alpha=0}^{\tau} \eta(\mathcal{P}(\alpha), \alpha) + \\ \frac{\beta^2}{2} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{\alpha=0}^{\tau} \sum_{\alpha'=0}^{\tau} \eta(\mathcal{P}(\alpha), \alpha) \eta(\mathcal{P}(\alpha'), \alpha') + O(\beta^3) \end{aligned} \quad (10.2)$$

Le terme $\sum_{\mathcal{P}} 1$ dans (10.2) est simplement égal au nombre de polymères dirigés de longueur τ partant du point $(0, 0)$. Dans le cas du réseau présenté dans la section 6.2.1 de l'introduction, ce nombre de chemins est égal à 2^τ si le système n'a pas de frontières (conditions périodiques ou infinies sur la dimension transversale), et a une expression plus compliquée sinon (voir la section 9.3). On peut exprimer la valeur moyenne $\langle Z(\tau) \rangle$ en fonction de ce nombre de chemins. On obtient simplement

$$Z(\tau) = \left(\sum_{\mathcal{P}} 1 \right)^\tau e^{\frac{1}{2} \langle \eta^2 \rangle \beta^2 (\tau+1)}. \quad (10.3)$$

(À comparer avec (6.7). On a utilisé le fait que la distribution η est gaussienne de moyenne nulle.)

On peut alors donner un développement de $\log Z - \log \langle Z \rangle$

$$\begin{aligned} \log Z(\tau) - \log \langle Z(\tau) \rangle = & - \frac{\beta}{\sum_{\mathcal{P}} 1} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{\alpha=0}^{\tau} \eta(\mathcal{P}(\alpha), \alpha) - \frac{1}{2} \langle \eta^2 \rangle \beta^2 (\tau+1) \\ & - \frac{\beta^2}{2 \left(\sum_{\mathcal{P}} 1 \right)^2} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{\mathcal{P}'} \sum_{\alpha=0}^{\tau} \sum_{\alpha'=0}^{\tau} \eta(\mathcal{P}(\alpha), \alpha) \eta(\mathcal{P}'(\alpha'), \alpha') \\ & + \frac{\beta^2}{2 \sum_{\mathcal{P}} 1} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{\alpha=0}^{\tau} \sum_{\alpha'=0}^{\tau} \eta(\mathcal{P}(\alpha), \alpha) \eta(\mathcal{P}(\alpha'), \alpha') + O(\beta^3) \end{aligned} \quad (10.4)$$

Cette expression se simplifie grandement quand on prend la moyenne sur le désordre. On obtient alors

$$\langle \log Z(\tau) \rangle - \log \langle Z(\tau) \rangle = - \frac{\langle \eta^2 \rangle \beta^2}{2 \left(\sum_{\mathcal{P}} 1 \right)^2} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{\mathcal{P}'} \sum_{\alpha=0}^{\tau} \delta_{\mathcal{P}(\alpha)}^{\mathcal{P}'(\alpha)} + O(\beta^3), \quad (10.5a)$$

et le calcul du second cumulant donne à cet ordre

$$\langle \log^2 Z(\tau) \rangle - \langle \log Z(\tau) \rangle^2 = \frac{\langle \eta^2 \rangle \beta^2}{\left(\sum_{\mathcal{P}} 1 \right)^2} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{\mathcal{P}'} \sum_{\alpha=0}^{\tau} \delta_{\mathcal{P}(\alpha)}^{\mathcal{P}'(\alpha)} + O(\beta^3). \quad (10.5b)$$

L'expression $\sum_{\mathcal{P}} \sum_{\mathcal{P}'} \sum_{\alpha} \delta_{\mathcal{P}}^{\mathcal{P}'}$ peut paraître compliquée, mais représente simplement la somme sur toutes les paires de polynômes de longueur τ partant de $(0,0)$ du nombre de croisements entre ces polymères. Dans le cas où la dimension transversale est infinie, on peut calculer cette quantité exactement

$$\frac{1}{\left(\sum_{\mathcal{P}} 1 \right)^2} \sum_{\mathcal{P}} \sum_{\mathcal{P}'} \sum_{\alpha=0}^{\tau} \delta_{\mathcal{P}(\alpha)}^{\mathcal{P}'(\alpha)} = (2\tau + 1) \frac{(2\tau)!}{4^{\tau} (\tau!)^2}, \quad (10.6)$$

ce qui permet d'avoir le comportement des deux premiers cumulants de l'énergie libre quand τ est grand

$$\langle \log Z(\tau) \rangle - \log \langle Z(\tau) \rangle \approx -\frac{\langle \eta^2 \rangle \beta^2}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\tau} + O(\beta^3), \quad (10.7a)$$

$$\langle \log^2 Z(\tau) \rangle - \langle \log Z(\tau) \rangle^2 \approx \frac{2 \langle \eta^2 \rangle \beta^2}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\tau} + O(\beta^3). \quad (10.7b)$$

Le cas où la dimension transversale est infinie est le plus simple, mais l'expression (10.5) est correcte quelle que soit la dimension ou la géométrie de l'espace. La seule chose qui change est le facteur combinatoire (10.6) qui compte le nombre moyen de croisements quand on prend deux polymères. Dans le même ordre d'idée, à condition de savoir calculer des facteurs plus compliqués comme le nombre moyen de croisements deux à deux quand on prend quatre polymères, *etc.*, cette méthode doit permettre de calculer les ordres suivants en β .

Dans l'expression (10.7), le second cumulant de l'énergie libre dépend de la longueur τ du polymère comme $\sqrt{\tau}$ alors que l'on s'attend à une dépendance en $\tau^{2/3}$. Cette différence vient du fait que l'on a pris la limite $\beta \rightarrow 0$ avant de faire $\tau \rightarrow \infty$. Pour retrouver le $\tau^{2/3}$, il faut donc probablement calculer *tous* les termes du développement en β .

10.2 Autre méthode pour calculer un développement en β des cumulants de $\log Z(\tau)$

Lorsque la dimension transversale est finie et périodique de largeur N , on peut utiliser une méthode complètement différente de celle présentée dans la

section précédente pour calculer le premier ordre du développement à β petit de l'énergie libre $\langle \log Z \rangle / \tau$ et du second cumulant $(\langle \log^2 Z \rangle - \langle \log Z \rangle^2) / \tau$. On écrit la fonction de partition d'un polymère s'arrêtant au point (k, τ) sous la forme

$$Z(k, \tau) = 2^\tau e^{\beta A_1(k, \tau) + \beta^2 A_2(k, \tau) + O(\beta^3)}, \quad (10.8)$$

où les $A_i(k, \tau)$ sont des variables aléatoires. Le système étant parfaitement symétrique en k , les quantités $A_i(k, \tau)$ ne doivent pas *en moyenne* dépendre de k . On omettra donc le k dans les valeurs moyennes et on écrira

$$\langle A_i(k, \tau) \rangle = \langle A_i(\tau) \rangle, \quad (10.9a)$$

$$\langle A_i^2(k, \tau) \rangle = \langle A_i^2(\tau) \rangle, \quad (10.9b)$$

etc.

Grâce à (10.8), il est facile d'exprimer les cumulants de l'énergie libre :

$$\frac{\langle \log Z(\tau) \rangle - \log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} = -\frac{1}{2} \frac{\langle A_1(\tau)^2 \rangle - \langle A_1(\tau) \rangle^2}{\tau} \beta^2 + O(\beta^3) \quad (10.10a)$$

$$\frac{\langle \log^2 Z(\tau) \rangle - \langle \log Z(\tau) \rangle^2}{\tau} = \frac{\langle A_1(\tau)^2 \rangle - \langle A_1(\tau) \rangle^2}{\tau} \beta^2 + O(\beta^3) \quad (10.10b)$$

On voit donc qu'il suffit de calculer les deux premiers moments de A_1 . Pour cela, si l'on reporte (10.8) dans la relation de récurrence (6.6) et qu'on développe à β petit, on trouve, au premier ordre,

$$2A_1(k, \tau + 1) = A_1(k, \tau) + A_1(k + 1, \tau) - 2\eta(k, \tau + 1). \quad (10.11)$$

Comme on suppose que $\langle \eta(k, \tau) \rangle = 0$, si l'on prend la moyenne sur le désordre de (10.11) on obtient immédiatement

$$\langle A_1(\tau + 1) \rangle = \langle A_1(\tau) \rangle. \quad (10.12)$$

$\langle A_1(\tau) \rangle$ est donc constant et n'intervient pas dans la limite où τ est grand. Si l'on élève (10.11) au carré et qu'on prend la moyenne du résultat, on obtient

$$\langle A_1^2(\tau + 1) \rangle = \langle \eta^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle A_1^2(\tau) \rangle + \frac{1}{2} \langle A_1(k, \tau) A_1(k + 1, \tau) \rangle, \quad (10.13)$$

(On a utilisé $\langle A_1(k, \tau) \eta(k', \tau + 1) \rangle = 0$. En effet, $A_1(k, \tau)$ et $\eta(k', \tau + 1)$ sont des variables aléatoires indépendantes car $A_1(k, \tau)$ ne dépend que des énergies des sites d'ordonnée inférieure ou égale à τ .)

On a donc besoin de calculer les corrélations de A_1 . Plus précisément, on veut calculer $\Delta_1(\tau)$ où l'on définit, pour tout entier p positif,

$$\Delta_p(\tau) = \langle A_1^2(\tau) \rangle - \langle A_1(k, \tau) A_1(k + p, \tau) \rangle, \quad (10.14)$$

(Pour la même raison que plus haut, cette quantité ne peut pas dépendre des positions k et $k + p$, mais seulement de la distance p entre elles.) On va voir dans la suite que pour calculer $\Delta_1(\tau)$, on doit en fait calculer *tous* les $\Delta_p(\tau)$.

Les conditions périodiques du système imposent la condition « aux bords »

$$\Delta_N(\tau) = \Delta_0(\tau) = 0. \quad (10.15)$$

En multipliant (10.11) prise au point (k, τ) par la même équation prise au point $(k + p, \tau)$ et en moyennant, on obtient pour tout $0 < p < N$

$$4 \langle A_1^2(\tau + 1) \rangle - 4\Delta_p(\tau + 1) = 4 \langle A_1^2(\tau) \rangle - \Delta_{p+1}(\tau) - \Delta_{p-1}(\tau) - 2\Delta_p(\tau). \quad (10.16)$$

On fait disparaître les $\langle A_1^2 \rangle$ en soustrayant quatre fois l'équation (10.13) :

$$4\Delta_p(\tau + 1) = 4 \langle \eta^2 \rangle - 2\Delta_1(\tau) + \Delta_{p+1}(\tau) + \Delta_{p-1}(\tau) + 2\Delta_p(\tau). \quad (10.17)$$

Il est clair que l'équation (10.17) admet une solution particulière indépendante de τ . L'équation (10.17) étant affine, sa solution générale s'obtient en ajoutant à cette solution particulière une solution de l'équation homogène (la même que (10.17) sans le terme « $4 \langle \eta^2 \rangle$ »). On peut néanmoins se convaincre que toutes les solutions de l'équation homogène tendent vers 0 quand τ devient grand. Il nous suffit donc de trouver la solution de (10.17) indépendante de τ , c'est à dire de résoudre l'équation

$$\Delta_p = 2 \langle \eta^2 \rangle - \Delta_1 + \frac{1}{2}\Delta_{p+1} + \frac{1}{2}\Delta_{p-1} \quad (10.18a)$$

pour $0 < p < N$, avec les conditions

$$\Delta_0 = \Delta_N = 0. \quad (10.18b)$$

La solution générale de (10.18) est de la forme

$$\Delta_p = ap(p - N), \quad (10.19)$$

et l'on trouve aisément la solution

$$\Delta_p = \langle \eta^2 \rangle \left(2p - \frac{2p^2}{N} \right). \quad (10.20)$$

Connaissant Δ_1 on peut alors simplifier l'équation (10.13) :

$$\langle A_1^2(\tau + 1) \rangle = \langle A_1^2(\tau) \rangle + \frac{\langle \eta^2 \rangle}{N}, \quad (10.21)$$

et si l'on reporte dans (10.10a) et (10.10b), on obtient finalement

$$\frac{\langle \log Z(\tau) \rangle - \log \langle Z(\tau) \rangle}{\tau} = \frac{-\langle \eta^2 \rangle \beta^2}{2N} + \dots \quad (10.22a)$$

$$\frac{\langle \log^2 Z(\tau) \rangle - \langle \log Z(\tau) \rangle^2}{\tau} = \frac{\langle \eta^2 \rangle \beta^2}{N} + \dots \quad (10.22b)$$

Ces résultats sont bien compatibles avec les résultats exacts (9.9a, 9.9b) obtenus dans [3, 4].

Si l'on essaie d'utiliser cette méthode pour calculer l'ordre suivant en β des développements (10.22) ou le troisième cumulant de l'énergie libre, on voit assez facilement que le calcul fait intervenir des corrélations à trois points du type $\langle A_1(k, \tau) A_1(k + p, \tau) A_1(k + q, \tau) \rangle$. Ce problème à trois corps peut peut-être être résolu, mais il est assez probable que ce ne soit pas le cas.

Chapitre 11

Conclusion de la seconde partie

Les polymères dirigés en milieu aléatoire sont l'un des modèles non-triviaux les plus simples de la théorie des systèmes désordonnés. Par un simple changement de variable, on peut montrer qu'à grande échelle ils sont décrits par l'équation KPZ (Kardar-Parisi-Zhang) et qu'ils sont donc reliés à l'étude de systèmes hors d'équilibre comme les phénomènes de croissance ou des problèmes d'écoulements non-turbulents (section 6.2.3). Le champ moyen des polymères dirigés présente des similitudes avec les verres de spins et peut par un autre changement de variables se ramener à un problème de type Fisher-Kolmogorov (section 6.3.3).

L'objectif de cette partie a été d'étudier l'énergie libre $\log Z(\tau)$ d'un polymère dirigé en $1 + 1$ dimensions quand la dimension transversale est finie. Pour tout entier positif n , la méthode des répliques permet de relier le moment $\langle Z^n(\tau) \rangle$ quand τ est grand au calcul de l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ du fondamental d'un modèle quantique où n particules interagissent sur une ligne avec un potentiel attractif δ (section 6.3.4, chapitre 7 et équations (8.1)). Cette énergie $E_0(n, L, \gamma)$ n'est bien sûr définie que lorsque n est entier, mais si on arrive à en prolonger la définition pour des n petits, les coefficients du développement en puissances de n de $E_0(n, L, \gamma)$ donnent les cumulants de l'énergie libre du polymère dirigé (équation (8.2)). Ce modèle de mécanique quantique qui apparaît ainsi a été introduit par Lieb et Liniger (fin de la section 6.3.4) pour résoudre un modèle de gaz de bosons avec un potentiel répulsif δ (et non pas attractif comme dans le cas des polymères dirigés). En dimension un et avec des conditions aux bords périodiques, Lieb et Liniger ont montré que l'Ansatz de Bethe permet d'écrire un système de n équations couplées non-linéaires (équation (8.16)) dont la résolution donne l'énergie du fondamental, et ils ont montré comment résoudre ce système pour un potentiel *répulsif* dans la *limite thermodynamique* où le nombre n de particules tend vers l'infini.

La principale contribution du travail présenté dans cette partie a été de montrer comment l'on peut résoudre de manière exacte ces mêmes équations de l'Ansatz de Bethe pour un potentiel *attractif* dans la limite où le nombre n de particules *tend vers zéro* et déterminer ainsi l'énergie du fondamental $E_0(n, L, \gamma)$ (voir le chapitre 8 et l'équation (8.4), ainsi que les deux articles [3, 4] reproduits en appendice). À travers l'équivalence (8.2) donnée par la méthode des répliques, ce calcul permet de prédire les premiers cumulants de l'énergie libre d'un très long polymère dirigé sur un cylindre.

La méthode employée pour conduire ce calcul consiste à définir une certaine fonction $B(u)$ quand n est entier (équation (8.21)) et de réécrire en terme de cette fonction les équations de l'Ansatz de Bethe (équations (8.23)). L'avantage de cette reformulation vient du fait que le paramètre n n'intervient plus que de manière explicite dans une équation intégrale (l'équation (8.23a)) et qu'il devient donc possible de prolonger la définition de $B(u)$ à des valeurs de n quelconques. À partir de ce nouveau système d'équations on peut aisément obtenir un développement de $B(u)$ (et donc de l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$) en puissances de $c = \gamma L/2$, et l'on trouve que chaque ordre du développement est un polynôme en n (voir la section 8.3 et les résultats (8.27) et (8.28)). L'écriture d'un développement en puissances de n est cependant beaucoup plus compliquée ; en effet, alors que le système (8.23) permet sans ambiguïté de déterminer le développement de $B(u)$ en puissances de c , on remarque en faisant le développement à n petit *qu'à chaque ordre* la fonction $B(u)$ n'est déterminée qu'à une certaine fonction $F(u, c)$ près. Entre autres propriétés, cette fonction $F(u, c)$ doit avoir un développement en puissances de c dont *tous les coefficients sont nuls* (section 8.4). Il serait donc parfaitement naturel de prendre $F(u, c) = 0$ si la fonction $B(u)$ ainsi obtenue était analytique en c . Ce n'est cependant pas le cas. Alors que $B(u)$ et l'énergie $E_0(n, L, \gamma)$ sont des fonctions analytiques en c pour tout entier positif n , nous avons remarqué que chaque terme du développement de ces deux fonctions en puissances de n avait une singularité en $c = 0$. Nous avons finalement dû supposer $F(u, c) = 0$ à tous les ordres avec comme justification le fait que ce choix permet de minimiser la croissance de $B(u)$ lorsque $u \rightarrow \pm i\infty$ (section 8.4). Des simulations numériques permettent de penser avec confiance que ce choix est effectivement le bon (chapitre 9 pour les simulations elles-mêmes, et chapitre 7 pour établir les relations entre les paramètres des polymères dirigés et ceux du modèle quantique).

Ce problème de fonction qui est analytique quand n est entier et ne l'est pas quand n est petit n'est pas particulier aux polymères dirigés ; cette même difficulté apparaît dans le modèle de système désordonné le plus simple que l'on puisse imaginer : un spin unique dans un champ aléatoire $c\eta$ avec $\langle \eta^2 \rangle = 1$. La section 8.5 montre que, pour ce modèle, la fonction $\langle Z^n \rangle$ est analytique

en c si et seulement si n est un entier positif. Nous pensons que la même propriété se retrouve dans les polymères dirigés et de manière plus générique dans beaucoup de systèmes désordonnés.

La méthode que nous avons introduite permet en principe de déterminer tous les ordres du développement de $E_0(n, L, \gamma)$ mais donne en pratique des expressions très vite trop compliquées pour être manipulées. Nous avons cependant pu montrer (section 8.6) que dans la limite où la taille L du système est grande et où n est d'ordre $1/\sqrt{L}$, il existe un régime d'échelle où l'on peut calculer *toute* la fonction $E_0(n, L, \gamma)$ et obtenir la distribution des grandes déviations d'ordre $1/L$ de l'énergie libre d'un polymère dirigé (section 8.1). Cette distribution est *la même* que celle trouvée dans le problème ASEP, ce qui nous conduit à penser que c'est une propriété universelle de l'équation KPZ (fin de la section 8.1).

La méthode employée pour un polymère dirigé sur un cylindre semble pouvoir s'appliquer au cas où le polymère dirigé se trouve sur une bande de largeur finie (section 8.7). Il faut alors résoudre le problème quantique que nous avons étudié, non pas sur un anneau, mais sur un segment, et l'on peut dans ce cadre définir une nouvelle fonction $B^{\text{bords}}(u)$ à la manière de (8.21) et écrire des développements de l'énergie $E_0^{\text{bords}}(n, L, \gamma)$ à c petit et à n petit (équations (8.61) et (8.62)). Ces développements sont des résultats préliminaires d'un travail en cours, et ni le régime d'échelle, ni la fonction de grandes déviations n'ont encore été calculés dans ce cas. Cependant, comme dans le cas périodique, on s'attend à ce que cette fonction de grandes déviations soit une caractéristique universelle de l'équation KPZ. Des simulations numériques (section 9.3) semblent confirmer que le résultat (8.62) est correcte.

Il serait intéressant de terminer le calcul du régime d'échelle dans le cas des polymères dirigés sur une bande et de comparer la fonction de grandes déviations avec celle du modèle sur cylindre. Récemment, Prähofer et Spohn ont étudié⁸⁶ la distribution de la hauteur du système dans le modèle PNG (*PolyNuclear Growth*). Ce modèle est dans la classe d'universalité de l'équation KPZ et décrit la croissance couche par couche d'un cristal : chaque couche en formation s'étend dans toutes les directions à vitesse constante, et de nouvelles couches apparaissent par des nucléations aléatoires (voir figure 11.1). En utilisant le fait que la distribution de la hauteur du cristal est reliée d'une part à la distribution de la longueur de la plus longue sous-séquence croissante dans une permutation aléatoire, et d'autre part à la distribution de la plus grande valeur propre d'une matrice aléatoire, les auteurs ont pu déterminer, pour plusieurs conditions initiales différentes, la fonction universelle de grandes déviations qui décrit les fluctuations de la hauteur du cristal (voir la figure (11.2) empruntée à [86]). L'idéal serait bien sûr d'avoir une méthode simple qui permette de relier toutes ces distributions univer-

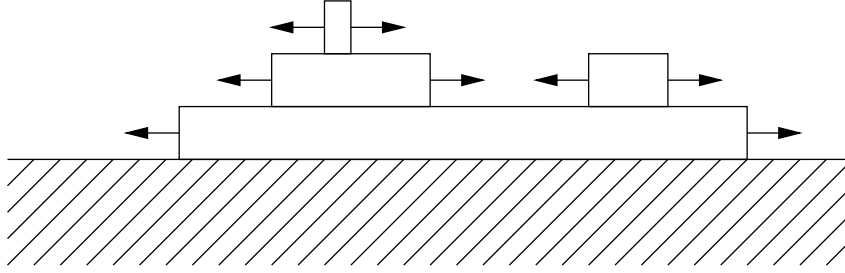


FIG. 11.1 – Le modèle *PolyNuclear Growth*. Un cristal croît sur un substrat en formant des couches qui s'étendent horizontalement à vitesse constante. De nouvelles couches apparaissent de manière aléatoire par des événements de nucléation.

selles les unes aux autres comme l'invariance conforme⁸⁷ permet de le faire pour les phénomènes critiques à deux dimensions.

Une autre extension naturelle de ce travail est de considérer des polymères dirigés dans un espace de dimension supérieure ou dans un milieu où le bruit a des corrélations à courte portée dans la direction transversale. La méthode des répliques fonctionne dans ces deux cas : les polymères dirigés en dimension $d + 1$ sont équivalents à un modèle quantique en dimension d , et des corrélations à courte portée sur le bruit se traduisent entre chaque paire de particules par une interaction attractive différente de l'interaction δ . Cependant, la méthode de l'Ansatz de Bethe ne peut pas s'appliquer à ces situations plus complexes. On s'attend néanmoins à ce que des corrélations à courte portée ne changent pas la classe d'universalité du problème et par conséquent à ce que la fonction de grande déviation soit dans ce cas la même que celle que nous avons calculée (section 8.1). Il est certainement possible en tout cas de faire une théorie de perturbation de l'hamiltonien et d'obtenir un développement en puissances de c de l'énergie. Comme dans la situation que nous avons étudiée, chaque ordre de ce développement doit être un polynôme en n , ce qui permet de définir facilement un développement de l'énergie pour un nombre non-entier de particules. Comme dans la situation que nous avons étudiée, ce développement a probablement un rayon de convergence nul dès que n n'est pas un entier positif.

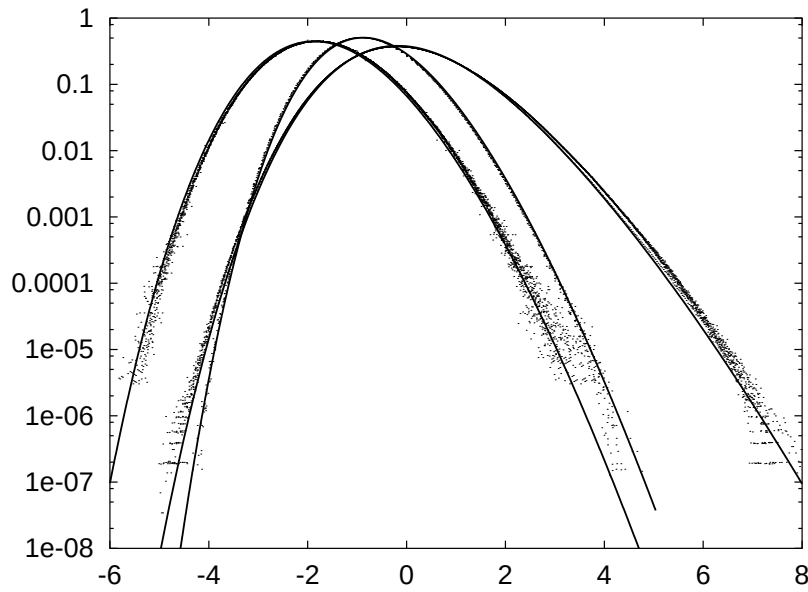


FIG. 11.2 – Pour trois conditions initiales différentes, la distribution des fluctuations de la hauteur du cristal dans le modèle PNG (figure empruntée à Prähofer et Spohn⁸⁶). Cette figure est très semblable à celle obtenue dans le cas des polymères dirigés (figure 8.1 page 92).

Appendice

Reproduction des articles publiés

Shift in the velocity of a front due to a cutoff

Eric Brunet* and Bernard Derrida†

Laboratoire de Physique Statistique, ENS, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

(Received 5 May 1997)

We consider the effect of a small cutoff ε on the velocity of a traveling wave in one dimension. Simulations done over more than ten orders of magnitude as well as a simple theoretical argument indicate that the effect of the cutoff ε is to select a single velocity that converges when $\varepsilon \rightarrow 0$ to the one predicted by the marginal stability argument. For small ε , the shift in velocity has the form $K(\ln \varepsilon)^{-2}$ and our prediction for the constant K agrees very well with the results of our simulations. A very similar logarithmic shift appears in more complicated situations, in particular in finite-size effects of some microscopic stochastic systems. Our theoretical approach can also be extended to give a simple way of deriving the shift in position due to initial conditions in the Fisher-Kolmogorov or similar equations. [S1063-651X(97)01609-7]

PACS number(s): 02.50.Ey, 03.40.Kf, 47.20.Ky

I. INTRODUCTION

Equations describing the propagation of a front between a stable and an unstable state appear [1–7] in a large variety of situations in physics, chemistry, and biology. One of the simplest equations of this kind is the Fisher-Kolmogorov [1,2] equation

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + h - h^3, \quad (1)$$

which describes the evolution of a space- and time-dependent concentration $h(x, t)$ in a reaction-diffusion system. This equation, originally introduced to study the spread of advantageous genes in a population [1], has been widely used in other contexts, in particular to describe the time dependence of the concentration of some species in a chemical reaction [8,9].

For such an equation, the uniform solutions $h=1$ and $h=0$ are, respectively, stable and unstable and it is known [3,7,10–12] that for initial conditions such that $h(x, 0) \rightarrow 1$ as $x \rightarrow -\infty$ and $h(x, 0) \rightarrow 0$ as $x \rightarrow +\infty$ there exists a one-parameter family F_v of traveling-wave solutions (indexed by their velocity v) of the form

$$h(x, t) = F_v(x - vt), \quad (2)$$

with F_v decreasing, $F_v(z) \rightarrow 1$ as $z \rightarrow -\infty$ and $F_v(z) \rightarrow 0$ as $z \rightarrow \infty$. The analytic expression of the shape F_v is in general not known, but one can determine the range of velocities v for which solutions of type (2) exist. If one assumes an exponential decay

$$F_v(z) \approx e^{-\gamma z} \quad \text{for large } z, \quad (3)$$

it is easy to see by replacing Eqs. (2) and (3) in Eq. (1) that the velocity v is given by

$$v(\gamma) = \gamma + \frac{1}{\gamma}. \quad (4)$$

As γ is arbitrary, this shows the well-known fact that the range of possible velocities is $v \geq 2$. The minimal velocity $v_0 = 2$ is reached for $\gamma_0 = 1$ and for steep enough initial conditions $h(x, 0)$ (which decay faster than $e^{-\gamma_0 x}$), the solution selected [3,4,6,7,10–12] for large t is the one corresponding to this minimal velocity v_0 .

