



HAL
open science

Mécanique statistique hors d'équilibre et fluctuations dans les gaz granulaires

Paolo Visco

► **To cite this version:**

Paolo Visco. Mécanique statistique hors d'équilibre et fluctuations dans les gaz granulaires. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2007. Français. NNT: . tel-00162084

HAL Id: tel-00162084

<https://theses.hal.science/tel-00162084>

Submitted on 12 Jul 2007

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

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



THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS VI
spécialité
PHYSIQUE THÉORIQUE

présentée par

Paolo Visco

pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

Sujet de thèse :

**Mécanique statistique hors d'équilibre et fluctuations dans les
gaz granulaires**

soutenue le 12 Juin 2007

devant le jury composé de :

M. J. Javier BREY, Professeur à l'université de Séville	Rapporteur
M. Olivier DAUCHOT, Chercheur au C.E.A.	Examineur
M. Bernard DERRIDA, Professeur à l'université Paris VI	Examineur
M. Stéphan FAUVE, Professeur à l'E.N.S.	Examineur
M. Emmanuel TRIZAC, Professeur à l'université Paris XI	Directeur de thèse
M. Christian VAN DEN BROECK, Professeur à l'université de Hasselt	Rapporteur
M. Frédéric VAN WIJLAND, Maître de conférences à l'université Paris VII	Examineur
M. Pascal VIOT, Directeur de recherche au LPTMC	Examineur

Résumé

Cette thèse porte sur un système dissipatif modèle, les gaz granulaires. Au moyen de méthodes issues de la théorie cinétique et des processus stochastiques, nous avons cherché à déterminer les propriétés statistiques d'observables globales, mimant ainsi la démarche qui prévaut l'équilibre. Parmi celles-ci, l'énergie qu'il faut fournir au gaz granulaire pour le maintenir dans un état stationnaire joue un rôle central. Elle est d'intérêt expérimental, mais elle est aussi pertinente comme mesure de la distance à l'équilibre, et c'est à ce titre qu'elle est récemment intervenue dans le contexte des relations de fluctuation. Nous avons complètement caractérisé la distribution de cette énergie injectée dans le système. Nous avons montré qu'elle ne pouvait être invoquée dans les relations de fluctuation, mais aussi que la distribution de cette grandeur macroscopique permettait d'obtenir des informations sur la dynamique microscopique. Plusieurs questions se sont développées autour de ce travail, dont la pertinence de la notion d'entropie dans un système dissipatif ou les limitations intrinsèques des relations de fluctuations.

Summary

The present thesis bears on a model dissipative system, namely, granular gases. By means of kinetic theory and stochastic methods, we have sought to determine the statistical properties of global observables, thus drawing a parallel with equilibrium approaches. Among those observables, the energy required to maintain the granular gas in a steady state plays a central role. It sure is of experimental interest, but it is also relevant as a measure of how far the system lies from equilibrium. This accounts for its ubiquity within the framework of fluctuation relations. We have completely characterized the distribution of the energy injected into the system. While we have ruled out its relevance, for the granular gas, to fluctuation relations, we have shown that the distribution of this macroscopic quantity could shed light on microscopic details of the dynamics. This work triggered a series of questions related to the issue of entropy in a dissipative system or to intrinsic limitations of fluctuation relations.

Table des matières

1	Introduction	5
1.1	Quantités globales	6
1.2	Relation de Fluctuation	8
2	Les gaz granulaires	15
2.1	Introduction	15
2.1.1	Les milieux granulaires	15
2.1.2	Le modèle des sphères dures inélastiques	15
2.1.3	Refroidissement libre et états stationnaires	16
2.2	Équations d'évolution	18
2.2.1	Opérateur d'évolution	18
2.2.2	Hierarchie BBGKY et équation de Boltzmann	19
2.2.3	Équations hydrodynamiques	20
2.2.4	Termes de forçage	21
2.2.5	Propriétés des solutions	22
2.2.6	Molécules de Maxwell et modèles cinétiques	25
2.3	Fluctuations d'énergie	25
2.3.1	Le cas d'un gaz vibré	26
	Fluctuations d'énergie totale	27
	Fluctuations locales d'énergie	29
	Comparaison avec les résultats numériques	31
2.3.2	Le cas d'un forçage homogène	34
	Thermostat stochastique	35
	Thermostat gaussien	37
2.3.3	Conclusion	40
3	Puissance injectée, énergie dissipée	43
3.1	Introduction	43
3.2	Puissance injectée	44
3.2.1	L'expérience de Feitosa et Menon	44
	Description de l'expérience et résultats	44
	Une image physique simple	48
3.2.2	Puissance injectée pour le thermostat stochastique	52
	Grandes déviations pour le courant d'énergie	52
	Quelques résultats asymptotiques	56

Table des matières

	Cumulants de \mathcal{W}	57
	Une solution approchée	61
	Grandes déviations pour le modèle de Maxwell	63
3.2.3	Simulations numériques	68
3.2.4	Puissance injectée pour le thermostat gaussien	74
3.3	Énergie dissipée	78
3.3.1	Grandes déviations pour l'énergie dissipée	78
3.3.2	Lien avec l'énergie injectée	79
3.4	Conclusion	82
4	Fonctionnelle d'action et singularités	85
4.1	Introduction	85
4.1.1	État des lieux	85
4.1.2	Et la fonctionnelle H ?	85
4.1.3	Fonctionnelle d'action	88
4.2	Relation de fluctuation pour un traceur granulaire	90
4.2.1	Équation maîtresse et taux de transition	90
	Exemples : bain gaussien et corrections de Sonine	92
4.2.2	Résultats numériques	93
4.3	Un exemple exactement soluble	99
4.4	Conclusion	106
5	Conclusion générale et perspectives	109
A	Moments collisionnels	113
A.1	Sphères dures inélastiques	113
A.2	Molécules de Maxwell inélastiques	114
B	Stationary state of a heated granular gas : fate of the usual H-functional	115
C	Statistique collisionnelle du gaz de sphères dures	127

1

Introduction

La physique statistique hors d'équilibre représente un des enjeux majeurs parmi les grands thèmes qui dominent la recherche scientifique actuelle. Née pour expliquer le comportement d'objets macroscopiques en partant d'une description microscopique, la physique statistique a trouvé ses premiers grands succès en reliant les lois de la thermodynamique aux lois qui gouvernent la dynamique microscopique des systèmes à l'équilibre. À l'équilibre on est ainsi capable d'attribuer une probabilité à un état donné du système, et on sait définir des fonctions d'état, qui contiennent la plupart des renseignements intéressants, d'un point de vue physique. Hors de l'équilibre, tout ceci n'est pas encore possible, et un formalisme capable de décrire de manière générale et systématique ces systèmes fait défaut.

On dispose aujourd'hui de très peu de résultats généraux sur la physique hors d'équilibre. En ce qui concerne les systèmes qui évoluent vers un état d'équilibre, le célèbre *théorème H* [16] nous renseigne sur le fait que les variations d'entropie de tels systèmes sont toujours positives (conformément au deuxième principe de la thermodynamique), et s'annulent seulement à l'équilibre¹.

Pour les systèmes proches de l'équilibre, une théorie de perturbation peut être mise en place. En effet, en connaissant l'état d'un système à l'équilibre, on peut avoir accès au comportement de ce même système sous l'effet d'une petite perturbation. Ceci est l'objet de la *théorie de la réponse linéaire*. Cette théorie permet d'aboutir à de nombreux résultats assez généraux au premier rang desquels on doit placer les travaux d'Einstein sur le mouvement brownien [47], qui ont montré pour la première fois que les fluctuations de vitesse d'une particule brownienne à l'équilibre sont reliées à la vitesse moyenne de cette même particule, lorsqu'elle est mise en mouvement par une force faible. Ce résultat est une première version du théorème de fluctuation–dissipation, qui relie plus

¹Notons toutefois que l'identification entre entropie et fonctionnelle H ne tient que pour les systèmes dilués ; elle tombe en particulier dès que l'énergie potentielle n'est plus négligeable [77].

1 Introduction

généralement la fonction de corrélation d'un système à sa fonction de réponse. Ensuite, de nombreux travaux ont abouti avec succès à des résultats généraux. On peut citer les relations de réciprocity d'Onsager [92, 93], les travaux de Callen et Greene [33], qui constituent la formulation plus connue du théorème fluctuation–dissipation, et la formule de Green–Kubo [71, 79], qui relie les coefficients de transport à l'autocorrélation des flux.

Ces résultats sont tous valides pour des systèmes proches de l'équilibre, mais se sont révélés, dans certains cas, utiles pour la description de systèmes loin de l'équilibre. Afin de simplifier le problème, on va se placer dans une situation stationnaire, qui ne dépend pas du temps. Un état stationnaire hors d'équilibre peut être alors obtenu en soumettant le système à l'action d'une force extérieure. Le plus souvent, il suffit de placer le système entre deux ou plusieurs thermostats, à des températures différentes, ou entre des réservoirs de particules, à des potentiels chimiques différents. On peut également appliquer un champ extérieur, comme par exemple un champ électromagnétique, pour des systèmes de particules chargées, ou appliquer un cisaillement sur un fluide. Le résultat principal d'une telle *force thermodynamique* va être l'apparition de flux. Ces flux sont typiquement des flux de chaleur (dans le cas du système en contact avec plusieurs thermostats) ou de particules, *etc*, et ils représentent l'essence même de l'état hors d'équilibre. Dans de telles situations, une théorie phénoménologique de la thermodynamique hors d'équilibre arrive souvent à décrire ces systèmes hors d'équilibre. Cette théorie, résumée dans l'ouvrage de référence [40], par De Groot et Mazur, repose essentiellement sur une hypothèse d'équilibre local. Dans le cadre de cette théorie, on sait entre autre définir une fonction d'entropie instantanée et établir un principe de production d'entropie minimum [67].

Dans les dernières années, deux nouvelles approches, à l'origine distinctes, ont ouvert une nouvelle voie pour l'étude des systèmes hors d'équilibre. Une première approche, empirique, suggère d'une manière générale l'étude des fluctuations, ainsi que de la fonction de distribution de la probabilité (pdf), de quantités globales. Une deuxième approche, motivée au départ par d'importants résultats théoriques, comme le théorème de fluctuation [62], concerne l'étude de distributions de quantités intégrées pendant des temps très longs (il s'agit en quelque sorte de quantités *extensives en temps*, ainsi qu'en nombre de constituants du système, ou en volume).

1.1 Quantités globales

Traditionnellement, en physique statistique hors d'équilibre, on a plutôt l'habitude de s'intéresser à des quantités locales, comme le facteur de structure, les fonctions de corrélations, ou les champs hydrodynamiques. Dans une direction opposée, plusieurs résultats dans le domaine de la physique statistique hors d'équilibre ont montré que l'étude des fluctuations de quantités globales peut se révéler utile dans la compréhension de ces systèmes et dans l'identification de caractères généraux ou universels.

A priori, on entend par quantité globale une quantité qui est le résultat d'une somme sur tous les constituants élémentaires du système. Il s'agit donc typiquement d'une

somme sur le nombre d’atomes (ou de molécules) du système, ou d’une intégration d’une certaine densité sur le volume total du système. Dans cette thèse on va aussi s’intéresser à des quantités intégrées pendant un temps t , qui peuvent également être qualifiées de “globales”.

Pour des systèmes à l’équilibre, les quantités globales ont une distribution gaussienne. Ceci est dû au théorème de la limite centrale, qui établit que la somme d’un grand nombre de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, tend vers une gaussienne. À l’équilibre, généralement, on a à faire à des systèmes homogènes, qui présentent des corrélations faibles. On peut donc effectivement considérer les constituants élémentaires du système comme des variables indépendantes et identiquement distribuées, ce qui automatiquement autorise l’application du théorème de la limite centrale. Lorsque l’on est dans une situation hors de l’équilibre, ou dans un système critique, l’homogénéité spatiale peut être perdue, et des corrélations non triviales peuvent apparaître. De ce fait on est confronté, dans ce genre de systèmes, à des fluctuations de quantités globales qui ne sont pas gaussiennes.

Il peut paraître ainsi judicieux d’étudier le comportement statistique des quantités globales, afin d’accéder à des informations concernant les hétérogénéités spatiales, ou la présence de corrélations. De plus, le fait de regarder une quantité macroscopique, laisse espérer que certains aspects, liés aux détails microscopiques du système en considération, soient minimisées. De cette manière, on pourrait trouver des caractérisations similaires entre systèmes *a priori* différents, avec pour but une recherche de phénoménologies universelles, dans le même esprit que celui adopté, par exemple, lorsque l’on étudie les transitions de phase.

Afin de mettre en évidence de tels caractères universels, il est aussi indispensable de représenter les variables dans les bonnes échelles. Le plus souvent, on peut se limiter à considérer une échelle où la variable d’intérêt a une moyenne nulle et une variance unité. Parfois, tout de même, le choix d’une variable de moyenne égale à l’unité s’impose et, d’une manière générale, on ne sait pas prédire à l’avance quel changement il faut effectuer pour pouvoir accéder aux caractères universels des distributions [101].

Un des exemples, parmi les plus spectaculaires et inattendus, dans l’apparition de distributions universelles, est sans doute celui de la distribution de Gumbel. Cette distribution a été observée lors d’une mesure expérimentale de la puissance injectée dans un fluide, situé entre deux cylindres, et maintenu dans un état turbulent par mouvement contrarotatif des cylindres [81]. Successivement il a été découvert que l’aimantation totale dans le modèle XY, au voisinage du point critique, présente exactement la même distribution de probabilité [21]. Plus récemment, il a même été montré que les fluctuations d’énergie d’un gaz granulaire en refroidissement libre, lorsque il s’approche de l’instabilité de *clustering*, présentent le même type de fluctuations [24]. Dans tous ces cas, on a toujours une quantité globale différente. Afin de pouvoir comparer leurs distributions, il faut utiliser le changement d’échelle suivant :

$$\tilde{X} = \frac{X - \langle X \rangle}{\sqrt{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle}}, \quad (1.1)$$

1 Introduction

où X désigne la quantité globale à laquelle on s'intéresse. Il est remarquable qu'avec un tel changement d'échelle, la superposition entre les distributions se fait naturellement, sans la nécessité de paramètres ajustables, ce qui rend beaucoup plus simple et claire l'interprétation des résultats. On peut remarquer également que les trois systèmes cités ci-dessus sont très différents entre eux : il s'agit d'un système dans un état stationnaire hors d'équilibre, un système à l'équilibre proche d'une transition de phase, et un système hors d'équilibre, non-stationnaire, proche d'une instabilité.

La distribution de Gumbel est bien connue en probabilités, puisqu'elle décrit, dans un ensemble de N variables aléatoires, le comportement statistique de la variable maximum, lorsque N tend vers l'infini [72]. De ce fait, les résultats décrits ci-dessus ont été initialement interprétés comme la signature d'un processus de maximalisation, qui dominerait la dynamique [96, 39, 73]. Plus récemment, Bertin a montré qu'une somme de variables aléatoires indépendantes, mais *non* identiquement distribuées, pouvait être distribuée suivant une loi de Gumbel généralisée [11]. Une généralisation de ce résultat à des variables corrélées a également été faite [12]. Ce résultat pourrait expliquer de manière plus claire l'apparition d'une telle phénoménologie.

D'autres exemples, où le caractère universel des fonctions de distributions de quantités globales joue un rôle, sont résumés par Rácz, dans l'article de revue [101]. Dans ce même article, on considère l'idée d'établir une "galerie" de distributions d'échelle hors d'équilibre. Avec un tel programme, l'apparition et l'identification de caractères communs à différents systèmes et différents résultats, aussi bien analytiques que numériques ou expérimentaux, permettrait d'améliorer la compréhension générale des systèmes hors d'équilibre et des systèmes critiques.

Une telle galerie est aujourd'hui loin d'être complète, mais de nouveaux éléments y sont apportés régulièrement [95, 3, 91, 20]. Dans cette thèse on s'intéressera principalement à des systèmes microscopiquement irréversibles, comme les gaz granulaires, dont on calculera la distribution de l'énergie totale, et de la puissance injectée et dissipée. En particulier, on concentrera une partie de notre travail sur la clarification d'un problème, débattu dans la communauté, concernant l'applicabilité de la "Relation de Fluctuation" (FR) aux gaz granulaires.

1.2 Relation de Fluctuation

On a vu qu'en physique statistique hors d'équilibre les résultats généraux sont rares. La Relation de Fluctuation fait désormais partie de ces quelques résultats, avec la particularité remarquable d'être valide arbitrairement loin de l'équilibre.

Découverte pour la première fois par Evans, Cohen et Morriss [53] lors d'une simulation numérique d'un fluide cisailé, la relation de fluctuation peut s'interpréter comme une version microscopique, ou fluctuante, du deuxième principe de la thermodynamique. Une définition rigoureuse de l'entropie n'existe cependant pas hors de l'équilibre. Dans un système hors d'équilibre et par analogie avec la thermodynamique des processus irréversibles (on entend par là la thermodynamique phénoménologique à la de Groot et Mazur [40]), on peut tenter d'écrire les variations temporelles de l'entropie S – qui reste

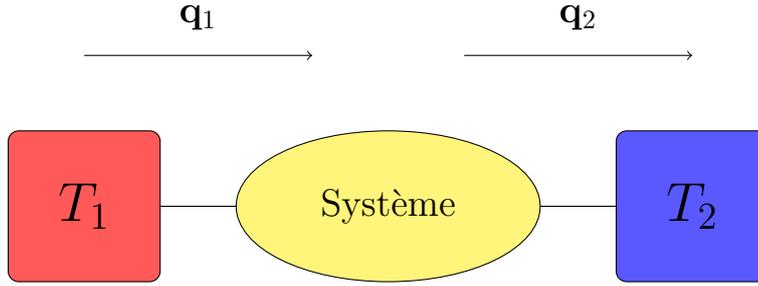


FIG. 1.1: Schéma de système en contact avec deux thermostats à des températures différentes. Ici on suppose $T_1 > T_2$.