Equations of type (1) are obtained either as the large-scale limit [5,8,13–16] or as the mean-field limit [17] of physical situations that are discrete at the microscopic level (particles, lattice models, etc.) As the number of particles is an integer, the concentration $h(x, t)$ could be thought of as being larger than some ε , which would correspond to the value of $h(x, t)$ when a single particle is present. Equations of type (1) appear then as the limit of the discrete model when $\varepsilon \rightarrow 0$. Several authors [8,13,14] already have noticed in their numerical works that the speed v_ε of the discrete model converges slowly, as ε tends to 0, towards the minimal velocity v_0 . We believe that the main effect of having $\varepsilon \neq 0$ is to introduce a cutoff in the tail of the front and that this changes the speed noticeably.

The speed of the front is in general governed by its tail. In the present work, we consider equations similar to Eq. (1), which we modify in such a way that whenever $h(x, t)$ is much smaller than a cutoff ε , it is replaced by 0. The cutoff ε can be introduced by replacing Eq. (1) by

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + (h - h^3)a(h), \quad (5)$$

with

$$\begin{aligned} a(h) &= 1 & \text{if } h > \varepsilon, \\ a(h) &\ll 1 & \text{if } h \ll \varepsilon. \end{aligned} \quad (6)$$

For example, one could choose $a(h) = 1$ for $h \geq \varepsilon$ and $a(h) = h/\varepsilon$ for $h \leq \varepsilon$. Another choice that we will use in Sec. IV is simply $a(h) = 1$ if $h > \varepsilon$ and $a(h) = 0$ if $h \leq \varepsilon$.

*Electronic address: eric.brunet@ens.fr

†Electronic address: bernard.derrida@ens.fr

The question we address here is the effect of the cutoff ε on the velocity v_ε of the front. We will show that the velocity v_ε converges, as $\varepsilon \rightarrow 0$, to the minimal velocity v_0 of the original problem (without a cutoff) and that the main correction to the velocity of the front is

$$v_\varepsilon = v_0 - \frac{\pi^2 \gamma_0^2}{2} v''(\gamma_0) \frac{1}{(\ln \varepsilon)^2} \quad (7)$$

for an equation of type (1) for which the velocity is related to the exponential decay γ of the shape (2) by some relation $v(\gamma)$. (Everywhere we denote by v_0 the minimal velocity and γ_0 the corresponding value of the decay γ .) In the particular case of Eq. (1), where $v(\gamma)$ is given by Eq. (4), this becomes

$$v_\varepsilon = 2 - \frac{\pi^2}{(\ln \varepsilon)^2}. \quad (8)$$

In Sec. II we describe an equation of type (1) where both space and time are discrete, so that simulations are much easier to perform. The results of the numerical simulations of this equation are described in Sec. III: as $\varepsilon \rightarrow 0$, the velocity is seen to converge like $(\ln \varepsilon)^{-2}$ to the minimal velocity v_0 and the shape of the front appears to take a scaling form.

In Sec. IV we show that for equations of type (1) in the presence of a small cutoff ε as in Eq. (5), one can calculate both the shape of the front and the shift in velocity. The results are in excellent agreement with the numerical data of Sec. III.

In Sec. V we consider a model defined, for a finite number N of particles, by some microscopic stochastic dynamics that reduces to the front equation of Secs. III and IV in the limit $N \rightarrow \infty$. Despite the presence of noise, our simulations indicate that in this case too the velocity dependence of the front decays slowly [as $(\ln N)^{-2}$] to the minimal velocity v_0 of the front.

II. DISCRETE FRONT EQUATION

To perform numerical simulations, it is much easier to study a case where both time and space are discrete variables. We consider here the equation

$$h(x, t+1) = g(x, t) \Theta(g(x, t) - \varepsilon), \quad (9a)$$

where

$$g(x, t) = 1 - [1 - ph(x-1, t) - (1-p)h(x, t)]^2. \quad (9b)$$

Time is a discrete variable and if initially the concentration $h(x, 0)$ is only defined when x is an integer, $h(x, t)$ remains so at any later time. Because t and x are both integers, the cutoff ε can be introduced as in Eq. (9) in the crudest way using a Heaviside Θ function. [We have checked, however, that other ways of introducing the cutoff ε as in Eqs. (5) and (6) do not change the results.]

Equation (9) appears naturally (in the limit $\varepsilon = 0$) in the problem of directed polymers on disordered trees [17,18] (where the energy of the bonds is either 1 with probability p

TABLE I. Values of γ_0 and v_0 for some p when $\varepsilon = 0$.

p	0.05	0.25	0.45
γ_0	2.751 111 ...	2.553 244 ...	4.051 851 ...
v_0	0.451 818 ...	0.810 710 ...	0.979 187 ...

or 0 with probability $1-p$). At this stage we will not give a justification for introducing the cutoff ε . This will be discussed in Sec. V.

We consider for the initial condition a step function

$$\begin{aligned} h(x, 0) &= 0 & \text{if } x \geq 0, \\ h(x, 0) &= 1 & \text{if } x < 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Clearly, for such an initial condition, $h(x, t) = 1$ for $x < 0$ at all times. As $h(x, t) = 1$ behind the front and $h(x, t) = 0$ ahead of the front, we define the position X_t of the front at time t by

$$X_t = \sum_{x=0}^{+\infty} h(x, t). \quad (11)$$

The velocity of the front v_ε can then be calculated by

$$v_\varepsilon = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{X_t}{t} = \langle X_{t+1} - X_t \rangle, \quad (12)$$

where the average is taken over time. [Note that as $h(x, t)$ is only defined on integers, the difference $X_{t+1} - X_t$ is time dependent and has to be averaged as in Eq. (12).]

When $\varepsilon = 0$, the evolution equation (9) becomes

$$h(x, t+1) = 1 - [1 - ph(x-1, t) - (1-p)h(x, t)]^2. \quad (13)$$

As for Eq. (1), there is a one-parameter family of solutions F_v of the form (2) indexed by the velocity v which is related as in Eq. (3) to the exponential decay γ of the shape by

$$v(\gamma) = \frac{1}{\gamma} \ln[2pe^\gamma + 2(1-p)]. \quad (14)$$

[This relation is obtained as Eq. (4) by considering the tail of the front where $h(x, t)$ is small and where therefore (13) can be linearized.]

One can show that for $p < 1/2$, $v(\gamma)$ reaches a minimal value v_0 smaller than 1 for some γ_0 , whereas for $p \geq 1/2$, $v(\gamma)$ is a strictly decreasing function of γ , implying that the minimal velocity is $v_0 = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} v(\gamma) = 1$. We will not discuss this phase transition here and we assume from now on that $p < 1/2$. Table I gives some values of v_0 and γ_0 obtained from Eq. (14).

It is important to notice that for $p < 1/2$, the function $v(\gamma)$ has a single minimum at γ_0 . Therefore, there are in general two choices γ_1 and γ_2 of γ for each velocity v . For $v \neq v_0$, the exponential decay of $F_v(z)$ is dominated by $\min(\gamma_1, \gamma_2)$. As $v \rightarrow v_0$, the two roots γ_1 and γ_2 become equal and the effect of this degeneracy gives (in a well chosen frame)

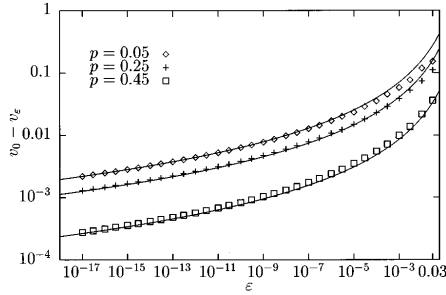


FIG. 1. Difference $v_0 - v_\varepsilon$ for $p=0.05$, 0.25 , and 0.5 . The symbols represent the result of our numerical simulations and the solid lines indicate the prediction of the analysis of Sec. IV.

$$F_{v_0}(z) \approx Aze^{-\gamma_0 z} \quad \text{for large } z, \quad (15)$$

where A is a constant. This large- z behavior can be recovered by looking at the general solution of the linearized form of Eq. (13),

$$h(x, t+1) = 2ph(x-1, t) + 2(1-p)h(x, t). \quad (16)$$

III. NUMERICAL DETERMINATION OF THE VELOCITY

We iterated numerically Eq. (9) with the initial condition (10) for several choices of $p < 1/2$ and for ε varying between 0.03 and 10^{-17} . We observed that the speed is usually very easy to measure because, after a short transient time, the system reaches a periodic regime for which

$$h(x, t+T) = h(x-Y, t) \quad (17)$$

for some constants T and Y . The speed v_ε of the front is then simply given by

$$v_\varepsilon = \frac{Y}{T}. \quad (18)$$

For example, for $p=0.25$ and $\varepsilon=10^{-5}$, we find $T=431$ and $Y=343$, so that $v_\varepsilon=343/431$. The emergence of this periodic behavior is due to the locking of the dynamical system of the $h(x, t)$ on a limit cycle. Because Y and T are integers, our numerical simulations give the speed with an *infinite accuracy*.

For each choice of p and ε , we measured the speed of the front, as defined by Eq. (12) and its shape. Figure 1 is a log-log plot of the difference $v_0 - v_\varepsilon$ versus ε (varying between 0.03 and 10^{-17}) for three choices of the parameter p . The solid lines on the plot indicate the value predicted by the calculations of Sec. IV.

We see in this figure that the velocity v_ε converges slowly towards the minimal velocity v_0 as $\varepsilon \rightarrow 0$. Our simulations, done over several orders of magnitude (here 15), reveal that the convergence is logarithmic: $v_0 - v_\varepsilon \sim (\ln \varepsilon)^{-2}$.

As the front is moving, to measure its shape, we need to locate its position. Here we use expression (11) and we measure the shape $s_\varepsilon(z)$ of the front at a given time t relative to its position X_t by

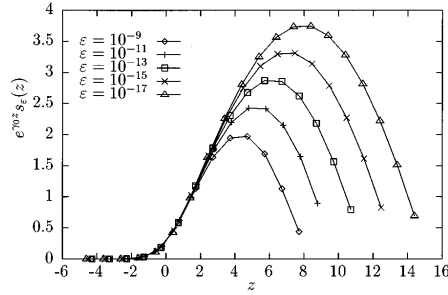


FIG. 2. Normalized shape of the front $s_\varepsilon(z)e^{\gamma_0 z}$ versus z for $p=0.25$ and several choices of ε .

$$s_\varepsilon(z) = h(z + X_t, t). \quad (19)$$

When the system reaches the limit cycle (17), the shape $s_\varepsilon(z)$ becomes roughly independent of the time chosen. (In fact, it becomes periodic of period T , but the shape s_ε has a smooth envelope.) We have measured this shape at some arbitrary large enough time to avoid transient effects. As we expect $s_\varepsilon(z)$ to look more and more like $F_{v_0}(z)$ as ε tends to 0, we normalize this shape by dividing it by $e^{-\gamma_0 z}$. The result $s_\varepsilon(z)e^{\gamma_0 z}$ is plotted versus z for $p=0.25$ and $\varepsilon=10^{-9}$, 10^{-11} , 10^{-13} , 10^{-15} , and 10^{-17} in Fig. 2.

On the left-hand side of the graph, our data coincide over an increasing range as ε decreases, indicating that far from the cutoff, the shape converges to expression (15) of $F_{v_0}(z)$. On the right-hand side, the curves increase up to a maximum before falling down to some small value that seems to be independent of ε . When ε is multiplied by a constant factor (here 10^{-2}), the maximum as well as the right-hand side of the curves is translated by a constant amount. This indicates that for ε small enough, the shape $s_\varepsilon(z)$ in the tail (that is, for z large) takes the scaling form

$$s_\varepsilon(z) \approx |\ln \varepsilon| G\left(\frac{z}{|\ln \varepsilon|}\right) e^{-\gamma_0 z}. \quad (20)$$

We will see that our analysis of Sec. IV does predict this scaling form. As one expects this shape to coincide with the asymptotic form (15) of $F_{v_0}(z)$ for $1 \ll z \ll |\ln \varepsilon|$, the scaling function $G(y)$ should be linear for small y .

IV. CALCULATION OF THE VELOCITY FOR A SMALL CUTOFF

The first remark we make is that as soon as we introduce a cutoff through a function $a(h)$, which is everywhere smaller than 1, the velocity v_ε of the front is lowered compared to the velocity obtained in the absence of a cutoff. This is easy to check by comparing a solution $h_\varepsilon(x, t)$ of Eq. (5), where $a(h)$ is present, and a solution $h_0(x, t)$ of Eq. (1). If initially $h_\varepsilon(x, 0) < h_0(x, 0)$, the solution h_ε will never be able to take over the solution h_0 . Indeed, if the two functions $h_\varepsilon(x, 0)$ and $h_0(x, 0)$ were to coincide for the first time at some point x , we would have at that point $\partial^2 h_\varepsilon / \partial x^2 \leq \partial^2 h_0 / \partial x^2$ and together with the effect of $a(h)$

this would bring back the system in the situation where $h_\varepsilon(x, t) < h_0(x, t)$ [3,7]. This shows that $v_\varepsilon \leq v_0$.

For the calculation of the velocity v_ε , we will consider first the modified Fisher-Kolmogorov equation (5) when the cutoff function $a(h)$ is simply given by

$$a(h) = \Theta(h - \varepsilon). \quad (21)$$

In this section we will calculate the leading correction to the velocity when ε is small and we will obtain the scaling function G that appears in Eq. (20). Then we will discuss briefly how our analysis could be extended to more general forms of the cutoff function $a(h)$ or to other traveling-wave equations such as Eq. (9).

As v_ε is the velocity of the front, its shape $s_\varepsilon(z) = h(z + v_\varepsilon t, t)$ in the asymptotic regime satisfies

$$v_\varepsilon s'_\varepsilon + s''_\varepsilon + (s_\varepsilon - s_\varepsilon^2) a(s_\varepsilon) = 0.$$

When ε is small, with the choice (21) for $a(h)$, we can decompose the range of values of z into three regions: *region I*, where $s_\varepsilon(z)$ is not small compared to 1; *region II*, where $\varepsilon < s_\varepsilon(z) \ll 1$; and *region III*, where $s_\varepsilon(z) < \varepsilon$.

In region I, the shape of the front s_ε looks like F_{v_0} , whereas in regions II and III, as s_ε is small, it satisfies the linear equations

$$v_\varepsilon s'_\varepsilon + s''_\varepsilon + s_\varepsilon = 0 \quad \text{in region II}, \quad (22)$$

$$v_\varepsilon s'_\varepsilon + s''_\varepsilon = 0 \quad \text{in region III}. \quad (23)$$

These linear equations (22) and (23) can be solved easily. The only problem is to make sure that the solution in region II and its derivative coincides with F_{v_0} at the boundary between I and II and with the solution valid in region III at the boundary between II and III. If we call Δ the shift in the velocity

$$\Delta = v_0 - v_\varepsilon \quad (24)$$

and if we denote $\gamma_r \pm i\gamma_i$ the two roots of the equation $v(\gamma) = v_\varepsilon$, the shape s_ε is given in the three regions by

$$s_\varepsilon(z) \approx F_{v_0}(z) \quad \text{in region I},$$

$$s_\varepsilon(z) \approx C e^{-\gamma_r z} \sin(\gamma_i z + D) \quad \text{in region II}, \quad (25)$$

$$s_\varepsilon(z) \approx \varepsilon e^{-v_\varepsilon(z-z_0)} \quad \text{in region III},$$

and we can determine the unknown quantities C , D , z_0 , and v_ε by using the boundary conditions.

For large z we know from Eq. (15) that $F_{v_0}(z) \approx A z e^{-\gamma_0 z}$ for some A . Therefore, as $\gamma_0 - \gamma_r \sim \Delta$ and $\gamma_i \sim \Delta^{1/2}$, the boundary conditions between regions I and II impose, to leading order in $\Delta^{1/2}$, that $C = A/\gamma_i$ and $D = 0$.

At the boundary between regions II and III, we have $s_\varepsilon(z) = \varepsilon$ and $z = z_0$. If we impose the continuity of s_ε and of its first derivative at this point, we get

$$A e^{-\gamma_r z_0} \sin(\gamma_i z_0) = \varepsilon \gamma_i \quad (26a)$$

and

$$A e^{-\gamma_r z_0} [-\gamma_r \sin(\gamma_i z_0) + \gamma_i \cos(\gamma_i z_0)] = -v_\varepsilon \varepsilon \gamma_i. \quad (26b)$$

Taking the ratio between these two relations leads to

$$\gamma_r - \frac{\gamma_i}{\tan(\gamma_i z_0)} = v_\varepsilon. \quad (27)$$

When Δ is small, $\gamma_r \approx \gamma_0 = 1$, $v_\varepsilon \approx v_0 = 2$, and $\gamma_i \sim \Delta^{1/2}$. Thus the only way to satisfy Eq. (27) is to set $\gamma_i z_0 \approx \pi$ and $\pi - \gamma_i z_0 \approx \gamma_i \sim \Delta^{1/2}$. Therefore, Eq. (26) implies to leading order that $z_0 \approx -(\ln \varepsilon)/\gamma_0$ and the condition $\gamma_i z_0 \approx \pi$ gives

$$\gamma_i \approx \frac{\pi}{z_0} \approx \frac{\pi \gamma_0}{|\ln \varepsilon|}. \quad (28)$$

Then, as γ_i is small, the difference $\Delta = v_0 - v_\varepsilon$ is given by

$$v_0 - v_\varepsilon \approx \frac{1}{2} v''(\gamma_0) \gamma_i^2 \approx \frac{v''(\gamma_0) \pi^2 \gamma_0^2}{2(\ln \varepsilon)^2}, \quad (29)$$

which is the result announced in Eqs. (7) and (8).

A different cutoff function $a(h)$ should not affect the shape of s_ε in region II or the size z_0 of region II. Only the precise matching between regions II and III might be modified and we do not think that this would change the leading dependence of z_0 in ε , which controls everything. In fact, there are other choices of the cutoff function $a(h)$ (piecewise constant) for which we could find the explicit solution in region III, confirming that the precise form of $a(h)$ does not change Eq. (28). The generalization of the above argument to equations other than Eq. (1) (and in particular to the case studied in Secs. II and III) is straightforward. Only the form of the linear equation is changed and the only effect on the final result (7) is that one has to use a different function $v(\gamma)$.

When expression (7) is compared in Fig. 1 with the results of the simulations, the agreement is excellent. Moreover, in region II, one sees from Eqs. (25) and (28) that

$$s_\varepsilon(z) \approx \frac{A}{\pi \gamma_0} |\ln \varepsilon| \sin\left(\frac{\pi \gamma_0 z}{|\ln \varepsilon|}\right) e^{-\gamma_0 z}, \quad (30)$$

which also agrees with the scaling form (20).

Recently, for a simple model of evolution [19,20] governed by a linear equation, the velocity was found to be the logarithm of the cutoff to the power 1/3. This result was obtained by an analysis that has some similarities to the one presented in this section.

V. STOCHASTIC MODEL

Many models described by traveling-wave equations originate from a large-scale limit of microscopic stochastic models involving a finite number N of particles [13–16]. Here we study such a microscopic model, the limit of which reduces to Eq. (13) when $N \rightarrow \infty$. Our numerical results, presented below, indicate a large- N correction to the velocity of the form $v_N \approx v_0 - a(\ln N)^{-2}$ with a coefficient a consistent with the one calculated in Sec. IV for $\varepsilon = 1/N$.

The model we consider in this section appears in the study of directed polymers [14] and is, up to minor changes,

equivalent to a model describing the dynamics of hard spheres [15]. It is a stochastic process discrete in both time and space with two parameters: N , the number of particles, and p , a real number between 0 and 1. At time t (t is an integer), we have N particles on a line at integer positions $x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t)$. Several particles may occupy the same site. At each time step, the N positions evolve in the following way: for each i , we choose two particles j_i and j'_i at random among the N particles. (These two particles do not need to be different.) Then we update $x_i(t)$ by

$$x_i(t+1) = \max[x_{j_i}(t) + \alpha_i, x_{j'_i}(t) + \alpha'_i], \quad (31)$$

where α_i and α'_i are two independent random numbers taking the value 1 with probability p or 0 with probability $1-p$. The numbers α_i, α'_i, j_i , and j'_i change at each time step. Initially ($t=0$), all particles are at the origin, so that we have $x_i(0)=0$ for all i .

At time t , the distribution of the $x_i(t)$ on the line can be represented by a function $h(x, t)$, which counts the fraction of particles strictly at the right of x ,

$$h(x, t) = \frac{1}{N} \sum_{x_i(t) > x} 1. \quad (32)$$

Obviously $h(x, t)$ is always an integral multiple of $1/N$. At $t=0$, we have $h(x, 0)=1$ if $x < 0$ and $h(x, 0)=0$ if $x \geq 0$. One can notice that the definition of the position X_t of the front used in Eq. (11) coincides with the average position of the N particles

$$X_t = \sum_{x=0}^{+\infty} h(x, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(t). \quad (33)$$

Given the positions $x_i(t)$ of all the particles [or, equivalently, given the function $h(x, t)$], the $x_i(t+1)$ become independent random variables. Therefore, given $h(x, t)$, the probability for each particle to have at time $t+1$ a position strictly larger than x is given by

$$\langle h(x, t+1) | h(x, t) \rangle = 1 - [1 - ph(x-1, t) - (1-p)h(x, t)]^2. \quad (34)$$

The difficulty of the problem comes from the fact that one can only average $h(x, t+1)$ over a single time step. On the right-hand side of Eq. (34) we see terms such as $h^2(x, t)$ or $h(x-1, t)h(x, t)$ and one has to calculate all the correlations of the $h(x, t)$ in order to find $\langle h(x, t+1) \rangle$. This makes the problem very difficult for finite N . However, given $h(x, t)$, the $x_i(t+1)$ are independent and in the limit $N \rightarrow \infty$, the fluctuations of $h(x, t+1)$ are negligible. Therefore, when $N \rightarrow \infty$, $h(x, t)$ evolves according to the deterministic equation (13). As the initial condition is a step function, we expect the front to move, in the limit $N \rightarrow \infty$, with the minimal velocity v_0 of Eq. (14).

For large but finite N , we expect the correction to the velocity to have two main origins. First, $h(x, t)$ takes only values that are integral multiples of $1/N$, so that $1/N$ plays a role similar to the cutoff ε of Sec. II. Second, $h(x, t)$ fluctuates around its average and this has the effect of adding noise

to the evolution equation (13). In the rest of this section we present the results of simulations done for large but finite N and we will see that the shift in the velocity seems to be very close to the expression of Sec. IV when $\varepsilon = 1/N$.

With the most direct way of simulating the model for N finite, it is difficult to study systems of size much larger than 10^6 . Here we use a more sophisticated method allowing N to become huge. Our method, which handles many particles at the same time, consists in iterating directly $h(x, t)$.

Knowing the function $h(x, t)$ at time t , we want to calculate $h(x, t+1)$. We call $x_{\min}$ and $x_{\max}$, respectively, the positions of the leftmost and rightmost particles at time t and $l = x_{\max} - x_{\min} + 1$. In terms of the function $h(x, t)$, one has $0 < h(x, t) < 1$ if and only if $x_{\min} \leq x < x_{\max}$. Obviously, all the positions $x_i(t+1)$ will lie between $x_{\min}$ and $x_{\max} + 1$. The probability p_k that a given particle i will be located at position $x_{\min} + k$ at time $t+1$ is

$$p_k = \langle h(x_{\min} + k - 1, t+1) \rangle - \langle h(x_{\min} + k, t+1) \rangle, \quad (35)$$

with $\langle h(x, t+1) \rangle$ given by Eq. (34). Obviously, $p_k \neq 0$ only for $0 \leq k \leq l$.

The probability to have, for every k , n_k particles at location $x_{\min} + k$ at time $t+1$ is given by

$$P(n_0, n_1, \dots, n_l) = \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_l!} p_0^{n_0} p_1^{n_1} \dots p_l^{n_l} \times \delta(N - n_0 - n_1 - \dots - n_l). \quad (36)$$

Using a random number generator for a binomial distribution, expression (36) allows one to generate random n_k . This is done by calculating n_0 according to the distribution

$$P(n_0) = \frac{N!}{n_0! (N - n_0)!} p_0^{n_0} (1 - p_0)^{N - n_0}, \quad (37)$$

then n_1 with

$$P(n_1 | n_0) = \frac{(N - n_0)!}{n_1! (N - n_0 - n_1)!} \left(\frac{p_1}{1 - p_0} \right)^{n_1} \times \left(1 - \frac{p_1}{1 - p_0} \right)^{N - n_0 - n_1}, \quad (38)$$

and so on. This method can be iterated to produce the $l+1$ numbers $n_0, n_1, \dots, n_l$ distributed according to Eq. (36). Then we construct $h(x, t+1)$ by

$$\begin{aligned} h(x, t+1) &= 1 & \text{if } x < x_{\min}, \\ h(x, t+1) &= \frac{1}{N} \sum_{i=k+1}^l n_i & \text{if } x_{\min} \leq x \leq x_{\max} + 1, \\ & & \text{and } x = x_{\min} + k, \\ h(x, t+1) &= 0 & \text{if } x > x_{\max} + 1. \end{aligned} \quad (39)$$

As the width l of the front is roughly of order $\ln N$, this method allows N to be very large.

Using this method with the generator of random binomial numbers given in [21], we have measured the velocity v_N of

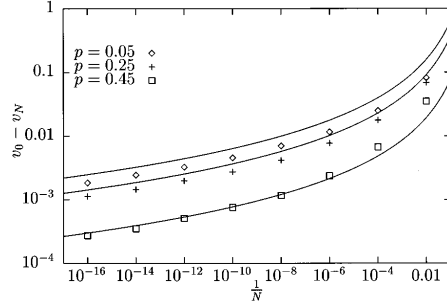


FIG. 3. Difference $v_0 - v_N$ versus $1/N$ for three choices of p . The symbols represent the result of our numerical simulations of the stochastic process and the solid lines indicate the prediction (7) for $\varepsilon = 1/N$.

the front for several choices of p (0.05, 0.25, and 0.45) and for N ranging from 100 to 10^{16} . We measured the velocities with the expression

$$v_N = \frac{X_{10^6} - X_{10^5}}{9 \times 10^5}. \quad (40)$$

Figure 3 is a log-log plot of the difference $v_0 - v_N$ versus $1/N$ compared to the prediction (7) for $\varepsilon = 1/N$. The variation of v_N when using longer times or different random numbers was not larger than the size of the symbols. We see in Fig. 3 that the speed v_N of the front seems to be given for large N by

$$v_N \approx v_0 - \frac{K}{(\ln N)^2}, \quad (41)$$

where the coefficient K is not too different from the prediction (7).

The agreement, however, is not perfect. The shift $v_0 - v_N$ seems to be proportional to $(\ln N)^{-2}$, but the constant in Fig. 3 looks slightly different from the one predicted by Eq. (7). A possible reason for this difference could have been the discretization of the front: instead of only cutting off the tail as in Secs. III and IV, here the whole front $h(x, t)$ is constrained to take values multiple of $1/N$. One might think that this could explain this discrepancy. However, we have checked numerically (the results are not presented in this paper) that Eq. (13) with $h(x, t)$ constrained to be a multiple of a cutoff ε does not give results significantly different from the simpler model of Secs. III and IV with only a single cutoff. So we think that the full discretization of the front cannot be responsible for a different constant K . The discrepancy observed in Fig. 3 is more likely due to the effect of the randomness of the process. It is not clear, however, whether this mismatch would decrease for even larger N . It would be interesting to push the numerical simulations further and check the N dependence of the front velocity for very large N .

VI. CONCLUSION

We have shown in the present work that a small cutoff ε in the tail of solutions of traveling-wave equations has the effect of selecting a single velocity v_ε for the front. This velocity v_ε converges to the minimal velocity v_0 when $\varepsilon \rightarrow 0$ and the shift $v_0 - v_\varepsilon$ is surprisingly large (7) and (8).

Very slow convergences to the minimal velocity have been observed in a number of cases [8,13–15] as well as the example of Sec. V. As the effect of the cutoff on the velocity is large, it is reasonable to think that it would not be affected much by the presence of noise. The example of Sec. V shows that the cutoff alone gives at least the right order of magnitude for the shift and it would certainly be interesting to push the simulations further for this particular model to see whether the analysis of Sec. IV should be modified by the noise. The numerical method used in Sec. V to study a very large ($N \sim 10^{16}$) system was very helpful to observe a logarithmic behavior. We did not succeed in checking in earlier works [13–15,22] whether the correction was logarithmic, mostly because the published data were usually too noisy or obtained on a too small range of the parameters. Still, even if the cutoff was giving the main contribution to the shift of the velocity, other properties would remain very specific to the presence of noise, like the diffusion of the position of the front [16].

Our approach of Sec. IV shows that the effect of a small cutoff is the existence of a scaling form (20) and (30) that describes the change in the shape of the front in its steady state. The effect of initial conditions for usual traveling-wave equations (with no cutoff) leads to a very similar scaling form for the change in the shape of the front in the transient regime. This is explained in the Appendix, where we show how the logarithmic shift of the position of a front due to initial conditions [10,23] can be recovered.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank C. Appert, V. Hakim, and J.L. Lebowitz for useful discussions. Le Laboratoire de Physique Statistique est associé au CNRS et aux Universités Paris VI and Paris VII.

APPENDIX: EFFECT OF INITIAL CONDITIONS ON THE POSITION AND ON THE SHAPE OF THE FRONT

In this appendix we show that ideas very similar to those developed in Sec. IV allow one to calculate the position and the shape at time t of a front evolving according to Eq. (1), or a similar equation, given its initial shape. The main idea is that in the long-time limit, there is a region of size $\sqrt{t}$ ahead of the front that keeps the memory of the initial condition. We will recover in particular the logarithmic shift in the position of the front due to the initial condition [10,23], namely, that if the initial shape is a step function

$$\begin{aligned} h(x, 0) &= 0 & \text{if } x > 0, \\ h(x, 0) &= 1 & \text{if } x < 0, \end{aligned} \quad (A1)$$

then the position X_t of the front at time t increases like

$$X_t \approx 2t - \frac{3}{2} \ln t. \quad (\text{A2})$$

More generally, if initially

$$h(x, 0) = x^\nu e^{-\gamma_0 x} \quad \text{if } x > 0,$$

$$h(x, 0) = 1 \quad \text{if } x < 0, \quad (\text{A3})$$

we will show that for $\nu > -2$

$$X_t \approx 2t + \frac{\nu - 1}{2} \ln t, \quad (\text{A4})$$

whereas the shift is given by Eq. (A2) for $\nu < -2$. Here, there is no cutoff, but the transient behavior in the long-time limit gives rise to a scaling function very similar to the one discussed in Sec. IV.

If we write the position of the front at time t as

$$X_t = v_0 t - c(t), \quad (\text{A5})$$

we observed numerically (as in Fig. 2 of Sec. III) and we are going to see in the following that the shape of the front takes, for large t , the scaling form

$$h(x, t) = t^\alpha G\left(\frac{x - X_t}{t^\alpha}\right) e^{-\gamma_0(x - X_t)}, \quad (\text{A6})$$

which is very similar to Eqs. (20) and (30).

If we use Eqs. (A5) and (A6) into the linearized form of Eq. (1), we get, using the fact that $v_0 = 2$ and $\gamma_0 = 1$,

$$\frac{1}{t^\alpha} G'' + \frac{1}{t^{1-\alpha}} (\alpha z G' - \alpha G) + t^\alpha \dot{c} G = \dot{c} G', \quad (\text{A7})$$

where $z = (x - X_t)t^{-\alpha}$. By writing that the leading orders of the different terms of Eq. (A7) are comparable, we see that we must have

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad (\text{A8})$$

$$\dot{c} \approx \frac{\beta}{t} \quad (\text{A9})$$

for some β and that the right-hand side of Eq. (A7) is negligible. Therefore, the equation satisfied by G is

$$\frac{d^2}{dz^2} G + \frac{z}{2} \frac{d}{dz} G + \left(\beta - \frac{1}{2}\right) G = 0 \quad (\text{A10})$$

and the position of the front is given by

$$X_t \approx v_0 t - \beta \ln t. \quad (\text{A11})$$

As in Sec. IV, we expect that as $t \rightarrow \infty$, the front will approach its limiting form and therefore that for z small, the shape will look like Eq. (15). Therefore, we choose the solution $G_\beta(z)$ of Eq. (A10), which is linear at $z = 0$. This solution can be written as an infinite sum

$$\begin{aligned} G_\beta(z) &= A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} z^{2n+1} \prod_{i=0}^{n-1} (\beta + i) \\ &= A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \frac{\Gamma(n+\beta)}{\Gamma(\beta)} z^{2n+1}. \end{aligned} \quad (\text{A12})$$

(The second equality is not valid when β is a nonpositive integer.)

To determine β , one can notice that the scaling form (A6) has to match the initial condition when x is large and t of order 1. We thus need to calculate the asymptotic behavior of $G(z)$ when z is large.

For certain values of β , there exist closed expressions of the sum (A12). For instance,

$$\begin{aligned} G_{-2}(z) &= A \left(z + \frac{z^3}{3} + \frac{z^5}{60} \right), \\ G_{7/2}(z) &= A \left(z - \frac{z^3}{3} + \frac{z^5}{60} \right) e^{-z^2/4}, \\ G_{-1}(z) &= A \left(z + \frac{z^3}{6} \right), \\ G_{5/2}(z) &= A \left(z - \frac{z^3}{6} \right) e^{-z^2/4}, \\ G_0(z) &= Az, \end{aligned}$$

$$G_{3/2}(z) = A z e^{-z^2/4},$$

$$G_1(z) = A e^{-z^2/4} \int_0^z e^{t^2/4} dt.$$

$$G_{1/2}(z) = A \int_0^z e^{-t^2/4} dt.$$

One can check directly on Eq. (A10) that G_β has a symmetry

$$G_\beta(z) = -i e^{-z^2/4} G_{3/2-\beta}(iz). \quad (\text{A14})$$

For any β , one can obtain the large- z behavior of $G(z)$. To do so, we note that for $\beta > 0$, one can rewrite Eq. (A12) as

$$\begin{aligned} G_\beta(z) &= \frac{A}{\Gamma(\beta)} \int_0^\infty dt \, t^{\beta-3/2} \sin(\sqrt{t}z) e^{-t} \\ &= \frac{2A}{\Gamma(\beta)} z^{1-2\beta} \int_0^\infty dt \, t^{2\beta-2} \sin(t) e^{-t^2/z^2}. \end{aligned} \quad (\text{A15})$$

For $0 < \beta < 1$, the second integral in Eq. (A15) has a nonzero limit and this gives the asymptotic behavior of $G_\beta(z)$,

$$G_\beta(z) \approx -\frac{2A}{\Gamma(\beta)} \cos(\pi\beta) \Gamma(2\beta-1) z^{1-2\beta}. \quad (\text{A16})$$

From Eq. (A12), one can also show that

$$G''_{\beta} = -\frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta)} G_{\beta+1}, \quad (\text{A17})$$

implying that Eq. (A16) remains valid for all β except for $\beta = 3/2, 5/2, 7/2$, etc., where the amplitude in Eq. (A16) vanishes. For these values of β , $G_{\beta}(z)$ decreases faster than a power law [see Eq. (A13)].

The functions G_{β} calculated so far are acceptable scaling functions for the shape of the front only for $\beta \leq 3/2$. Indeed, one can see in Eq. (A16) that for $3/2 < \beta < 5/2$ the function $G_{\beta}(z)$ is negative for large z . In fact, for all $\beta > 3/2$, this function changes its sign at least once, so that the scaling form (A6) is not reachable for an initial $h(x,0)$ that is always positive. It is only for $\beta \leq 3/2$ that G_{β} remains positive for all $z > 0$.

Looking at the asymptotic form (A16), we see that if initially $h(x,0) = x^{\nu} e^{-\gamma_0 x}$, the only function $G_{\beta}(z)$ that has the right large- z behavior is such that $1 - 2\beta = \nu$ and this gives,

together with Eq. (A11), the expression (A4) for the shift of the position. As the cases $\beta > 3/2$ are not reachable, all initial conditions corresponding to $\nu < -2$ or steeper (such as step functions) give rise to $G_{3/2}$ and the shift in position given by Eq. (A2).

The analysis of this appendix can be extended to other traveling-wave equations such as Eq. (13), with more general functions $v(\gamma)$ (having a nondegenerate minimum at γ_0) as in Eq. (14). Then the expressions (A2) and (A4) of the shift become

$$X_t = v_0 t - \frac{3}{2\gamma_0} \text{Int} \quad (\text{A18})$$

and

$$X_t = v_0 t - \frac{1-\nu}{2\gamma_0} \text{Int}. \quad (\text{A19})$$

-
- [1] R. A. Fisher, *Ann. Eugenics* **7**, 355 (1937).
 - [2] A. Kolmogorov, I. Petrovsky, and N. Piscounov, *Moscou Univ. Bull. Math. A* **1**, 1 (1937).
 - [3] D. G. Aronson and H. F. Weinberger, *Adv. Math.* **30**, 33 (1978).
 - [4] G. Dee and J. S. Langer, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 383 (1983).
 - [5] M. Bramson *et al.*, *J. Stat. Phys.* **45**, 905 (1986).
 - [6] W. van Saarloos, *Phys. Rev. A* **39**, 6367 (1989).
 - [7] P. Collet and J. -P. Eckmann, *Instabilities and Fronts in Extended Systems* (Princeton University Press, Princeton, 1990).
 - [8] A. R. Kerstein, *J. Stat. Phys.* **45**, 921 (1986).
 - [9] D. G. Aronson and H. F. Weinberger, *Lect. Notes Math.* **446**, 5 (1975).
 - [10] M. Bramson, *Convergence of Solutions of the Kolmogorov Equation to Traveling Waves*, No. 285 in *Memoirs of the American Mathematical Society* (AMS, Providence, 1983).
 - [11] W. van Saarloos, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2571 (1987).
 - [12] W. van Saarloos, *Phys. Rev. A* **37**, 211 (1988).
 - [13] H. P. Breuer, W. Huber, and F. Petruccione, *Physica D* **73**, 259 (1994).
 - [14] J. Cook and B. Derrida, *J. Stat. Phys.* **61**, 961 (1990).
 - [15] R. van Zon, H. van Beijeren, and C. Dellago (unpublished).
 - [16] H. P. Breuer, W. Huber, and F. Petruccione, *Europhys. Lett.* **30**, 69 (1995).
 - [17] B. Derrida and H. Spohn, *J. Stat. Phys.* **51**, 817 (1988).
 - [18] B. Derrida, *Phys. Scr.* **38**, 6 (1991).
 - [19] D. A. Kessler, H. Levine, D. Ridgway, and L. Tsimring (unpublished).
 - [20] L. Tsimring, H. Levine, and D. A. Kessler, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4440 (1996).
 - [21] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
 - [22] A. R. Kerstein, *J. Stat. Phys.* **53**, 703 (1988).
 - [23] M. D. Bramson, *Commun. Pure Appl. Math.* **31**, 531 (1978).



Computer Physics Communications 121–122 (1999) 376–381

Computer Physics
Communications

www.elsevier.nl/locate/cpc

Microscopic models of traveling wave equations

Eric Brunet¹, Bernard Derrida²Laboratoire de Physique Statistique, ENS, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France³

Abstract

Reaction-diffusion problems are often described at a macroscopic scale by partial derivative equations of the type of the Fisher or Kolmogorov–Petrovsky–Piscounov equation. These equations have a continuous family of front solutions, each of them corresponding to a different velocity of the front. By simulating systems of size up to $N = 10^{16}$ particles at the microscopic scale, where particles react and diffuse according to some stochastic rules, we show that a single velocity is selected for the front. This velocity converges logarithmically to the solution of the F-KPP equation with minimal velocity when the number N of particles increases. A simple calculation of the effect introduced by the cutoff due to the microscopic scale allows one to understand the origin of the logarithmic correction. © 1999 Published by Elsevier Science B.V. All rights reserved.

1. The Fisher equation

The Fisher equation [1], also called KPP equation (for Kolmogorov–Petrovsky–Piscounov [2]) is widely used to describe front propagation in many problems of physics, chemistry and biology:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + c - c^2. \quad (1)$$

Fisher first introduced this equation to represent “The Wave of Advance of Advantageous Genes” [1] in a population. The concentration $c(x, t)$ was the fraction of individuals in a population at position x and time t that exhibit some benefit genes, and (1) was used to describe how this favorable gene would spread in the population. Eq. (1) can also model the dynamics of sick individuals in a population during a viral contagious infection, the proportion of burnt-out gases in

a combustion [3], the concentration of some species produced in a chemical reaction, etc. It also appears in the mean field theory of directed polymers in a random medium [4] and in the calculation of Lyapunov exponents of large sparse random matrices [5,6].

In (1), $c(x, t)$ represents a concentration, implying that, for all x and t :

$$0 \leq c(x, t) \leq 1. \quad (2)$$

If we look at solutions constant in space ($\partial c / \partial x = 0$), Eq. (1) becomes simply:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = c - c^2. \quad (3)$$

There are two stationary solutions: $c = 0$ (unstable fixed point) and $c = 1$ (stable fixed point).

The role of the diffusion term $\partial^2 c / \partial x^2$ in (1) is to spread any positive perturbation. Therefore, if initially $c(x, 0) > 0$ in some region of space and $c(x, 0) = 0$ elsewhere, the perturbation will grow, reach asymptotically the stable fixed point $c = 1$ and spread throughout the whole space. Ultimately, the stable value $c = 1$ will be reached everywhere.

¹ E-mail: eric.brunet@ens.fr.

² E-mail: bernard.derrida@ens.fr.

³ Laboratoire associé CNRS et aux Universités Paris VI et Paris VII.

To study how the stable region (where $c = 1$) invades the unstable one (where $c = 0$), one can consider an initial condition where $c(x, 0)$ decreases monotonically from $c(-\infty, 0) = 1$ to $c(+\infty, 0) = 0$. If at time $t = 0$ the initial condition $c(x, 0)$ decreases fast enough as $x \rightarrow \infty$ (in particular if $c(x, 0)$ is a step function), the front moves in the long time limit with a well defined speed $v_{\min}$ [7]:

$$v_{\min} = 2. \quad (4)$$

To understand from (1) why the velocity $v_{\min} = 2$ is selected looks a priori a very hard task. Eq. (1) is a non-linear partial derivative equation and there is no way of writing the full expression of $c(x, t)$ for an arbitrary initial condition. However, the velocity $v_{\min} = 2$ can be understood easily without solving the full non-linear problem: let us assume that the front moves at some constant speed v . The concentration profile $c(x, t)$ takes then the form:

$$c(x, t) = F_v(x - vt), \quad (5)$$

where $F_v(z)$ is the solution of:

$$F_v'' + vF_v' + F_v - F_v^2 = 0 \quad (6)$$

with $F_v(-\infty) = 1$ and $F_v(+\infty) = 0$. In the region where $F_v(z) \ll 1$, i.e. far ahead of the front, one can neglect in (6) the non-linear term. The general solution of the linearized equation is a sum of two exponentials so that for $z \rightarrow +\infty$ one of these two exponentials dominates:

$$F_v(z) \simeq Ae^{-\gamma z}, \quad (7)$$

and, from the linearized version of (6), one finds that v and γ are related by:

$$v(\gamma) = \gamma + \frac{1}{\gamma}. \quad (8)$$

We see that the asymptotic decay γ in (7) determines completely the velocity $v(\gamma)$ of the front.

What (8) tells us is that any velocity $v \geq v_{\min}$ ($v_{\min} = 2$) is possible for the front. (It should be noted that $v < v_{\min}$ would also be possible by allowing γ to be complex. However, a front moving at such a speed would take negative values in the tail, and this would violate condition (2).)

The minimal speed $v_{\min} = 2$ reached for $\gamma_{\min} = 1$ has a special status: it has been shown [8–12] that if in its initial condition the front decays faster than

$e^{-\gamma_{\min}x}$ (in particular, if $c(x, 0)$ is a step function), then the front moves asymptotically with this minimal speed $v_{\min}$. Moreover, in the long time limit, the position $X(t)$ of the front is given by

$$X(t) = 2t - \frac{3}{2} \ln t + O(1). \quad (9)$$

(In other words, the velocity of the front converges to $v_{\min} = 2$ with a leading correction [12] given by $-3/(2t)$. The presence of a logarithmic correction in (9) makes often a precise determination of the asymptotic velocity difficult.)

Most properties of (1) (selection of the minimal velocity for steep enough initial conditions, logarithmic corrections to the position as in (9)) can also be recovered in a whole class [10] of front equations where a stable region invades an unstable one. An example very different from (1) that we will consider below is:

$$c(x, t+1) = 1 - \left[1 - \int d\alpha \rho(\alpha) c(x - \alpha, t) \right]^2, \quad (10)$$

where $\rho(\alpha)$ can be any density function ($\rho(\alpha) \geq 0$ and $\int d\alpha \rho(\alpha) = 1$). As for (1), the uniform solutions $c = 0$ and $c = 1$ are respectively unstable and stable and the integral over α spreads any positive perturbation as does the diffusion term in (1).

As for (1), the linearized version of (10) where terms quadratic in c are neglected determines the velocity. For an exponential decay (7) of the front, one finds a dispersion relation $v(\gamma)$ generalizing (8):

$$v(\gamma) = \frac{1}{\gamma} \ln \left[2 \int d\alpha \rho(\alpha) e^{\gamma \alpha} \right], \quad (11)$$

and for a steep enough initial condition the minimum velocity

$$v_{\min} = \min_{\gamma} v(\gamma) = v(\gamma_{\min}) \quad (12)$$

is reached in the long time limit. The position $X(t)$ is then given [11] for large t by:

$$X(t) = v_{\min} t - \frac{3}{2\gamma_{\min}} \ln t + O(1). \quad (13)$$

(Note that in general $\gamma_{\min}$ in (12) is finite except for very particular choices of $\rho(\alpha)$.)

2. The microscopic stochastic model

Front equations of type (1) or (10) originate often as the large-scale limit of microscopic stochastic mod-

els [3,5,6,13–15]. Here we study a particular microscopic model which, as we will see, is described in the large scale limit by the front Eq. (10). We will compare the velocity measured for this microscopic stochastic problem with the velocity (11), (12) expected for the traveling wave Eq. (10).

Our microscopic model [11] is defined as follows: Imagine a population where each generation has exactly N individuals. Each individual i ($1 \leq i \leq N$) at generation t (t is an integer) is characterized by its fitness $x_i(t)$, a real number representing its adaptation to the environment. The state of the system at any time t is completely determined by the N numbers $x_i(t)$.

At time $t = 0$, we set $x_i(0) = 0$ for all i (but this choice of initial condition is actually unimportant in the long-time limit). By definition of the model, the $x_i(t)$ evolve from generation t to generation $t + 1$ with the following rule:

$$x_i(t + 1) = \max[x_{m_i}(t) + \alpha_i, x_{f_i}(t) + \alpha'_i], \quad (14)$$

where m_i and f_i are the two parents of the new individual i , chosen at random in the previous generation t (in other words, m_i and f_i are random integers uniformly distributed between 1 and N), and where α_i and α'_i are random numbers independently chosen according to some probability distribution $\rho(\alpha)$ representing random mutations. So at each generation, the m_i , f_i , α_i and α'_i are independent and new values are chosen at every time step.

Under the dynamics (14), the cloud of N points $x_i(t)$ moves along the line and we want to determine its asymptotic velocity v_N , that is:

$$v_N = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{X(t)}{t}, \quad (15)$$

where

$$X(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(t). \quad (16)$$

Let us now see how one can relate this microscopic model to the traveling wave equation (10). We define $c(x, t)$ as the fraction of population which has a fitness larger than x :

$$c(x, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Theta(x_i(t) - x). \quad (17)$$

(By convention, we choose here $\Theta(x) = 1$ if $x > 0$ and $\Theta(x) = 0$ if $x \leq 0$.) Obviously, $c(x, t)$ is

a monotonic decreasing function of x going from $c(-\infty, t) = 1$ to $c(+\infty, t) = 0$. At time $t = 0$, we have $c(x, 0) = 1$ for $x < 0$ and $c(x, 0) = 0$ for $x \geq 0$, so the initial condition is a step function. It should be noted that $c(x, t)$ can only take values which are integral multiples of $1/N$.

Clearly from (17), the position $X(t)$ of the cloud of points can be rewritten with the function $c(x, t)$ as:

$$X(t) = X(0) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx [c(x, t) - c(x, 0)]. \quad (18)$$

Given the positions $x_i(t)$ of all the particles (or, equivalently given the function $c(x, t)$), the $x_i(t + 1)$ obtained from (14) are independent random variables. Therefore, if we fix $c(x, t)$, the average $\langle c(x, t + 1) \rangle$ over the dynamics between time t and $t + 1$ gives:

$$\begin{aligned} \langle c(x, t + 1) \rangle &= 1 - \left[1 - \int d\alpha \rho(\alpha) c(x - \alpha, t) \right]^2, \end{aligned} \quad (19)$$

which, except for the $\langle \rangle$, is exactly (10). However, if we try to average over the whole history (i.e. over all the timesteps), we need to average terms quadratic in c on the right hand side of (19). This means $\langle c(x, t + 1) \rangle$ is not only related to $\langle c(x, t) \rangle$, but also to correlations like $\langle c(x, t) c(x', t) \rangle$, and this makes the problem very difficult for finite N . On the other hand, if we neglect these correlations (and one can argue that these correlations are small for large enough N) and replace $\langle c(x, t) c(x', t) \rangle$ with $\langle c(x, t) \rangle \langle c(x', t) \rangle$, then (19) reduces exactly to (10). So (10) can be thought as the mean-field (or large N) version of the microscopic model (14).

As the initial condition $c(x, 0)$ given by (17) is a step function, the mean field equation predicts a front moving at the minimum velocity $v_{\min}$ given by (11), (12).

3. Direct simulations

We have simulated the microscopic model (14) for several choices of the distribution $\rho(\alpha)$: the uniform distribution in the range $0 \leq \alpha \leq 1$

$$\rho_{\text{uni}}(\alpha) = \Theta(\alpha) \Theta(1 - \alpha), \quad (20)$$

Table 1
Values of $\gamma_{\min}$ and $v_{\min}$ for different models

Model	$\rho = \rho_{\text{uni}}$	$\rho = \rho_{\text{exp}}$	$\rho = \rho_{\text{disc}}$	Martian model
$\gamma_{\min}$	5.262 076...	0.626 635...	2.553 245...	8.133 004...
$v_{\min}$	0.815 172...	2.678 347...	0.810 710...	0.877 338...

the exponential distribution

$$\rho_{\text{exp}}(\alpha) = \Theta(\alpha)e^{-\alpha}, \quad (21)$$

and a discrete distribution

$$\rho_{\text{disc}}(\alpha) = 0.25 \delta(1 - \alpha) + 0.75 \delta(\alpha). \quad (22)$$

We have also simulated a generalization of the problem (Martian genetics) where each new individual at time $t + 1$ has *three* parents, so that (14) is replaced by the max over three terms, with the effect of mutations distributed according to (20).

The minimal value of the speed $v_{\min}$ and the corresponding decay rate $\gamma_{\min}$ of the deterministic front equations (10)–(12) for these four cases are given in Table 1.

For these four models, we have simulated (14) for $T = 10^7$ timesteps after a transient time of $T' = 10^6$ timesteps to eliminate the effect of initial conditions. For several choices of N , we have measured the speed as:

$$v_N = \frac{X(T + T') - X(T')}{T}. \quad (23)$$

Fig. 1 represents the difference between the mean-field speed $v_{\min}$ (given in Table 1) and the speed v_N measured in the simulation for several choices of N (16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048 and 4096).

We see in Fig. 1 that a single speed v_N is selected in the microscopic model. This speed is always lower than the speed $v_{\min}$ of the deterministic front equation, and the difference $v_{\min} - v_N$ seems to decay like $N^{-1/3}$ for all the variants of the model. The effective power law exponent seems however to decrease slowly as N increases.

In order to confirm the $N^{-1/3}$ decay of Fig. 1, we tried to increase N , but as in the direct simulation computer time scales like $N \times T$, it is very hard to make N much larger than 10^4 or 10^5 for a number $T = 10^7$ of timesteps.

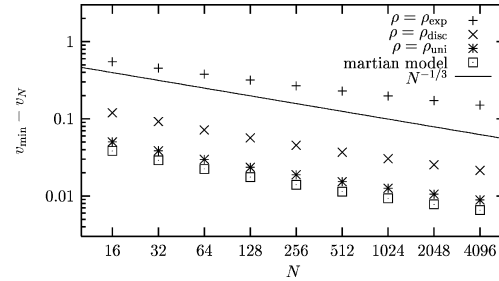


Fig. 1. Log-log plot of the difference between the speed $v_{\min}$ given by the mean-field theory and the speed v_N measured in Monte Carlo simulations for the four models as a function of the number N of particles. The straight line represents $N^{-1/3}$.

4. Highly parallel simulations

We are now going to describe a computational trick which we developed [11] for some particular distributions $\rho(\alpha)$ such as

$$\rho(\alpha) = p\delta(\alpha - 1) + (1 - p)\delta(\alpha), \quad (24)$$

allowing to simulate the microscopic model for a huge number of points (N up to 10^{16}). We restrict p to the range $0 < p < 0.5$ (to avoid one of the rare cases where (11) has no minimum for a finite $\gamma_{\min}$).

For the distribution (24), the $x_i(t)$ are always integers if they are so at $t = 0$ and the concentration $c(x, t)$ as defined by (17) is constant between any pair of consecutive integers. We call respectively $x_{\min}$ and $x_{\max}$ the positions of the leftmost and rightmost particles at time t and $w = x_{\max} - x_{\min} + 1$ the width of the front. We observed in our simulations that w is typically of order $\ln N$, so that even for N as huge as 10^{16} , the number of possible values of the $x_i(t)$ at a given time is very limited, and the whole information in $c(x, t)$ is carried by the number of particles at each integer x between $x_{\min}$ and $x_{\max}$.

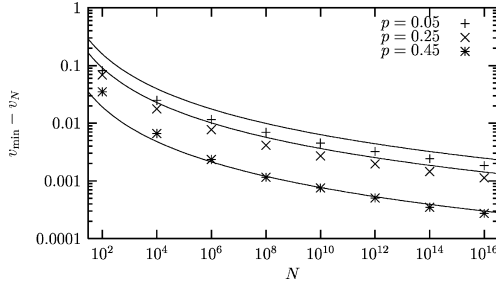


Fig. 2. Differences between the speed obtained by the mean-field theory and the speed measured in highly parallel simulations for different values of p as a function of the number N of particles. The lines represent for each value of p the prediction (27).

Knowing the function $c(x, t)$ at time t , we generate $c(x, t + 1)$. As at time t , all the $x_i(t)$ satisfy

$$x_{\min} \leq x_i(t) \leq x_{\max},$$

from (14) and (24) the positions $x_i(t + 1)$ will lie between $x_{\min}$ and $x_{\max} + 1$. The probability p_k that a given particle i will be located at position $x_{\min} + k$ at time $t + 1$ is

$$p_k = \langle c(x_{\min} + k - 1, t + 1) \rangle - \langle c(x_{\min} + k, t + 1) \rangle \quad (25)$$

with $\langle c(x, t + 1) \rangle$ given by (19). Obviously, $p_k \neq 0$ only for $0 \leq k \leq w$. The probability to have, for every k , n_k particles at location $x_{\min} + k$ at time $t + 1$ is given by

$$P(n_0, n_1, \dots, n_w) = \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_w!} p_0^{n_0} p_1^{n_1} \dots p_w^{n_w} \times \delta(N - n_0 - n_1 - \dots - n_w). \quad (26)$$

Using a random number generator for a binomial distribution [16], expression (26) allows us to generate the random numbers n_k directly [11].