à définir – sous la forme :

$$\frac{dS}{dt} = \sigma - \langle \Sigma \rangle . \quad (1.2)$$

Le premier terme du membre de droite représente la production irréversible d'entropie du système. C'est une quantité qui est toujours positive, et ne peut être nulle qu'à l'équilibre. Le deuxième terme est la moyenne de l'entropie que le système a échangé avec son environnement. Il s'agit d'un terme qui a une interprétation statistique précise, puisque c'est la moyenne d'une quantité microscopique bien définie. Ce terme est souvent appelé flux d'entropie, en raison du fait que souvent, son expression est proportionnelle aux flux physiques (d'énergie, ou de particules) qui traversent le système. Dans ces cas son expression est de la forme :

$$\Sigma = \int_{\text{système}} dV \nabla \cdot \mathbf{J}_\Sigma , \quad (1.3)$$

où \mathbf{J}_Σ est le véritable flux d'entropie, qui, sous une hypothèse d'équilibre local, peut s'exprimer comme la somme des flux sortants du système, multipliés par leurs affinités respectives. Si par exemple l'on considère un fluide entre deux thermostats à des températures T_1 et T_2 différentes, comme schématisé dans la figure 1.1, l'expression du flux d'entropie sera alors :

$$\langle \Sigma \rangle = \left\langle \frac{q_1(t)}{T_1} + \frac{q_2(t)}{T_2} \right\rangle , \quad (1.4)$$

où les crochets $\langle \dots \rangle$ représentent une moyenne d'ensemble. Dans l'expression ci-dessus les quantités q_i désignent chacune le flux microscopique total de chaleur entre le thermostat à la température T_i et le système². Dans un état stationnaire, le flux de chaleur entrant dans le système, est égal au flux sortant, ce qui implique que $q_1 = -q_2 \equiv q$. De plus, les variations temporelles d'entropie sont par définition nulles. On aura donc :

$$\sigma = \langle \Sigma \rangle = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \langle q(t) \rangle > 0 . \quad (1.5)$$

²Il s'agit donc du flux q_i intégré sur la surface (orientée) commune au thermostat i et au système.

1 Introduction

Le flux d'entropie $\langle \Sigma \rangle$ étant bien défini microscopiquement, il peut alors être mesuré (par exemple, lors d'une expérience). Une méthode, parmi les nombreuses que l'on pourrait adopter pour mesurer Σ , consisterait à mesurer une moyenne temporelle³ :

$$\mathcal{S}_\tau = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \Sigma(t) . \quad (1.6)$$

Lorsque le temps d'intégration τ tend vers l'infini, l'expression ci-dessus tend effectivement vers le flux d'entropie moyen du système. Cependant, on ne peut jamais, expérimentalement, réaliser une moyenne sur un intervalle de temps infini. Par conséquent, la quantité \mathcal{S}_τ à laquelle on a accès, peut également être considérée comme une quantité fluctuante. On peut donc s'intéresser à la distribution de la probabilité de \mathcal{S}_τ , et à son comportement au cours du temps τ . C'est précisément le comportement de cette distribution qui fait l'objet de la Relation de Fluctuation, qui établit que, lorsque $\tau \rightarrow \infty$:

$$\frac{P_{\mathcal{S}}(\mathcal{S}_\tau = s)}{P_{\mathcal{S}}(\mathcal{S}_\tau = -s)} = e^{s\tau} , \quad (1.7)$$

où $P_{\mathcal{S}}$ désigne la probabilité d'avoir une certaine réalisation de \mathcal{S}_τ . On voit que, bien qu'en moyenne $\langle \Sigma \rangle > 0$, \mathcal{S}_τ peut avoir des fluctuations négatives⁴. Cependant, ces fluctuations sont "exponentiellement" rares.

Avant de rentrer dans les détails de la Relation de Fluctuation (FR), il est utile d'introduire la notion de *fonction de grandes déviations*. Il s'agit en fait d'une propriété très générale qui s'applique à toute somme de variables aléatoires identiquement distribuées, éventuellement corrélées⁵, $X_N = \sum^N x_i$. Dans ces conditions, la densité de probabilité $P(X_N)$ se comporte, lorsque $N \rightarrow \infty$ de la façon suivante :

$$P(X_N = xN) \sim e^{Nf(x)} , \quad (1.8)$$

où f est une *fonction de grandes déviations*, qui ne dépend que du paramètre $x = X_N/N$. La physique statistique d'équilibre repose essentiellement sur cette propriété, caractéristique de toute quantité extensive. Par exemple, si l'on considère l'énergie totale E d'un système isolé, d'hamiltonien \mathcal{H} , le nombre de configurations ayant une énergie E donnée s'écrit :

$$\Omega(E, N) = \sum_{\substack{\text{configurations} \\ \text{microscopiques}}} \delta(E - \mathcal{H}) \stackrel{N \rightarrow \infty}{\sim} e^{Nh(e)} , \quad (1.9)$$

où $e = E/N$ est l'énergie par particule, et $h(e)$ l'entropie intensive du système. De même, le flux d'entropie \mathcal{S}_τ va vérifier la propriété analogue :

$$P_{\mathcal{S}}(\mathcal{S}_\tau = s) \sim e^{\tau\pi_{\mathcal{S}}(s)} , \quad (1.10)$$

³On suppose que le système est muni d'une dynamique ergodique.

⁴C'est cette considération qui est à l'origine du titre de la Réf. [53] : "Probability of second law violations in shearing steady states"

⁵Il faut remarquer que ces hypothèses sont moins restrictives que les hypothèses nécessaires à l'application du théorème de la limite centrale [65, 48].

où cette fois-ci le temps τ va jouer le rôle du nombre de particules N , et $\pi_{\mathcal{S}}$ le rôle d'une entropie (par unité de temps). L'introduction des grandes déviations temporelles s'est révélée fructueuse dans l'étude des systèmes hors d'équilibre [104, 44, 15] : elle permet une analogie directe avec les fonctions d'état thermodynamiques, tout en donnant un rôle prédominant à la dynamique, en s'intéressant à des quantités qui dépendent des histoires du système.

Maintenant que l'on a introduit la notion de grandes déviations, on peut aisément réécrire l'équation (1.7) sous la forme :

$$\pi(s) - \pi(-s) = s . \quad (1.11)$$

Souvent en physique statistique, des simplifications surviennent lorsque l'on se place dans l'ensemble canonique. Un tel changement d'ensemble s'obtient en introduisant une transformée de Laplace. Si par exemple l'on considère de nouveau le nombre de configurations dans l'ensemble microcanonique, on obtient la fonction de partition à partir de la transformation :

$$Z(\beta, N) = \int dE \Omega(E, N) e^{-\beta E} \stackrel{N \rightarrow \infty}{\sim} e^{Ng(\beta)} , \quad (1.12)$$

où $g(\beta)$ est proportionnelle à l'énergie libre par particule du système. Par analogie, on peut définir la fonction intensive (en temps) $\mu_{\mathcal{S}}(\lambda)$ par :

$$\mu_{\mathcal{S}}(\lambda) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \log \hat{P}_{\mathcal{S}}(\lambda, t) , \quad (1.13)$$

où $\hat{P}_{\mathcal{S}}$ est la transformée de Laplace de $P_{\mathcal{S}}$:

$$\hat{P}_{\mathcal{S}}(\lambda, t) = \int d\mathcal{S} e^{\lambda \mathcal{S}} P_{\mathcal{S}}(\mathcal{S}, t) . \quad (1.14)$$

Dans ce cas on voit que $\mu_{\mathcal{S}}(\lambda)$ joue un rôle analogue à celui d'une énergie libre, et λ un rôle analogue à celui d'une température inverse. De plus, en thermodynamique, les fonctions d'état sont reliées par des transformations de Legendre. Cette relation reste aussi valable entre $\pi_{\mathcal{S}}(s)$ et $\mu_{\mathcal{S}}(\lambda)$. La fonction $\mu_{\mathcal{S}}$ est également la fonction génératrice des cumulants de \mathcal{S}_{τ} (à un facteur τ près). La propriété (1.11) peut se traduire, pour cette fonction, par une relation de symétrie :

$$\mu_{\mathcal{S}}(\lambda) = \mu_{\mathcal{S}}(1 - \lambda) . \quad (1.15)$$

Après avoir été découverte de manière heuristique par Evans, Cohen et Morriss [53], cette relation a été démontrée rigoureusement par Gallavotti et Cohen [62], dans le cadre de systèmes chaotiques réversibles. Il s'agit, plus précisément, de systèmes uniformément hyperboliques (ou d'Anosov), qui sont simplement des systèmes où en tout point de l'espace des phases il existe au moins une direction stable, et une direction instable. Bien que dans la nature il y ait très peu de systèmes qui vérifient cette propriété (qui est, par ailleurs, très difficile à prouver), cela a donné une explication rigoureuse de la

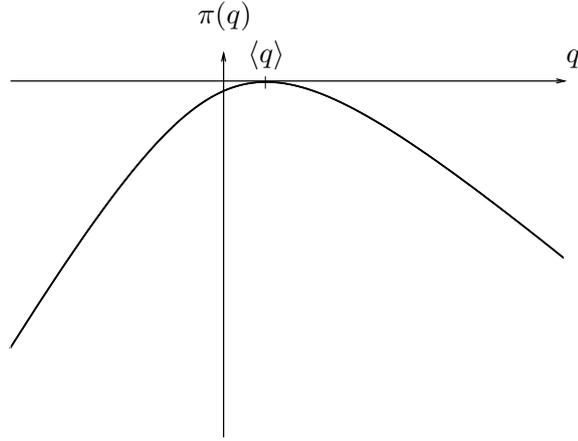


FIG. 1.2: Exemple de fonction de grandes déviations.

relation de fluctuation, en lui conférant le statut de théorème. Dans ce cadre, la quantité fluctuante considérée est le taux de contraction de l'espace des phases. De plus, tout cela a imposé la nécessité d'une *hypothèse chaotique* : même si un système n'est pas Anosov (i.e. n'est pas "assez" chaotique), il pourrait se comporter comme s'il l'était. C'est justement cette hypothèse qui est mise en question dans les premières expériences (éventuellement numériques) [60, 17, 38, 37] consacrées à la vérification de la FR.

Il y a eu ensuite une généralisation du théorème de Gallavotti–Cohen pour les systèmes stochastiques. D'abord Kurchan a montré que l'entropie phénoménologique (i.e. la puissance injectée divisé par la température) vérifie cette relation dans des systèmes décrits par une équation de Langevin [80]. Successivement, Lebowitz et Spohn ont généralisé ce dernier résultat au cas de systèmes ayant une dynamique markovienne [82]. De nombreuses études ont ensuite essayé de sonder (analytiquement, ou expérimentalement) cette relation sur des systèmes particuliers [117, 64]. L'ensemble de ces approches suppose une certaine réversibilité temporelle. Dans le cas de la démonstration de Gallavotti et Cohen, la symétrie par renversement du temps est présente dans les équations du mouvement. Dans le cas des systèmes stochastiques, il y a toujours la nécessité que, pour chaque trajectoire du système dans l'espace des phases, la trajectoire correspondante renversée dans le temps existe (c'est-à-dire qu'il faut que cette trajectoire ait une probabilité, aussi faible soit-elle, strictement positive). Il semblerait donc que la symétrie exprimée par la FR soit une conséquence raffinée de la symétrie par renversement du temps du système.

Une question importante est alors de savoir si une telle relation pourrait éventuellement être vérifiée également pour des systèmes dissipatifs, irréversibles⁶, comme par exemple les milieux granulaires, ou les systèmes turbulents. Pour ces systèmes, une définition du flux d'entropie fait défaut. La vérification (éventuelle) de la FR par une quantité

⁶On entend ici une irréversibilité *microscopique*, traduite par l'absence d'invariance par renversement du temps des équations du mouvement

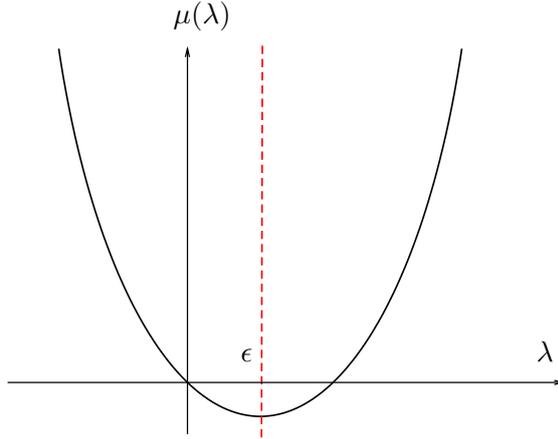


FIG. 1.3: Exemple de fonction génératrice des cumulants $\mu(\lambda)$. La symétrie 1.20 est déterminée par la valeur de l’affinité ϵ , qui maintient le système dans un état hors d’équilibre.

bien précise permettrait donc une possible identification de celle-ci avec le flux d’entropie. Dans cette optique, la FR semble une bonne pierre de touche pour identifier des candidats possibles pour le flux d’entropie, s’il existe.

Une telle question a été abordée pour la première fois par Aumaître *et al.* [3], dans plusieurs modèles de systèmes dissipatifs. D’autres études se sont également penchées sur le sujet [55, 56, 2, 58], sans forcément réussir à obtenir des résultats concluants sur la question.

Dans de tels systèmes, un état stationnaire est atteint en injectant de l’énergie. Le système étant irréversible, une partie de l’énergie est dissipée naturellement. Il suffit donc ici d’un seul “thermostat” pour faire naître un flux d’énergie qui traverse le système. En l’absence d’une définition rigoureuse du flux d’entropie, l’approche la plus intuitive suggère d’étudier l’entropie phénoménologique, représentée ici par la puissance injectée par le thermostat, divisée par la température du système. Ces considérations seront précisées dans les chapitres suivants.

D’une manière générale, l’entropie phénoménologique est proportionnelle à la puissance injectée, et peut s’écrire :

$$\langle \Sigma \rangle = \epsilon \langle Q \rangle , \quad (1.16)$$

où ϵ joue le rôle d’un champ, qui maintient le système dans un état stationnaire hors d’équilibre. Souvent, on se limite à étudier les propriétés de :

$$\mathcal{Q}_\tau = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt Q(t) = \frac{\mathcal{S}_\tau}{\epsilon} , \quad (1.17)$$

plutôt que celles de \mathcal{S}_τ . La quantité \mathcal{Q}_τ est également intégrée dans le temps, et sa

1 Introduction

fonction de grandes déviations

$$\pi(q) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \log P(\mathcal{Q}_\tau = q) , \quad (1.18)$$

va vérifier une relation de fluctuation qui s'écrit :

$$\pi(q) - \pi(-q) = \epsilon q . \quad (1.19)$$

De même, la relation (1.15) peut se traduire, pour la fonction génératrice des cumulants de \mathcal{Q}_τ :

$$\mu(\lambda) = \mu(\epsilon - \lambda) . \quad (1.20)$$

Un exemple qui représente l'allure typique des fonctions π et μ est exposé dans les figures 1.2 et 1.3. La fonction $\pi(q)$ est une fonction concave, qui prend sa valeur maximum dans la valeur la plus probable $q = \langle q \rangle = \langle \mathcal{Q}_\tau \rangle$. La fonction $\mu(\lambda)$ est, quant à elle, convexe. Elle s'annule en $\lambda = 0$, comme toute fonction génératrice des cumulants (c'est une condition imposée par la normalisation de $P(\mathcal{Q}_\tau)$).

En lien avec une possible Relation de Fluctuation, la détermination de fonctions de grandes déviations dans les systèmes fortement irréversibles constitue l'un des fils directeurs de cette thèse.

2

Les gaz granulaires

2.1 Introduction

2.1.1 Les milieux granulaires

Depuis maintenant plusieurs années, les milieux granulaires sont l'objet de nombreuses études au sein de la communauté scientifique. On parle généralement de milieu granulaire lorsqu'on a affaire à des systèmes constitués d'un grand nombre de particules macroscopiques (généralement de taille supérieure au micromètre) de sorte que l'énergie mécanique typique de chaque grain est beaucoup plus grande que l'échelle d'énergie thermique (d'une manière générale on a $mgh \gg k_B T$, avec des notations habituelles). De plus, les grains n'interagissent entre eux que lorsqu'ils sont en contact, et cette interaction est généralement *dissipative* (i.e. elle ne conserve pas l'énergie). Parmi les milieux granulaires, on distingue aussi plusieurs "phases", qui comprennent notamment [76] :

- une phase "dense", caractérisée par des temps de relaxation très grands et des effets de vieillissement (propriétés qui sont aussi communes aux matériaux vitreux)
- Une phase "liquide", qui peut être décrite par des équations continues, mais dont la rhéologie n'est pas newtonienne.
- une phase "gazeuse", caractérisée par une densité relativement faible. C'est cet état particulier de la matière en grains qui va être considéré, dans le cadre de cette thèse, comme un paradigme de système irréversible hors de l'équilibre.

Précisons qu'une telle "classification" n'a rien de systématique, et relève pour l'essentiel de l'arbitraire.