We have measured from (23) the velocity v_N of the front for several choices of p (0.05, 0.25 and 0.45) and for N ranging from 100 to 10^{16} . Fig. 2 shows the results together with functions $A(p)/\ln^2 N$ given in the next section.

Clearly the apparent power law of Fig. 1 does not persist as N increases and the simulations indicate that $v_{\min} - v_N \sim \ln^{-2} N$ for large N . We are going to see

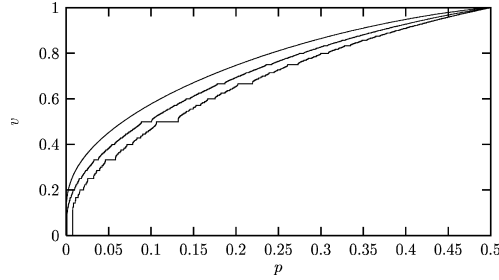


Fig. 3. Comparison of the velocity $v_{\min}$ valid for infinite N (top curve) with the velocity of the model with a cutoff $1/N$ for $N = 512$ (middle curve) and $N = 64$ (bottom curve) as a function of p .

in the next section that this logarithmic correction has a simple origin.

5. Effect of the cutoff

The two main differences between the traveling wave equation (10) and the microscopic model (14) is that the microscopic model is stochastic and that $c(x, t)$ varies by steps multiple of $1/N$ (see (17)).

The effect of the noise is hard to treat analytically and we have not succeeded yet to develop a satisfactory theory for it. The effect of discretization can be however understood rather simply: let us modify (10) by imposing, after each timestep, $c(x, t + 1) = 0$ if the value given by (10) is smaller than $1/N$ (in other words, we put a cutoff in the deterministic model to mimic the fact that $c(x, t)$ changes by steps of $1/N$). The velocity v'_N of this deterministic model with a cutoff can be easily measured as under these dynamics the front reaches rapidly a periodic regime [11]. As the cutoff goes to zero (i.e. as N goes to infinity), the speed v'_N converges to the mean-field speed $v_{\min}$ given by (11) and (12). In Fig. 3 we compare this speed for $N = 64$ and $N = 512$ with $v_{\min}$ for $\rho(\alpha)$ given by (24) with $0 \leq p \leq 0.5$. (One can note that the speed gets locked to rational values as p varies.)

The speed v'_N of this new deterministic model can be calculated analytically [11] for large N :

$$v'_N \simeq v_{\min} - \frac{\pi^2 \gamma_{\min}^2 v''(\gamma_{\min})}{2 \ln^2 N}, \quad (27)$$

where $v(\gamma)$ is given by (11). Comparing the prediction (27) with the results of the simulations in Fig. 2 gives a good, though not perfect, agreement. This indicates that the slow convergence of the velocity of the stochastic model is controlled by the effect of the cut-off.

6. Conclusion

We have seen that, for a very particular microscopic stochastic model (14), it was possible to simulate systems of 10^{16} particles. Our model is so particular that there is no hope that our trick could be extended to large classes of statistical physics problems. In our case, however, going to very large N enabled us to clearly discriminate between a power law and a logarithmic correction.

The fact that the microscopic scale selects a single velocity [11,17,18] with a logarithmic correction due to a cutoff seems to appear in several related problems (reaction-diffusion [3,19], kinetic theory [6]). Even model (14) can be introduced in many different contexts, like directed polymers in a random medium (where $x_i(t)$ would be the free energy of a polymer of length t ending at position i), or growth problems (where $x_i(t)$ would be the height variables). Still, we do not know yet whether the prediction (27) based simply on the effect of the cutoff gives the exact large- N behavior of the model (14), or whether a more sophisticated theory is needed to explain the results of Section 5.

Acknowledgements

We thank M. Droz for communicating us several relevant references.

References

- [1] R.A. Fisher, The wave of advance of advantageous genes, *Ann. Eugenics* 7 (1937) 355–369.
- [2] A. Kolmogorov, I. Petrovsky, N. Piscounov, Étude de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application à un problème biologique, *Bull. Univ. État Moscou A* 1 (1937) 1–25.
- [3] A.R. Kerstein, Computational study of propagating fronts in a lattice-gas model, *J. Statist. Phys.* 45 (1986) 921–931.
- [4] B. Derrida, H. Spohn, Polymers on disordered trees, spin glasses, and traveling waves, *J. Statist. Phys.* 51 (1988) 817–840.
- [5] J. Cook, B. Derrida, Lyapunov exponents of large, sparse random matrices and the problem of directed polymers with complex random weights, *J. Statist. Phys.* 61 (1990) 961–986.
- [6] R. van Zon, H. van Beijeren, C. Dellago, Largest Lyapunov exponent for many particle systems at low densities, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 2035–2038.
- [7] M. Bramson, Convergence of Solutions of the Kolmogorov Equation to Traveling Waves, No. 285 in *Memoirs of the American Mathematical Society* (AMS, 1983).
- [8] M.D. Bramson, Maximal displacement of branching Brownian motion, *Comm. Pure Appl. Math.* 31 (1978) 531–581.
- [9] E.B. Jacob, H. Brand, G. Dee, L. Kramer, I. Langer, Pattern propagation in nonlinear dissipative systems, *Physica D* 14 (1985) 348.
- [10] W. van Saarloos, Front propagation into unstable states. Linear versus nonlinear marginal stability and rate of convergence, *Phys. Rev. A* 39 (1989) 6367–6390.
- [11] E. Brunet, B. Derrida, Shift in the velocity of a front due to a cutoff, *Phys. Rev. E* 56 (1997) 2597–2604.
- [12] U. Ebert, W. van Saarloos, Universal algebraic relaxation of fronts propagating into an unstable state and implications for moving boundary approximations, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 1650–1653.
- [13] D.A. Kessler, H. Levine, D. Ridgway, L. Tsimring, Evolution on a smooth landscape, *J. Statist. Phys.* 87 (1997) 519–544.
- [14] H.P. Breuer, W. Huber, F. Petruccione, Fluctuation effects on wave propagation in a reaction-diffusion process, *Physica D* 73 (1994) 259–273.
- [15] H.P. Breuer, W. Huber, F. Petruccione, The macroscopic limit in a stochastic reaction-diffusion process, *Europhys. Lett.* 30 (1995) 69–74.
- [16] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press, 1994).
- [17] G.C. Paquette, L.-Y. Chen, N. Goldenfeld, Y. Oono, Structural stability and renormalization group for propagating fronts, *Phys. Rev. Lett.* 72 (1994).
- [18] J. Mai, I.M. Sokolov, V.N. Kuzovkov, A. Blumen, Front form and velocity in a one-dimensional autocatalytic $A + B \rightarrow 2A$ reaction, *Phys. Rev. E* 56 (1997) 4130–4134.
- [19] D.A. Kessler, Z. Ner, L.M. Sander, Front propagation: precursors, cutoffs and structural stability, *Phys. Rev. E* 58 (1998).



Physica A 279 (2000) 398–407

PHYSICA A

www.elsevier.com/locate/physa

Ground state energy of a non-integer number of particles with δ attractive interactions

Éric Brunet*, Bernard Derrida

*Laboratoire de Physique Statistique, École Normale Supérieure, 24, rue Lhomond,
75231 Paris Cédex 05, France*

Abstract

We show how to define and calculate the ground state energy of a system of quantum particles with δ attractive interactions when the number of particles n is non-integer. The question is relevant to obtain the probability distribution of the free energy of a directed polymer in a random medium. When one expands the ground state energy in powers of the interaction, all the coefficients of the perturbation series are polynomials in n , allowing to define the perturbation theory for non-integer n . We develop a procedure to calculate all the cumulants of the free energy of the directed polymer and we give explicit, although complicated, expressions of the first three cumulants. © 2000 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

PACS: 05.40.+j; 02.50.-r; 82.20.-w

It is our great pleasure to dedicate this work to our friend Joel L. Lebowitz on the occasion of his 70th birthday

1. Introduction

We consider a system of n identical quantum particles on a ring of size L with δ attractive interactions. If we call x_α (for $1 \leq \alpha \leq n$) the positions of the particles, the Hamiltonian of this system is

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha}^2} - \gamma \sum_{\alpha < \beta} \delta(x_{\alpha} - x_{\beta}), \quad (1)$$

where γ is the strength of the attractive ($\gamma \geq 0$) interactions. The main goal of the present work is to define and to calculate the ground state energy $E_0(n, L, \gamma)$ of (1) when n is not an integer (especially when n is small).

* Corresponding author.

E-mail addresses: eric.brunet@physique.ens.fr (É. Brunet), bernard.derrida@physique.ens.fr (B. Derrida)

This system of particles in one dimension with δ interactions has a long history in the theory of exactly soluble models [1–5]. It was first introduced to describe a Bose gas by Lieb and Liniger who calculated by Bethe ansatz the ground state energy and the excitations for repulsive interactions (that is for negative γ) in the thermodynamic limit (n and L go to infinity keeping n/L constant) [1].

The problem arose also in the theory of disordered systems: the calculation of the free energy of a directed polymer in a random medium in $1 + 1$ dimensions by the replica method reduces [6–11] to finding the ground state energy of (1): If $Z(x, t)$ is the partition function of a directed polymer joining the points $(0, 0)$ and (x, t) on a cylinder with periodic boundary conditions ($x + L \equiv x$)

$$Z(x, t) = \int_{(0,0)}^{(x,t)} \mathcal{D}y(s) \exp \left(- \int_0^t ds \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dy(s)}{ds} \right)^2 + \eta(y(s), s) \right] \right), \quad (2)$$

where the random medium is characterised by a Gaussian white noise $\eta(y, t)$

$$\langle \eta(y, t) \eta(y', t') \rangle = \gamma \delta(y - y') \delta(t - t'), \quad (3)$$

then the integer moments of $Z(x, t)$ are given for large t by [12]

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \left[\frac{\langle Z^n(x, t) \rangle}{\langle Z(x, t) \rangle^n} \right] = -E_0(n, L, \gamma), \quad (4)$$

where $\langle \rangle$ denotes the average over the random medium and $E_0(n, L, \gamma)$ is the ground state energy of (1). The knowledge of $E_0(n, L, \gamma)$ determines for large t the whole distribution of $\ln Z(x, t)$. For example, the variance of $\ln Z(x, t)$ is

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \ln^2 Z(x, t) \rangle - \langle \ln Z(x, t) \rangle^2}{t} = - \left. \frac{\partial^2 E_0(n, L, \gamma)}{\partial n^2} \right|_{n=0}. \quad (5)$$

Of course, to obtain this variance or other characteristics of the distribution of $\ln Z(x, t)$, one should be able to define and to calculate the ground state energy of (1) not only for integer n , but for *any value of* n [13–17]. Moreover, because of (3), the interactions in (1) must be attractive ($\gamma \geq 0$); So in contrast to the Bose gas initially studied [1], the interactions are attractive and the interesting limit is no longer the thermodynamic limit $n \rightarrow \infty$ but rather the limit $n \rightarrow 0$.

For integer n and $L = \infty$, the n particles form a bound state at energy [4,6]

$$E_0(n, \infty, \gamma) = -\gamma^2 \frac{n(n^2 - 1)}{24}. \quad (6)$$

Using this formula for non-integer n helped to understand several properties [12] of the distribution of $\ln Z(t)$ when L is infinite. There are, however, a number of difficulties with (6) for non-integer n , in particular a problem of convexity: $d^2 \ln \langle Z^n \rangle / dn^2$ should be positive for all n , and so (4,6) cannot be valid at least for negative n . We believe that these difficulties are due to the exchange of limit $t \rightarrow \infty$ and $L \rightarrow \infty$ and this is why we try in the present work to determine $E_0(n, L, \gamma)$ for finite L .

The paper is organised as follows: in Section 2, we recall the Bethe ansatz equations which give the ground state energy of (1) for an (integer) number n of particles and

we write the integral equation (13) which is a way of solving the coupled non-linear equations of the Bethe ansatz. The main advantage of this integral equation is that both the strength γ of the interactions and the number n of particles appear as continuous parameters. In Section 3, we solve (13) perturbatively in c (where $c = \gamma L/2$) for arbitrary n . We notice that the coefficients in the small c expansion of $E_0(n, L, \gamma)$ are all polynomials in n , thus allowing to define the expansion even for non-integer n . In Section 4, we show how to generate a small n expansion of the solution of (13). We give explicit expressions up to order n^3 of $E_0(n, L, \gamma)$ and we notice that the coefficients of the small n expansion have in general a zero radius of convergence in c .

2. The Bethe ansatz equations

The Bethe ansatz [18] consists in looking in the region $0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_n \leq L$ for a ground state wave function $\Psi(x_1, \dots, x_n)$ of the form

$$\Psi(x_1, \dots, x_n) = \sum_P A_P e^{2(q_1 x_{P(1)} + \dots + q_n x_{P(n)})/L}, \quad (7)$$

where the sum in (7) runs over all the permutations P of $\{1, \dots, n\}$. The value of Ψ in other regions can be deduced from (7) by symmetries. One can show [3–5] that (7) is an eigenstate of (1) at energy

$$E(n, L, \gamma) = -\frac{2}{L^2} \sum_{1 \leq \alpha \leq n} q_\alpha^2, \quad (8)$$

if the $\{q_\alpha\}$ are solutions of the n coupled equations

$$e^{2q_\alpha} = \prod_{\beta \neq \alpha} \frac{q_\alpha - q_\beta + c}{q_\alpha - q_\beta - c}, \quad (9)$$

where

$$c = \frac{\gamma L}{2}. \quad (10)$$

(A derivation of (9) can be found in Ref. [3]. Note that ik_j and c in Ref. [3] become here, respectively, $(2/L)q_j$ and $-\gamma$; the c in Ref. [3] and our c defined in (10) are thus different.) Moreover, for $\gamma \neq 0$, all the q_α are distinct.

There are a priori many solutions of (9). We look for the ground state, that is the solution $\{q_\alpha\}$ for which (8) is minimal. When $c = 0$, the problem reduces to n non-interacting particles $\{q_\alpha\} = \{0\}$ (we have periodic boundary conditions). Because the ground state solution is not degenerate, the solution $\{q_\alpha\}$ of (9) must have the symmetry $\{q_\alpha\} = \{-q_\alpha\}$, depend continuously on c , and vanish as $c \rightarrow 0$.

Let us introduce the following function of $\{q_\alpha\}$:

$$B(u) = \frac{1}{n} e^{c(u^2-1)/4} \sum_{q_\alpha} \rho(q_\alpha) e^{q_\alpha(u-1)}, \quad (11)$$

where the parameters $\rho(q_\alpha)$ are defined by

$$\rho(q_\alpha) = \prod_{q_\beta \neq q_\alpha} \frac{q_\alpha - q_\beta + c}{q_\alpha - q_\beta} . \quad (12)$$

The function $B(u)$ is a rather complicated (but convenient to use) symmetric function of the ground state solution $\{q_\alpha\}$ of (9). As shown in Appendix A, it satisfies the integral equation

$$B(1+u) - B(1-u) = nc \int_0^u e^{-c(v^2-uv)/2} B(1-v) B(1+u-v) dv , \quad (13)$$

and the following two conditions:

$$B(1) = 1 , \quad (14)$$

$$B(u) = B(-u) . \quad (15)$$

Moreover, the energy (8) can be deduced from $B(u)$ by

$$E_0(n, L, \gamma) = \frac{2}{L^2} \left[\frac{n^3 c^2}{6} + \frac{nc^2}{12} + \frac{nc}{2} - nB''(1) \right] . \quad (16)$$

The derivation of (13)–(16) is given in Appendix A. How these relations lead to small c or small n expansions is explained in Sections 3 and 4.

3. Expansion in powers of c

One could try to solve Eq. (9) perturbatively in c but the approach turns out to be quickly complicated [19]. Instead we are going to see that the integral equation (13) is very convenient to obtain $E_0(n, L, \gamma)$ for small c .

It is known [5] (and easy to check from (9)) that the q_α scale like $\sqrt{c}$ for small c . Therefore, each coefficient $B_i(u)$ of the small c expansion of $B(u)$ defined by (11) is a polynomial in u .

$$B(u) = B_0(u) + cB_1(u) + c^2B_2(u) + \dots . \quad (17)$$

Moreover, conditions (14) and (15) impose that all the $B_i(u)$ are even, that $B_0(1) = 1$ and $B_i(1) = 0$ for any $i \geq 1$.

At zeroth order in c , we find, using (13):

$$B_0(1+u) - B_0(1-u) = 0 . \quad (18)$$

Thus, $B_0(u)$ and $B_0(1+u)$ are both even functions of u . As $B_0(u)$ is a polynomial and $B_0(1) = 1$, the only solution is

$$B_0(u) = 1 . \quad (19)$$

We put this back into (13) and get at first order in c

$$B_1(1+u) - B_1(1-u) = nu . \quad (20)$$

Again, using the fact that $B_1(u)$ is an even polynomial such that $B_1(1) = 0$, the only possible solution is

$$B_1(u) = \frac{n}{4}(u^2 - 1). \quad (21)$$

It is easy to see from (13) that at any order in c , we have to solve

$$B_i(1+u) - B_i(1-u) = \text{“some polynomial odd in } u\text{”}, \quad (22)$$

and that there is a unique even polynomial solution satisfying $B_i(1) = 0$. One can generate as many $B_i(u)$ as needed to obtain $B(u)$ up to any desired order in c .

$$B(u) = 1 + \frac{cn(-1+u^2)}{4} + \frac{c^2n(1+2n)(-1+u^2)^2}{96} + O(c^3). \quad (23)$$

Relation (16) then gives the energy. Up to the fourth order in c , we find

$$\frac{L^2}{2}E_0(n, L, \gamma) = -n(n-1) \left(\frac{c}{2} + \frac{c^2}{12} + \frac{n}{180}c^3 + \left(\frac{n^2}{1512} - \frac{n}{1260} \right) c^4 + \dots \right). \quad (24)$$

4. Solution for small n

It is clear from Section 3 that if we stop the small c expansion of $B(u)$ at a given order, $B(u)$ and $E_0(n, L, \gamma)$ are polynomials in n . This allows to define the small c expansion of $B(u)$ or of $E_0(n, L, \gamma)$ for an arbitrary value of n .

Moreover, we can write a small n expansion of $B(u)$ by collecting all the terms proportional to n^k in the small c expansion of $B(u)$ and calling the series obtained $b_k(u)$. Then,

$$B(u) = 1 + nb_1(u) + n^2b_2(u) + \dots. \quad (25)$$

Conditions (14) and (15) impose that $b_k(u) = b_k(-u)$ and $b_k(1) = 0$ for all $k \geq 1$.

We are now going to describe a procedure which leads to a recursion on the $b_k(u)$ and allows to write them not only as power series in c but as explicit functions of c and u . If we insert (25) into (13), we get at first order in n

$$b_1(1+u) - b_1(1-u) = c \int_0^u e^{-c(v^2-uv)/2} dv. \quad (26)$$

It can be checked that a solution of (26) compatible with the conditions $b_1(u) = b_1(-u)$ and $b_1(1) = 0$ is

$$b_1(u) = \sqrt{c} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\cosh(\lambda u \sqrt{c}/2) - \cosh(\lambda \sqrt{c}/2)}{\sinh(\lambda \sqrt{c}/2)} e^{-\lambda^2/2}. \quad (27)$$

There are, however, other solutions to the difference equation (26): one could add to (27) an arbitrary function $F(u, c)$ even and periodic in u of period 2 and vanishing at $u = 1$. If we require that each term in the small c expansion of $b_1(u)$ is polynomial in u (as justified in Section 3), we see that *all the terms of the small c expansion*

of $F(u, c)$ must be identically zero. For example $F(u, c) = \exp(-c^{-1/4})(\cos(\pi u) + 1)$ is an acceptable function. This already shows that $b_1(u)$ given by (27) has indeed for small c expansion the series obtained by collecting all the terms proportional to n in the small c expansion of Section 3.

If the solution $b_1(u)$ (27) had a non-zero radius of convergence in c , it would be natural to choose the only $b_1(u)$ which is analytic near $c = 0$ by taking $F(u, c) = 0$. Unfortunately, this is not the case: by making the change of variable $\lambda^2 = \mu$, expression (27) appears as the Borel sum of a divergent series [20].

We found no conclusive reasons why (27) is the solution of (26) we should select. However, one can notice that, when n is an integer, $B(u)$ is analytic in u and goes to zero when $u \rightarrow \pm i\infty$ (see (11)). Here, the $b_1(u)$ given by (27) grows like $\ln|u|$ when $u \rightarrow \pm i\infty$. Adding a non-zero periodic $F(u, c)$ would either lead to an exponential growth in the imaginary direction or introduce singularities in u . So (27) is the solution of (26), analytic in the whole u plane, which has the slowest growth in the imaginary direction.

The same difficulty of selecting the right solution appears at each order in the expansion in powers of n . We are now going to explain the procedure we have used to select one solution. If we insert (25) into (13), we have to solve at any order k in the small n expansion

$$b_k(1+u) - b_k(1-u) = \phi_k(u), \quad (28)$$

where $\phi_k(u)$ is a function odd in u which can be calculated from the previous orders

$$\phi_k(u) = c \sum_{i=0}^{k-1} \int_0^u e^{-c(v^2 - uv)/2} b_i(1-v) b_{k-i-1}(1+u-v) dv. \quad (29)$$

(For consistency, we use $b_0(u) = 1$.) It can be checked that a solution to (28) is

$$b_k(u) = \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\cosh(\lambda u \sqrt{c}/2) - \cosh(\lambda \sqrt{c}/2)}{\sinh(\lambda \sqrt{c}/2)} a_k(\lambda), \quad (30)$$

where $a_k(\lambda)$ is given by

$$a_k(\lambda) = \frac{1}{2i\pi} \int_0^{+\infty} du \sin\left(\frac{\lambda u}{2}\right) \phi_k\left(\frac{iu}{\sqrt{c}}\right). \quad (31)$$

Indeed, the verification is a simple matter of algebra, and we convinced ourselves that $b_k(u) \sim \ln^k|u|$ and $\phi_k(u) \sim \ln^{k-1}|u|/u$ as $u \rightarrow \pm i\infty$, and that $a_k(\lambda) \sim \ln^{k-1}|\lambda|$ for $\lambda \rightarrow 0$ and $a_k(\lambda) \sim \exp(-\lambda^2(k+1)/4k)$ for $\lambda \rightarrow \infty$, so that all the integrals in (30), (31) converge.

As for $b_1(u)$, one could add to the $b_k(u)$ given by (30,31) an arbitrary function $F_k(u, c)$, even and periodic in u of period 2 to obtain the general solution of (28). However, to be consistent with the small c expansion of Section 3, the small c expansion of $F_k(u, c)$ should be identically zero. Moreover, if we want the solution of (28) to be analytic in the whole u plane and not to grow too fast when $u \rightarrow \pm i\infty$, we must take $F_k(u, c) = 0$.

Expression (27) for $b_1(u)$ is in fact a particular case of the procedure (30, 31); when applied to (26), it gives indeed $a_1(\lambda) = \sqrt{c} \exp(-\lambda^2/2)$.

At second order in the small n expansion, we find for $\lambda > 0$

$$a_2(\lambda) = c e^{-\lambda^2/2} \left[\int_0^\lambda d\mu e^{-\mu^2/2} \frac{2 \cosh(\lambda\mu/2) - 2}{\tanh(\mu\sqrt{c}/2)} + \int_\lambda^{+\infty} d\mu e^{-(\mu^2/2)} \frac{e^{-(\lambda\mu/2)} - 2}{\tanh(\mu\sqrt{c}/2)} \right]. \quad (32)$$

The expressions of $b_3(u)$ or $a_3(u)$ would be much longer to write.

Using relation (16) and expressions (27) and (32) of $b_1(u)$ and $a_2(u)$, we can give an expression of the energy $E_0(n, L, \gamma)$ up to the order n^3 :

$$\begin{aligned} \frac{L^2}{2} E_0(n, L, \gamma) = & n \left(\frac{c}{2} + \frac{c^2}{12} \right) - n^2 \frac{c^{3/2}}{4} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda^2}{\tanh(\lambda\sqrt{c}/2)} e^{-\lambda^2/2} + n^3 \frac{c^2}{6} \\ & - n^3 \frac{c^2}{4} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda^2 e^{-\lambda^2/2}}{\tanh(\lambda\sqrt{c}/2)} \left[\int_0^\lambda d\mu e^{-\mu^2/2} \frac{2 \cosh(\lambda\mu/2) - 2}{\tanh(\mu\sqrt{c}/2)} \right. \\ & \left. + \int_\lambda^{+\infty} d\mu e^{-\mu^2/2} \frac{e^{-(\lambda\mu/2)} - 2}{\tanh(\mu\sqrt{c}/2)} \right]. \quad (33) \end{aligned}$$

As explained in the introduction, this small n expansion of $E_0(n, L, \gamma)$ gives the cumulants of the free energy in the directed polymer problem. Of course, if we expand (33) in powers of c , we recover (24).

5. Conclusion

In this work, we have developed a method allowing to calculate perturbatively the ground state energy of (1) for a non-integer number n of particles. We first generated for integer n a perturbation series in powers of the interaction c . Each term of this series is polynomial in n , allowing to define a small c expansion of the energy for non-integer n . This series, at least for small n , has a zero radius of convergence, in contrast to integer n for which the radius of convergence of the perturbation theory is non-zero [21]. (For $n = 2$, the closest singularities of $E_0(2, L, \gamma)$ in the c plane lie at $c \simeq 3.30 \pm i 4.12$.)

We believe that the fact that each term in the perturbation theory is polynomial in n is generic and would be true for an arbitrary pair interaction and in any dimension. As the link (4) to directed polymers is valid in any dimension, it would be useful and interesting to try to recover our results by doing a direct perturbation theory of the Hamiltonian instead of our Bethe ansatz approach (which is limited to $1+1$ dimensions and to a δ potential) in order to see whether the calculations could be extended to higher dimensions.

Our calculation of the ground state energy for non-integer n is based on the integral equation (13) and conditions (14) and (15). When we tried to solve the problem for small n , at each order we had to select a particular solution of a difference equation.

We did not find a conclusive reason to justify the solution we selected, apart from some analyticity properties and growth criterion in the complex plane of the variable u . It would certainly be interesting to justify our choice (33) by calculating the second and the third cumulants of $\ln Z$ directly (and not only perturbatively to all orders in c).

In our small n expansion of Section 4, the terms become quickly very complicated. There is, however, a regime, which corresponds to the large c limit of recursion (28), (30), (31) where one can handle the general term in the small n expansion [19]. This allows to calculate the whole distribution of $\ln(Z(x,t))/t$ when t is very large and $(1/t)\ln(Z(x,t)/\langle Z(x,t) \rangle)$ of order $1/L$. One can then recover [19] the same large deviation function as found for the asymmetric exclusion process [22–26], as expected since the directed polymer problem in $1+1$ dimensions and the asymmetric exclusion process are both representatives of the KPZ equation [27,12,28] in dimension 1. This strengthens the conjecture that the solutions to the difference equations we selected in Section 4 give indeed the right non-integer moments of the partition function.

From the point of view of the theory of disordered systems, our results give one of the very few examples for which the distribution of Z can be calculated exactly. In particular, they could provide a good test of the replica approach and of other variational methods [7,9–11].

A simple and interesting phenomenon visible in the present work (which should be generic of all kinds of disordered systems with Gaussian disorder) is that the weak disorder expansion (here small c expansion) of non-integer moments of the partition function has a zero radius of convergence whereas integer moments have a non-zero radius of convergence. This is already visible in the trivial example of a single Ising spin $\sigma = \pm 1$ in a random Gaussian field h ; the free energy at temperature T is $\ln(2 \cosh(h/T))$, and it is easy to check that all non-integer moments of the partition function have a zero radius of convergence in $1/T$.

Acknowledgements

We thank François David, Michel Gaudin, Vincent Pasquier, Leonid Pastur, Herbert Spohn and André Voros for useful discussions.

Appendix A. Derivation of (13)–(16)

Let us first establish some useful properties of the numbers $\rho(q_\alpha)$ defined by (12). If the q_α are the n roots of the polynomial $P(X)$ defined as

$$P(X) = \prod_{q_\alpha} (X - q_\alpha), \quad (\text{A.1})$$

it is easy to see that the $\rho(q_\alpha)$ defined in (12) satisfy

$$\frac{P(X+c)}{P(X)} = 1 + c \sum_{q_\alpha} \frac{\rho(q_\alpha)}{X - q_\alpha}. \quad (\text{A.2})$$

(The two sides have the same poles with the same residues and coincide at $X \rightarrow \infty$.)

Expanding the right-hand side of (A.2) for large X , we get

$$\frac{P(X+c)}{P(X)} = 1 + c \sum_{q_\alpha} \frac{\rho(q_\alpha)}{X} \left(1 + \frac{q_\alpha}{X} + \frac{q_\alpha^2}{X^2} \right) + O\left(\frac{1}{X^4}\right). \quad (\text{A.3})$$

On the other hand, using (8, A.1) and the symmetry $\{q_\alpha\} = \{-q_\alpha\}$ we have

$$P(X) = X^n + \frac{L^2}{4} E_0(n, L, \gamma) X^{n-2} + O(X^{n-4}), \quad (\text{A.4})$$

so that

$$\frac{P(X+c)}{P(X)} = 1 + \frac{nc}{X} + \frac{c^2 \binom{n}{2}}{X^2} + \frac{c^3 \binom{n}{3} - c E_0(n, L, \gamma) L^2 / 2}{X^3} + O\left(\frac{1}{X^4}\right). \quad (\text{A.5})$$

Comparing (A.3) and (A.5), we get the relations

$$\sum_{q_\alpha} \rho(q_\alpha) = n, \quad (\text{A.6})$$

$$\sum_{q_\alpha} q_\alpha \rho(q_\alpha) = c \binom{n}{2}, \quad (\text{A.7})$$

$$\sum_{q_\alpha} q_\alpha^2 \rho(q_\alpha) = c^2 \binom{n}{3} - \frac{E_0(n, L, \gamma) L^2}{2}. \quad (\text{A.8})$$

Moreover, by letting $X = \pm q_\beta - c$ in (A.2) we get for any q_β root of $P(X)$

$$\frac{1}{c} = \sum_{q_\alpha} \frac{\rho(q_\alpha)}{q_\alpha - q_\beta + c} = \sum_{q_\alpha} \frac{\rho(q_\alpha)}{q_\alpha + q_\beta + c}. \quad (\text{A.9})$$

Lastly, using the symmetry $\{q_\alpha\} = \{-q_\alpha\}$ and definition (12), the Bethe ansatz equations (9) reduce to

$$e^{q_\alpha} \rho(-q_\alpha) - e^{-q_\alpha} \rho(q_\alpha) = 0. \quad (\text{A.10})$$

From definition (11) of $B(u)$ and properties (A.6)–(A.10), it is straightforward to establish (13)–(16): the integral equation (13) is a direct consequence of (11) and (A.9). Properties (14), (15) follow from (11), (A.6) and (11), (A.10), respectively. Lastly (16) is a consequence of (11) and (A.6)–(A.8).

References

- [1] E.H. Lieb, W. Liniger, *Phys. Rev.* 130 (1963) 1605.
- [2] C.N. Yang, C.P. Yang, *J. Math. Phys.* 10 (1969) 1115.
- [3] M. Jimbo, T. Miwa, Y. Mōri, M. Sato, *Physica* 1D (1980) 80.
- [4] H.B. Thacker, *Rev. Mod. Phys.* 53 (1981) 253.
- [5] M. Gaudin, *La Fonction d'Onde de Bethe*, Masson, Paris, 1983.
- [6] M. Kardar, *Nucl. Phys. B* 290 [FS20] (1987) 582.
- [7] M. Mézard, G. Parisi, *J. Phys. I France* 1 (1991) 809.
- [8] J.P. Bouchaud, H. Orland, *J. Stat. Phys.* 61 (1990) 877.

- [9] Y.Y. Goldschmidt, Nucl. Phys. B 393 (1993) 507.
- [10] T. Garel, H. Orland, Phys. Rev. B 55 (1997) 226.
- [11] D.B. Saakian, T.M. Nieuwenhuizen, J. Phys. I France 7 (1997) 1513.
- [12] T. Halpin-Healy, Y.-C. Zhang, Phys. Rep. 254 (1995) 215.
- [13] J. Krug, Adv. Phys. 46 (1997) 139.
- [14] T. Halpin-Healy, Phys. Rev. A 44 (1991) R3415.
- [15] J. Krug, P. Meakin, T. Halpin-Healy, Phys. Rev. A 45 (1992) 638.
- [16] J.M. Kim, M.A. Moore, A.J. Bray, Phys. Rev. A 44 (1991) 2345.
- [17] Y.-C. Zhang, J. Stat. Phys. 57 (1989) 1123.
- [18] H.A. Bethe, Z. Phys. 71 (1931) 205.
- [19] É. Brunet, B. Derrida, submitted to Phys. Rev. E.
- [20] B. Candelpergher, M.A. Coppo, E. Delabaere, Ens. Math. 1 (1997).
- [21] T. Kato, Perturbation Theory for Linear Operators, Springer, Berlin, 1966.
- [22] B. Derrida, J.L. Lebowitz, Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 209.
- [23] B. Derrida, C. Appert, J. Stat. Phys. 94 (1999) 1.
- [24] D. Kim, Phys. Rev. E 52 (1995) 3512.
- [25] D.-S. Lee, D. Kim, Phys. Rev. E 59 (1999) 6476.
- [26] C. Appert, Phys. Rev. E, in press.
- [27] M. Kardar, G. Parisi, Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 889.
- [28] A.L. Barabási, H.E. Stanley, Fractal Concepts in Surface Growth, CUP, Cambridge, 1995.

Probability distribution of the free energy of a directed polymer in a random medium

Éric Brunet* and Bernard Derrida†

Laboratoire de Physique Statistique, École Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cédex 05, France

(Received 10 December 1999)

We calculate exactly the first cumulants of the free energy of a directed polymer in a random medium for the geometry of a cylinder. By using the fact that the n th moment $\langle Z^n \rangle$ of the partition function is given by the ground-state energy of a quantum problem of n interacting particles on a ring of length L , we write an integral equation allowing to expand these moments in powers of the strength of the disorder γ or in powers of n . For n small and $n \sim (L\gamma)^{-1/2}$, the moments $\langle Z^n \rangle$ take a scaling form which allows us to describe all the fluctuations of order $1/L$ of the free energy per unit length of the directed polymer. The distribution of these fluctuations is the same as the one found recently in the asymmetric exclusion process, indicating that it is characteristic of all the systems described by the Kardar-Parisi-Zhang equation in $1+1$ dimensions.

PACS number(s): 64.60.Cn, 05.30.-d, 05.70.-a

I. INTRODUCTION

Directed polymers in a random medium is one of the simplest systems for which the effect of strong disorder can be studied [1–3]. At the mean-field level, it possesses a low-temperature phase, with a broken symmetry of replica [4,5] similar to mean-field spin glasses [6]. The problem is, however, much better understood than spin glasses; in particular, one can write [4,5] closed expressions of the mean-field free energy and one can predict the existence [7] of phase transitions in all dimensions $d+1 > 2+1$. It is also an interesting system from the point of view of nonequilibrium phenomena: through the Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) equation [8,9], it is related to ballistic growth models and, in $1+1$ dimensions, to the asymmetric simple exclusion process (ASEP) [3,9].

In the theory of disordered systems, the replica approach plays a very special role. On the one hand, it is one of the most powerful theoretical tools and often the only possible approach to study some strongly disordered systems. On the other hand, it is difficult to tell in advance whether the predictions of the replica approach are correct or not. When it does not work, one can always try to break the symmetry of the replica [6]: this usually makes the calculations much more complicated without being certain that the results become correct. In the replica approach, the calculation usually starts with an integer number n of the replica. Then, as the limit of physical interest is the limit $n \rightarrow 0$, one has to extend to noninteger n results obtained for integer n . This is in fact the big difficulty of the replica approach, so it is useful to look at simple examples for which the n dependence can be studied in detail.

This is one of the motivations of the present work, where we show how to calculate integer and noninteger moments $\langle Z^n \rangle$ of the partition function Z of a directed polymer in $1+1$ dimensions. The geometry we consider is a cylinder infinite in the t direction and periodic, of size L , in the x direction (i.e., $x+L \equiv x$). The partition function $Z(x,t)$ of a di-

rected polymer joining the points $(0,0)$ and (x,t) on this cylinder is given by the path integral

$$Z(x,t) = \int_{(0,0)}^{(x,t)} \mathcal{D}y(s) \exp \left(- \int_0^t ds \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dy(s)}{ds} \right)^2 + \eta(y(s),s) \right] \right), \quad (1)$$

where the random medium is characterized by a Gaussian white noise $\eta(x,t)$,

$$\langle \eta(x,t) \eta(x',t') \rangle = \gamma \delta(x-x') \delta(t-t'). \quad (2)$$

One of the main goals of the present work is to calculate the cumulants $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \ln^k Z(t) \rangle_c / t$ of the free energy per unit length of the directed polymer. These cumulants are the coefficients of the small- n expansion of $E(n,L,\gamma)$ defined as

$$E(n,L,\gamma) = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \left[\frac{\langle Z^n(x,t) \rangle}{\langle Z(x,t) \rangle^n} \right]. \quad (3)$$

This $E(n,L,\gamma)$ was calculated exactly by Kardar [10] for integer n and $L = \infty$. His closed expression $E(n,\infty,\gamma) = -n(n^2-1)\gamma^2/24$ cannot, however, be continued to all values of n , in particular to negative n , as it would violate the fact that $\partial^2 E(n,L,\gamma) / \partial n^2$ is negative. Therefore, one does not know the range of validity of this expression.

The second motivation of the present work is to test the universality class of the KPZ equation. The problem (1) of a directed polymer in a random medium is described by the KPZ equation as several other problems such as growing interfaces or exclusion processes [3]. For certain models of this class, the asymmetric exclusion processes, the distribution of the total current Y_t integrated over time t , has been calculated exactly [11–15] in the long-time limit. For large t , the generating function of this integrated current Y_t on a ring of L sites takes the form [11,12]

$$\ln \langle e^{\alpha Y_t} \rangle \sim \Lambda_{\max}(\alpha) t, \quad (4)$$

*Electronic address: Eric.Brunet@physique.ens.fr

†Electronic address: Bernard.Derrida@physique.ens.fr

and it was shown [11–14], when L is large and when the parameter α in Eq. (4) is of order $L^{-3/2}$ that $\Lambda_{\max}(\alpha)$ takes the following scaling form:

$$\Lambda_{\max}(\alpha) - \alpha K_1 = K_2 G(\alpha K_3), \quad (5)$$

where K_1 , K_2 , and K_3 are three constants which depend on the system size L , the density of particles, and the asymmetry.

The interesting aspect of Eq. (5) is that the function $G(\beta)$ is universal [12,14,16] in the sense that it does not depend on any of the microscopic parameters which define the model. It is given (in a parametric form) by

$$\beta = - \sum_{p=1}^{+\infty} \frac{\epsilon^p}{p^{3/2}}, \quad (6)$$

$$G(\beta) = - \sum_{p=1}^{+\infty} \frac{\epsilon^p}{p^{5/2}}. \quad (7)$$

In the correspondence [3] between the directed polymer problem and the asymmetric exclusion process through the KPZ equation, the role played by $\ln(Z(t))$ is the ratio Y_t/L . Comparing $\langle \exp(\alpha Y_t) \rangle$ and $\langle Z^n(t) \rangle$ in Eqs. (3) and (4), we see that n corresponds to αL and $E(n, L, \gamma)$ to $\Lambda_{\max}(\alpha)$. If the function $G(\beta)$ is characteristic of systems described by the KPZ equation, we expect in the scaling regime (large L and $n \sim L^{-1/2}$) a relation similar to Eq. (5) between $E(n, L, \gamma)$ [defined by Eq. (3)] and n . This is indeed one of the main results of the present work: when L is large and $n \sim L^{-1/2}$, we find

$$E(n, L, \gamma) = \frac{n\gamma^2}{24} - \frac{\sqrt{\gamma}}{2\sqrt{2\pi L}^{3/2}} G(-n\sqrt{2\pi L}\gamma). \quad (8)$$

It is clear that in order to establish this relation we have to calculate noninteger moments of the partition function.

The paper is organized as follows. In Sec. II, we recall how the replica approach of Eq. (1) can be formulated as a quantum problem with n particles on a ring and how this problem can be solved by the Bethe ansatz when the noise is δ correlated as in Eq. (2). In Sec. III, we write an integral equation (26) which, together with some symmetry conditions (27) and (28), allows us to solve the Bethe equations of Sec. II. The main advantage of Eq. (26) is that the strength c of the disorder (where $c = \gamma L/2$) and the number of the replica appear as continuous parameters. We show how expansions in powers of c or in powers of the number n of replica can be obtained from this integral equation. In the expansion of the energy $E(n, L, \gamma)$ in powers of c , all the coefficients are polynomials in n . This allows us to define $E(n, L, \gamma)$ for a noninteger n at least perturbatively in c . At the end of Sec. III, we show how to generate a small- n expansion which solves the integral equation (26). We also give explicit expressions up to order n^3 and we notice that in this small- n expansion of the energy, we have to deal with coefficients that are functions of c with a zero radius of convergence. The content of Secs. II and III is essentially a recall of a method developed in our previous work [17]. In Sec. IV, we show that the recursion of Sec. III, which generates all the terms of

the small- n expansion, simplifies greatly in the scaling regime (c large and $n \sim c^{-1/2}$), allowing us to calculate all the terms of the expansion and to establish Eq. (8).

II. A QUANTUM SYSTEM OF n PARTICLES WITH δ INTERACTIONS

Let us start with a case slightly more general than Eq. (2) where the noise $\eta(x, t)$ in Eq. (1) is a Gaussian noise δ -correlated in time but with some given correlation v in space,

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = \gamma v(x - x') \delta(t - t'). \quad (9)$$

If we consider the correlation function $\langle Z(x_1, t) Z(x_2, t) \cdots Z(x_n, t) \rangle$ of the partition function $Z(x, t)$ at points $x_1, x_2, \dots, x_n$, one can check [3] from Eqs. (1) and (9) that it satisfies

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle Z(x_1, t) Z(x_2, t) \cdots Z(x_n, t) \rangle \\ = - \tilde{\mathcal{H}} \langle Z(x_1, t) Z(x_2, t) \cdots Z(x_n, t) \rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

where the Hamiltonian $\tilde{\mathcal{H}}$ is given by

$$\tilde{\mathcal{H}} = - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha}^2} - \gamma \sum_{\alpha < \beta} v(x_{\alpha} - x_{\beta}) - \gamma \frac{n}{2} v(0), \quad (11)$$

and where, because of the cylinder geometry in the directed polymer problem, we have $x_{\alpha} \equiv x_{\alpha} + L$ for $1 \leq \alpha \leq n$.

This implies that in the long-time limit,

$$\langle Z(x_1, t) Z(x_2, t) \cdots Z(x_n, t) \rangle \sim e^{-t\tilde{E}(n, L, \gamma)}, \quad (12)$$

where $\tilde{E}(n, L, \gamma)$ is the ground-state energy of Eq. (11).

If one takes the limit $v(x - x') \rightarrow \delta(x - x')$, the energy $\tilde{E}(n, L, \gamma)$ becomes infinite because of the constant part $nv(0)/2$ in Eq. (11). This divergence disappears, however, if we consider the ratio $\langle Z(x_1, t) Z(x_2, t) \cdots Z(x_n, t) \rangle / \Pi_{\alpha} \langle Z(x_{\alpha}, t) \rangle$, and one can see that in the long-time limit,

$$\frac{\langle Z(x_1, t) Z(x_2, t) \cdots Z(x_n, t) \rangle}{\langle Z(x_1, t) \rangle \langle Z(x_2, t) \rangle \cdots \langle Z(x_n, t) \rangle} \sim e^{-tE(n, L, \gamma)}, \quad (13)$$

where $E(n, L, \gamma)$ is the ground-state energy of the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x_{\alpha}^2} - \gamma \sum_{\alpha < \beta} \delta(x_{\alpha} - x_{\beta}), \quad (14)$$

where the positions x_{α} of the n particles are on a ring of length L .

Lieb and Liniger have shown that the Bethe ansatz allows us to calculate the ground-state energy $E(n, L, \gamma)$ of this one-dimensional quantum Hamiltonian exactly [18–24]. The Bethe ansatz consists in looking for a ground-state wave function $\Psi(x_1, \dots, x_n)$ of Eq. (14) of the form

$$\Psi(x_1, \dots, x_n) = \sum_p a_p e^{2(q_1 x_{p(1)} + \cdots + q_n x_{p(n)})/L} \quad (15)$$

in the region $0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_n \leq L$. The sum in Eq. (15) runs over all the permutations P of $\{1, \dots, n\}$ and the value of Ψ in other regions can be deduced from Eq. (15) by symmetries. One can show [22–24,17] that Eq. (15) is the ground-state wave function of Eq. (14) at energy

$$E(n, L, \gamma) = -\frac{2}{L^2} \sum_{1 \leq \alpha \leq n} q_\alpha^2, \quad (16)$$

if the q_α are the solutions of the n coupled equations

$$e^{2q_\alpha} = \prod_{\beta \neq \alpha} \frac{q_\alpha - q_\beta + c}{q_\alpha - q_\beta - c}, \quad (17)$$

obtained by continuity from the solution $\{q_\alpha\} = \{0\}$ at $c=0$, where

$$c = \frac{\gamma L}{2}. \quad (18)$$

Moreover, the q_α are all different and the ground state is symmetric ($\{q_\alpha\} = \{-q_\alpha\}$). [See, for instance, [22]. Note that ik_j and c in [22] are here $(2/L)q_j$ and $-\gamma$; so our c defined by Eq. (18) and the c in [22] are different.]

If we introduce the polynomial $P(X)$,

$$P(X) = \prod_{q_\alpha} (X - q_\alpha), \quad (19)$$

the system of equations (17) becomes

$$e^{q_\alpha} P(q_\alpha - c) + e^{-q_\alpha} P(q_\alpha + c) = 0 \quad (20)$$

for any $1 \leq \alpha \leq n$, and we have from the symmetry of the ground state

$$P(-X) = (-1)^n P(X). \quad (21)$$

The knowledge of the polynomial $P(X)$ determines the energy (16) as

$$P(X) = X^n - \frac{1}{2} \left(\sum_{1 \leq \alpha \leq n} q_\alpha^2 \right) X^{n-2} + \dots \quad (22)$$

[using Eq. (19) and the fact that $\sum q_\alpha = 0$].

For small c , it is possible to solve directly Eq. (20) and to determine the q_α (see Appendix D). This leads to the following expression of the ground-state energy (16):

$$E(n, L, \gamma) = -\frac{2}{L^2} n(n-1) \left(\frac{c}{2} + \frac{c^2}{12} + \frac{nc^3}{180} + O(c^4) \right). \quad (23)$$

We see that the first coefficients of the small- c expansion are polynomial in n . In fact, following the approach of Appendix D, one can see that each coefficient of the small- c expansion of $E(n, L, \gamma)$ is polynomial in n , allowing us to define, at least perturbatively in c , the ground-state energy $E(n, L, \gamma)$ for noninteger n . The approach of Appendix D becomes, however, quickly complicated. This is why in the next section we develop a different approach [17] based on the integral equation (26).

III. SOLUTION OF THE BETHE ANSATZ USING AN INTEGRAL EQUATION

In this section we recall the approach developed in our previous work [17], which consists in writing an integral equation where c and n appear as continuous parameters and which allows us to expand the energy in powers of c as well as in powers of n .

Let us introduce the following function of $\{q_\alpha\}$:

$$B(u) = \frac{1}{n} e^{c(u^2-1)/4} \sum_{q_\alpha} \rho(q_\alpha) e^{q_\alpha(u-1)}, \quad (24)$$

where the parameters $\rho(q_\alpha)$ are defined by

$$\rho(q_\alpha) = \prod_{q_\beta \neq q_\alpha} \frac{q_\alpha - q_\beta + c}{q_\alpha - q_\beta}. \quad (25)$$

If the $\{q_\alpha\}$ are given by the solution of Eq. (17), which corresponds to the ground state, one can show (see Appendix A) that the function $B(u)$ satisfies the integral equation

$$B(1+u) - B(1-u) = nc \int_0^u dv e^{-c(v^2-uv)/2} \times B(1-v)B(1+u-v) \quad (26)$$

and the following two conditions:

$$B(1) = 1, \quad (27)$$

$$B(u) = B(-u). \quad (28)$$

Moreover, the energy (16) can be extracted from the knowledge of $B(u)$ through

$$E(n, L, \gamma) = \frac{2}{L^2} \left[\frac{n^3 c^2}{6} + \frac{nc^2}{12} + \frac{nc}{2} - nB''(1) \right]. \quad (29)$$

The derivation of Eqs. (26)–(29) is given in Appendix A. We are now going to see how one can find perturbatively in c or in n the solution of Eqs. (26)–(28) and, consequently, the ground-state energy (29).

A. Expansion in powers of c

To obtain the small- c expansion of $B(u)$ for arbitrary n , we write

$$B(u) = B_0(u) + cB_1(u) + c^2B_2(u) + \dots \quad (30)$$

Conditions (27) and (28) impose that $B_0(0)=1$ and all $B_k(1)=0$ for $k>0$, and that the $B_k(u)$ are all even. Moreover, as can be seen directly from Eq. (17), the q_α scale like $\sqrt{c}$ when c is small. (Appendix D shows how to obtain the small- c expansion of the q_α .) This implies from the definition (24) of $B(u)$ that all the $B_k(u)$ are polynomials in u .

At zeroth order in c , Eq. (26) becomes

$$B_0(1+u) - B_0(1-u) = 0. \quad (31)$$

The only polynomial solution of Eq. (31) consistent with Eqs. (27) and (28), i.e., $B_0(u) = B_0(-u)$ and $B_0(1)=1$, is simply

$$B_0(u) = 1 \quad (32)$$

for any u . We put this back into Eq. (26) and we get at first order in c

$$B_1(1+u) - B_1(1-u) = nu. \quad (33)$$

Again, there is a unique polynomial solution which satisfies the facts that $B_1(u)$ is even and that $B_1(1) = 0$:

$$B_1(u) = \frac{n}{4}(u^2 - 1). \quad (34)$$

It is easy to see from Eq. (26) that at any order in c , we have to solve

$$B_k(1+u) - B_k(1-u) = \phi_k(u), \quad (35)$$

where $\phi_k(u)$ is a polynomial odd in u . There is a unique even polynomial $B_k(u)$ solution of Eq. (35) satisfying $B_k(1) = 0$: it is one degree higher than $\phi_k(u)$ and can be determined by equating each power of u in both sides of Eq. (35). (Alternatively, we found a way of writing the solution for any $\phi_k(u)$:

$$\begin{aligned} B_k(u) = & \left[s_0 \int_1^u dv \phi_k(v) + s_1 [\phi_k'(u) - \phi_k'(1)] \right. \\ & + s_2 [\phi_k'''(u) - \phi_k'''(1)] + \dots \\ & \left. + s_p [\phi_k^{(2p-1)}(u) - \phi_k^{(2p-1)}(1)] + \dots \right] / 2, \end{aligned} \quad (36)$$

where the s_k are the coefficients of the expansion of $x/\sinh x$ in powers of x (i.e., as $x/\sinh x = 1 - x^2/6 + 7x^4/360 + \dots$, one has $s_0 = 1$, $s_1 = -1/6$, $s_2 = 7/360$, $\dots$).

This procedure gives for the first terms

$$\begin{aligned} B(u) = & 1 + \frac{cn(u^2 - 1)}{4} + \frac{c^2 n(2n+1)(u^2 - 1)^2}{96} \\ & + \frac{c^3 n(u^2 - 1)^2(5n^2(u^2 - 1) + 4n(2u^2 - 1) + 2(u^2 - 3))}{5760} + O(c^4). \end{aligned} \quad (37)$$

The energy can then be deduced from Eq. (29):

$$\begin{aligned} E(n, L, \gamma) = & -2 \frac{n(n-1)}{L^2} \left[\frac{c}{2} + \frac{c^2}{12} + \frac{n}{180} c^3 \right. \\ & \left. + \left(\frac{n^2}{1512} - \frac{n}{1260} \right) c^4 + \dots \right]. \end{aligned} \quad (38)$$

[For Eq. (38), we used more terms than given above in $B(u)$.] Of course, this expression agrees with Eq. (23) obtained directly by expanding the q_α .

B. Expansion in powers of n

The number of particles n is *a priori* an integer. However, when we look at the small- c expansion (37) of $B(u)$ or Eq. (38) of the energy, we see that at any given order in c the expression is polynomial in n . Therefore, one can extend the

definition of the small- c expansion of $B(u)$ or of $E(n, L, \gamma)$ to noninteger n . We can also collect in the small- c expansion of $B(u)$ all the terms proportional to n and call this series $b_1(u)$. From Eq. (37) we see that

$$\begin{aligned} b_1(u) = & \frac{(u^2 - 1)}{4} c + \frac{(u^2 - 1)^2}{96} c^2 \\ & + \frac{(u^2 - 1)^2(u^2 - 3)}{2880} c^3 + O(c^4). \end{aligned} \quad (39)$$

More generally, we can collect all the terms proportional to n^k in the small- c expansion and call the series $b_k(u)$. This means that we can write $B(u)$ as a power series in n ,

$$B(u) = 1 + nb_1(u) + n^2 b_2(u) + \dots, \quad (40)$$

where all the $b_k(u)$ are defined perturbatively in c . Conditions (27) and (28) impose that all the $b_k(u)$ are even and that $b_k(1) = 0$ for all $k \geq 1$. We define $b_0(u) = 1$ for consistency. [It is easy to see in the small- c expansion that if $n = 0$, then $B(u) = 1$.]

We are now going to describe the procedure we used [17] to determine the whole function $b_1(u)$ and eventually all the $b_k(u)$. If we insert Eq. (40) into Eq. (26) we get, at first order in n ,

$$b_1(1+u) - b_1(1-u) = c \int_0^u e^{-c(v^2 - uv)/2} dv. \quad (41)$$

It is easy to check that a solution of Eq. (41) compatible with the conditions $b_1(1) = 0$ and $b_1(u) = b_1(-u)$ is

$$b_1(u) = \sqrt{c} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\cosh \frac{\lambda u \sqrt{c}}{2} - \cosh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}}{\sinh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}} e^{-\lambda^2/2}. \quad (42)$$

There are, however, many other solutions of Eq. (41), which can be obtained by adding to Eq. (42) an arbitrary function $F(u, c)$ even and periodic in u of period 2 and vanishing at $u = 1$. If we require that each term in the small- c expansion of $b_1(u)$ is polynomial in u (as justified in Sec. III A), we see that all the terms of the small- c expansion of $F(u, c)$ must be identically zero. This already shows that Eq. (42) has the same small c expansion (39) as one would get by collecting all the terms proportional to n in the small- c expansion of Sec. III A.

If the solution (42) of Eq. (41) had a nonzero radius of convergence in c , it would be natural to choose this solution and set $F(u, c) = 0$. However, it is easy to see that Eq. (42) has a zero radius of convergence in c : by making the change of variable $\lambda^2 = 2\nu$, it is easy to see that Eq. (42) is the Borel sum of a divergent series [25].

Apart from being the Borel sum of its expansion in powers of c , we did not find definitive reasons why Eq. (42) is the solution of Eq. (41) we should select. However, we can notice that for integer n , all the q_α are real and $B(u)$ defined by Eq. (24) is analytic in u and remains bounded as $|\text{Im } u|$

$\rightarrow \infty$. The solution $b_1(u)$ given by Eq. (42) is also analytic in u and grows as $\ln(u)$ as $|\operatorname{Im} u| \rightarrow \infty$. Adding any function $F(u, c)$ periodic and analytic in u to Eq. (42) would produce a much faster growth.