2.1.2 Le modèle des sphères dures inélastiques

On peut déduire du paragraphe précédent qu'un gaz granulaire est essentiellement un ensemble de particules macroscopiques, qui interagissent par des interactions de cœur

dur (collisions). Puisque chaque particule est elle même constituée d'un grand nombre d'atomes, la dynamique microscopique (à des échelles inférieures à la taille d'un grain) est extrêmement complexe et implique ondes de choc, radiation, et beaucoup d'autres phénomènes qu'il serait inutilement compliqué de décrire par des équations physiques. Cependant, on peut considérer que l'ensemble de ces phénomènes qui ont lieu pendant une collision produisent simplement un transfert d'énergie sur des modes microscopiques, qui ne vont jouer aucun rôle dans une description à l'échelle du grain. Une manière très simple de modéliser une telle collision inélastique consiste à considérer que lors de chaque collision, une partie de l'énergie cinétique totale de la paire de particules est perdue à jamais. La trajectoire de chaque particule va ainsi effectuer une réflexion spéculaire. La loi de collision résultante conserve la quantité de mouvement globale, et s'écrit :

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1^* = \mathbf{v}_1 - \frac{1+\alpha}{2}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \mathbf{v}_2^* = \mathbf{v}_2 + \frac{1+\alpha}{2}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{cases}, \quad (2.1)$$

où les astérisques se réfèrent aux vitesses post-collisionnelles, \mathbf{v}_1 et \mathbf{v}_2 sont les vitesses des particules engagées dans la collision, $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ est leur vitesse relative. Le vecteur $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ est un vecteur unitaire qui rejoint les centres de gravité des deux particules lorsqu'elles sont en contact (cf. Fig. 2.1). Par la suite on ne considérera que des systèmes monodisperses, où les particules ont toutes le même diamètre σ et la même masse m . À défaut d'une spécification précise, ces deux quantités vont être considérées comme égales à l'unité (elles seront utilisées comme unité respectivement de longueur et de masse). Dans la loi (2.1) on voit aussi paraître un coefficient α appelé *coefficient de restitution* : quand $\alpha = 1$ on retrouve le cas bien connu d'une collision élastique, et pour $\alpha = 0$ on a une collision purement inélastique. À partir de la loi de collision qui précède, on peut aisément vérifier que la quantité de mouvement est préservée après une collision. Par contre, l'énergie cinétique totale va être réduite d'un facteur

$$\Delta E = \frac{1 - \alpha^2}{4}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2. \quad (2.2)$$

Ce modèle de sphères dures inélastiques est une version simplifiée, qui néglige plusieurs effets (qui sont pris en compte par d'autres modèles), comme par exemple l'effet des rotations [78, 84, 83, 88, 114], ou le fait que le coefficient de restitution dépend en fait de la vitesse relative des particules [75, 31]. Cependant, même un tel modèle est capable de reproduire un grand nombre de phénomènes très riches et variés, comme l'apparition de structures hétérogènes (*clustering*) [68, 32, 109], l'effet du *Démon de Maxwell* [46, 106, 27, 5], ou encore la non équipartition de l'énergie [88, 118, 57], pour n'en citer que quelques uns (voir [6] pour une revue complète).

2.1.3 Refroidissement libre et états stationnaires

En raison du caractère dissipatif de la loi de collision, pour un gaz granulaire qui évolue librement, l'énergie cinétique totale va décroître dans le temps. De ce fait, il ne peut y avoir d'état stationnaire autre que l'état trivial où toutes les vitesses sont nulles

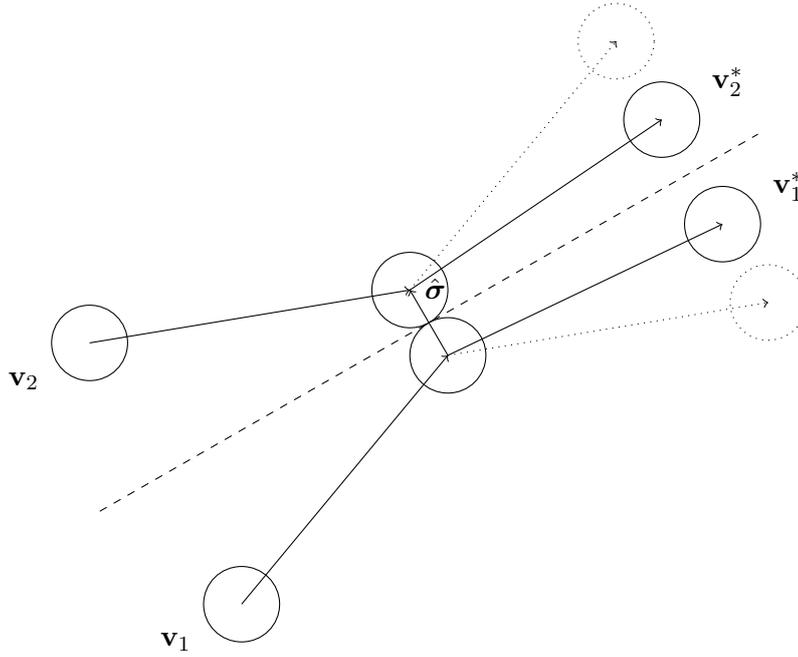


FIG. 2.1: Exemple de collision inélastique. Le trait en pointillé représente les trajectoires post-collisionnelles pour une collision élastique.

(dans le repère du centre de masse du système). L'évolution vers un tel état est appelé le “*refroidissement libre*”. Dans la limite où la densité est homogène, on sait prédire la loi temporelle de décroissance de l'énergie (loi de Haff [74]) qui suit une loi de puissance $E(t) \propto t^{-2}$. Cependant, on peut montrer qu'un tel état de refroidissement libre homogène est instable par rapport à des perturbations de grande longueur d'onde [28] : des amas se forment spontanément dans le système.

Par ailleurs, on peut compenser la perte d'énergie due aux collisions inélastiques par un apport extérieur. De cette manière, on peut obtenir un état stationnaire, qui va être intrinsèquement hors d'équilibre. En principe on pourrait imaginer une infinité de mécanismes d'injection d'énergie (“*thermostats*”), mais on va commencer à partager l'ensemble des thermostats en deux grandes familles, différenciées en fonction de l'homogénéité spatiale de l'état stationnaire. Dans ce travail, nous nous sommes penchés sur des représentants de chacune de ces deux familles.

Une première famille est représentée par des thermostats pour lesquels l'énergie est injectée par une condition aux bords. Il s'agit d'un dispositif relativement simple à réaliser expérimentalement : dans la plupart des expériences on place des grains (par exemple des billes d'acier) dans une boîte, et on fait vibrer à haute fréquence soit la boîte entière, soit une paroi de la boîte. Ce type de thermostat est aussi utilisé dans des simulations numériques, où on utilise parfois une paroi thermique (ou thermostat

de Maxwell), qui consiste à remplacer la vitesse d'une particule qui touche un bord par une vitesse tirée au hasard dans une distribution donnée. Puisque l'énergie est injectée en surface, et dissipée en volume, il ne pourra pas y avoir de compensation locale de la dissipation. C'est la raison pour laquelle l'état stationnaire, dans ce genre de situation, ne peut pas être homogène. Généralement les champs de densité et de température vont dépendre d'une variable d'espace, et vont donc présenter un certain profil spatial.

La deuxième famille de thermostats est en revanche caractérisée par un mécanisme d'injection locale d'énergie. De cette manière la dissipation peut être compensée localement par un apport extérieur d'énergie, et on peut obtenir un état stationnaire homogène. Généralement ce type de forçage est plutôt utilisé dans des simulations numériques, où on utilise souvent un bruit blanc qui agit sur chaque particule (thermostat stochastique), ou une force déterministe (qui dépend de la vitesse). Néanmoins les résultats de certaines expériences sont bien reproduits par de tels modèles. Le dispositif expérimental typique consiste à placer des grains sur une plaque horizontale qui vibre à haute fréquence, mais à très faible amplitude. Si cette plaque horizontale est rugueuse, les aspérités vont donner une impulsion aléatoire à chaque particule [97, 102]. Ceci semble bien reproduire les résultats analytiques obtenus dans le cadre du thermostat stochastique [108, 111, 94], où un bruit blanc agit sur chaque particule.

2.2 Équations d'évolution

2.2.1 Opérateur d'évolution

L'évolution d'un gaz granulaire peut être décrite à l'aide des nombreux outils que la théorie cinétique a développés depuis plus d'un siècle. Comme souvent en physique statistique on commence par définir les variables microscopiques – positions et vitesses – \mathbf{R}_i et \mathbf{V}_i pour chaque particule i , et les variables de champ, \mathbf{r}_i et \mathbf{v}_i , qui définissent les sous-espaces propres à chaque particule. La densité de l'espace des phases s'écrit alors comme une moyenne des configurations microscopiques :

$$\rho(\mathbf{\Gamma}; t) = \left\langle \prod_{i=1}^N \delta(\mathbf{X}_i - \mathbf{x}_i) \right\rangle, \quad (2.3)$$

où $\mathbf{\Gamma} = \{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N\}$, $\mathbf{X}_i = \{\mathbf{R}_i, \mathbf{V}_i\}$, $\mathbf{x}_i = \{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i\}$ et les crochets $\langle \dots \rangle$ indiquent une moyenne sur l'ensemble des conditions initiales. L'évolution temporelle de la densité ρ est régie par une équation linéaire de pseudo-Liouville :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \right] \rho(\mathbf{\Gamma}, t) = \sum_{i \neq j} \bar{T}_{ij} \rho(\mathbf{\Gamma}, t). \quad (2.4)$$

Le membre de gauche de l'équation qui précède décrit simplement une évolution en mouvement libre, tandis que le membre de droite prend en compte l'effet de toutes les collisions possibles entre des particules i et j . Ces collisions sont décrites par l'opérateur

de collision binaire [52, 26, 110] :

$$\bar{T}_{ij} = \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \left(\frac{1}{\alpha^2} \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) b_{ij}^{**} - \delta(\mathbf{r}_{ij} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \right). \quad (2.5)$$

Dans l'opérateur de collision binaire, Θ représente la fonction de Heaviside, et l'opérateur b_{ij}^{**} remplace les vitesses i et j par leur pendants pré-collisionnels :

$$b_{ij}^{**} \rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_i, \dots, \mathbf{v}_j, \dots, \mathbf{v}_N; t) = \rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_i^{**}, \dots, \mathbf{v}_j^{**}, \dots, \mathbf{v}_N; t). \quad (2.6)$$

On obtient l'expression des vitesses pré-collisionnelles en inversant la loi de collision (2.1) [il suffit en fait juste de remplacer α par $1/\alpha$ dans (2.1)] :

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1^{**} = \mathbf{v}_1 - \frac{1+\alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \mathbf{v}_2^{**} = \mathbf{v}_1 + \frac{1+\alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \end{cases} \quad (2.7)$$

2.2.2 Hiérarchie BBGKY et équation de Boltzmann

Même si on sait formellement écrire une équation d'évolution pour la densité à N points $\rho(\mathbf{\Gamma})$, il s'agit d'une équation trop compliquée pour permettre une résolution analytique ou numérique. Pour simplifier le problème, une première étape consiste à réécrire l'équation d'évolution (2.4) sous la forme d'un système fermé de N équations pour les densités réduites à s points

$$f^s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; t) = \frac{N!}{(N-s)!} \int d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_s \rho(\mathbf{\Gamma}; t), \quad (2.8)$$

où par définition $s \leq N$. En intégrant l'équation (2.4) sur $N - s$ variables \mathbf{x}_i pour $1 \leq s \leq N$ on obtient ainsi une hiérarchie de N équations, chacune reliant une fonction à s points f^s à une fonction à $s + 1$ points f^{s+1} . Cet ensemble d'équations prend le nom de hiérarchie BBGKY (cet acronyme est obtenu à partir des initiales de Born, Bogoliubov, Green, Kirkwood et Yvon). La plus simple de toutes ces équations est sans doute la première, qui relie la fonction à 1 point $f^1 \equiv f$ à la fonction f^2 :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \right) f(\mathbf{x}_1; t) = \int d\mathbf{x}_2 T_{12} f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; t). \quad (2.9)$$

Pour obtenir une équation fermée pour $f(\mathbf{x})$ on a encore besoin d'une équation qui relie f à f^2 . Une telle relation de fermeture est donnée par l'hypothèse de chaos moléculaire (*stosszahlansatz*). Le point clé de cette hypothèse est le fait que deux particules, avant une collision, sont supposées décorréelées [70, 103] :

$$f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \simeq f(\mathbf{x}_1) f(\mathbf{x}_2). \quad (2.10)$$

2 Les gaz granulaires

Si en plus on néglige (ce qui est parfaitement justifié dans la limite diluée) la distance au contact des centres de masse des deux particules impactantes devant le libre parcours moyen, on aboutit à l'équation de Boltzmann suivante :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \right) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1; t) = J[f|f] . \quad (2.11)$$

L'opérateur non linéaire (et non local) $J[f|f]$ est l'intégrale de collision :

$$J[f|f] = \sigma^{d-1} \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \left(\frac{1}{\alpha^2} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1^{**}) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2^{**}) - f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2) \right) , \quad (2.12)$$

où la notation \int' indique que le domaine d'intégration est défini par le demi-espace où $\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} > 0$.

2.2.3 Équations hydrodynamiques

À partir de l'équation (2.11), on peut écrire des équations hydrodynamiques pour les champs de densité, de vitesse et de température. Ces champs sont définis comme les premiers moments de la fonction de distribution à un point :

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) , \quad (2.13a)$$

$$n(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) , \quad (2.13b)$$

$$\frac{d}{2} n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) . \quad (2.13c)$$

Il faut remarquer que ces définitions sont purement cinétiques, en parfaite analogie avec la théorie cinétique des gaz. Cependant, nous avons affaire ici à des particules macroscopiques. De ce fait, l'agitation thermique microscopique, qui est à la base de la définition de la température thermodynamique, ne joue aucun rôle dans la description statistique des grains (on rappelle que $mgh \gg k_B T$). La température définie par l'éq. (2.13c) n'est donc pas la température thermodynamique habituelle : il s'agit de la *température granulaire*. En projetant l'équation (2.11) sur les premiers moments de la vitesse, on obtient des équations continues pour les champs hydrodynamiques :

$$\partial_t n + \nabla \cdot (n \mathbf{u}) = 0 , \quad (2.14a)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) u_i + (mn)^{-1} \nabla_j P_{ij} = 0 , \quad (2.14b)$$

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla + \zeta) T + \frac{2}{3n} (P_{ij} \nabla_j u_i + \nabla \cdot \mathbf{q}) = 0 . \quad (2.14c)$$

Ces équations définissent de manière naturelle l'expression microscopique du tenseur de pression P_{ij} , du flux de chaleur \mathbf{q} , et du taux de refroidissement ζ :

$$P_{ij}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} m (v_i - u_i)(v_j - u_j) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) , \quad (2.15)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \frac{m}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 (\mathbf{v} - \mathbf{u}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.16)$$

$$\zeta(\mathbf{r}, t) = \frac{(1 - \alpha^2) m \pi^{\frac{d-1}{2}} \sigma^{d-1}}{4d\Gamma\left(\frac{d+3}{2}\right) n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t)} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 |v_{12}|^3 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_2, t). \quad (2.17)$$

Toute la difficulté consiste ensuite à obtenir des équations constitutives, s'il en existe, c'est-à-dire à relier, P_{ij} et \mathbf{q} aux différents gradients. À partir de ces équations on peut effectuer par exemple un développement en série, en puissances des gradients spatiaux (il s'agit du développement de Chapman-Enskog [35, 103]). En cherchant des solutions dites "normales", où la dépendance spatiale de la fonction de distribution n'intervient qu'à travers les champs hydrodynamiques, on arrive à exprimer la pression, le flux de chaleur et le taux de refroidissement en fonction uniquement de n , \mathbf{u} et T , et de certains coefficients de transport, qui dans ce cas sont des fonctions du coefficient de restitution α . On aboutit ainsi à un système d'équations fermé pour les champs hydrodynamiques. Ces équations pourront être utilisées en particulier dans certains cas d'un gaz chauffé par des parois, et d'une manière générale dans des cas où l'injection d'énergie est fournie par des conditions aux bords. Il faut tout de même rappeler que ces équations ne sont correctes que si les gradients sont faibles. Plus précisément, il faut être *a priori* dans un régime hydrodynamique, ce qui veut dire que le libre parcours moyen doit être petit par rapport aux échelles de longueur typiques des gradients (en d'autres termes, le nombre de Knudsen, qui est le rapport entre ces deux quantités, doit être petit devant l'unité [25]).