If we insert Eq. (40) into Eq. (26), we have to solve at order n^k

$$b_k(1+u) - b_k(1-u) = \varphi_k(u), \quad (43)$$

where $\varphi_k(u)$ is some function odd in u which can be calculated if we know the previous orders $b_1(u), \dots, b_{k-1}(u)$,

$$\begin{aligned} \varphi_k(u) = & c \sum_{i=0}^{k-1} \int_0^u dv e^{-c(v^2-uv)^{1/2}} b_i(1-v) \\ & \times b_{k-i-1}(1+u-v). \end{aligned} \quad (44)$$

We see that the difficulty of selecting a solution of a difference equation appears at all orders in the expansion in powers of n , and we are now going to explain the procedure we have used to select one solution.

If we write, as $\varphi_k(u)$ is an odd function of u ,

$$\varphi_k(u) = 2 \int_0^{+\infty} d\lambda \sinh \frac{\lambda u \sqrt{c}}{2} a_k(\lambda), \quad (45)$$

which is equivalent, by inverting when u is imaginary the Fourier transform in Eq. (45), to define $a_k(\lambda)$ by

$$a_k(\lambda) = \frac{1}{2i\pi} \int_0^{+\infty} du \sin \frac{\lambda u}{2} \varphi_k\left(\frac{iu}{\sqrt{c}}\right), \quad (46)$$

then the solution for $b_k(u)$ we select is given by

$$b_k(u) = \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\cosh \frac{\lambda u \sqrt{c}}{2} - \cosh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}}{\sinh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}} a_k(\lambda). \quad (47)$$

Indeed, $b_k(u)$ is an even function, vanishes at $u=1$, and one can check using Eq. (45) that Eq. (47) solves Eq. (43).

The integrals in Eqs. (45)–(47) are convergent [17] and Eqs. (44)–(47) give an automatic way of calculating the $b_k(u)$ up to any desired order.

This procedure is the direct generalization of the choice (42) we did to solve Eq. (41). In fact, for $k=1$, Eqs. (44) and (46) give (for $\lambda \geq 0$) $a_1(\lambda) = \sqrt{c} \exp(-\lambda^2/2)$ and Eq. (47) is identical to Eq. (42).

As for Eq. (42), the solution (47) is not the only solution of Eq. (43). At any order k , we could add an arbitrary even periodic function $F(u, c)$ of period 2, the expansion of which vanishes to all orders in c . As for $b_1(u)$, we did not find an unquestionable justification of our choice. One can notice, nevertheless, that Eq. (47) is the solution of Eq. (43) analytic in u and with the slowest growth with u in the imaginary direction.

At order n^2 , the procedure (44) and (46) gives

$$\begin{aligned} a_2(\lambda) = & c e^{-\lambda^2/2} \left[\int_0^\lambda d\mu e^{-\mu^2/2} \frac{2 \cosh \frac{\lambda \mu}{2} - 2}{\tanh \frac{\mu \sqrt{c}}{2}} \right. \\ & \left. + \int_\lambda^{+\infty} d\mu e^{-\mu^2/2} \frac{e^{-\lambda \mu/2} - 2}{\tanh \frac{\mu \sqrt{c}}{2}} \right], \end{aligned} \quad (48)$$

with $b_2(u)$ given by Eq. (47). Writing down $b_3(u)$ or $a_3(u)$ would take here about half a column.

We can now give the first terms in the small- n expansion of the energy. Using relation (29), we find

$$\begin{aligned} \frac{L^2}{2} E(n, L, \gamma) = & n \left(\frac{c}{2} + \frac{c^2}{12} \right) - n^2 \frac{c^{3/2}}{4} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda^2}{\lambda \sqrt{c}} e^{-\lambda^2/2} - n^3 \frac{c^2}{4} \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\lambda^2}{\lambda \sqrt{c}} e^{-\lambda^2/2} \\ & \times \left(\int_0^\lambda d\mu e^{-\mu^2/2} \frac{2 \cosh \frac{\lambda \mu}{2} - 2}{\tanh \frac{\mu \sqrt{c}}{2}} + \int_\lambda^{+\infty} d\mu e^{-\mu^2/2} \frac{e^{-\lambda \mu/2} - 2}{\tanh \frac{\mu \sqrt{c}}{2}} \right) + \frac{n^3 c^2}{6} + O(n^4). \end{aligned} \quad (49)$$

By making the change of variable $\lambda^2 = 2\nu$, the terms of order n^2 and n^3 appear as Borel transforms of series in c with a finite radius of convergence. We conclude that these terms both have a zero radius of convergence in c .

This small- n expansion gives quickly very complicated expressions of $b_k(u)$. It turns out, as we shall see in the next section, that for large c , the expressions of the $b_k(u)$ get simpler and the energy $E(n, L, \gamma)$ can be calculated to all orders in powers of n .

IV. EXPANSION IN POWERS OF n IN THE REGIME $c \rightarrow \infty$

In the preceding section, we have developed a procedure allowing to get the small- n expansion of the energy by solving the problem (26)–(28). Here, we show how this procedure becomes greatly simplified for large c .

The expansion in powers of n of the preceding section can be summarized as follows: if we use Eq. (40) and we write

$$a(\lambda) = na_1(\lambda) + n^2 a_2(\lambda) + \dots, \quad (50)$$

the $b_k(u)$ and $a_k(\lambda)$ can be obtained by expanding in powers of n the following two equations:

$$B(u) = 1 + \int_0^{+\infty} d\lambda \frac{\cosh \frac{\lambda u \sqrt{c}}{2} - \cosh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}}{\sinh \frac{\lambda \sqrt{c}}{2}} a(\lambda) \quad (51)$$

[this is a rewriting of Eq. (47)] and

$$a(\lambda) = \frac{nc}{2i\pi} \int_0^{+\infty} du \sin \frac{\lambda u}{2} \int_0^{iu/\sqrt{c}} dv e^{-c(v^2 - iuv/\sqrt{c})/2} \times B(1-v) B\left(1 + \frac{iu}{\sqrt{c}} - v\right). \quad (52)$$

[This is a rewriting of Eqs. (44) and (46).] It will be convenient in the following to replace Eq. (52) by its Fourier transform,

$$2 \int_0^{+\infty} d\lambda \sinh \frac{\lambda u \sqrt{c}}{2} a(\lambda) = nc \int_0^u dv e^{-c(v^2 - uv)/2} B(1-v) B(1+u-v). \quad (53)$$

[This is a rewriting of Eqs. (44) and (45).]

We are going to see how one can simplify Eqs. (51)–(53) when c is large. First we observe that for large c and u fixed of order 1, the expression $b_1(u)$ takes the scaling form

$$b_1\left(1 + \frac{u}{\sqrt{c}}\right) \approx \sqrt{c} \int_0^{+\infty} (e^{\lambda u/2} - 1) e^{-\lambda^2/2} d\lambda. \quad (54)$$

One can check from Eqs. (44), (46), and (47) that this scaling form is present at any order in the small- n expansion. Indeed, Eq. (51) becomes in the large- c limit

$$B\left(1 + \frac{u}{\sqrt{c}}\right) = 1 + \int_0^{+\infty} d\lambda (e^{\lambda u/2} - 1) a(\lambda), \quad (55)$$

and using Eq. (53) we find

$$2 \int_0^{+\infty} d\lambda \sinh \frac{\lambda u}{2} a(\lambda) = n\sqrt{c} \int_0^u dv e^{-(v^2 - uv)/2} B\left(1 - \frac{v}{\sqrt{c}}\right) \times B\left(1 + \frac{u-v}{\sqrt{c}}\right). \quad (56)$$

It is apparent from Eqs. (55) and (56) that in the large- c limit the function $B(1+u/\sqrt{c})$ depends only on u and $n\sqrt{c}$, and $a(\lambda)$ depends only on λ and $n\sqrt{c}$. Let us introduce the constant K ,

$$K = 1 - \int_0^{+\infty} d\lambda a(\lambda). \quad (57)$$

Equation (55) becomes

$$B\left(1 + \frac{u}{\sqrt{c}}\right) = K + \int_0^{+\infty} d\lambda e^{\lambda u/2} a(\lambda). \quad (58)$$

In Eq. (56), if we write the integral from 0 to u as the difference between an integral from 0 to $+\infty$ and an integral from u to $+\infty$, and if we change the variable in the second integral to shift it to 0 to $+\infty$, we obtain

$$2 \int_0^{+\infty} d\lambda \sinh \frac{\lambda u}{2} a(\lambda) = n\sqrt{c} \int_0^{+\infty} dv e^{-v^2/2} B\left(1 - \frac{v}{\sqrt{c}}\right) \times \left[e^{uv/2} B\left(1 + \frac{u-v}{\sqrt{c}}\right) - e^{-uv/2} \times B\left(1 - \frac{u+v}{\sqrt{c}}\right) \right]. \quad (59)$$

If we replace $B[1+(u-v)/\sqrt{c}]$ and $B[1-(u+v)/\sqrt{c}]$ by their expression (58), we get after some rearrangements

$$2 \int_0^{+\infty} d\lambda \sinh \frac{\lambda u}{2} a(\lambda) = n\sqrt{c} \int_0^{+\infty} dv e^{-v^2/2} B\left(1 - \frac{v}{\sqrt{c}}\right) \times \left[2K \sinh \frac{uv}{2} + \int_0^{+\infty} d\mu a(\mu) \times e^{-\mu v/2} 2 \sinh\left(u \frac{v+\mu}{2}\right) \right]. \quad (60)$$

Taking the Fourier transform of this expression for imaginary u , we get for $\lambda \geq 0$

$$a(\lambda) = n\sqrt{c} \int_0^{+\infty} dv e^{-v^2/2} B\left(1 - \frac{v}{\sqrt{c}}\right) \times \left[K \delta(\lambda - v) + \int_0^{+\infty} d\mu a(\mu) e^{-\mu v/2} \delta(\lambda - v - \mu) \right]. \quad (61)$$

This last expression can be used to calculate $B(1+u/\sqrt{c})$ using Eq. (58):

$$B\left(1 + \frac{u}{\sqrt{c}}\right) = K + n\sqrt{c} \int_0^{+\infty} dv e^{-v^2/2} B\left(1 - \frac{v}{\sqrt{c}}\right) \times \left[K e^{vu/2} + \int_0^{+\infty} d\mu a(\mu) e^{-\mu v/2} e^{(v+\mu)u/2} \right]. \quad (62)$$

Finally, using Eq. (58), we recognize the relation

$$B\left(1 + \frac{u}{\sqrt{c}}\right) = K + n\sqrt{c} \int_0^{+\infty} dv e^{-v^2/2} B\left(1 - \frac{v}{\sqrt{c}}\right) \times e^{vu/2} B\left(1 + \frac{u-v}{\sqrt{c}}\right). \quad (63)$$

We see that, in the large- c limit, Eqs. (51) and (52) reduce to this single equation (63). We are now going to see that Eq. (63) can be solved to all orders in the parameter $n\sqrt{c}$. If we introduce the function $\beta(u)$ and the parameter ϵ defined by

$$\beta(u) = \frac{1}{2K\sqrt{\pi}} e^{-u^2/4} B\left(1 + \frac{u}{\sqrt{c}}\right) \quad (64)$$

and

$$\epsilon = 2nK\sqrt{\pi c}, \quad (65)$$

then Eq. (63) simply becomes

$$\beta(u) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-u^2/4} + \epsilon \int_0^{+\infty} dv \beta(u-v) \beta(-v). \quad (66)$$

Using Eqs. (27), (29), and (64), we can express the ground-state energy $E(n, L, \gamma)$ in terms of $\beta(u)$:

$$E(n, L, \gamma) = \frac{2}{L^2} \left[\frac{n^3 c^2}{6} + \frac{nc^2}{12} - nc \frac{\beta''(0)}{\beta(0)} \right]. \quad (67)$$

It is clear that relation (66) alone determines $\beta(u)$, at least perturbatively in ϵ . So, from Eq. (67), we only need to extract $\beta(0)$ and $\beta''(0)$ from Eq. (66).

It is easy to do it for the first orders in ϵ directly from Eq. (66). Moreover, we have found a way of calculating $\beta(0)$ and $\beta''(0)$, and hence the energy, to all orders in ϵ . This calculation is technical and we present it in Appendix B. The final result can be written as

$$n\sqrt{c} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\epsilon^k}{k^{3/2}}, \quad (68)$$

$$E(n, L, \gamma) = \frac{2}{L^2} \left[\frac{nc^2}{12} + \frac{\sqrt{c}}{4\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\epsilon^k}{k^{5/2}} \right]. \quad (69)$$

We see that the energy is defined in an implicit way: expression (68) allows us to calculate ϵ as a function of $n\sqrt{c}$, and Eq. (69) gives the energy as a function of ϵ . If we substitute c using Eq. (18), we obtain the result announced in Eq. (8).

For small n , one can eliminate ϵ from Eqs. (68) and (69). We get

$$\frac{L^2}{2} E(n, L, \gamma) - \frac{nc^2}{12} = \frac{\sqrt{c}}{4\sqrt{\pi}} \left[2n\sqrt{c}\pi - \frac{\sqrt{2}}{8} (2n\sqrt{c}\pi)^2 + \left(\frac{1}{8} - \frac{2\sqrt{3}}{27} \right) (2n\sqrt{c}\pi)^3 + O((n\sqrt{c})^4) \right]. \quad (70)$$

V. CONCLUSION

In this paper, we have calculated, using the replica method, the first cumulants (13) and (49) of the free energy of a directed polymer in a random medium (1) for a cylinder geometry. We used the integral equation (26) of [17] which together with conditions (27) and (28) allowed us to expand the moments $\langle Z^n \rangle$ of the partition function in powers of the strength c of the disorder or in powers of the number n of the replica. All the coefficients of the small- c expansion (38) are polynomial in n , allowing us to define the expansions for noninteger n . On the other hand, the coefficients of the expansion (49) in powers of n are complicated functions of c , with in general a zero radius of convergence at $c=0$. As already mentioned in [17], we think that weak disorder expansions of the moments $\langle Z^n \rangle$ have generically a zero radius of convergence for noninteger n when the disorder is Gaussian; this is already the case for a single Ising spin in a Gaussian random field.

To obtain our small- n expansion, we solved a difference equation (26) which at each order in powers of n has several solutions. We selected the particular solution which has the slowest growth in the imaginary u direction and has the right small- c expansion, but we could not exclude other solutions. A different approach, with a direct calculation of the first cumulants of the free energy, and not based on the replica, would therefore be very useful to test the validity of our expressions (49), which we have been able to derive only perturbatively to all orders in c .

Although our expansion in powers of n becomes quickly very complicated, it simplifies when c is large and we could write in this limiting case all the terms of the small- n expansion (68) and (69). The expression (8) we obtain of the energy $E(n, L, \gamma)$ [that is, through Eq. (3), the expression of $\langle Z^n \rangle$] is given exactly by the same scaling function as found for the ASEP. The present work therefore gives additional evidence that the scaling function $G(\beta)$ given by Eqs. (6) and (7) is characteristic of the long-time behavior of the KPZ equation in 1+1 dimensions on a ring and that the probability distribution of the free energy for a very long directed polymer on a ring should have a universal shape in the range where the fluctuations per unit length of the free energy are of order $1/L$. Other universal distributions for the free energy of a directed polymer have been found recently for different geometries [26–30]. Our present approach, based on the Bethe ansatz, is, at the moment, unable to recover these other distributions. One can try, however, to extend it to open boundary conditions (in this case too, the Bethe ansatz can be used [24]) instead of periodic boundary conditions and

see how this change of boundary conditions affects the distribution of $\ln Z$. Of course, it would be very nice to find a simpler approach which would somehow unify all these results and allow us to relate all these universal distributions corresponding to the possible geometries, in the spirit of critical phenomena in two dimensions where conformal invariance [31] allows us to connect the properties of different geometries.

Technically, the approach followed in the present work is simply to try to find the q_α solution of Eq. (17) and to calculate the energy (16), which is a symmetric function of the roots q_α , in such a way that n becomes a continuous variable. One could do the same in all kinds of situations. For example, in Appendix C, we show how to define and calculate symmetric functions of the roots of Hermite polynomials when the degree of the polynomial becomes noninteger.

Another interesting extension of the present work would be to consider more general correlations of the noise (9). The corresponding quantum problem becomes then the general problem of quantum particles interacting with an arbitrary pair potential. If the interactions are short ranged, one expects the universality class of the KPZ equation to hold, so one could try to repeat our expansion in powers of c for a general potential (without the use of the Bethe ansatz) simply by a standard perturbation theory in the strength of the potential. We believe that at any order in the strength of the potential, the ground-state energy is polynomial in n allowing us to define the perturbation expansion for noninteger n as we did here. If, with such an approach based on perturbation theory, one could recover the scaling function G of Eqs. (6) and (7), one could try to extend the approach to higher dimension as the relation between the directed polymer problem and the quantum Hamiltonian is valid in any dimension.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank François David, Michel Gaudin, Vincent Pasquier, Herbert Spohn, and André Voros for interesting discussions.

APPENDIX A: DERIVATION OF EQS. (26)–(29)

Let us first establish some useful properties of the numbers $\rho(q_\alpha)$ defined by Eq. (25). If the q_α are the n roots of the polynomial $P(X)$,

$$P(X) = \prod_{q_\alpha} (X - q_\alpha), \quad (\text{A1})$$

it is easy to see that the $\rho(q_\alpha)$ defined in Eq. (25) satisfy

$$\frac{P(X+c)}{P(X)} = 1 + c \sum_{q_\alpha} \frac{\rho(q_\alpha)}{X - q_\alpha}. \quad (\text{A2})$$

(The two sides have the same poles with the same residues and coincide at $X \rightarrow \infty$.) Expanding the right-hand side of Eq. (A2) for large X , we get

$$\frac{P(X+c)}{P(X)} = 1 + c \sum_{q_\alpha} \frac{\rho(q_\alpha)}{X} \left(1 + \frac{q_\alpha}{X} + \frac{q_\alpha^2}{X^2} \right) + O\left(\frac{1}{X^4}\right). \quad (\text{A3})$$

On the other hand, using Eqs. (16) and (A1) and the symmetry $\{q_\alpha\} = \{-q_\alpha\}$, we have

$$P(X) = X^n + \frac{L^2}{4} E(n, L, \gamma) X^{n-2} + O(X^{n-4}), \quad (\text{A4})$$

so that

$$\begin{aligned} \frac{P(X+c)}{P(X)} &= 1 + \frac{nc}{X} + \frac{c^2 \binom{n}{2}}{X^2} + \frac{c^3 \binom{n}{3} - cE(n, L, \gamma)L^2/2}{X^3} \\ &\quad + O\left(\frac{1}{X^4}\right). \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

Comparing Eqs. (A3) and (A5), we get the relations

$$\sum_{q_\alpha} \rho(q_\alpha) = n, \quad (\text{A6})$$

$$\sum_{q_\alpha} q_\alpha \rho(q_\alpha) = c \binom{n}{2}, \quad (\text{A7})$$

$$\sum_{q_\alpha} q_\alpha^2 \rho(q_\alpha) = c^2 \binom{n}{3} - \frac{E(n, L, \gamma)L^2}{2}. \quad (\text{A8})$$

Moreover, by letting $X = \pm q_\beta - c$ in Eq. (A2), we get for any q_β root of $P(X)$

$$\frac{1}{c} = \sum_{q_\alpha} \frac{\rho(q_\alpha)}{q_\alpha - q_\beta + c} = \sum_{q_\alpha} \frac{\rho(q_\alpha)}{q_\alpha + q_\beta + c}. \quad (\text{A9})$$

Lastly, using the symmetry $\{q_\alpha\} = \{-q_\alpha\}$ and the definition (25), the Bethe ansatz equations (17) reduce to

$$e^{q_\alpha} \rho(-q_\alpha) - e^{-q_\alpha} \rho(q_\alpha) = 0. \quad (\text{A10})$$

From the definition (24) of $B(u)$ and the properties (A6)–(A10), it is straightforward to establish Eqs. (26)–(29): the integral equation (26) is a direct consequence of Eqs. (24) and (A9). Properties (27) and (28) follow from Eqs. (24) and (A6) and Eqs. (24) and (A10), respectively. Lastly, Eq. (29) is a consequence of Eqs. (24) and (A6)–(A8).

APPENDIX B: THE ENERGY IN THE SCALING REGIME

In this appendix, we show how to calculate the energy from the integral equation (66). This equation is of the form

$$\beta(u) = H(u) + \epsilon \int_0^{+\infty} dv \beta(u-v) \beta(-v), \quad (\text{B1})$$

where, in our case, $H(u)$ is given by

$$H(u) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-u^2/4}. \quad (\text{B2})$$

We are going to do our calculations for an arbitrary function $H(u)$, even in u and decreasing fast enough (to make all the integrals converge) when $|u| \rightarrow \infty$.

To find the energy, we see from Eq. (67) that we have to calculate from Eq. (B1) the quantities $\beta(0)$ and $\beta''(0)$ as functions of ϵ . We first show that Eq. (B1) is equivalent to

$$\beta(u) = H(u) + \epsilon \int_0^{+\infty} dv H(u-v) \beta(v), \quad (\text{B3})$$

as long as $H(u)$ is even and decreases fast enough. Then, we will introduce a new function $\beta^*(u)$ which is easy to calculate, and relate the derivatives of $\beta(u)$ and $\beta^*(u)$ at $u=0$.

1. Equivalence between Eqs. (B1) and (B3)

The solution of Eq. (B3) can be written as

$$\beta(u) = \beta_0(u) + \epsilon \beta_1(u) + \epsilon^2 \beta_2(u) + \dots, \quad (\text{B4})$$

where

$$\begin{aligned} \beta_0(u) &= H(u), \\ \beta_1(u) &= \int_0^{+\infty} H(u-v_1) H(v_1) dv_1, \\ \beta_2(u) &= \int_0^{+\infty} H(u-v_1) H(v_1-v_2) H(v_2) dv_1 dv_2, \\ &\dots \\ \beta_k(u) &= \int \dots \int_0^{+\infty} H(u-v_1) H(v_1-v_2) \dots \\ &\dots H(v_{k-1}-v_k) H(v_k) dv_1 \dots dv_k. \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

For a given $k>0$, the integration range of $\beta_k(u)$ can be divided into k parts: the region where v_1 has the lowest value of all the $\{v_i\}$, the region where v_2 has the lowest value, . . . , and the region where v_k has the lowest value. Let us consider, for some j such that $1 \leq j \leq k$, the region where v_j has the lowest value. All the other integrals then run from v_j to $+\infty$. If we translate those to integrals running from 0 to $+\infty$ by changing v_i into $v_i + v_j$, we get

$$\begin{aligned} &\int_0^{+\infty} dv_j \int_0^{+\infty} dv_1 \dots dv_{j-1} H(u-v_1-v_j) \\ &\times H(v_1-v_2) \dots H(v_{j-1}) \int_0^{+\infty} dv_{j+1} \dots dv_k \\ &\times H(-v_{j+1}) H(v_{j+1}-v_{j+2}) \dots H(v_k+v_j). \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

Using the fact that $H(u) = H(-u)$, we see that Eq. (B6) is equal to

$$\int_0^{+\infty} dv_j \beta_{j-1}(u-v_j) \beta_{k-j}(-v_j). \quad (\text{B7})$$

By summing over j , we therefore have

$$\beta_k(u) = \int_0^{+\infty} dv \sum_{j=1}^k \beta_{j-1}(u-v) \beta_{k-j}(-v). \quad (\text{B8})$$

Finally, if we multiply by ϵ^k and if we sum over k all these terms (keeping apart the term for $k=0$), we obtain Eq. (B1).

Equations (B1) and (B3) are thus equivalent and Eqs. (B4) and (B5) give the solution of Eq. (B1) to any order in ϵ .

2. Calculation of the derivatives of $\beta(u)$

If we look at the expression (B5) of $\beta(u)$ in powers of ϵ , the calculation of $\beta(0)$ and $\beta''(0)$ looks simple, especially when $H(u)$ is given by Eq. (B2). However, when we try to actually do the calculation, the expressions become quickly complicated with error functions, primitives of error functions, etc. It would be much easier if the integrals in Eq. (B5) were running from $-\infty$ to $+\infty$ instead of 0 to $+\infty$. This is why we introduce the even function

$$\beta^*(u) = \beta_0^*(u) + \epsilon \beta_1^*(u) + \epsilon^2 \beta_2^*(u) + \dots, \quad (\text{B9})$$

where, for $k>0$,

$$\beta_k^*(u) = \frac{1}{k+1} \int \dots \int_{-\infty}^{+\infty} H(u-v_1) \dots H(v_k) dv_1 \dots dv_k \quad (\text{B10})$$

and $\beta_0^*(u) = H(u)$. One can see easily that

$$\beta^*(u) = \frac{-1}{2\pi\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-iqu} \ln[1 - \epsilon \hat{H}(q)], \quad (\text{B11})$$

where we have defined

$$\hat{H}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{iqu} H(u). \quad (\text{B12})$$

The Wiener-Hopf technique [32] allows us to relate $\beta(u)$ and $\beta^*(u)$. More specifically, we are going to show that for any $X>0$,

$$\epsilon \int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta^*(u) = \ln \left(1 + \epsilon \int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta(u) \right). \quad (\text{B13})$$

This relation allows us to relate the derivatives of $\beta(u)$ and $\beta^*(u)$ at $u=0$: indeed, if X is large in Eq. (B13), we get

$$\int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta(u) = \frac{\beta(0)}{X} + \frac{\beta'(0)}{X^2} + \frac{\beta''(0)}{X^3} + \dots \quad (\text{B14})$$

and a similar expression for $\beta^*(u)$. Comparing both sides of Eq. (B13) gives

$$\begin{aligned} \beta(0) &= \beta^*(0), \\ \beta'(0) &= \frac{\epsilon}{2} \beta(0)^2, \end{aligned} \quad (\text{B15})$$

$$\beta''(0) = \beta^{*''}(0) + \frac{\epsilon^2}{6} \beta(0)^3.$$

[We have used the fact that $\beta^{*'}(0)=0$ because $\beta^*(u)$ is an even function.]

In order to prove Eq. (B13), the first thing to note is that, as $H(u)$ decreases fast when $u \rightarrow \pm\infty$, then also does $\beta(u)$. This allows us to define the two “partial” Fourier transforms

$$\hat{\beta}_+(q) = \int_0^{+\infty} du e^{iqu} \beta(u), \quad (\text{B16})$$

$$\hat{\beta}_-(q) = \int_{-\infty}^0 du e^{iqu} \beta(u). \quad (\text{B17})$$

It is easy to see that $\hat{\beta}_+(q)$ is analytic in the upper half-plane ($\text{Im } q \geq 0$). Moreover, in this half-plane, $\hat{\beta}_+(q)$ is bounded and vanishes when $|q| \rightarrow \infty$. Conversely, $\hat{\beta}_-(q)$ is analytic, bounded, and decreases to 0 at infinity when $\text{Im } q \leq 0$.