2.2.4 Termes de forçage

Jusqu'à présent on a considéré une équation d'évolution qui ne tient pas compte d'éventuels termes dus à des mécanismes d'injection d'énergie. L'équation (2.11) peut donc être utilisée seulement pour décrire un régime de refroidissement libre, ou un système chauffé par des conditions aux bords. On va maintenant s'intéresser à la manière de modifier l'équation (2.11) pour tenir compte de forces supplémentaires agissant sur les particules. Pour cela, on va considérer le cas général d'une force qui s'écrit :

$$\mathbf{F}_i^{th} = \mathbf{a}(\mathbf{v}_i) + \boldsymbol{\xi}_i, \quad (2.18)$$

où $\mathbf{a}(\mathbf{v})$ est une force déterministe, qui ne dépend que de la vitesse, et $\boldsymbol{\xi}$ est un bruit blanc, de moyenne nulle et corrélation

$$\langle \boldsymbol{\xi}_i(t) \boldsymbol{\xi}_j(t') \rangle = 2\xi_0^2 \delta(t - t') \delta_{i,j}, \quad (2.19)$$

où $\langle \dots \rangle$ désigne une moyenne d'ensemble. Sur chaque particule va agir une force due aux collisions en plus de la force du thermostat. Nous avons vu dans le paragraphe précédent que les changements des fonctions de distribution dus aux collisions étaient bien pris en compte par l'opérateur de pseudo-Liouville. Pour déterminer l'équation d'évolution complète, il suffit de rajouter les opérateurs de Fokker-Planck correspondant à la force (2.18) [107, 63]. On obtient finalement :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \right] \rho(\mathbf{\Gamma}, t) = \sum_{i \neq j} \bar{T}_{ij} \rho(\mathbf{\Gamma}, t) + \sum_i \mathcal{F}_i \rho(\mathbf{\Gamma}, t), \quad (2.20)$$

2 Les gaz granulaires

avec [107, 63]

$$\mathcal{F}_i = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} \cdot \mathbf{a}(\mathbf{v}_i) + \xi_0^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_i^2} . \quad (2.21)$$

En pratique on va considérer comme forçage soit simplement un bruit blanc (thermostat stochastique), soit une force de “friction négative”, $\mathbf{a} = \gamma \mathbf{v}$, où γ est une constante positive (thermostat gaussien). L’intérêt du thermostat stochastique tient principalement au caractère général de la force. De plus, ce type de forçage modélise assez bien des expériences menées en quasi-2 dimensions [97, 102] (cf aussi le paragraphe 2.2.4). Par contre, la force de friction négative qui caractérise le thermostat gaussien n’a pas, à première vue, d’application expérimentale directe. Cependant, lorsque l’on cherche des solutions à l’équation de Boltzmann pour le refroidissement libre dans un état homogène, si l’on introduit, comme le suggèrent les simulations numériques, une nouvelle fonction d’échelle \tilde{f} , définie par

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{n}{(2T(t))^{d/2}} \tilde{f} \left(\frac{\mathbf{v}}{\sqrt{2T(t)}} \right) , \quad (2.22)$$

on s’aperçoit que l’équation vérifiée par \tilde{f} est exactement la même que celle vérifiée par un système chauffé par un thermostat gaussien, où le coefficient γ est remplacé par le taux de refroidissement ζ (cf. (2.17)).

2.2.5 Propriétés des solutions

Même si on ne sait pas obtenir un résultat exact pour les solutions de l’équation de Boltzmann, on arrive quand même à avoir des résultats qui, bien qu’approximatifs, reproduisent, avec un très bon accord quantitatif, certaines propriétés des solutions. En particulier, deux limites bien précises de la pdf de la vitesse nous intéressent : le comportement autour de la moyenne et le comportement très loin de la moyenne. On se place dans le cadre d’un forçage homogène, et on s’intéresse à des solutions homogènes de l’équation de Boltzmann.

Une telle solution est stable pour le thermostat stochastique contrairement au cas du thermostat gaussien, pour lequel la solution homogène n’est pas stable. On sait que dans le cas élastique (quand $\alpha = 1$), la pdf de la vitesse est une gaussienne. On se restreint par ailleurs à la recherche de solutions isotropes. Pour avoir des renseignements sur la forme de la distribution quand $\alpha < 1$, on peut essayer de perturber la solution gaussienne. Pour cela on introduit d’abord une famille de polynômes orthogonaux par rapport à une mesure gaussienne, les polynômes de Sonine [35]. On note $S_p(x)$ le polynôme d’ordre p . L’expression des premiers polynômes est la suivante :

$$S_0(x) = 1 \quad (2.23a)$$

$$S_1(x) = -x + \frac{1}{2}d \quad (2.23b)$$

$$S_2(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}(d+2)x + \frac{1}{8}d(d+2) \quad (2.23c)$$

$$S_3(x) = \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{4}(d+4)x^2 - \frac{1}{8}(8+d(d+6)) + \frac{1}{48}d(d(d+6)+8). \quad (2.23d)$$

On peut alors essayer d'exprimer la solution sous la forme :

$$f(\mathbf{v}) = \phi(\mathbf{v}) \sum_{p=0}^N a_p S_p \left(\frac{v^2}{2T} \right), \quad (2.24)$$

où ϕ est une gaussienne.

En utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Sonine, on peut déduire l'expression des coefficients a_p en fonction des moments de la vitesse :

$$a_p = \frac{\int d\mathbf{v} f(\mathbf{v}) S_p(v^2)}{\int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{v}) S_p^2(v^2)} \equiv \frac{\langle S_p(v^2) \rangle}{\langle S_p^2(v^2) \rangle_0}, \quad (2.25)$$

où $\langle \dots \rangle$ représente une moyenne sur f et $\langle \dots \rangle_0$ une moyenne sur ϕ . À partir de cette relation, on voit aisément que le coefficient $a_0 = 1$ pour assurer la normalisation, et que $a_1 = 0$, par définition de la température granulaire $T = \langle \mathbf{v}^2 \rangle / d$. La première correction à la gaussienne vient donc du coefficient a_2 , qui est relié au quatrième cumulant de la vitesse.

La solution homogène et stationnaire f doit vérifier l'équation de Boltzmann :

$$J[f|f] + \mathcal{F}f = 0. \quad (2.26)$$

Pour obtenir une estimation du coefficient a_2 , on tronque la série (2.24) à l'ordre a_2 , et on injecte la série tronquée dans (2.26). Ensuite, on projette l'équation ainsi obtenue sur les premiers moments de la vitesse, ce qui donne :

$$\int d\mathbf{v} v^p \mathcal{F}f = \nu_p, \quad (2.27)$$

où ν_p est le moment collisionnel d'ordre p (l'expression des premiers moments collisionnels est donnée dans l'appendice A) :

$$\nu_p = - \int d\mathbf{v} v^p J[f|f]. \quad (2.28)$$

En prenant l'équation (2.27) pour $p = 2$ et $p = 4$ (en fait, pour p impair les moments collisionnels sont tous nuls, puisque f est une fonction paire) on a un système d'équations fermé pour T et pour a_2 . Cela donne, pour le thermostat stochastique [108] :

$$T^{st} = m \left(\frac{d\xi_o^2 \sqrt{\pi}}{(1-\alpha^2)\Omega_d n \sigma^{d-1}} \right)^{2/3} (1 + \mathcal{O}(a_2)), \quad (2.29)$$

$$a_2^{st}(\alpha) = \frac{16(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{73 + 56d - 24\alpha d - 105\alpha + 30(1-\alpha)\alpha^2}, \quad (2.30)$$

2 Les gaz granulaires

et, pour le thermostat gaussien :

$$T^{gauss} = m \left(\frac{2\sqrt{\pi}\gamma d}{(1-\alpha^2)\Omega_d n \sigma^{d-1}} \right)^2 (1 + \mathcal{O}(a_2)) . \quad (2.31)$$

$$a_2^{gauss} = \frac{16(1-\alpha^2)(1-2\alpha^2)}{25 + 24d - \alpha(57 - 8d) - 2(1-\alpha)\alpha^2} , \quad (2.32)$$

où Ω_d est l'angle solide en dimension d :

$$\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} . \quad (2.33)$$

La troncature de cette série au deuxième terme donne déjà un résultat très satisfaisant pour la forme de la pdf de la vitesse autour de la moyenne. Pour obtenir une estimation du comportement de la pdf pour des grandes vitesses (c'est-à-dire le comportement des queues de la distribution), une autre approche est nécessaire. En fait, si on considère une particule très rapide, elle va en moyenne plutôt perdre de l'énergie après une collision. De ce fait, le terme de perte de l'intégrale de collision va être beaucoup plus grand que le terme de gain. De plus, la vitesse relative $|\mathbf{v}_{12}| \simeq |\mathbf{v}_1|$, puisqu'on considère que $|\mathbf{v}_1|$ est très grand. Finalement, l'intégrale de collision se simplifie en :

$$J[f|f] \simeq -\frac{\beta_1}{\ell} |\mathbf{v}_1| f(\mathbf{v}_1) \quad (2.34)$$

où $\ell = n\sigma^{d-1}$ est une longueur proportionnelle au libre parcours moyen, et

$$\beta_1 = \int' d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\hat{\mathbf{v}}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} . \quad (2.35)$$

Dans le cadre de cette approximation, le comportement à grande vitesse est donné, pour le cas d'un thermostat stochastique, par :

$$f(v) \propto \exp\left(-\frac{2}{3}\sqrt{\frac{\beta_1}{\ell\xi_0^2}}v^{3/2}\right) , \quad (2.36)$$

et, pour le thermostat gaussien, par :

$$f(v) \propto \exp\left(-\frac{\beta_1}{\ell\gamma}v\right) . \quad (2.37)$$

On voit donc que, même si le comportement autour de la moyenne est proche de la gaussienne, les queues sont toujours surpeuplées par rapport à la gaussienne.

2.2.6 Molécules de Maxwell et modèles cinétiques

L'équation de Boltzmann pour les sphères dures est une équation intégral-différentielle non linéaire, et, hormis le cas d'équilibre, où la solution est une gaussienne, on ne sait pas la résoudre exactement. Afin d'avoir des versions simplifiées de l'équation de Boltzmann, on va d'abord écrire une forme plus générale de cette équation¹ :

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}_1, t) = n\sigma^{d-1}(2T)^{\frac{1-\nu}{2}} \int d\mathbf{v}_2 \int' (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^\nu (\alpha^{-\nu-1} f(\mathbf{v}_1^{**})f(\mathbf{v}_2^{**}) - f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2)) . \quad (2.38)$$

Dans le cas élastique ($\alpha = 1$), le noyau $(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^\nu$ est relié au potentiel d'interaction de paire $U(\mathbf{r}_{ij})$. Par simple analyse dimensionnelle on peut montrer que si $U(\mathbf{r}_{ij}) \sim 1/r^n$, alors l'exposant ν du noyau de collision est relié à l'exposant de la force n par [103] :

$$\nu = 1 - \frac{2(d-1)}{n} . \quad (2.39)$$

On voit que dans la limite $n \rightarrow \infty$ on retrouve bien le cas des sphères dures, où $\nu = 1$. Il y a cependant d'autres cas, qui sont intéressants à cause de leur simplicité. Le cas le plus simple est sans doute le cas $\nu = 0$, qui correspond, lorsque $\alpha = 1$, à un potentiel d'interaction $U(r) \sim 1/r^{2(d-1)}$. Ce modèle simple a été introduit pour la première fois par J.C. Maxwell [86], pour déterminer les coefficients de transport. On peut voir ce modèle comme une sorte de version “champ moyen” de l'équation de Boltzmann pour les sphères dures, puisqu'il remplace simplement le noyau de collision $\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ par sa valeur moyenne, qui est la fréquence de collision $\omega \equiv n\sigma^{d-1}\sqrt{2T}$. Un autre cas célèbre est le cas $\nu = 2$ [49], qui est appelé *modèle de sphères très dures*, puisqu'il correspondrait à un potentiel d'interaction avec une décroissance plus rapide que le potentiel des sphères dures. Même si nés dans le cadres de systèmes cinétiques conservant l'énergie, tous ces modèles s'adaptent très bien à des systèmes granulaires, bien que l'interprétation physique soit sans doute moins transparente. Le modèle de Maxwell a néanmoins eu beaucoup de succès dans la littérature [14, 4, 9, 8, 50], en étant plus abordable², ce qui a permis d'avoir des résultats analytiques exacts.

2.3 Fluctuations d'énergie

On va maintenant s'intéresser aux fluctuations d'énergie. Compte tenu de la nécessité de mieux comprendre l'éventuelle importance de la pdf de quantités globales, l'énergie est sans doute celle qui se prête le mieux (à cause de son sens physique) à une étude des fluctuations. De plus, au delà de l'intérêt général d'une telle étude pour une “classification” des distributions hors d'équilibre, des résultats récents [24] montrent que les fluctuations d'énergie pour un gaz granulaire en refroidissement libre à l'approche de la transition de “clustering”, sont distribuées suivant une distribution de Gumbel. Cette

¹Par souci de simplicité, on va se placer dans le cas homogène où $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \equiv f(\mathbf{v}, t)$

²Dans ce cas l'intégrale de collision se réduit en effet à un produit de convolution.

2 Les gaz granulaires

observation renforce l'importance de cette distribution dans des systèmes critiques, et semble cacher un lien avec l'existence de longueurs de corrélations divergentes.

Deux études récentes s'étaient déjà penchées sur le sujet. D'une part, les travaux numériques de Aumaître *et al.* [3, 2], qui ont regardé d'un côté la forme de la distribution de l'énergie, qui est non gaussienne, et d'un autre côté la non extensivité de l'énergie (et la non intensivité de la température granulaire qui en découle). D'autre part, les travaux de Brey *et al.* [23], sur les fluctuations d'énergie dans le cas du refroidissement libre homogène, montrent que les fluctuations d'énergie sont essentiellement gaussiennes, avec une variance non-triviale, qui est due à la présence de corrélations entre vitesses. Il semble donc que les effets non triviaux des fluctuations d'énergie peuvent être attribués d'une part aux corrélations, et d'autre part, aux hétérogénéités. Dans un premier temps on va s'intéresser au cas hétérogène, pour essayer de quantifier ces deux contributions. Dans un deuxième temps, nous nous pencherons sur le cas d'un chauffage homogène, où seules les corrélations peuvent jouer un rôle.

L'ensemble de ces résultats est publié dans la référence [P6]

2.3.1 Le cas d'un gaz vibré

On considère d'abord le cas d'un gaz chauffé par une paroi vibrante. Le but étant aussi de comparer les résultats aux simulations de Aumaître *et al.* [3, 2], on va se placer dans la même configuration d'un gaz granulaire à deux dimensions dans une boîte dont une paroi vibre sinusoïdalement, le tout sans gravité (un cliché du système est montré dans la figure 2.2). Dans ce cadre, le champ de vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ est nul. De plus le produit du champ de température avec le champ de densité (c'est-à-dire la pression) est, dans la limite diluée, constant. Avec ces simplifications les équations hydrodynamiques (2.13) peuvent être résolues exactement. Le résultat peut s'exprimer par le profil de température [29], qui, en raison des symétries du problème, ne dépend que de la distance x par rapport à la paroi vibrante, et perpendiculairement à celle-ci. On introduit d'abord une nouvelle échelle de longueur réduite ℓ (à ne pas confondre avec la longueur $n\sigma^{d-1}$ introduite précédemment), adimensionnée par le libre parcours moyen $\lambda(x)$, définie par :

$$d\ell = \frac{dx}{\lambda(x)}, \quad \lambda(x) = \left[\frac{\sqrt{2\pi}^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma[(d+1)/2]} \sigma^{d-1} n(x) \right]^{-1}. \quad (2.40)$$

Quand $x = 0$, on a bien $\ell = 0$, et quand $x = H$, on a $\ell = \ell_m$ où :

$$\ell_m = \frac{\sqrt{2\pi}^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma[(d+1)/2]} \sigma^{d-1} \int_0^H dx n(x) = C \sigma^{d-1} N_x, \quad (2.41)$$

où N_x est le nombre de particules par unité de section perpendiculaire à l'axe x (par exemple, en deux dimensions, $N_x = N/L$, où L est la largeur du rectangle contenant les particules). Le profil de température s'écrit alors :

$$T(\ell) = T_0 \left(\frac{\cosh \left(\sqrt{a(\alpha)} (\ell_m - \ell) \right)}{\cosh \left(\sqrt{a(\alpha)} \ell_m \right)} \right)^2. \quad (2.42)$$

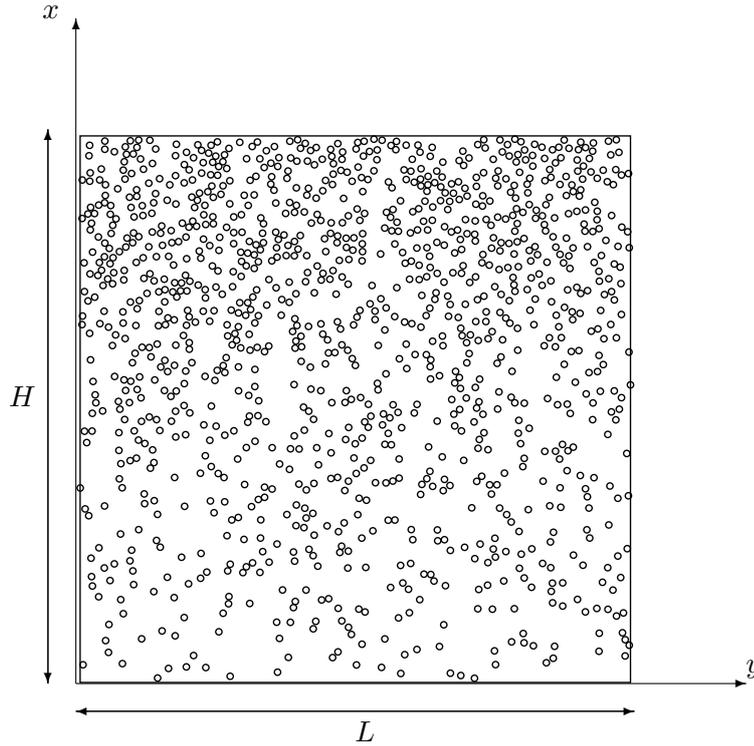


FIG. 2.2: Un cliché de l'état stationnaire pour un système de $N = 1200$ particules dans une boîte carrée de côté $L = H = 86.6\sigma$, à densité moyenne $\rho = 0.15$.

Le facteur $a(\alpha)$ est une fonction de α qui est déterminée par le développement de Chapman-Enskog (son expression analytique est donnée dans la Réf. [29]). Les conditions aux bords utilisées pour aboutir au profil de température sont :

$$T(\ell = 0) = T(x = 0) = T_0 \quad \left. \frac{\partial T}{\partial \ell} \right|_{\ell=\ell_m} = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=H} = 0 . \quad (2.43)$$

Nous avons confirmé la validité de ce résultat par des simulations de Dynamique Moléculaire, dont on montre un résultat dans la figure 2.3, qui compare l'expression (2.42) au profil de température mesuré.

Voilà l'état des lieux tel qu'établi par Brey *et al.* [29]. Nous avons à ce stade entrepris une étude des fluctuations d'énergie, afin d'expliquer les résultats observés par Aumaître *et al.* [2].

Fluctuations d'énergie totale

On va s'intéresser maintenant aux fluctuations d'énergie totale, le but étant de séparer les contributions dues aux corrélations, des effets dus à l'hétérogénéité du système.

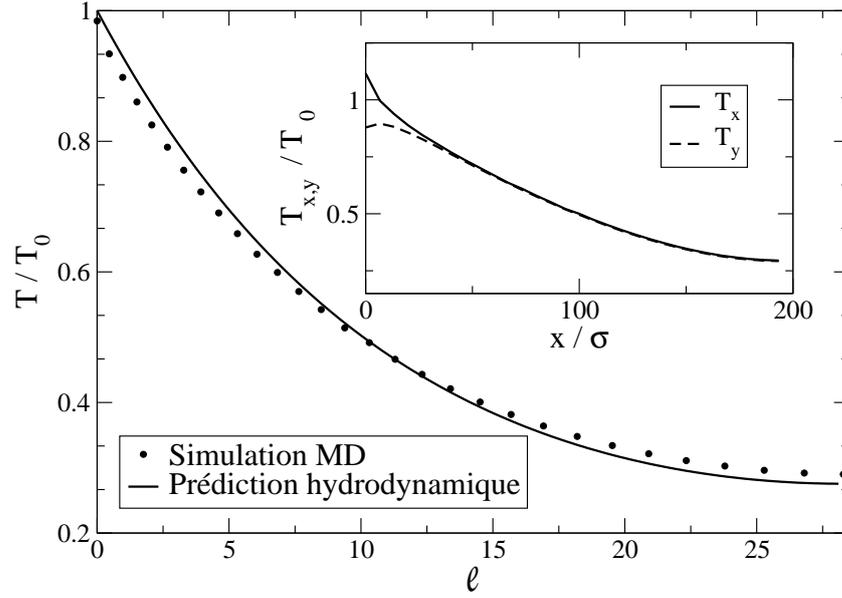


FIG. 2.3: Profil de température en fonction de la longueur réduite ℓ pour un système de $N = 1000$ particules dans un rectangle de hauteur $H = 200 \sigma$ et densité $\rho \sigma^2 = 0.05$, avec un coefficient de restitution $\alpha = 0.99$. La température est en unités de la température T_0 près de la paroi vibrante. L'encadré montre les profils de température des composantes x et y , en fonction de la hauteur x . On observe que la température est effectivement isotrope, hormis pour une petite région au voisinage de la paroi vibrante, où la description hydrodynamique est mise en défaut (ici le nombre de Knudsen est grand).

Pour cela, il faut pouvoir estimer la distribution de la vitesse. Quoique celle-ci soit non gaussienne, les écarts à la gaussienne sont relativement faibles, et de plus parfaitement contrôlés. On va donc partir de l'hypothèse qu'à une hauteur donnée x (où mieux ℓ , si on se place dans cette échelle), la pdf de la vitesse est une gaussienne avec une température $T(\ell)$:

$$f(\mathbf{v}, \ell) = \frac{e^{-v^2/2T(\ell)}}{(2\pi T(\ell))^{d/2}} . \quad (2.44)$$

L'énergie $e = v^2/2$ de chaque particule est donc distribuée suivant :

$$p(e, \ell) = f_{\frac{1}{T(\ell)}, \frac{d}{2}}(e) , \quad (2.45)$$

où $f_{\alpha, \nu}(x)$ est une distribution gamma [59] :

$$f_{\alpha, \nu}(x) = \frac{\alpha^\nu}{\Gamma(\nu)} x^{\nu-1} e^{-\alpha x} . \quad (2.46)$$

La fonction caractéristique (i.e. la transformée de Fourier) de la distribution gamma est donnée par :

$$\tilde{f}_{\alpha,\nu}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ikx} f_{\alpha,\nu}(x) = \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right)^{-\nu}. \quad (2.47)$$

La quantité macroscopique d'intérêt est la température granulaire, définie comme la moyenne spatiale de la température locale :

$$T_g = \frac{1}{N} \int_V n(\mathbf{r}) T(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{1}{\ell_m} \int_0^{\ell_m} T(\ell) d\ell. \quad (2.48)$$

Afin de calculer la distribution de l'énergie totale, il est utile de diviser le système en $\ell_m/\Delta\ell$ couches, de hauteur $\Delta\ell$. L'avantage d'utiliser l'échelle ℓ est que maintenant dans chaque couche le nombre de particules N_ℓ est constant, puisque $d\ell \propto n(x)dx$. De plus dans chaque couche i la température $T_i \equiv T(i\Delta\ell)$ est aussi homogène. Dans une couche j , l'énergie ϵ_j est la somme de N_ℓ vitesses distribuées suivant une distribution gaussienne de variance T_j . La distribution de l'énergie pour une couche donnée $q_j(x) = \text{prob}(\epsilon_j = x)$ peut s'écrire, si on néglige les corrélations :

$$q_j(x) = f_{\frac{1}{T_j}, N_\ell \frac{d}{2}}(x). \quad (2.49)$$

Finalement, la fonction caractéristique de l'énergie totale $E = \sum_j \epsilon_j$ peut s'écrire comme le produit des fonctions caractéristiques \tilde{q}_j :

$$\tilde{P}(k) = \prod_{j=0}^{\ell_m/\Delta\ell} \tilde{q}_j(k) = \prod_{j=0}^{\ell_m/\Delta\ell} (1 - ikT_j)^{-\frac{N_\ell d}{2}}. \quad (2.50)$$

Puisque le nombre de particules dans chaque couche N_ℓ est une fraction connue du nombre total de particules ($N_\ell = N\Delta\ell/\ell_m$), on peut réécrire l'expression (2.50) comme une somme de Riemann. Dans la limite $\Delta\ell \rightarrow 0$ on obtient la fonction caractéristique de l'énergie totale, qui s'écrit :

$$\tilde{P}(k) = \exp\left(-\frac{Nd}{2\ell_m} \int_0^{\ell_m} \log(1 - ikT(\ell)) d\ell\right). \quad (2.51)$$

Fluctuations locales d'énergie

Il est aussi intéressant d'étudier les fluctuations d'énergie "locale", c'est-à-dire les fluctuations d'énergie pour une couche à une distance x de la paroi vibrante et d'une épaisseur Δx (suffisamment faible pour que la densité et la température puissent être considérées homogènes). On considère toujours que les vitesses sont gaussiennes et indépendantes. Dans ce cas l'énergie ϵ est une somme de $N(x)$ variables aléatoires identiquement distribuées, mais leur nombre $N(x)$ fluctue dans le temps. La pdf de l'énergie locale $\epsilon(x)$ peut donc s'écrire :

$$P_I(\epsilon, x) = \sum_{N(x)=1}^{\infty} P_d(N(x)) f_{\frac{1}{T(x)}, N(x)\frac{d}{2}}(\epsilon) + P_d(0)\delta(\epsilon), \quad (2.52)$$

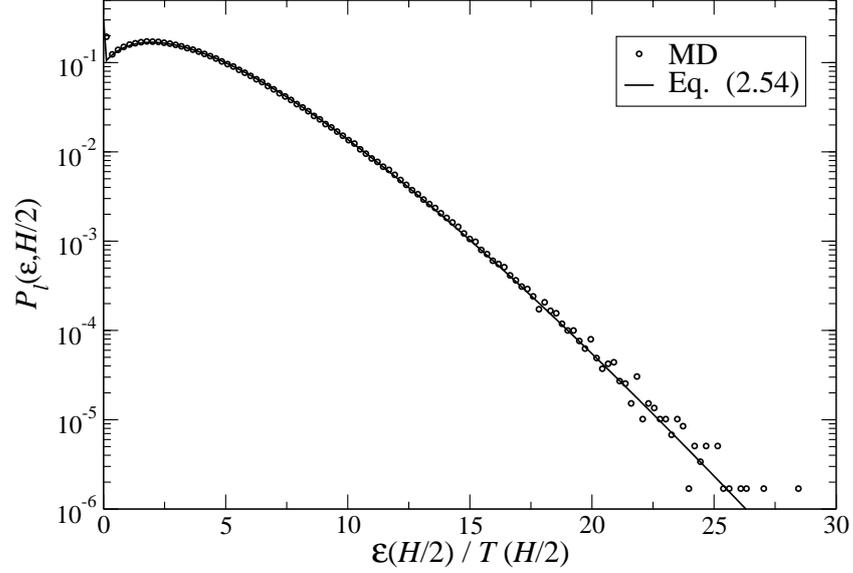


FIG. 2.4: Distribution de l'énergie locale pour un système de $N = 100$ particules dans une boîte carré avec une densité $\rho\sigma^2 = 0.04$ et avec $\alpha = 0.95$. L'énergie a été échantillonnée dans une bande d'épaisseur $\Delta x = 1.66\sigma$, centrée en $x = H/2$. La courbe en trait continu est l'estimation analytique de l'équation (2.54).

où P_d est la distribution du nombre de particules à une distance x de la paroi vibrante. Le deuxième terme dans le membre de droite de l'équation précédente est dû au fait que lorsqu'il n'y a pas de particules dans la couche la distribution de l'énergie est une distribution delta. Si les particules sont décorréélées, la distribution P_d devrait être bien approximée par une Poissonnienne, de moyenne $\langle N(x) \rangle = n(x)\Delta x$:

$$P_d(N(x) = i) = e^{-n(x)\Delta x} \frac{(n(x)\Delta x)^i}{i!}. \quad (2.53)$$

Dans le cadre de cette approximation, la pdf locale de l'énergie peut être calculée analytiquement, ce qui donne, en deux dimensions d'espace :

$$P_l(\epsilon, x) = e^{-n(x)\Delta x - \frac{\epsilon}{T(x)}} \sqrt{\frac{n(x)\Delta x}{T(x)\epsilon}} I_1 \left(2\sqrt{\frac{n(x)\Delta x \epsilon}{T(x)}} \right) + 2e^{-n(x)\Delta x} \delta(\epsilon), \quad (2.54)$$

où $I_n(x)$ est la fonction modifiée de Bessel du premier type [1]. Pour des dimensions d'espace supérieures à deux, la somme dans l'éq. (2.52) avec des fluctuations de densité poissonniennes peut s'exprimer en termes de fonctions hypergéométriques. Nous avons également comparé ce résultat à des simulations de Dynamique Moléculaire (MD), comme montré dans la figure 2.4. Les cumulants de cette distribution sont, en dimension générale d :

$$\langle \epsilon^p \rangle_c(x) = \frac{n(x)\Delta x T^p(x)}{2^p} d(d+2) \dots (d+2p-2), \quad (2.55)$$

où la notation $\langle X^p \rangle_c$ désigne le cumulants d'ordre p de la variable aléatoire X .

Comparaison avec les résultats numériques

Afin d'obtenir une expression analytique pour la pdf de l'énergie totale, il faut calculer la transformée de Fourier inverse de l'équation (2.51) en utilisant (2.42) comme profil de température. Ceci ne semble pas possible analytiquement, mais on peut toujours recourir à des méthodes numériques. Aumaître *et al.* [3, 2] ont montré par des simulations de MD que la distribution de l'énergie totale a la forme d'une loi du χ^2 (i.e. une distribution gamma, cf. (2.46)), mais avec un nombre de degrés de liberté différent de $N \times d$, et une température différente de la température granulaire moyenne T_g . Ils ont donc proposé de définir un nombre de degrés de liberté effectif N_f et une température effective T_E tels que la pdf de l'énergie s'écrive :

$$\Pi(E) = f_{\frac{1}{T_E}, \frac{N_f}{2}}(E) . \quad (2.56)$$

La définition de N_f et T_E devient alors :

$$N_f = 2 \frac{\langle E \rangle_c^2}{\langle E^2 \rangle_c}, \quad T_E = \frac{\langle E^2 \rangle_c}{\langle E \rangle_c} . \quad (2.57)$$

On a déjà montré dans la Fig. 2.3 le bon accord entre le profil de température mesuré et la prédiction hydrodynamique de l'éq.(2.42). Les points numériques sont le résultat d'une simulation de dynamique moléculaire dite "événementielle", avec des conditions aux bords périodiques dans la direction y (perpendiculaire au forçage), une paroi vibrante en $x_0(t) = A \sin(\Omega t)$, avec $A = 0.25\sigma$ (Ω fixe l'échelle de temps), et une paroi solide en $x = H$. Dans la figure 2.5 la transformée de Fourier inverse de (2.51) est comparée avec la composante y de l'énergie totale mesurée dans la simulation, avec un bon accord numérique. On a limité notre analyse à la seule composante y parce que les déviations par rapport à la gaussienne pour la pdf de la vitesse sont plus faibles dans cette direction³, ce qui est en meilleur accord avec nos hypothèses initiales. Dans la même figure, on a aussi tracé la fonction $\Pi(E)$ définie en (2.56), qui a une forme similaire et qui s'ajuste mieux sur les résultats des simulations. Cependant, on souligne que notre prédiction requiert un seul paramètre, T_0 , qui fixe la moyenne de la distribution, alors que déterminer $\Pi(E)$ nécessite deux paramètres, qui sont la moyenne et la variance de E . Ceci souligne l'importance de considérer les hétérogénéités spatiales dans la détermination des fluctuations de l'énergie totale. En revanche, les corrélations, qui ont été négligées dans nos approximations, semblent jouer un rôle secondaire.

Notre approche permet aussi d'étudier le comportement des quantités macroscopiques N_f et T_E en fonction des paramètres du système, et en particulier de sa taille. Une des questions soulevées dans [3, 2] est que l'énergie moyenne n'est pas extensive en la taille du système. De même, la température granulaire, telle qu'elle est définie, n'est

³on peut voir cela dans l'encadré de la figure 2.5, où l'on a tracé le kurtosis des composantes x et y de la vitesse, voir aussi [29]

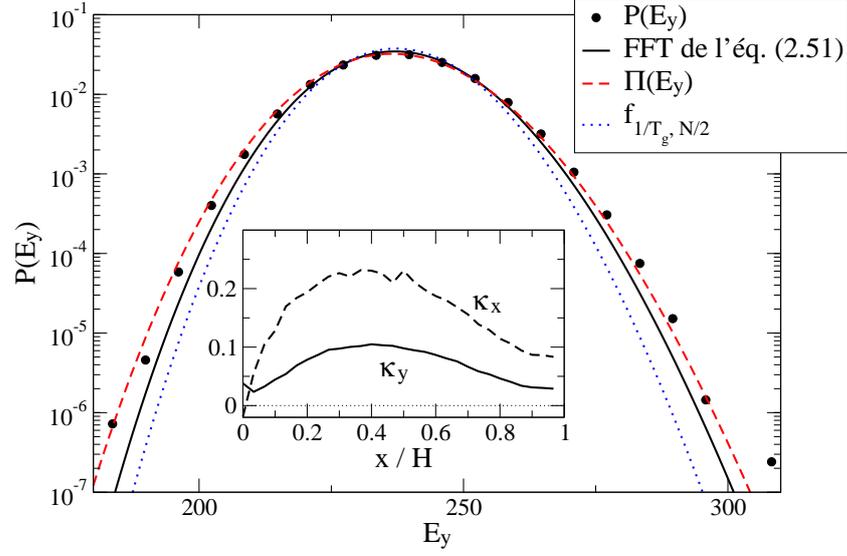


FIG. 2.5: Distribution de probabilité de la composante y de l'énergie totale $E_y = \sum_i^N v_{y_i}^2/2$ (points). Les paramètres du système sont les mêmes que pour la Fig. 2.3. La courbe en trait continu est la transformée de Fourier inverse de l'éq.(2.51) (avec $d = 1$); la courbe en tirets est une loi du χ^2 avec même moyenne et variance que les données numériques. La courbe en pointillés est un χ^2 avec pour paramètres la température granulaire et le nombre de degrés de liberté maximal (N). L'énergie est en unités de la température de la paroi chauffante T_0 . L'encadré montre l'excès de kurtosis $\kappa_i = \langle v_i^4 \rangle / \langle v_i^2 \rangle^2 - 3$ pour les composantes x et y de la vitesse.

pas intensive. Ceci s'explique en considérant que si l'on injecte de l'énergie en surface, et qu'elle est dissipée en volume, il est normal que dans la limite où le volume tend vers l'infini, à densité constante, l'énergie totale moyenne n'est pas proportionnelle à la taille du système. Pour étudier ce phénomène, on va d'abord donner l'expression des cumulants de E , telle qu'elle est prédite par l'éq. (2.51) :

$$\langle E^p \rangle_c = \frac{Nd}{2\ell_m} \int_0^{\ell_m} T^p(\ell) d\ell . \quad (2.58)$$

À partir des cumulants on obtient simplement :

$$N_f = \frac{Nd}{\ell_m} \frac{\left(\int_0^{\ell_m} T(\ell) d\ell \right)^2}{\int_0^{\ell_m} T^2(\ell) d\ell}, \quad T_E = \frac{\int_0^{\ell_m} T^2(\ell) d\ell}{\int_0^{\ell_m} T(\ell) d\ell}, \quad (2.59)$$

ce qui montre que T_E n'est pas rigoureusement intensive, mais dépend de ℓ_m , qui est proportionnel au nombre de couches de particules au repos. Cependant, pour des valeurs

de ℓ_m suffisamment grandes, l'intégrale dans l'éq.(2.58) ne dépend plus de la taille du système :

$$\int_0^{\ell_m} T^p(\ell) d\ell \sim \frac{T_0^p}{2p\sqrt{a(\alpha)}}, \quad (2.60)$$

de sorte que la température effective T_E devient une constante proportionnelle à la température de la paroi chauffante, alors que le paramètre N_f dépend encore de la taille du système :

$$N_f \sim \frac{1}{\sqrt{a(\alpha)}} \frac{Nd}{\ell_m}, \quad T_E \sim \frac{T_0}{2}. \quad (2.61)$$

On va maintenant comparer comment les résultats de [2] s'inscrivent dans ce cadre, pour différentes configurations du volume, à diamètre des particules σ fixé, et à densité $\rho = N/(HL)$ constante (on se place à deux dimensions, comme dans [2]) :

- Si on augmente seulement L , à H constant, N/L est constant, donc ℓ_m et T_E ne changent pas.
- Si on augmente H , à L constant, alors $\ell_m \propto N/L$ augmente, et donc T_E n'est pas constant. Les variations de T_E quand H change sont tout de même faibles, et quand N est suffisamment grand, T_E atteint sa valeur asymptotique qui est $T_0/2$.
- Si H et L sont augmentées au même taux, ℓ_m augmente encore plus lentement, et encore une fois, T_E n'est pas rigoureusement constante, mais décroît lentement vers sa valeur asymptotique $T_0/2$.