The function $\beta(u)$ can be written in terms of $\hat{\beta}_+(q)$ and $\hat{\beta}_-(q)$:

$$\beta(u) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-iqu} [\hat{\beta}_+(q) + \hat{\beta}_-(q)], \quad (\text{B18})$$

which allows us to express the right-hand side of Eq. (B13) when x is positive,

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta(u) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\hat{\beta}_+(q)}{X+iq} \\ &+ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{\hat{\beta}_-(q)}{X+iq}. \end{aligned} \quad (\text{B19})$$

We calculate the two integrals in the right-hand side of Eq. (B19) by the residue theorem. As $\hat{\beta}_+(q)$ is analytic and decreases at infinity in the upper half-plane, the first integral can be written as a contour integral around the upper half-plane. The only contribution to the first integral comes, using Cauchy’s theorem, from the pole $q=iX$. One can also check that the second integral vanishes [using a contour around the lower half-plane and the fact that $\hat{\beta}_-(q)$ has no pole]. Therefore, Eq. (B19) gives

$$\int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta(u) = \hat{\beta}_+(iX). \quad (\text{B20})$$

Now, if we multiply Eq. (B3) by $\exp(iqu)$ and if we integrate over u , we easily get for any real q

$$\hat{\beta}_+(q) + \hat{\beta}_-(q) = \hat{H}(q) + \epsilon \hat{H}(q) \hat{\beta}_+(q). \quad (\text{B21})$$

This relation between $\hat{H}(q)$, $\hat{\beta}_-(q)$, and $\hat{\beta}_+(q)$, together with Eq. (B11), gives

$$\begin{aligned} \beta^*(u) &= \frac{1}{2\pi\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-iqu} \{ \ln[1 + \epsilon \hat{\beta}_+(q)] \\ &- \ln[1 - \epsilon \hat{\beta}_-(q)] \}. \end{aligned} \quad (\text{B22})$$

Using again that, in the upper half-plane, $\hat{\beta}_+(u)$ is analytic and vanishes at infinity, we see that, for a *small enough* ϵ , the quantity $\ln[1 + \epsilon \hat{\beta}_+(q)]$ is also analytic and decreases to 0 at infinity when $\text{Im } q \geq 0$. Similarly, $\ln[1 - \epsilon \hat{\beta}_-(q)]$ has the

same properties for $\text{Im } q \leq 0$. This allows us to calculate the left-hand side of Eq. (B13) as we did for the right-hand side. We find

$$\int_0^{+\infty} du e^{-uX} \beta^*(u) = \frac{1}{\epsilon} \ln[1 + \epsilon \hat{\beta}_+(iX)]. \quad (\text{B23})$$

Comparing Eqs. (B20) and (B23) completes the proof of Eq. (B13).

We can now give an expression of the energy. If we use the definition (B2) of $H(u)$ in Eqs. (B11) and (B12), we find

$$\beta^*(u) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\epsilon^k}{(k+1)^{3/2}} e^{-u^2/[4(k+1)]}. \quad (\text{B24})$$

This gives

$$\beta^*(0) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\epsilon^k}{(k+1)^{3/2}}, \quad (\text{B25})$$

$$\beta^{**}(0) = -\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{\epsilon^k}{(k+1)^{5/2}}, \quad (\text{B26})$$

and, together with Eq. (B15), these equations allow us to give an expression of $\beta(0)$ and $\beta''(0)$.

From Eqs. (27), (64), and (65), we see that

$$\epsilon \beta(0) = n \sqrt{c}. \quad (\text{B27})$$

Then, using Eq. (B15), we get

$$\epsilon \beta^*(0) = n \sqrt{c}, \quad (\text{B28})$$

$$\frac{\beta''(0)}{\beta(0)} = \frac{\epsilon}{n\sqrt{c}} \beta^{**}(0) + \frac{n^2 c}{6}.$$

The energy is given by Eq. (67). We get

$$E(n, L, \gamma) = \frac{2}{L^2} \left[\frac{nc^2}{12} - \epsilon \sqrt{c} \beta^{**}(0) \right]. \quad (\text{B29})$$

And, finally, using relations (B25) and (B26), we obtain Eqs. (68) and (69).

APPENDIX C: HERMITE POLYNOMIALS WITH A NONINTEGER NUMBER OF ROOTS

What we try to do in this whole paper is essentially to calculate $\Sigma_\alpha q_\alpha^2$ (the energy) where $\{q_\alpha\}$ is a solution of Eq. (17), in such a way that n appears as a continuous parameter. This allows us to obtain expressions of the energy for non-integer n .

One can use the same procedure in other kinds of situations. A simple example which illustrates our calculations is the case of the zeros of Hermite polynomials.

The n th Hermite polynomial $H_n(X)$ is the solution polynomial in X with leading coefficient 1 of the differential equation [33]

$$\frac{1}{2}H_n''(X) - XH_n'(X) + nH_n(X) = 0. \quad (C1)$$

The polynomial $H_n(x)$ is of degree n and has the symmetry $H_n(X) = (-1)^n H_n(-X)$. For example, we have $H_4(X) = X^4 - 3X^2 + \frac{3}{2}$. The n roots $\{h_\alpha\}$ ($1 \leq \alpha \leq n$) of $H(X)$ are real and distinct [34].

By deriving Eq. (C1) p times with respect to X , we see that, for all p ,

$$XH_n^{(p+1)}(X) = \frac{1}{2}H_n^{(p+2)}(X) + (n-p)H_n^{(p)}(X). \quad (C2)$$

This shows that the $(n-p)$ th Hermite polynomial is, up to a constant factor, equal to the p th derivative of $H_n(X)$. (This property will be used a lot in Appendix D.)

Equation (C1) can be used directly to calculate the first coefficients of $H_n(X)$,

$$H_n(X) = X^n - \frac{1}{2}\binom{n}{2}X^{n-2} + \frac{3}{4}\binom{n}{4}X^{n-4} + \dots \quad (C3)$$

Using Eq. (C3), the symmetry of $H(X)$, and the large X expansion,

$$\frac{H_n'(X)}{H_n(X)} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{X^{p+1}} \left(\sum_{\alpha} h_{\alpha}^p \right), \quad (C4)$$

we can calculate the moments of the roots $\{h_{\alpha}\}$ of $H(X)$:

$$\sum_{\alpha} h_{\alpha}^2 = \frac{n(n-1)}{2}, \quad (C5)$$

$$\sum_{\alpha} h_{\alpha}^4 = \frac{n(n-1)}{4}(2n-3), \quad (C6)$$

and so on. These moments are *a priori* defined only for integer n but as the expressions are polynomial in n , one can obviously extend their definition to noninteger n [similarly to what we do in the small- c expansion of $B(u)$ in Sec. (III B)].

To generate all the moments of the roots h_{α} , it is convenient to consider the generating function

$$Q(u) = \sum_{h_{\alpha}} e^{h_{\alpha}u}, \quad (C7)$$

which is quite reminiscent of the quantity $\beta(u)$ defined in our quantum problem. [Using Eqs. (24) and (64), we can check that $\beta(u) \propto \exp(u\sqrt{c}/2) \sum \rho(q_{\alpha}) \exp(q_{\alpha}u/\sqrt{c})$.]

The function $Q(u)$ is hard to calculate for general n but we can expand it in powers of n . This can be done by considering

$$\Psi(X) = \frac{H_n'(X)}{H_n(X)} = \int_0^{+\infty} du Q(u) e^{-uX}, \quad (C8)$$

which is defined only for X positive and large enough to make the integral converge. This function $\Psi(X)$ is solution of a differential equation which follows from Eq. (C1):

$$\frac{1}{2}\Psi'(X) + \frac{1}{2}\Psi(X)^2 - X\Psi(X) + n = 0. \quad (C9)$$

To obtain an expansion in powers of n , we write

$$\Psi(X) = n\Psi_1(X) + n^2\Psi_2(X) + \dots \quad (C10)$$

Thus $\Psi_1(X)$ satisfies

$$\frac{1}{2}\Psi_1'(X) - X\Psi_1(X) + 1 = 0. \quad (C11)$$

This differential equation can easily be solved, and the integration constant can be fixed using the requirement (C8) that, for large X , $\Psi(X) \approx n/X$,

$$\Psi_1(X) = \int_0^{+\infty} du e^{-uX - (u^2/4)}. \quad (C12)$$

Then order n^2 of Eq. (C9) gives

$$\frac{1}{2}\Psi_2'(X) - X\Psi_2(X) + \frac{1}{2}\Psi_1(X)^2 = 0, \quad (C13)$$

the solution of which can be written as

$$\Psi_2(X) = 2 \int_0^{+\infty} du e^{-uX - u^2/4} \int_0^{+\infty} dt \frac{\cosh \frac{ut}{\sqrt{2}} - 1}{t} e^{-t^2}. \quad (C14)$$

The procedure can be iterated to any order in n (of course expressions become more and more complicated). Using Eq. (C8) and the expressions of $\Psi_1(X)$ and $\Psi_2(X)$, we can give an expression of $Q(u)$:

$$Q(u) = ne^{-u^2/4} + 2n^2e^{-u^2/4} \int_0^{+\infty} dt \frac{\cosh \frac{ut}{\sqrt{2}} - 1}{t} e^{-t^2} \\ \times e^{-t^2} + O(n^3). \quad (C15)$$

Expanding this expression in powers of u , one calculates from this expression and from Eq. (C7) the terms linear and quadratic in n of all the moments of the h_{α} . [The results agree for the second and the fourth moments with Eqs. (C5) and (C6).]

We noticed that for small n , the expression (C15) corresponds to n roots h_{α} distributed along the imaginary axis with a Gaussian distribution. We do not know whether this is general and whether there exists, for general noninteger n , a distribution of the roots h_{α} in the complex plane which gives all moments calculated as in Eqs. (C5) and (C6).

It is interesting to notice the similarity between $Q(u)$ and $\beta(u)$ defined in Sec. IV.

APPENDIX D: THE EXPANSION IN POWERS OF c USING HERMITE POLYNOMIALS

In this appendix we show how to expand the solution $\{q_{\alpha}\}$ of Eq. (17) in powers of c for integer n . One can see

from Eq. (17) that the roots q_α scale for small c like $\sqrt{c}$. It is thus convenient to rescale the polynomial $P(X)$ defined in Eq. (19) and the q_α in the following way:

$$q_\alpha = r_\alpha \sqrt{c}, \quad (D1)$$

$$P(X\sqrt{c}) = c^{n/2} R(X).$$

[$\{r_\alpha\}$ are thus the roots of $R(X)$.] With these new variables, Eq. (20) becomes

$$e^{r_\alpha \sqrt{c}} R(r_\alpha - \sqrt{c}) + e^{-r_\alpha \sqrt{c}} R(r_\alpha + \sqrt{c}) = 0. \quad (D2)$$

As the roots r_α of $R(X)$ are all distinct, this equation is obviously equivalent to

$$\begin{aligned} e^{X\sqrt{c}} R(X - \sqrt{c}) + e^{-X\sqrt{c}} R(X + \sqrt{c}) \\ = 2[\cosh X\sqrt{c} + f(X)]R(X), \end{aligned} \quad (D3)$$

where $f(X)$ is analytic [this follows from the fact that as $R(X)$ is polynomial, $f(X)$ defined by Eq. (D3) is obviously meromorphic; moreover, as the left-hand side of Eq. (D3) vanishes at all the roots of $R(X)$, $f(X)$ has no pole]. We are now going to solve Eq. (D3) as a power series in c [i.e., find both $f(X)$ and $R(X)$ as power series in c].

1. Expansion of the polynomial $R(X)$

We only have the single equation (D3) to obtain two quantities [$R(X)$ and $f(X)$]; however, using the fact that $f(X)$ has no pole and $R(X)$ is a polynomial, both quantities can be determined in a small- c expansion. Let us write

$$\begin{aligned} R(X) &= R_0(X) + cR_1(X) + c^2R_2(X) + \dots, \\ f(X) &= cf_1(X) + c^2f_2(X) + \dots, \end{aligned} \quad (D4)$$

where the $f_i(X)$ have no pole, $R_0(X)$ is a polynomial of degree n [the term of highest degree in $R_0(X)$ is X^n], and all the $R_i(X)$ (for $i \geq 1$) are polynomials of degree less than n . At first order in c , we find that Eq. (D3) gives

$$\frac{1}{2}R_0'' - XR_0' = f_1R_0. \quad (D5)$$

As $f_1(X)$ has no pole, it must be a polynomial. Because $R_0(X)$ is of degree n , we see by looking at both sides of Eq. (D5) that, necessarily, $f_1(X) = -n$. We recognize then the differential equation (C1) that defines Hermite polynomials. Therefore,

$$\begin{aligned} f_1(X) &= -n, \\ R_0(X) &= H(X). \end{aligned} \quad (D6)$$

We recover that way that the r_α are the zeros of the n th Hermite polynomial when c is very small [24].

At next order in c , Eq. (D3) gives

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}R_1'' - XR_1' + nR_1 - f_2H \\ = \frac{X^3}{6}H' - \frac{X^2}{4}H'' + \frac{X}{6}H^{(3)} - \frac{1}{24}H^{(4)}. \end{aligned} \quad (D7)$$

As R_1 and H are polynomials, Eq. (D7) tells us that f_2H is a polynomial, too. We also know that $f_2(X)$ has no pole, thus it must be a polynomial. $R_1(X)$ is of degree strictly less than n , so the expression $R_1''/2 - XR_1' + nR_1$ is of degree strictly less than n . As H is of degree n , we recognize in Eq. (D7) a Euclidian division of polynomials: $-f_2(X)$ is the quotient of the right-hand side of Eq. (D7) divided by $H(X)$, and the terms involving $R_1(X)$ form the remainder of this division. This ensures that there is only one possible function $f_2(X)$ which verifies Eq. (D7).

In practice, to perform this Euclidian division we can use the property (C2) of the Hermite polynomials as many times as needed in the right-hand side of Eq. (D7): for instance, we transform the term $X^3H'/6$ into $nX^2H/6 + X^2H''/12$. We cannot change X^2H anymore, but we can apply Eq. (C2) to the term X^2H'' . When no more transformation is possible, we are left with

$$\begin{aligned} \frac{X^3}{6}H' - \frac{X^2}{4}H'' + \frac{X}{6}H^{(3)} - \frac{1}{24}H^{(4)} \\ = \left(\frac{n}{6}X^2 - \frac{n(n-1)}{6}\right)H - \frac{1}{12}H''. \end{aligned} \quad (D8)$$

The Euclidian division is then easy to perform,

$$f_2(X) = -\frac{n}{6}X^2 + \frac{n(n-1)}{6}, \quad (D9)$$

$$\frac{1}{2}R_1'' - XR_1' + nR_1 = -\frac{1}{12}H''.$$

Using again Eq. (C2), the differential equation on R_1 can be solved; we find

$$R_1(X) = -\frac{1}{24}H''(X). \quad (D10)$$

As $R_1(X)$ is simply a derivative of $H(X)$, and as $f_1(X)$ is a known polynomial of X , we see that at the next order in c we will have to solve an equation of the form

$$\frac{1}{2}R_2'' - XR_2' + nR_2 - f_3H = \sum X^j H^{(k)}. \quad (D11)$$

Using many times Eq. (C2), the right-hand side can be written in a “canonical form”:

$$\sum X^j H^{(k)} = \sum X^j H + \sum H^{(k)}, \quad (D12)$$

which allows us to write f_3 as a polynomial in X and R_2 as a sum of derivatives of $H(X)$. It is easy to see recursively that at any order c^k in the expansion we can repeat this procedure

to calculate $f_k(X)$ and $R_{k-1}(X)$. As a result we see that f_k is a polynomial in X and that R_{k-1} can be written as a sum of derivatives of $H(X)$.

It is worth noting that at each order the variable n comes from the previous orders and from transformations of the kind $XH'(X) \rightarrow \frac{1}{2}H''(X) + nH(X)$. Because those are the only two mechanisms by which n appears, it is easy to see that at each order the coefficients of the sum of derivatives of $H(X)$ that constitutes $R_{k-1}(X)$ are all *polynomials in n* .

A computer can easily do this tedious but straightforward task to any desired order. Up to c^3 , we find

$$R = H - \frac{c}{24}H'' - c^2 \left(\frac{n}{360}H'' - \frac{7}{5760}H^{(4)} \right) + c^3 \left[\left(\frac{n}{2520} - \frac{n^2}{3024} \right)H'' + \frac{11n}{60480}H^{(4)} - \frac{31}{967680}H^{(6)} \right] + O(c^4). \quad (D13)$$

2. Expansion of the roots r_α of $R(X)$

As seen in Eq. (D13), the polynomial $R(X)$ is to leading order in c given by $H(X)$. It is thus natural to write the roots r_α of $R(X)$ as

$$r_\alpha = h_\alpha + cx_\alpha + O(c^2). \quad (D14)$$

($\{h_\alpha\}$ are the roots of H .) Inserting Eq. (D14) into Eq. (D13), we find, at first order in c ,

$$x_\alpha H'(h_\alpha) - \frac{1}{24}H''(h_\alpha) = 0. \quad (D15)$$

Using the definition (C1) of Hermite polynomials, we have $H''(h_\alpha) = 2h_\alpha H'(h_\alpha)$. This gives in turn $x_\alpha = \frac{1}{12}h_\alpha$. Repeating this procedure to any order in c , we generate terms of the form $h_\alpha^l H^{(k)}(h_\alpha)$ which can be reduced to terms of the form $h_\alpha^l H'(h_\alpha)$ by using Eq. (C2) as many times as necessary. It is then possible to divide the expression by $H'(h_\alpha)$ and we are left with an equation giving each new term in the expansion of r_α as a *polynomial in h_α* . Again, this can be programmed, and we get, up to the order c^2 ,

$$r_\alpha = \frac{q_\alpha}{\sqrt{c}} = h_\alpha + \frac{c}{12}h_\alpha + c^2 \left[\left(\frac{n}{120} - \frac{11}{1440} \right)h_\alpha - \frac{1}{360}h_\alpha^3 \right] + O(c^3). \quad (D16)$$

Using Eqs. (D1) and (16), this leads to

$$\frac{2}{L^2}E(n, L, \gamma) = -c \sum h_\alpha^2 - \frac{c^2}{6} \sum h_\alpha^2 - \frac{c^3}{360} \left((6n-3) \sum h_\alpha^2 - 2 \sum h_\alpha^4 \right) + O(c^4), \quad (D17)$$

which coincides with Eq. (38) when one uses the properties (C5) and (C6) of the roots h_α of the Hermite polynomials.

-
- [1] M. Kardar and Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **58**, 2087 (1987).
 - [2] Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **59**, 2125 (1987).
 - [3] T. Halpin-Healy and Y.-C. Zhang, Phys. Rep. **254**, 215 (1995).
 - [4] B. Derrida and H. Spohn, J. Stat. Phys. **51**, 817 (1988).
 - [5] B. Derrida, Phys. Scr. **T38**, 6 (1991).
 - [6] M. Mézard, G. Parisi, and M. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond* (World Scientific, Singapore, 1987).
 - [7] J. Z. Imbrie and T. Spencer, J. Stat. Phys. **52**, 609 (1988).
 - [8] M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **56**, 889 (1986).
 - [9] J. Krug, Adv. Phys. **46**, 139 (1997).
 - [10] M. Kardar, Nucl. Phys. B **290** [FS20], 582 (1987).
 - [11] B. Derrida and J. L. Lebowitz, Phys. Rev. Lett. **80**, 209 (1998).
 - [12] B. Derrida and C. Appert, J. Stat. Phys. **94**, 1 (1999).
 - [13] D. Kim, Phys. Rev. E **52**, 3512 (1995).
 - [14] D.-S. Lee and D. Kim, Phys. Rev. E **59**, 6476 (1999).
 - [15] J. L. Lebowitz and H. Spohn, J. Stat. Phys. **95**, 333 (1999).
 - [16] C. Appert, Phys. Rev. E **61**, 2092 (2000).
 - [17] E. Brunet and B. Derrida, Physica A **279**, 398 (2000).
 - [18] E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).
 - [19] E. H. Lieb, Phys. Rev. **130**, 1616 (1963).
 - [20] C. N. Yang and C. P. Yang, J. Math. Phys. **10**, 1115 (1969).
 - [21] M. Gaudin, Phys. Rev. A **4**, 386 (1971).
 - [22] M. Jimbo, T. Miwa, Y. Môri, and M. Sato, Physica D **1**, 80 (1980).
 - [23] H. B. Thacker, Rev. Mod. Phys. **53**, 253 (1981).
 - [24] M. Gaudin, *La Fonction d'Onde de Bethe* (Masson, Paris, 1983).
 - [25] E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis* (CUP, Cambridge, 1927).
 - [26] M. Praehofer and H. Spohn, Phys. Rev. Lett. (to be published) (e-print cond-mat/9910273).
 - [27] K. Johansson, Commun. Math. Phys. **209**, 437 (2000).
 - [28] J. M. Kim, M. A. Moore, and A. J. Bray, Phys. Rev. A **44**, 2345 (1991).
 - [29] T. Halpin-Healy, Phys. Rev. A **44**, R3415 (1991).
 - [30] J. Krug, P. Meakin, and T. Halpin-Healy, Phys. Rev. A **45**, 638 (1992).
 - [31] J. L. Cardy, J. Phys. A **17**, 385 (1984).
 - [32] J. Mathews and R. L. Walker, *Mathematical Methods of Physics* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1973).
 - [33] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, New York, 1972).
 - [34] G. Szegő, *Orthogonal Polynomials*, No. 23 in *Colloquium Publications* (AMS, New York, 1959).

Bibliographie

- [1] ÉRIC BRUNET & BERNARD DERRIDA, *Shift in the velocity of a front due to a cutoff*, Physical Review E 1997, **56** (3), 2597–2604.
Nous avons déterminé dans cet article l'effet d'un *cut-off* sur la forme et la vitesse d'un front *pulled* se propageant dans un milieu instable, et nous avons regardé comment ce résultat pouvait s'appliquer à des modèles stochastiques. La méthode employée nous a également permis de calculer la correction à la position du front due aux conditions initiales.
- [2] ÉRIC BRUNET & BERNARD DERRIDA, *Microscopic models of traveling wave equations*, Computer Physics Communications 1999, **121–122**, 376–381.
Cet article reprend les résultats de [1] et présente plus en détail le modèle microscopique et nos simulations numériques.
- [3] ÉRIC BRUNET & BERNARD DERRIDA, *Ground state energy of a non-integer number of particles with δ attractive interactions*, Physica A 2000, **279** (1–4), 398–407.
Nous avons expliqué dans cet article comment l'on pouvait calculer les premiers cumulants de l'énergie libre par unité de longueur d'un polymère dirigé en milieu aléatoire.
- [4] ÉRIC BRUNET & BERNARD DERRIDA, *Distribution of the free energy of a directed polymer in a random medium*, Physical Review E 2000, **61** (6), 6789–6801.
Dans cet article, nous avons repris les résultats de [3] et nous avons montré que dans un certain régime d'échelle la distribution de l'énergie libre d'un polymère dirigé était donnée par la même fonction de grande déviation que dans le modèle ASEP.
- [5] MAURY D. BRAMSON, *Maximal displacement of branching Brownian motion*, Communications In Pure and Applied Mathematics 1978, **31**, 531–581.
L'auteur étudie la position d'un front dans l'équation de Fisher-Kolmogorov quand la condition initiale est une marche abrupte.
- [6] MAURY D. BRAMSON, *Convergence of solutions of the Kolmogorov equation to traveling waves*, Memoirs of the American Mathematical Society 1983, **44** (285).
L'auteur calcule la position d'un front décrit par une équation de type Fisher-Kolmogorov pour diverses conditions initiales.
- [7] RONALD A. FISHER, *The wave of advance of advantageous genes*, Annals of Eugenics 1937, **7**, 355–369.

Dans cet article, l'auteur introduit l'équation de Fisher-Kolmogorov pour décrire la propagation de gènes avantageux dans une population.

- [8] ANDREI KOLMOGOROV, IVAN PETROVSKY & N. PISCOUNOV, *Étude de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application à un problème biologique*, Bull. Univ. État Moscou, A 1937, **1** (6), 1–25.

Les auteurs introduisent (indépendamment de [7]) l'équation de Fisher-Kolmogorov et font le lien avec le problème de propagation des gènes.

- [9] DONALD G. ARONSON & HANS F. WEINBERGER, *Nonlinear diffusion in population genetics, combustion, and nerve propagation*, Lecture Notes in Mathematics 1975, **446**, 5–49.

Les auteurs étudient l'équation de Fisher-Kolmogorov et prouvent l'existence d'une vitesse critique marginalement stable qui est sélectionnée quand la condition initiale est abrupte.

- [10] DONALD G. ARONSON & HANS F. WEINBERGER, *Multidimensional nonlinear diffusion arising in population genetics*, Advances in Mathematics 1978, **30**, 33–76.

Les auteurs reprennent et étendent les résultats de [9] à des fronts multi-dimensionnels.

- [11] ALAN R. KERSTEIN, *A two-particle representation of front propagation in diffusion-reaction systems*, Journal of Statistical Physics 1988, **53** (3/4), 703.

L'auteur reprend le modèle introduit dans [27] et propose une méthode approchée pour déterminer la vitesse de propagation.

- [12] WIM VAN SAARLOOS, *Front propagation into unstable states. Linear versus nonlinear marginal stability and rate of convergence*, Physical Review A 1989, **39** (12), 6367–6390.

L'auteur étudie la stabilité de plusieurs types de fronts se propageant dans un milieu instable et développe l'argument de la stabilité marginale.

- [13] PIERRE COLLET & JEAN-PIERRE ECKMANN, *Instabilities and Fronts in Extended Systems* (Princeton University Press, 1990).

- [14] HEINZ-PETER BREUER, WOLFGANG HUBER & FRANCESCO PETRUCCIONE, *Fluctuation effects on wave propagation in a reaction-diffusion process*, Physica D 1994, **73**, 259–273.

Les auteurs étudient un modèle stochastique décrit à grande échelle par l'équation de Fisher-Kolmogorov et ils obtiennent par des simulations numériques la vitesse de propagation.

- [15] JOACHIM MAI, IGOR M. SOKOLOV & ALEXANDER BLUMEN, *Front propagation and local ordering in one-dimensional irreversible autocatalytic reactions*, Physical Review Letters 1996, **77** (21), 4462–4465.

Les auteurs étudient un modèle microscopique de réaction-diffusion de type $A + B \rightarrow 2A$. Ils mesurent numériquement la vitesse de propagation du front qui se forme et comparent les résultats à l'équation déterministe obtenue en prenant un grand nombre de particules.

- [16] S. JOHN DI BARTOLO & ALAN T. DORSEY, *Velocity selection for propagating fronts in superconductors*, Physical Review Letters 1996, **77** (21), 4442–4445.

Les auteurs étudient un système où une phase supraconductrice envahit une phase résistive dans un métal en dessous de la température critique.

- [17] UTE EBERT & WIM VAN SAARLOOS, *Front propagation into unstable states : Universal algebraic convergence towards uniformly translating pulled fronts*, Physica D 2000, (in press), cond-mat/0003181.

Longue et intéressante revue des problèmes de sélection dans les fronts se propageant dans un milieu instable et de la convergence vers la forme asymptotique en partant de la condition initiale.

- [18] DAVID CARPENTIER & PIERRE LE DOUSSAL, *Topological transitions and freezing in XY models and Coulomb gases with quenched disorder : renormalization via traveling waves*, cond-mat/9908335 1999.

Les auteurs développent une nouvelle méthode du groupe de renormalisation pour étudier la phase basse température du modèle XY.

- [19] A. N. STOKES, Mathematical Bioscience 1976, **31**, 307.

Dans cet article, l'auteur étudie différents fronts se propageant dans un état instable et introduit la distinction entre les cas *pushed* et *pulled*.

- [20] ESHEL BEN-JACOB, HELMUT BRAND, GREG DEE, LORENZ KRAMER & JAMES S. LANGER, *Pattern propagation in nonlinear dissipative systems*, Physica 1985, **14D**, 348–364.

Les auteurs étudient les problèmes de stabilité de plusieurs généralisations de l'équation de Fisher-Kolmogorov.

- [21] GREG DEE & JAMES S. LANGER, *Propagating pattern selection*, Physical Review Letters 1983, **50** (6), 383–386.

Les auteurs appliquent l'hypothèse de la stabilité marginale à une équation décrivant la formation d'une figure d'oscillations.

- [22] WIM VAN SAARLOOS, *Three basic issues concerning interface dynamics in nonequilibrium pattern formation*, Physics Reports 1998, **301** (1–3), 9–43.

L'auteur fait entre autres une revue sur les solutions de différents types de fronts (propagation dans un état stable ou instable, front « *pushed* » ou « *pulled* ») et sur leur stabilité.

- [23] LIN-YUAN CHEN, NIGEL GOLDENFELD, YOSHITSUGU OONO & GLENN C. PAQUETTE, *Selection, stability and renormalization*, Physica A 1994, **204**, 111–133.

- [24] LIN-YUAN CHEN, NIGEL GOLDENFELD & YOSHITSUGU OONO, *Renormalization group theory and variational calculations for propagating fronts*, Physical Review E 1994, **49** (5), 4502–4511.