Le comportement de N_f dépend aussi de ℓ_m . À diamètre et densité constants, l'éq.(2.61) montre que (i) pour une boîte carrée, puisque $\ell_m \propto \sqrt{N}$, on a $N_f \propto \sqrt{N}$, ce qui est proche du comportement $N^{0.4}$ observé numériquement [2], et (ii) à L constant, si on augmente la hauteur H , ℓ_m est proportionnel à N , et N_f est donc une constante. Toutes ces propriétés sont en accord avec les observations numériques de [2]. Ces résultats montrent que les anomalies concernant l'intensivité et l'extensivité peuvent s'expliquer par une approche qui, négligeant les corrélations, se concentre sur les aspects liés aux hétérogénéités, qui sont décrites approximativement par les profils hydrodynamiques [29]. Le paramètre crucial dans cette explication est finalement le nombre de couches de particules au repos (qui est proportionnel à ℓ_m). Si ce nombre est suffisamment grand, la température effective T_E est bien intensive. De plus cette approche permet de décrire le comportement des fluctuations dans un gaz granulaire vibré. La pdf de l'énergie s'ajuste bien sur une distribution gamma, qui est la distribution qui décrit les fluctuations d'énergie à l'équilibre (dans l'ensemble canonique). Cependant on trouve des grandes déviations par rapport à la théorie des fluctuations d'équilibre, puisque les paramètres de la distribution gamma (i.e. le nombre de degrés de liberté et la température) ne sont ni le nombre de degrés de liberté du système, ni la température granulaire. Une autre remarque est que les corrélations entre vitesses ne jouent pas un rôle primordial dans l'explication de ces déviations. Afin de caractériser la contribution due à ces corrélations, il est utile de mesurer les fluctuations d'énergie à une distance x de la paroi vibrante donnée. À partir de l'expression des cumulants de l'énergie locale (2.55), il est possible de définir

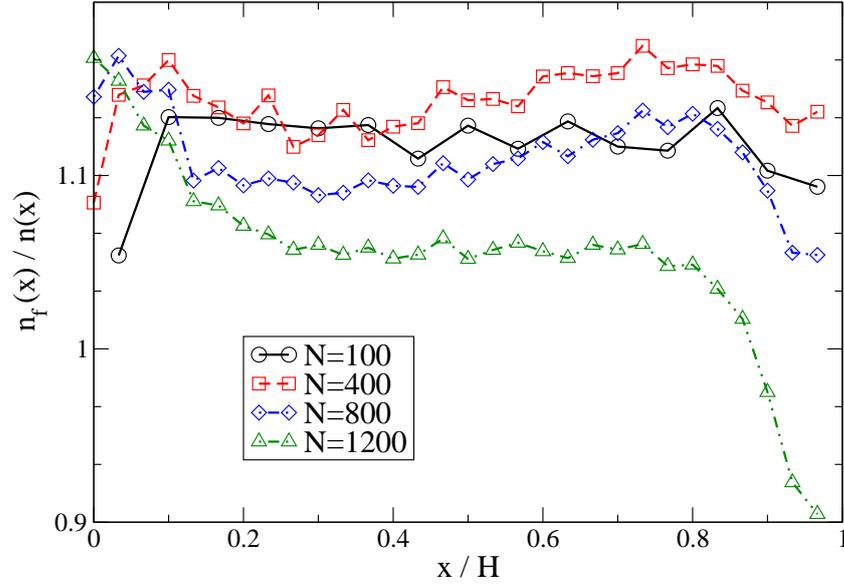


FIG. 2.6: Densité effective $n_f(x)$ divisée par la densité $n(x)$ dans un système carré à densité constante $\rho\sigma^2 = 0.04$ et avec $\alpha = 0.99$. Le nombre de degrés de liberté effectif correspondant est : $N_f/(Nd) = 0.99$ (pour $N = 100$) ; $N_f/(Nd) = 0.77$ (pour $N = 400$) ; $N_f/(Nd) = 0.63$ (pour $N = 800$) ; $N_f/(Nd) = 0.47$ (pour $N = 1200$).

une “densité effective” :

$$n_f(x) = \frac{d(d+2)}{d^2} \frac{\langle \epsilon \rangle^2}{\langle \epsilon^2 \rangle_c}. \quad (2.62)$$

Si les hypothèses de décorrélation et de gaussianité sont satisfaites, alors $n_f(x) = n(x)$. et les déviations à cette égalité sont dues exclusivement aux corrélations et aux effets non gaussiens. Dans la figure 2.6 on montre plusieurs mesures de $n_f(x)/n(x)$ pour différents systèmes. On observe que systématiquement $n_f(x) \neq n(x)$, cependant ces déviations sont faibles par rapport aux différences entre N_f et N .

2.3.2 Le cas d'un forçage homogène

On va maintenant s'intéresser à l'effet des corrélations entre vitesses. Pour cela, on va considérer un gaz granulaire dans un état stationnaire homogène. De cette manière, les effets dus aux hétérogénéités disparaissent, permettant ainsi une mesure précise des corrélations. Dans une première partie on considérera le cas d'un gaz chauffé par le thermostat stochastique, et dans une deuxième partie le cas du thermostat gaussien.

Thermostat stochastique

Dans le cas d'un forçage par un bruit blanc, on a vu dans 2.2.4 que le système atteint un état stationnaire homogène, et que l'on sait déterminer avec une bonne précision les propriétés de la pdf de la vitesse. La température moyenne est donnée par (2.29), et c'est bien une quantité intensive, l'énergie moyenne $\langle E \rangle = dNT/2$ étant extensive. Cependant l'énergie est une quantité qui fluctue dans le temps. On va justement s'intéresser à ces fluctuations, et en particulier à la variance réduite :

$$\sigma_E^2 = N \frac{\langle E^2(t) \rangle - \langle E(t) \rangle^2}{\langle E(t) \rangle^2}. \quad (2.63)$$

En utilisant les notations de la partie précédente, on voit que $\sigma_E^2 \equiv 2N/N_f$. Brey *et al.* [23] ont calculé, en utilisant les équations cinétiques, une expression analytique pour σ_E^2 dans le cas d'un gaz granulaire en refroidissement libre homogène, qui est équivalent au thermostat gaussien. Cette quantité a aussi été mesurée numériquement pour un gaz granulaire à une dimension avec un thermostat similaire [34]. Comme première remarque, on peut s'intéresser à la limite élastique $\alpha \rightarrow 1$ de σ_E^2 . Dans le cas du thermostat gaussien, comme du refroidissement libre, la limite $\alpha = 1$ correspond à un état d'équilibre microcanonique, où l'énergie totale est conservée, et donc distribuée suivant une distribution de Dirac. De ce fait, les fluctuations de l'énergie sont strictement nulles. D'autre part, dans le cas du thermostat stochastique, le bruit va continuer à jouer un rôle, et les fluctuations seront non triviales même dans la limite élastique.

La distribution empirique de l'énergie peut se mesurer numériquement en utilisant l'algorithme Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Cet algorithme, introduit par Bird [13], simule une chaîne de Markov dont l'équation maîtresse associée redonne exactement la première équation de la hiérarchie BBGKY. Un graphe de la distribution d'énergie est tracé dans la Fig. 2.7. On observe encore une fois une forme qui s'ajuste bien avec une loi du χ^2 de même moyenne et variance. Cependant, le nombre de degrés de liberté de cette distribution est plus petit que le vrai nombre de degrés de liberté du système (c'est à dire $(N - 1) \times d$). Ce phénomène peut *a priori* être dû à deux causes : la non gaussianité de la pdf de la vitesse, et la présence de corrélations entre vitesses. Afin de quantifier la portée de chacun de ces effets sur la pdf de l'énergie, il est utile de calculer la distribution de l'énergie en supposant les vitesses décorrélatées (mais non-gaussiennes). On a vu que tronquer la série de Sonine (2.24) au deuxième ordre donne déjà une bonne approximation pour la pdf de la vitesse $f(\mathbf{v})$. Dans le cadre de cette approximation, on peut calculer la fonction caractéristique de l'énergie totale :

$$\tilde{P}_N(k) = \frac{1}{(1 - ikT)^{\frac{Nd}{2}}} \left(1 + \frac{d(d+2)}{8} a_2 \left(\frac{1}{(1 - ikT)^2} - \frac{2}{(1 - ikT)} + 1 \right) \right)^N, \quad (2.64)$$

où N est le nombre de particules du système, et a_2 est relié au quatrième cumulant de la distribution de vitesse. À partir de cette expression on déduit les premiers moments de l'énergie (qui sont donnés par les dérivées successives en $k = 0$ de la fonction

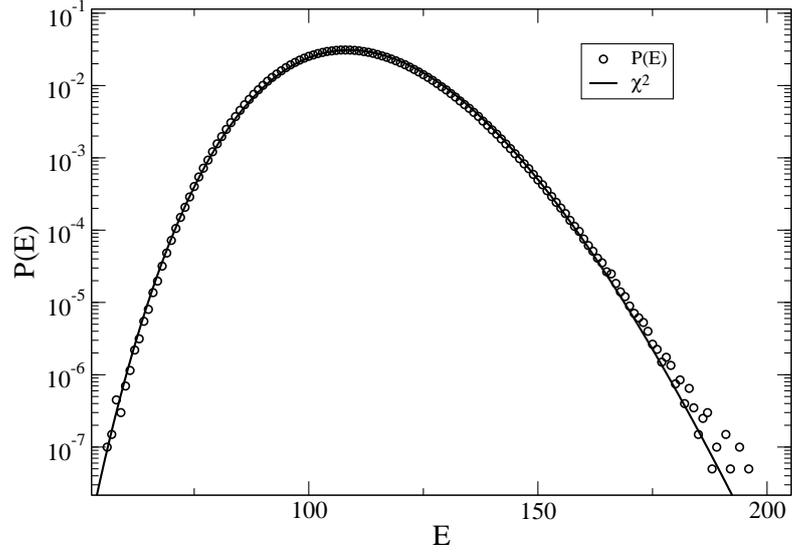


FIG. 2.7: Distribution de l'énergie par une simulation Monte Carlo de type DSMC pour un gaz de $N = 100$ particules avec un coefficient de restitution $\alpha = 0.5$ en $d = 2$ (cercles). Le trait continu représente une distribution gamma de même moyenne et même variance, qui correspond à un nombre de degrés de liberté effectif $N_f \simeq 174$ inférieur au véritable nombre de degrés de liberté $(N - 1)d \simeq 200$.

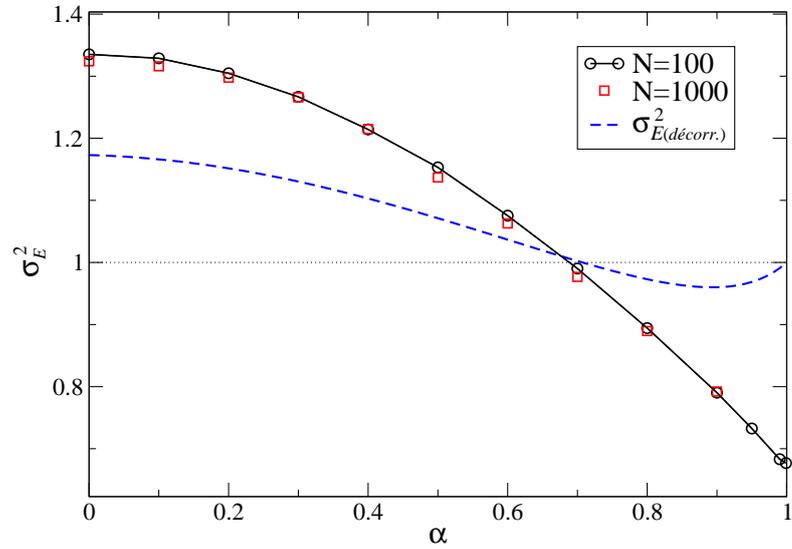


FIG. 2.8: Tracé de σ_E^2 en fonction du coefficient de restitution α pour $N = 100$ (\circ) et $N = 1000$ (\square) particules en $d = 2$, chauffées par le thermostat stochastique. Le résultat du calcul qui néglige les corrélations (2.66) est tracé en trait continu.

caractéristique) :

$$\langle E \rangle = \frac{d}{2}NT, \quad \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{d}{2}NT^2 \left(1 + \frac{d+2}{2}a_2 \right), \quad (2.65)$$

qui donnent accès à une expression pour σ_E^2 :

$$\sigma_{E(\text{décorr.})}^2 = \frac{2}{d} \left(1 + \frac{d+2}{2}a_2 \right). \quad (2.66)$$

Comme on devait s'y attendre pour des raisons dimensionnelles, on voit que la température T n'apparaît pas dans l'expression de σ_E^2 , qui ne dépend que du coefficient de restitution α (et de la dimension d'espace d). Ce résultat est comparé, dans la figure 2.8, à des résultats de simulations [DSMC](#), pour différentes valeurs de α et pour deux tailles de système différentes en 2 dimensions. Le désaccord entre le calcul qui suppose les vitesses décorréelées, et les simulations numériques indique l'importance des corrélations entre vitesses induites par l'inélasticité (en réalité on a aussi négligé les queues non gaussiennes de la pdf de la vitesse, mais cet effet a des conséquences négligeables pour les premiers moments de l'énergie). On peut remarquer que lorsque le coefficient de restitution est proche de la valeur $1/\sqrt{2}$ (c'est-à-dire quand l'expression de a_2 s'annule), alors la valeur de $\sigma_E^2 \simeq 1 \equiv 2/d$, qui est le même résultat que pour un gaz à l'équilibre en contact avec un thermostat (i.e. dans l'ensemble canonique, où l'hypothèse d'absence de corrélations est exacte). Il y a malgré tout lieu de penser qu'il s'agit là d'une coïncidence, dans la mesure où σ_E^2 ne tend pas vers 1 lorsque $\alpha \rightarrow 1$, limite pour laquelle a_2 s'annule également.

On va s'intéresser maintenant à la dépendance de σ_E^2 avec l'amplitude du bruit ξ_0^2 . Pour cela, il est utile d'introduire une nouvelle variable d'énergie, exprimée dans une échelle telle qu'elle ait une moyenne nulle et une variance unité :

$$\tilde{E} = \frac{E - \langle E \rangle}{\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}}. \quad (2.67)$$

On a tracé dans la figure 2.9 la pdf de cette quantité pour un système de $N = 100$ particules avec un coefficient de restitution $\alpha = 0.5$ et pour différentes valeurs de l'amplitude du bruit ξ_0^2 . On voit que les données s'ajustent bien sur une seule et unique courbe (qui a toujours une forme de χ^2), ce qui confirme que le bruit a pour unique fonction de déterminer une échelle de température dans le système. D'autre part, cela implique que la distribution de \tilde{E} ne dépend que de α et de N . De plus, puisque σ_E^2 ne dépend pas du nombre de particules N (pour N suffisamment grand), $\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$ croît comme \sqrt{N} , le théorème de la limite centrale s'applique, et $P(\tilde{E})$ tend bien vers une gaussienne dans la limite $N \rightarrow \infty$. À ce propos, la figure 2.10 montre que la pdf de \tilde{E} pour $N = 1000$ particules est très proche de la gaussienne (même si la loi du χ^2 s'ajuste mieux).

Thermostat gaussien

Dans le cadre du thermostat gaussien, les équations cinétiques sont exactement identiques au cas du refroidissement libre homogène. On précise que cette équivalence est

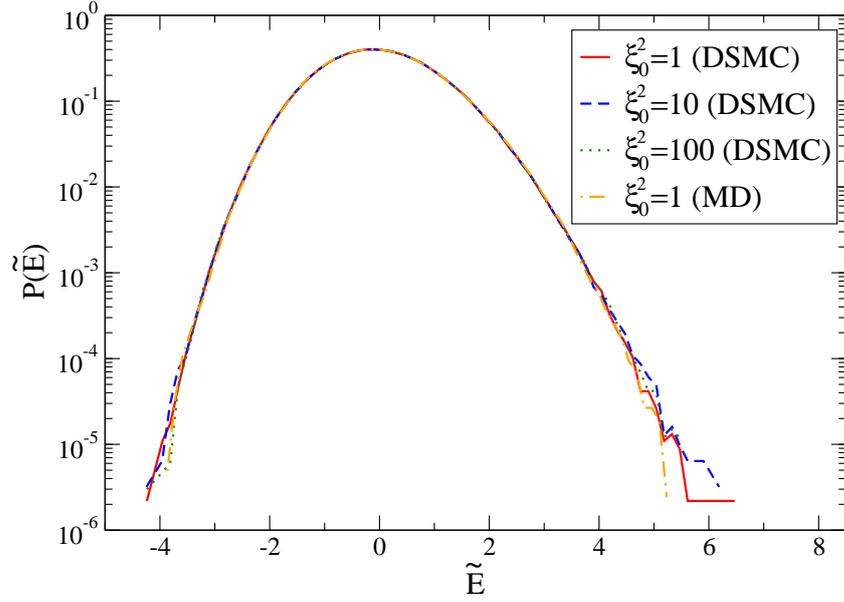


FIG. 2.9: Distribution de l'énergie adimensionnée \tilde{E} pour $\alpha = 0.5$, $N = 100$ particules en $d = 2$, et différentes valeurs de l'amplitude du bruit ξ_0^2 . Les simulations ont été faites soit avec l'algorithme DSMC, soit par dynamique moléculaire, avec $\rho\sigma^2 = 0.04$.

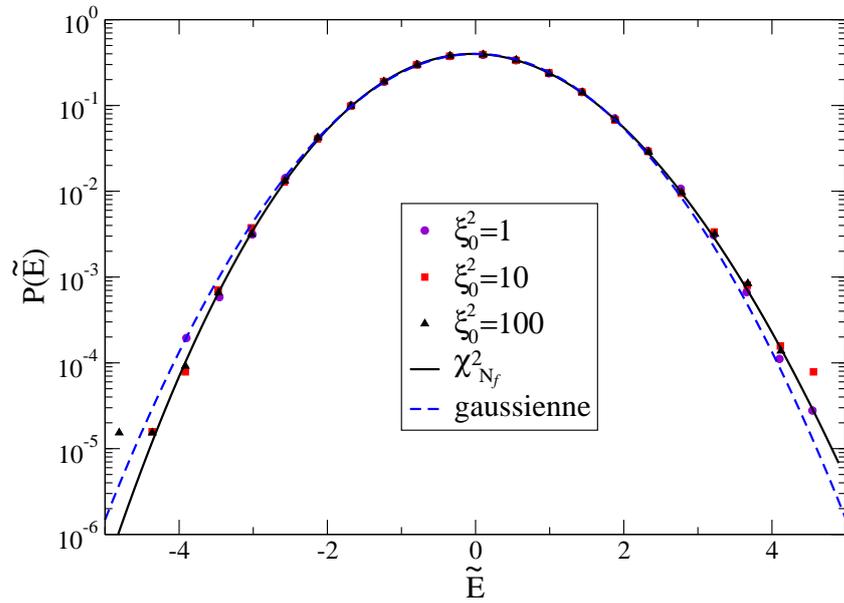


FIG. 2.10: Distribution de \tilde{E} pour $\alpha = 0.5$, $N = 1000$ particules, et pour différentes valeurs de l'amplitude du bruit ξ_0^2 . La courbe en trait continu est une loi du χ^2 avec $N_f = sN/\sigma_E^2 \simeq 1759$ degrés de liberté, et qui est très proche de la distribution gaussienne, tracée ici en tirets.

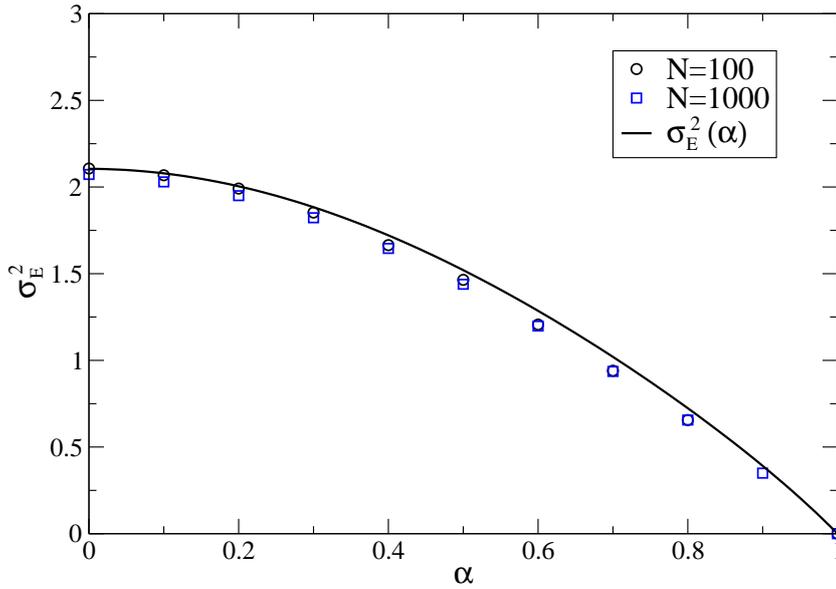


FIG. 2.11: Résultats de simulations **DSMC** avec un thermostat gaussien pour σ_E^2 en fonction de α pour $N = 100$ (\circ) et $N = 1000$ (\square) particules. Le trait continu est l'expression analytique donnée par l'éq.(2.68).

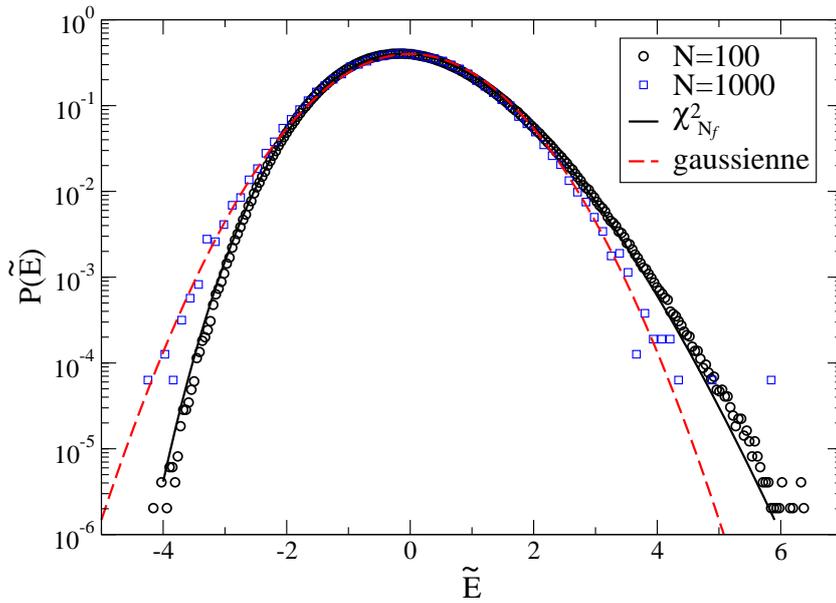


FIG. 2.12: Distribution de l'énergie adimensionnée \tilde{E} pour un coefficient de restitution $\alpha = 0.5$. Le système est chauffé par un thermostat gaussien pour $N = 100$ (\circ) et 1000 (\square) particules. Le trait plein montre une distribution gamma de moyenne nulle, de variance unité, qui a un nombre de degrés de liberté $N_f = 2N/\sigma_E^2$. Le trait en tirets est une gaussienne de moyenne nulle et variance unité.

2 Les gaz granulaires

vraie non seulement pour l'équation de Boltzmann, mais également pour l'équation de pseudo-Liouville, et donc pour toute fonction de distribution à n points. De ce fait, il apparaît que le thermostat gaussien et le refroidissement libre partagent aussi les mêmes fluctuations et fonctions de corrélations. On pourra donc comparer les résultats obtenus pour le refroidissement libre à des simulations [DSMC](#) d'un gaz maintenu dans un état stationnaire et homogène par un thermostat gaussien. Dans le cas du thermostat gaussien, Brey *et al.* [23] ont obtenu une expression analytique pour la quantité σ_E^2 définie en (2.63). Son expression est :

$$\sigma_E^2 = \frac{d(d+1)}{2} + \frac{d(d+2)}{4} a_2(\alpha) + d^2 b(\alpha), \quad (2.68)$$

où ⁴ :

$$b(\alpha) = \frac{4(1-2\alpha^2)(1-3\alpha+\alpha^2(\alpha-1)) - (1-\alpha)(3-2\alpha(8+5\alpha))d - 2(3+\alpha)d^2}{2d(7+6d-\alpha(15+2\alpha(1-\alpha)-2d))}. \quad (2.69)$$

On remarque que $b(\alpha=1) = -(1+d)/(2d)$, de sorte que σ_E^2 est bien nul dans la limite élastique. Ce résultat analytique a été obtenu en projetant l'équation de Liouville sur les modes hydrodynamiques, qui sont donnés par les fonctions propres de l'opérateur de collision linéarisé. Ces fonctions propres peuvent se calculer dans le cas du thermostat gaussien, mais pas dans le cas du thermostat stochastique.

Les résultats numériques sont comparés à l'équation (2.68) dans la figure 2.11. Les simulations ont été faites pour deux tailles de système différentes ($N = 100$ et $N = 1000$, en 2 dimensions), et pour différentes valeurs de α , et les résultats sont toujours en très bon accord avec l'équation (2.68). La pdf de l'énergie se comporte à nouveau comme une loi du χ^2 . Quand le système n'est pas trop grand, $N \sim 100$, la pdf de l'énergie s'ajuste bien sur un χ^2 avec une moyenne donnée par (2.31) et une variance donnée par (2.68). De plus, quand le nombre de particules augmente, la loi du χ^2 se rapproche de plus en plus de la gaussienne. Ces propriétés sont illustrées dans la figure 2.12.

2.3.3 Conclusion

Dans ce chapitre, on a étudié les fluctuations de l'énergie cinétique totale pour un gaz granulaire maintenu dans un état stationnaire hors d'équilibre par différents mécanismes d'injection d'énergie.

Dans le cas où l'énergie est injectée par une paroi vibrante, le système est hétérogène. En tirant profit d'une hypothèse d'"équilibre" local, qui suppose que les particules sont décorréélées, on peut calculer la fonction caractéristique de la distribution de l'énergie. Cette fonction apparaît comme étant une fonctionnelle du profil de température, et elle s'applique donc dans plusieurs cas de conditions aux limites. En utilisant le profil de température établi par Brey *et al.* [29], on arrive à expliquer les phénomènes observés

⁴L'expression qui suit n'est pas exactement la même que celle qui apparaît dans [23]. Ceci est dû au fait qu'on utilise ici une expression du coefficient de Sonine a_2 légèrement différente, et qui concorde mieux avec les simulations numériques [89]

lors de simulations numériques par Aumaître *et al.* [2]. Le résultat ainsi obtenu semble valable même lorsque l'approximation hydrodynamique n'est pas valable dans l'ensemble du système⁵. De plus, on trouve que la température effective définie dans la Réf. [2] n'est extensive que lorsque le nombre de couches de particules au repos est suffisamment élevé. Dans ce cas on montre que la température effective est reliée à la température imposée par la condition aux limites, qui est représentée dans cet exemple par la "température" de la paroi vibrante. On peut définir également un nombre de degrés de liberté effectifs, dont on trouve la dépendance par rapport au nombre de degrés de liberté du système. Ce résultat est lui aussi en accord avec les résultats numériques de la Réf [2]. Tout ceci nous mène à la conclusion que les problèmes soulevés dans [2], relatifs au comportement non intensif de la température, et non extensif de l'énergie, s'expliquent finalement lorsque l'on prend en compte l'hétérogénéité du système.

Dans le cas de gaz granulaires dans un état homogène, la distribution de l'énergie cinétique totale se comporte comme une loi du χ^2 , avec un nombre de degrés de liberté différent (mais proportionnel) au nombre de degrés de liberté total $d(N - 1)$. L'énergie est donc bien extensive et, de plus, dans la limite où $N \rightarrow \infty$, sa distribution tend bien vers une gaussienne. On a mesuré, par simulation Monte Carlo (méthode DSMC), la variance σ_E^2 de l'énergie, qui ne dépend que du coefficient de restitution α . Ces fluctuations non triviales sont essentiellement dues aux corrélations induites par l'inélasticité. On peut distinguer deux contributions à ces corrélations. D'une part, le comportement non gaussien de la pdf de la vitesse, qui implique que les composantes euclidiennes de la vitesse de chaque particule sont corrélées. D'autre part, une contribution de la distribution à deux points, qui ne se factorise pas exactement en un produit de deux fonctions à un point. Un calcul analytique de la contribution due à l'aspect non gaussien de la pdf de la vitesse est possible, et n'est pas en accord avec les simulations numériques. Ceci montre que les contributions qui proviennent de la distribution à deux points ne sont pas négligeables. Il faut tout de même remarquer que l'importance de ces corrélations n'abolit pas la validité de l'équation de Boltzmann. Comme déjà remarqué dans les Réfs. [51, 23], la fonction de corrélation à deux points $g_2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$, définie par :

$$g_2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = f^{(2)}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) - f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2) , \quad (2.70)$$

est toujours d'ordre $1/N$. Ceci est confirmé par l'observation que la pdf de l'énergie tend bien vers une gaussienne, lorsque $N \rightarrow \infty$.

Lorsque l'énergie est injectée par le thermostat gaussien, les résultats numériques sont en très bon accord avec les prédictions de la Réf [23]. Ceci implique en particulier que l'algorithme DSMC est sensible aux effets provenant de la fonction de corrélation à deux points. Cet aspect n'était pas prévu dans la formulation initiale de cet algorithme, destiné à l'origine à résoudre exclusivement l'équation de Boltzmann.

⁵En particulier, l'approximation hydrodynamique n'est pas valable près de la paroi vibrante, où le gaz est trop dilué

2 *Les gaz granulaires*

3

Puissance injectée, énergie dissipée

3.1 Introduction

On va s'intéresser, dans ce chapitre, à la distribution de l'énergie injectée dans un gaz granulaire pendant un grand intervalle de temps. Les motivations sont multiples.

Premièrement, il s'agit d'une quantité qui est, sous une hypothèse d'équilibre local, proportionnelle au flux d'entropie phénoménologique, constitué par la somme des flux entrant dans le système, divisés par leur force conjuguée respective [40]. Le flux d'entropie n'étant pas défini d'une manière rigoureuse dans les systèmes irréversibles, il semble important de consacrer une étude détaillée à cette quantité, afin de vérifier si elle peut jouer ce rôle. De plus, le flux d'entropie, intégré dans le temps, vérifie, dans les systèmes thermostatés, la Relation de Fluctuation (FR) (cf. 1.2). Il serait donc utile d'essayer également d'étudier si les systèmes irréversibles vérifient également cette relation, ou une relation similaire. De telles tentatives ont déjà été effectuées, dans le cadre de simulations numériques [3, 2], et d'expériences [58]. Cependant, aucune approche analytique n'a été proposée pour sonder la question.

D'un point de vue expérimental, l'étude de la puissance injectée, peut aussi se révéler féconde. Il s'agit d'une quantité relativement facile à mesurer lors d'une expérience. De plus, elle est souvent égale au travail nécessaire pour maintenir un système dans un état stationnaire hors d'équilibre. De ce fait, un lien avec la dissipation, qui se produit à l'intérieur du système, semble possible.

Une grande partie de ce chapitre est consacrée à l'étude d'une éventuelle vérification de la FR dans les gaz granulaires. La vérification de cette relation nécessite la connaissance du flux d'entropie. En l'absence d'une telle définition, l'approche la plus intuitive consiste à s'intéresser au flux phénoménologique, qui définit le flux d'entropie comme la puissance injectée divisée par une température. Dans les exemples classiques, comme le cas d'un fluide en contact avec deux thermostats à des températures différentes,

3 Puissance injectée, énergie dissipée

cette température est bien déterminée. Il s'agit en fait de l'inverse de la différence des températures inverses des deux thermostats. En revanche, dans le cas du gaz granulaire on a une seule échelle de température, la température granulaire. Cette température est définie de manière cinétique, et ne possède pas toutes les qualités de la température thermodynamique ordinaire. Une étude de la puissance injectée comme flux d'entropie pourrait donc également aboutir à une définition d'une nouvelle température, qui aurait des propriétés plus proches que celles de la température ordinaire.

On peut par ailleurs considérer un système granulaire comme un système entre deux réservoirs. Même si à un niveau topologique on sort des descriptions ordinaires, où les flux ont une direction spatiale bien définie, il y a bien un flux d'énergie qui traverse le système. En moyenne, le flux est dirigé d'un réservoir d'énergie, constitué par le mécanisme d'injection, vers un autre réservoir, où se trouve toute l'énergie dissipée par les collisions. On peut donc voir un gaz granulaire comme un gaz de sphères dures élastiques, où toutes les particules sont couplées à deux thermostats qui agissent de manière différente. Si le système atteint un état stationnaire homogène, on saura définir une température granulaire constante pour le système. À partir de cette température, on peut déduire les températures des deux réservoirs. Il suffit pour cela, en analogie avec la thermodynamique habituelle, de connaître la température du système lorsqu'il est en contact avec un seul de ces deux thermostats. Or, on sait que sans dissipation, la température granulaire va croître indéfiniment, sous l'effet de l'injection d'énergie. En revanche, sans injection d'énergie, la température granulaire va tendre vers une valeur nulle, sous l'effet de la dissipation. Formellement, on se retrouve en définitive avec un système entre deux réservoirs qui sont respectivement à température infinie et à température nulle. Même si on arrive à établir une analogie directe avec une situation où l'on est capable de déterminer le flux d'entropie, le thermostat à température nulle pose problème. La présence d'une telle température implique systématiquement une divergence du flux d'entropie. Bien sûr, ceci n'est qu'une image, mais elle a le mérite de mettre en évidence les nombreuses difficultés que l'on rencontre lorsque l'on essaye d'adosser sa vision du système à celle de la thermodynamique hors d'équilibre usuelle.