- [25] GLENN C. PAQUETTE, LIN-YUAN CHEN, NIGEL GOLDENFELD & YOSHITSUGU OONO, *Structural stability and renormalization group for propagating fronts*, Physical Review Letters 1994, **72** (1), 76–79.

Dans ces trois articles, les auteurs introduisent et développent un nouveau critère (la « stabilité structurelle » pour déterminer la vitesse sélectionnée dans un modèle de type Fisher-Kolmogorov.

- [26] BERNARD DERRIDA & HERBERT SPOHN, *Polymers on disordered trees, spin glasses and traveling waves*, Journal of Statistical Physics 1988, **51** ((5/6)), 817–840.

Les auteurs résolvent le problème des polymères dirigés sur un arbre (ce qui est équivalent à prendre la limite de champ moyen $d \rightarrow \infty$) en montrant comment, par un astucieux changement de variable, la fonction de partition du problème est reliée à la vitesse de propagation dans une équation de front de type Fisher-Kolmogorov. Ils trouvent qu'il existe une transition de phase très semblable à celle des verres de spins. Le même calcul est refait en utilisant le formalisme des répliques à symétrie brisée.

- [27] ALAN R. KERSTEIN, *Computational study of propagating fronts in a lattice-gas model*, Journal of Statistical Physics 1986, **45** (5/6), 921–931.

L'auteur présente un modèle microscopique de particules se déplaçant sur un réseau dont la limite quand le nombre de particules tend vers l'infini est l'équation de Fisher-Kolmogorov.

- [28] HEINZ-PETER BREUER, WOLFGANG HUBER & FRANCESCO PETRUCCIONE, *The macroscopic limit in a stochastic reaction-diffusion process*, Europhysics Letters 1995, **30** (2), 69–74.

Les auteurs étudient une version microscopique de l'équation de Fisher-Kolmogorov et mesurent numériquement les fluctuations de la position du front.

- [29] JOACHIM MAI, IGOR M. SOKOLOV, VLADIMIR N. KUZOVKOV & ALEXANDER BLUMEN, *Front form and velocity in a one-dimensional autocatalytic $A + B \rightarrow 2A$ reaction*, Physical Review E 1997, **56** (4), 4130–4134.

Cet article est la suite directe de [15]; le modèle est décrit plus en détail et est étendu au cas où les deux types de particules ont des constantes de diffusion différentes.

- [30] DANIEL BEN AVRAHAM, *Fisher waves in the diffusion-limited coalescence process $A + A \rightleftharpoons A$* , Physics Letters A 1998, **247** (1–2), 53–58.

L'auteur étudie un problème microscopique qui tend à grande échelle vers l'équation de Fisher-Kolmogorov et analyse la distribution des particules.

- [31] DAVID A. KESSLER, ZVI NER & LEONARD M. SANDER, *Front propagation : Precursors, cutoffs and structural stability*, Physical Review E 1998, **58** (1), 107–114.

Les auteurs reprennent les résultats de [1] et étudient les cas des fronts *pushed* ou qui se propagent dans un milieu stable. Ils introduisent la notion d'un précurseur qui construit le front en aval de celui-ci et montrent comment l'étude de la vitesse du précurseur fournit un nouveau critère de sélection.

- [32] JOANNA COOK, *Directed Polymers in a Random Medium*, Thèse de doctorat, Université d'Edinburgh, 1990.

L'auteur a étudié dans sa thèse plusieurs aspects des polymères dirigés dont les transitions de phases en dimension élevée, la limite de champ moyen, un développement en puissances de $1/d$ de l'énergie.

- [33] JOANNA COOK & BERNARD DERRIDA, *Directed polymers in a random medium : $1/d$ expansion and the n -tree approximation*, Journal of Physics A 1990, **23**, 1523–1554.

Les auteurs présentent une méthode pour obtenir à partir d'approximations successives de champs moyens des développements en $1/d$ de diverses quantités dans des problèmes de polymères dirigés.

- [34] UTE EBERT & WIM VAN SAARLOOS, *Universal algebraic relaxation of fronts propagating into an unstable state and implications for moving boundary approximations*, Physical Review Letters 1998, **80** (8), 1650–1653.

Les auteurs étudient la relaxation d'un front à partir des conditions initiales pour les fronts *pulled* et comparent leurs résultats à d'autres types de fronts.

- [35] CHRISTINE NORMAND, YVES POMEAU & MANUEL G. VERLADE, *Convective instability : a physicist's approach*, Reviews of Modern Physics 1977, **49** (3), 581–624.

Les auteurs font une revue des résultats connus sur la convection de Rayleigh-Bénard.

- [36] JAMES S. LANGER, *Lectures in the theory of pattern formation*, in *Chance and Matter*, Les Houches summer school, 1986 pp. 629–711.

L'auteur fait un cours sur le principe de sélection et de formation de structures en prenant comme exemple les modèles de solidification.

- [37] MICHAEL C. CROSS & PIERRE C. HOHENBERG, *Patterns formation outside of equilibrium*, Reviews of Modern Physics 1993, **65** (3), 851–1112.

Les auteurs présentent une revue très longue et très complète sur les problèmes de formation de structures et de sélection dans plusieurs systèmes hors d'équilibre.

- [38] PHILIP G. SAFFMAN & GEOFFREY TAYLOR, *The penetration of a fluid into a porous medium of Hele-Shaw cell containing a more viscous liquid*, Proceedings of the Royal Society of London A 1958, **245**, 312–329.

Les auteurs étudient la pénétration d'un fluide dans un fluide plus visqueux. Si l'espace a une largeur finie, ils montrent que l'interface entre les deux fluides a la forme d'un doigt et que la vitesse de propagation dépend de la largeur de ce doigt. Expérimentalement, une seule solution est sélectionnée.

- [39] JAMES W. SWIFT & PIERRE C. HOHENBERG, *Hydrodynamic fluctuations at the convective instability*, Physical Review A 1977, **15** (1), 319–328.

Les auteurs étudient l'effet des fluctuations thermiques sur la convection de Rayleigh-Bénard.

- [40] YVES POMEAU & PAUL MANNEVILLE, *Stability and fluctuations of a spatially periodic convective flow*, Le Journal de Physique — Lettres 1979, **40** (23), 609–612.

Les auteurs étudient le seuil de convection dans une instabilité de type Rayleigh-Bénard.

- [41] W. W. MULLINS & ROBERT F. SEKERKA, *Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy*, Journal of Applied Physics 1964, **35** (2), 444–456.

Les auteurs étudient le front de solidification dans un solide en surfusion et montrent qu'une interface plane n'est pas stable.

- [42] YVES POMEAU & PAUL MANNEVILLE, *Wavelength selection in cellular flows*, Physics Letters A 1980, **75** (4), 296–298.

Les auteurs étudient la sélection de la longueur d'onde dans des problèmes de convection décrits par l'équation de Swift-Hohenberg.

- [43] RAMSES VAN ZON, HENK VAN BEIJEREN & CHRISTOPH DELLAGO, *Largest Lyapunov exponent for many particle systems at low densities*, Physical Review Letters 1998, **80** (10), 2035–2038.
L'auteur étudie un modèle de gaz de sphères dures et montre que le calcul du plus grand exposant de Lyapunov se ramène à la détermination de la vitesse d'un front.
- [44] LEV TSIMRING, HERBERT LEVINE & DAVID A. KESSLER, *RNA virus evolution via a fitness-space model*, Physical Review Letters 1996, **76** (23), 4440–4443.
- [45] DAVID A. KESSLER, HERBERT LEVINE, DOUGLAS RIDGWAY & LEV TSIMRING, *Evolution on a smooth landscape*, Journal of Statistical Physics 1997, **87** (3/4), 519–544.
- [46] DOUGLAS RIDGWAY, HERBERT LEVINE & DAVID A. KESSLER, *Evolution on a smooth landscape : the role of bias*, Journal of Statistical Physics 1998, **90** (1/2), 191–210.
Dans ces trois articles, les auteurs étudient en détail un modèle d'évolution d'une colonie de virus où l'adaptation moyenne des individus à leur environnement peut-être interprétée comme la vitesse d'un front. Leur modèle est en accord avec certaines données expérimentales.
- [47] ANNIE LEMARCHAND & B. NOWAKOWSKI, *Different description levels of chemical wave front and propagation speed selection*, Journal of Chemical Physics 1999, **111** (14), 6190–6196.
Les auteurs étudient l'effet du bruit sur la vitesse d'un front d'onde. Ils observent une correction en $N^{-1/3}$ quand le nombre N de particules par site est assez petit.
- [48] BERNARD DERRIDA & JOEL L. LEBOWITZ, *Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process*, Physical Review Letters 1998, **80**, 209–213.
En utilisant l'Ansatz de Bethe, les auteurs calculent la fonction de grandes déviations de la vitesse dans le modèle ASEP pour un nombre de particules et de sites quelconques. Dans la limite thermodynamique, cette fonction de grandes déviations prend une forme d'échelle.
- [49] DEOK-SUN LEE & DOOCHUL KIM, *Large deviation function of the partially asymmetric exclusion process*, Physical Review E 1999, **59** (6), 6476–6482.
Les auteurs retrouvent la fonction de grande déviation $G(\beta)$ dans le cadre du PASEP, et calculent les corrections de taille finie au premier ordre en utilisant une équivalence avec un modèle de chaîne XXX.
- [50] CÉCILE APPERT, *Large deviation function for the Eden model and universality within the one-dimensional Kardar-Parisi Zhang class*, Physical Review E 2000, **61** (2), 2092–2094.
L'auteur présente dans cet article plusieurs simulations numériques de différents modèles de croissance. Les résultats sont compatibles avec la fonction de grande déviation qui décrit la vitesse dans le modèle ASEP.
- [51] MEHRAN KARDAR, GIORGIO PARISI & YI-CHENG ZHANG, *Dynamic scaling of growing interfaces*, Physical Review Letters 1986, **56** (9), 889–892.

Les auteurs introduisent dans cet article la célèbre équation KPZ pour décrire des modèles de croissance. Ils font le lien avec les polymères dirigés et l'équation de Burgers, donnent la solution générale dans le cas non bruité et étudient le cas bruité par des méthodes de renormalisation et des simulations numériques.

- [52] TIMOTHY HALPIN-HEALY & YI-CHENG ZHANG, *Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that*, Physics Reports 1995, **254** (4–6), 215–414.

Longue et très intéressante revue sur les modèles de croissance et sur plusieurs modèles qui y sont reliés.

- [53] JOACHIM KRUG, *Origins of scale invariance in growth processes*, Advances in Physics 1997, **46** (2), 139–282.

L'auteur présente une revue des propriétés connues sur les phénomènes de croissance.

- [54] MEHRAN KARDAR, *Replica Bethe Ansatz studies of two-dimensional interfaces with quenched random impurities*, Nuclear Physics B 1987, **290** [FS20], 582–602.

L'auteur étudie le comportement d'une interface dans un modèle d'Ising à deux dimensions en présence de liens aléatoires. Il montre que ce problème est équivalent à un modèle quantique aléatoire à une particule en 1D, et, en utilisant la méthode des répliques, à un problème quantique non-aléatoire à n particules. Ce modèle quantique est alors résolu grâce à l'Ansatz de Bethe. L'auteur étudie ensuite des problèmes voisins, comme le piégeage de l'interface par une ligne de liens faibles.

- [55] DAVID A. HUSE & CHRISTOPHER L. HENLEY, *Pinning and roughening of domain walls in Ising systems due to random impurities*, Physical Review Letters 1985, **54** (25), 2708–2711.

Les auteurs étudient les interfaces entre domaines homogènes dans un modèle d'Ising ferromagnétique en deux dimensions où les énergies de liaison ont une composante aléatoire. Des simulations numériques leur permettent de trouver les exposants critiques $W(L) \propto L^{2/3}$ et $\langle E^2(L) \rangle_c \propto L^{2/3}$ qui relient la largeur W de l'interface et les fluctuations d'énergie en fonction de sa longueur L . Dans une note de l'article, le lien est fait pour la première fois entre ce problème et l'équation de Burgers avec bruit.

- [56] MEHRAN KARDAR, *Roughening by impurities at finite temperatures*, Physical Review Letters 1985, **55** (26), 2923.

Dans cette lettre se trouve explicité pour la première fois le lien entre le problème d'interfaces de domaines de spins et les modèles de polymères dirigés. L'auteur présente des simulations numériques à température finie et mesure des exposants critiques.

- [57] DAVID A. HUSE, CHRISTOPHER L. HENLEY & DANIEL S. FISHER, *(réponse à [56])*, Physical Review Letters 1985, **55** (26), 2924.

Dans cette lettre, les auteurs explicitent le lien entre les problèmes d'interface de domaines et l'équation de Burgers. Ils utilisent ce résultat pour calculer les exposants critiques sur la largeur et l'énergie de l'interface.

- [58] JÁNOS KERTÉSZ, *Fractal fracture*, Physica A 1992, **191**, 208–212.

L'auteur présente les résultats d'expériences où il déchire plusieurs types de papiers de tailles différentes. Il mesure la largeur de la déchirure en fonction de sa longueur et l'exposant critique ainsi obtenu est en excellent accord avec celui des polymères dirigés. Voir aussi l'article plus complet : J. KERTÉSZ, V.K. HORVÁTH & F. WEBER, Fractals 1993 **1**, 67.

- [59] THOMAS NATTERMANN & REINHARD LIPOWSKY, *Vortex behavior in high- T_c superconductors with disorder*, Physical Review Letters 1988, **61** (21), 2508.

Les auteurs étudient le piégeage de lignes de vortex par des impuretés dans un supraconducteur haute T_c en supposant que ces impuretés sont distribuées aléatoirement. Leurs lignes de vortex sont donc des polymères dirigés en $2 + 1$ dimensions.

- [60] BERNARD DERRIDA, *Mean field theory of directed polymers in a random medium*, Physica Scripta 1991, **T38**, 6–12.

L'auteur montre que l'on peut calculer par des approximations de champ moyen successives un développement en $1/d$ de l'énergie dans un modèle de polymère dirigé en milieu aléatoire. D'autres problèmes sont aussi abordés ; en particulier une preuve de l'existence d'une transition de phase si $d + 1 > 2 + 1$ est donnée.

- [61] THOMAS GAREL & HENRI ORLAND, *Directed polymers in a random medium : a variational approach*, Physical Review B 1997, **55** (1), 226–230.

Les auteurs utilisent une méthode variationnelle pour calculer les fluctuations de l'énergie libre d'un polymère dirigé.

- [62] JIN MIN KIM, M. A. MOORE & ALAN J. BRAY, *Zero-temperature directed polymers in a random potential*, Physical Review A 1991, **44** (4), 2345–2351.

Les auteurs présentent les résultats de simulations numériques où ils testent l'universalité des modèles de polymères dirigés en faisant varier divers paramètres du problème.

- [63] JEAN-PHILIPPE BOUCHAUD & HENRI ORLAND, *On the Bethe Ansatz for random directed polymers*, Journal of Statistical Physics 1990, **61** ((3/4)), 877–884.

Les auteurs calculent les exposants critiques et les préfacteurs dans un modèle de polymères dirigés en milieu aléatoire en $1 + 1$ dimensions pour une dimension transversale infinie (c'est à dire, le modèle étudié dans [54]). Leur calcul prend en compte non seulement l'état fondamental du problème quantique associé, mais aussi les premiers états excités.

- [64] MEHRAN KARDAR & YI-CHEN ZHANG, *Scaling of directed polymers in random media*, Physical Review Letters 1987, **58** (20), 2087–2090.

Les auteurs présentent les résultats de simulations numériques de polymères dirigés en milieu aléatoire à température nulle en dimension $1 + 1$, $2 + 1$ et $3 + 1$. Leurs résultats indiquent que les exposants critiques qui donnent les fluctuations de l'énergie et de la largeur du polymère varient peu avec la dimension.

- [65] YI-CHENG ZHANG, *Ground-state instability of a random system*, Physical Review Letters 1987, **59** (19), 2125–2128.

L'auteur étudie l'effet de petites modifications des impuretés d'un milieu aléatoire sur le polymère dirigé d'énergie minimale. Des simulations numériques en $1 + 1$ dimensions montrent que lorsque le polymère dirigé optimal change à cause de ces modifications des impuretés, le nouveau polymère est en général complètement différent de l'ancien.

- [66] TIMOTHY HALPIN-HEALY, *Directed polymers in random media : Probability distributions*, Physical Review A 1991, **44** (6), R3415–R3418.

L'auteur présente des simulations numériques à température nulle d'un modèle de polymère dirigé en milieu aléatoire en $1 + 1$ dimensions avec une dimension transversale infinie. Il mesure la largeur et l'énergie libre moyenne de ces polymères et compare les résultats avec les prédictions de [54, 63].

- [67] JOACHIM KRUG, PAUL MEAKIN & TIMOTHY HALPIN-HEALY, *Amplitude universality for driven interfaces and directed polymers in random media*, Physical Review A 1992, **45** (2), 638–653.

Les auteurs étudient numériquement et en détail plusieurs problèmes de croissance et de polymères dirigés en $1 + 1$ dimensions.

- [68] JOHN Z. IMBRIE & T. SPENCER, *Diffusion of directed polymers in a random environment*, Journal of Statistical Physics 1988, **52** (3/4), 609–626.
Les auteurs prouvent que dans un problème de polymères dirigés en milieu aléatoire en dimension $> 2 + 1$, il existe une phase de faible interaction (ou de haute température) où le désordre perd toute influence et où le polymère dirigé a simplement un comportement diffusif.
- [69] JIN MIN KIM & J. M. KOSTERLITZ, *Growth in a restricted solid-on-solid model*, Physical Review Letters 1989, **62** (19), 2289–2292.
Les auteurs présentent des simulations numériques d'un certain modèle de croissance en 2, 3, 4 et 5 dimensions. Ils conjecturent la manière dont les exposants critiques dépendent de la dimension et comparent leurs résultats à d'autres simulations.
- [70] GIORGIO PARISI, *Infinite number of order parameters for spin-glasses*, Physical Review Letters 1979, **43** (23), 1754–1756.
L'auteur introduit dans cet article la méthode des répliques à symétrie brisée dans un modèle de verres de spins. voir aussi G. PARISI, J. Phys. A 1980, **13**, 1887.
- [71] SAMUEL F. EDWARDS & PHILIP W. ANDERSON, *Theory of spin glasses*, Journal of Physics F 1975, **5**, 965–974.
Dans cet article, les auteurs introduisent la méthode des répliques pour calculer l'énergie libre et d'autres quantités dans un modèle de verre de spins.
- [72] H. A. BETHE, *Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*, Zeitschrift für Physik 1931, **71**, 205–226.
C'est dans cet article que l'auteur introduit la méthode de l'Ansatz de Bethe en l'utilisant pour résoudre un problème de métal mono-dimensionnel.
- [73] ELLIOT H. LIEB & WERNER LINIGER, *Exact analysis of an interacting Bose gas. I. The general solution and the ground state*, Physical Review 1963, **130** (4), 1605–1616.
Les auteurs présentent pour la première fois le modèle quantique où n bosons interagissent sur un anneau avec un potentiel δ . Ils montrent comment on peut grâce à l'Ansatz de Bethe établir un système d'équations couplées qui permet de calculer l'énergie du système. Les auteurs calculent alors l'énergie du fondamental dans la limite thermodynamique dans le cas où l'interaction est répulsive.
- [74] ELLIOT H. LIEB, *Exact analysis of an interacting Bose gas. II. The excitation spectrum*, Physical Review 1963, **130** (4), 1616–1624.
Cet article est la suite de [73] et s'appuie sur ses résultats pour calculer le spectre d'excitation du modèle quantique.
- [75] MICHEL GAUDIN, *Boundary energy of a Bose gas in one dimension*, Physical Review A 1971, **4**, 386–394.
L'auteur s'intéresse à l'énergie de surface du système de bosons en interaction δ décrit dans [73]. Après avoir rappelé la méthode et les résultats de [73] dans le cas où le système est périodique, il donne grâce à l'Ansatz de Bethe les solutions du modèle quand le système est dans une boîte. La différence d'énergie du fondamental entre les deux systèmes (« énergie de surface ») est alors calculée dans la limite thermodynamique.
- [76] MICHIO JIMBO, TETSUJI MIWA, YASUKO MÔRI & MIKIO SATO, *Density matrix of an impenetrable Bose gas and the fifth Painlevé transcendent*, Physica 1980, **1D**, 80–158.

Les auteurs reprennent le travail de Lieb & Liniger^{73,74} et calculent, toujours dans la limite thermodynamique, la matrice réduite de densité à n particules.

- [77] HARRY B. THACKER, *Exact integrability in quantum field theory and statistical systems*, Reviews of Modern Physics 1981, **53** (2), 253–285.

L'auteur présente dans cet article deux méthodes pour résoudre exactement certains problèmes quantiques : l'Ansatz de Bethe et la « méthode quantique inverse ». En guise d'illustration de l'Ansatz de Bethe, le modèle à n bosons en interaction δ sur un anneau est résolu, et le spectre d'excitation est explicitement donné dans la limite thermodynamique. L'auteur fait dans l'introduction une rapide mais très intéressante revue des modèles résolus par l'Ansatz de Bethe.

- [78] C. N. YANG & C. P. YANG, *Thermodynamics of one-dimensional systems of bosons with repulsive delta-function potential*, Journal of Mathematical Physics 1969, **10** (7), 1115–1122.

Les auteurs démontrent rigoureusement que la méthode de l'Ansatz de Bethe donne bien toutes les fonctions propres du modèle quantique présenté dans [73] où n bosons se repoussent sur un anneau avec un potentiel δ . Ils étudient ensuite d'autres propriétés du système dans la limite thermodynamique, dont le spectre d'excitation à température finie.

- [79] AMIR DEMBO & OFER ZEITOUNI, *Large Deviations Techniques and Applications* (Springer Verlag, New-York, 1998).

- [80] YI-CHENG ZHANG, *Directed polymers in Hartree-Fock approximation*, Journal of Statistical Physics 1989, **57** (5/6), 1123–1128.

Dans cet article, l'auteur montre comment on peut utiliser l'approximation de Hartree-Fock pour retrouver la fonction de grandes déviations de l'énergie libre d'un polymère dirigé. Il utilise la même approximation pour traiter le cas des polymères dirigés à énergies complexes.

- [81] YI-CHENG ZHANG, *Directed polymers with complex amplitudes*, Europhysics Letters 1989, **9** (2), 113–118.

L'auteur étudie des polymères dirigés dans un milieu aléatoire avec des amplitudes complexes. Dans une note, il introduit l'hypothèse selon laquelle la distribution de probabilité de l'énergie libre s'écrit pour les temps longs avec une fonction de grande déviation : $\rho(\log Z) \propto \exp(tf((\log Z - \langle \log Z \rangle)/t))$.

- [82] YI-CHANG ZHANG, *Growth anomaly and its implications*, Physica A 1990, **170**, 1–13.

L'auteur montre que si l'on remplace le bruit gaussien dans l'équation KPZ par un bruit en loi de puissance ayant une moyenne et une variance finie, alors l'universalité de la classe KPZ peut être perdue. L'auteur explique que ceci est dû au fait que si l'on définit KPZ sur un réseau de taille a , alors la limite continue $a \rightarrow 0$ n'existe pas.

- [83] BERNARD DERRIDA & CÉCILE APPERT, *Universal large-deviation function of the Kardar-Parisi-Zhang equation in one dimension*, Journal of Statistical Physics 1999, **94** (1/2), 1–30.

Cet article reprend et complète [48]. Les auteurs dérivent comme dans le précédent papier la distribution de probabilité du modèle ASEP, donnent les continuations analytiques du résultat, et étudient la forme d'échelle de la limite N grand. Deux modèles de croissance sont étudiés numériquement et présentent un comportement compatible avec cette forme d'échelle.

- [84] MICHEL GAUDIN, *La Fonction d'Onde de Bethe* (Masson, Paris, 1983).

- [85] JON MATHEWS & ROBERT L. WALKER, *Mathematical Methods of Physics* (Addison-Wesley, 1973).

- [86] MICHAEL PRAEHOFFER & HERBERT SPOHN, *Statistical self-similarity of one-dimensional growth processes*, cond-mat/9910273 1999.
Les auteurs étudient un nouveau modèle de croissance de la classe KPZ en une dimension. Ils ont pu calculer la fonction de grande déviation de la hauteur du système pour plusieurs géométries, et les résultats sont assez similaires à ceux du modèle ASEP.
- [87] JOHN L. CARDY, *Conformal invariance and universality in finite size scaling*, Journal of Physics A 1984, **17**, L 385–387.

Résumé de la thèse.

Dans la première partie, nous avons étudié l'effet du bruit sur la vitesse d'un front décrit par une équation de type Fisher-Kolmogorov. Ces équations interviennent souvent comme la limite d'un modèle aléatoire faisant intervenir N particules quand N devient grand. Elles ont beaucoup de solutions, mais c'est la vitesse marginalement stable v^* qui est sélectionnée pour une condition initiale localisée. Nous avons montré que si l'on prend en compte l'aspect discret du modèle microscopique en ajoutant un *cut-off* d'ordre $1/N$ dans la queue du front, alors, quelles que soient les conditions initiales, la vitesse de propagation v_N est proche de v^* et la différence $v^* - v_N$ est d'ordre $(\log N)^{-2}$. Ces résultats peuvent s'appliquer au modèle aléatoire : grâce à des simulations faisant intervenir jusqu'à 10^{14} particules, nous avons observé une correction de la vitesse compatible avec celle obtenue dans le modèle avec *cut-off*. La méthode que nous avons employée permet également de retrouver les résultats de Bramson sur l'influence des conditions initiales sur la vitesse d'un front.

La seconde partie est consacrée aux polymères dirigés dans un milieu aléatoire de largeur finie. La méthode des répliques permet de ramener le calcul des fluctuations de l'énergie libre d'un tel polymère à un problème de mécanique quantique avec n particules en interaction. Ce modèle peut être résolu grâce à l'Ansatz de Bethe, mais il faut extrapoler les solutions à des n non-entiers pour faire le lien avec l'énergie libre d'un polymère. Nous avons présenté une méthode qui nous a permis de calculer exactement les premiers cumulants de cette énergie libre. De plus, pour une dimension transversale périodique, on peut calculer tous ces cumulants dans la limite où la largeur du système devient grande et déterminer ainsi la distribution de l'énergie libre. Cette distribution est la même que celle obtenue dans le modèle ASEP et semble donc être une propriété universelle de l'équation KPZ.

Summary of the thesis

In the first part, we have studied the effect of noise on the speed of fronts described by equations similar to Fisher-Kolmogorov's equation. These equations usually appear as the limit of a stochastic model involving N particles when N goes to infinity. They have many solutions, but the marginally stable velocity v^ is selected for a localized initial condition. We have shown that if we take into account the discreteness of the microscopic system by adding a cut-off of order $1/N$ in the tail of the front, then, whatever the initial conditions are, the propagating velocity v_N is close to v^* and the difference $v^* - v_N$ is of order $(\log N)^{-2}$. These results can be applied to the stochastic model: by doing simulations involving up to 10^{14} particles, we have observed a correction to the speed which is compatible with the one obtained in the model with a cut-off. With the method we used, we can also recover Bramson's results on the influence of initial conditions on the velocity of a front.*

In the second part, we have studied directed polymers in a random medium when the width of this medium is finite. The replica method reduces the calculation of the free energy of a directed polymer to a quantum problem with n particles in interaction. This model can be solved using the Bethe Ansatz, but the solutions must be extended to non-integer n in order to relate to the free energy of a polymer. We have presented a method that allowed us to calculate the exact first cumulants of this free energy. Moreover, for a periodic transverse dimension, one can calculate all those cumulants when the width of the system is large and thus determine the distribution of the free energy. This distribution is the same as the one found in the ASEP model and seems to be an universal property of the KPZ equation.

Mots-clés

Fronts d'onde, sélection, effets microscopiques, modèles stochastiques, correction logarithmique, systèmes désordonnés, polymères dirigés, équation KPZ, méthode des répliques, Ansatz de Bethe, fonction de grandes déviations.