Les résultats présentés dans la suite de ce chapitre sont une synthèse des publications [P2,P1,P4,P10].

3.2 Puissance injectée

3.2.1 L'expérience de Feitosa et Menon

Description de l'expérience et résultats

On va d'abord commencer par décrire le travail mené par Feitosa et Menon [58]. Il s'agit d'une expérience en quasi deux dimensions, composée par une boîte rectangulaire (c'est dans la réalité un parallélépipède dont un côté est un peu plus grand que le diamètre d'une bille), à l'intérieur duquel on a placé quelques centaines de billes en métal (de diamètre $\sigma \simeq 1.6\text{mm}$ et de masse $m \simeq 5\text{mg}$). Cette boîte est ensuite vibrée verticalement à très haute fréquence ($f = 60\text{Hz}$), avec une amplitude de $2.6 \times \sigma$. Le système

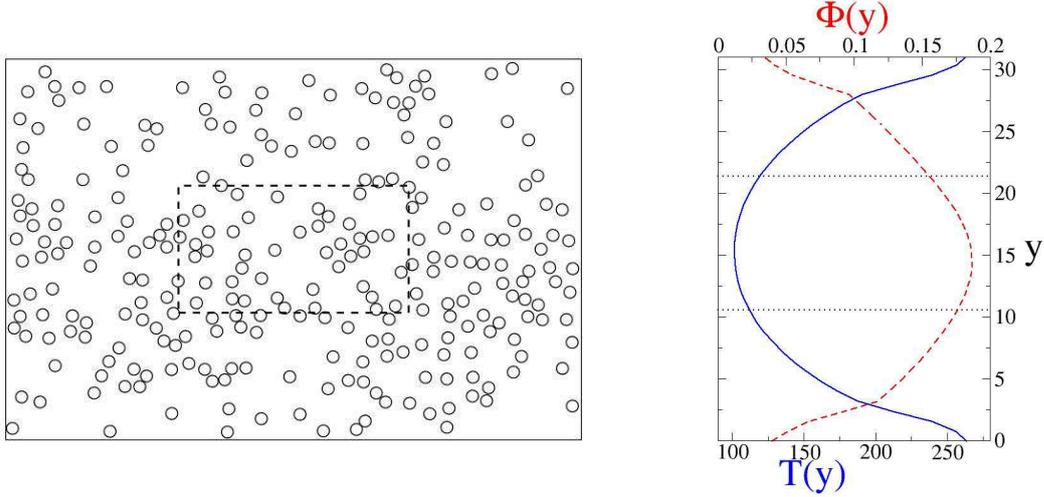


FIG. 3.1: Gauche : une configuration typique de l'état stationnaire (image issue d'une simulation de Dynamique Moléculaire avec $N = 270$ et $\alpha = 0.9$. Le libre parcours moyen est $\lambda \sim 5.7\sigma$). Droite : profils de densité (tirets) et de température (trait continu) du système. Les pointillés démarquent les limites du périmètre Σ .

atteint ainsi un état stationnaire, très loin de l'équilibre. Les auteurs s'intéressent ensuite à un sous-système de ce dispositif, qui est constitué par un rectangle imaginaire au centre de la boîte. Dans la figure 3.1, qui représente le système entier, le sous-système est délimité par une ligne en tirets. Cette dernière figure, ainsi que toutes les figures successives relatives à cette expérience, est en fait le résultat de simulation de Dynamique Moléculaire (MD) que nous avons réalisées afin de reproduire le plus fidèlement possible les conditions de l'expérience, et dont les résultats sont en parfait accord avec leur pendants expérimentaux. Le sous-système choisi est suffisamment grand pour qu'il y ait à l'intérieur un nombre significatif de particules, nécessaire pour une analyse statistique. De plus, dans cette même figure 3.1 on peut également voir une mesure des profils de densité et de température du système. Il apparaît que dans le sous-système les gradients sont minimum, ce qui suggère que la densité et la température y sont approximativement homogènes. Les mesures de l'expérience portent sur le flux d'énergie Q_τ traversant le périmètre Σ qui délimite le sous-système d'intérêt en un temps τ . À partir de ces données, on peut construire l'histogramme de Q_τ pour différentes valeurs de τ . Plus précisément, on a mesuré les histogrammes de la quantité :

$$q_\tau = \frac{Q_\tau}{\tau}, \quad (3.1)$$

dont les tracés sont reportés dans la figure 3.2. Il apparaît clairement que, même si la moyenne de Q est strictement positive, des fluctuations négatives sont bien présentes. On constate que plus le temps d'intégration τ augmente, plus la distribution se resserre

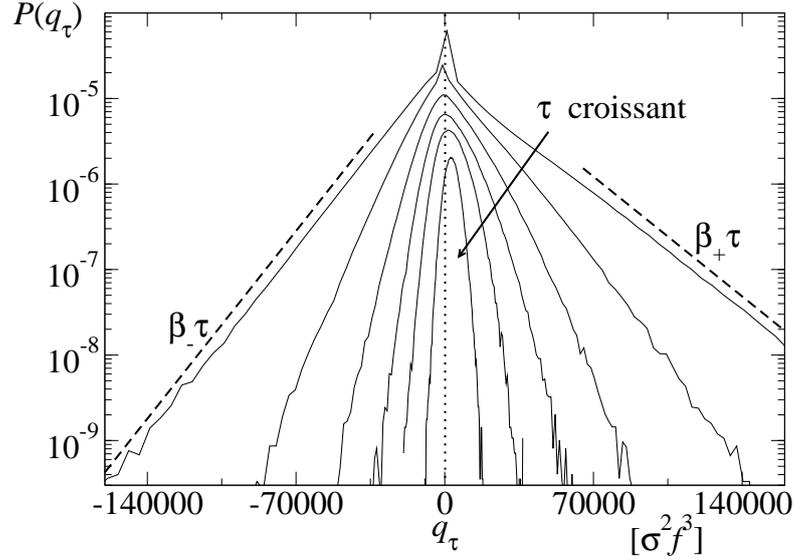


FIG. 3.2: Distribution de la puissance injectée $P(q_\tau)$ pour différentes valeurs de τ ($\tau = (1, 2, 4, 8, 16, 32) \times \tau_{min}$ avec $\tau_{min} = 0.015/f$). Les distributions ont été déplacées verticalement (en haut les temps les plus courts) pour que le tout soit plus clair. Les tirets mettent en évidence les queues exponentielles de la distribution à temps court. La valeur moyenne vaut ici $\langle q_\tau \rangle \simeq 3200m\sigma^2 f^3$.

autour de sa valeur moyenne, et dans la limite $\tau \rightarrow \infty$, la distribution de q_τ tend vers une distribution de Dirac : $P(q_\tau) \rightarrow \delta(q_\tau - \langle Q \rangle)$. On peut aussi constater que les queues de la distribution à faible τ sont exponentielles, avec des préfacteurs différents (ici dénotés β_+ et β_-). Vraisemblablement de telles queues exponentielles sont présentes à tout τ , mais la faible statistique disponible pour les grandes valeurs de τ ne permet pas de les observer. Pour les grandes valeurs de τ les échantillons de q_τ sont tous concentrés autour de la moyenne, avec essentiellement des fluctuations gaussiennes (à cause du théorème de la limite centrale). Cette distribution empirique de la pdf de q_τ peut être utilisée pour essayer de vérifier si la FR semble satisfaite. Dans la figure 3.3 on a tracé le graphe de :

$$\frac{1}{\tau} \log \left(\frac{P(q_\tau)}{P(-q_\tau)} \right) \quad (3.2)$$

en fonction de q_τ , pour différentes valeurs de τ . On peut voir que pour les valeurs de τ les plus grandes parmi celles pour lesquelles on a des événements négatifs, on a une loi linéaire, comme prévu par la FR. La pente de cette droite est *a priori* un nombre associé à une échelle de température inverse. Cependant, il est différent de la seule échelle de température du problème, qui est la température granulaire inverse $\beta_{gran} = 1/T_g$, où T_g représente cette fois-ci la température moyenne du sous-système d'intérêt (à peu près homogène dans le sous-système, comme montré dans la figure 3.1). La valeur de la pente qu'on obtient pourrait donc être utilisée pour définir une nouvelle température

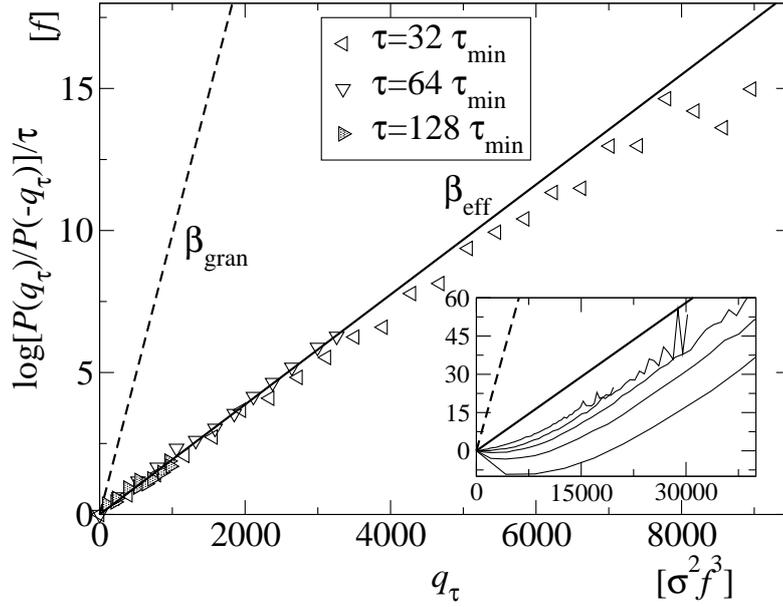


FIG. 3.3: Tracé de $1/\tau \log[P(q_\tau)/P(-q_\tau)]$ en fonction de q_τ à partir des histogrammes de la figure 3.2. La ligne en trait continu est une régression linéaire (de pente β_{eff}) des données à $\tau = 128\tau_{min}$. La ligne en tirets est une droite de pente $\beta_{gran} = 1/T_g$, où T_g désigne la température granulaire du sous-système à l'étude. Dans l'encadré on peut voir la même fonction tracée pour les données à temps court ($\tau = (1, 2, 4, 8) \times \tau_{min}$, en partant du bas vers le haut)

$T_{eff} = 1/\beta_{eff}$, β_{eff} désignant la pente de la relation linéaire vérifiée. C'est du moins la proposition faite par les auteurs de la référence [58]. Il faut aussi souligner que les temps τ pendant lesquels on intègre le signal ne sont pas beaucoup plus grands que les temps caractéristiques du système, qui sont : le temps de vol $\tau_{coll} \simeq 0.5f^{-1}$, le temps de diffusion à l'intérieur du périmètre Σ , $\tau_{diff} \simeq 0.8f^{-1}$, et le temps moyen entre deux sorties successives du périmètre, $\tau_{traversé} \simeq 0.04f^{-1}$. De plus, la statistique disponible aux temps longs, ne permet pas de sonder les événements négatifs, de plus en plus rares. Dans la figure 3.3, il apparaît que pour les temps les plus grands (pour lesquels on voit des droites), on atteint à peine une échelle de l'ordre de $\langle q \rangle$, ce qui montre que l'on est en fait dans un régime de faibles valeurs de q , et que donc on est plutôt en train de voir un développement limité à l'ordre linéaire en q_τ , que de vérifier véritablement la FR à des valeurs arbitraires de q_τ [3]. Nous reviendrons sur ce point dans la partie suivante.

Une image physique simple

Afin de quantifier les phénomènes décrits dans le paragraphe précédent, il est utile de commencer par expliciter le flux d'énergie intégrée Q_τ comme suit :

$$Q_\tau = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{n_+} v_{i+}^2 - \sum_{i=1}^{n_-} v_{i-}^2 \right), \quad (3.3)$$

où n_+ est le nombre de particules qui rentrent dans le sous-système en un temps τ , et n_- le nombre de particules qui en sortent. De même, v_{i+} est la vitesse de la i -ème particule entrante, et v_{i-} la vitesse de la i -ème particule sortante. Pour obtenir très simplement une estimation de la probabilité de Q_τ , on va être amené à faire des hypothèses pour n_+ et n_- , et pour v_{i+} et v_{i-} . Bien que très simples, ces hypothèses sont non seulement physiquement justifiées, mais permettent de capturer toute la physique du problème, en restituant la phénoménologie observée. On va supposer que les nombres de particules sortantes ou entrantes sont distribués suivant des lois de Poisson. Ceci revient à négliger les corrélations entre particules. De plus, le nombre de particules dans le sous-système est en moyenne constant, puisque l'on est dans un état stationnaire. On a donc $\langle n_+ \rangle = \langle n_- \rangle = \omega_{tr}\tau$ et

$$\text{Prob}(n_+ = p) = \text{Prob}(n_- = p) = \frac{(\omega_{tr}\tau)^p}{p!} e^{-\omega_{tr}\tau} \quad (3.4)$$

où ω_{tr} définit naturellement la fréquence de traversée du périmètre Σ . En ce qui concerne les vitesses des particules, on peut commencer par remarquer que si on suit dans le temps une particule qui rentre dans le sous-système, elle va typiquement effectuer des collisions (et donc dissiper de l'énergie) dans le sous-système, avant d'en sortir. À partir de cette remarque, on déduit que l'énergie moyenne des particules qui rentrent dans le sous-système est forcément plus grande que l'énergie moyenne des particules qui en sortent. Cette observation permet de justifier que l'on considère v_{i+} et v_{i-} comme des variables aléatoires issues de deux populations différentes de variance respective T_+ et T_- . De plus on considère que ces deux populations ont une distribution gaussienne. Ceci, là encore n'est pas tout à fait vrai ; cependant, à ce degré de description, c'est une hypothèse raisonnable, les déviations par rapport à la gaussienne étant faibles. On peut dès lors calculer exactement la fonction caractéristique de Q_τ . La probabilité de la somme des carrés de n variables aléatoires gaussiennes est une distribution gamma, définie en (2.46) ; on a donc :

$$\text{Prob} \left(Q_+ = \sum_i^{n_+} \frac{v_{i+}^2}{2} \right) = f_{\frac{1}{T_+}, \frac{n_+}{2}}(Q_+), \quad \text{Prob} \left(Q_- = -\sum_i^{n_-} \frac{v_{i-}^2}{2} \right) = f_{\frac{1}{T_-}, \frac{n_-}{2}}(-Q_-). \quad (3.5)$$

La transformée de Fourier de la probabilité de $Q = Q_+ - Q_-$ va être donnée par le produit des fonctions caractéristiques, sommé sur toutes les réalisations possibles de n_+ et n_- :

$$\tilde{P}(z) = \sum_{n_+, n_-}^{\infty} P(n_+)P(n_-) \tilde{f}_{\frac{1}{T_+}, \frac{n_+}{2}}(z) \tilde{f}_{\frac{1}{T_-}, \frac{n_-}{2}}(-z). \quad (3.6)$$

Le résultat de cette somme donne la fonction caractéristique, qui s'écrit :

$$\tilde{P}(z) = e^{\tau\mu(z)}, \quad (3.7)$$

avec

$$\mu(z) = \omega_{tr} \left(-2 + (1 - T_+ z)^{-d/2} + (1 + T_- z)^{-d/2} \right). \quad (3.8)$$

Ce résultat, qui rappelle le comportement à grand temps des grandes déviations, est ici valable à tout temps. Cependant, μ représente bien la fonction génératrice des cumulants de Q_τ , et ne vérifie aucune symétrie du type $\mu(z) = \mu(\text{cte} - z)$. La FR ne peut donc pas être vérifiée, du moins dans le cadre de ce modèle simple.

Pour obtenir une forme analytique pour la distribution de la puissance injectée, il faudrait inverser la transformée de Laplace (3.7), ce qui n'est pas possible analytiquement. On peut néanmoins s'intéresser à des cas limites. Une limite intéressante, à cause de sa simple accessibilité expérimentale, est le comportement à temps court. Dans ce cas, on peut effectuer un développement limité de l'éq.(3.7) au premier ordre en τ , ce qui donne :

$$\tilde{P}(z) = 1 + \omega\tau \left(-2 + (1 - T_+ z)^{-d/2} + (1 + T_- z)^{-d/2} \right) + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (3.9)$$

Le premier terme constant indique une contribution d'un pic de Dirac en espace direct. De plus, les termes successifs indiquent la présence de queues exponentielles, avec un coefficient $1/T_+$ à droite, et un coefficient $1/T_-$ à gauche.

Un lien clair apparaît ainsi entre les queues exponentielles observés à temps court (montrées dans la figure 3.2) et le modèle à deux températures. Cela permet aussi de relier directement les coefficients observés β_+ et β_- aux deux températures du modèle, $T_+ = 1/\beta_+$ et $T_- = 1/\beta_-$, ce qui permet enfin de pouvoir mesurer les deux températures T_\pm expérimentalement.

En ce qui concerne le température effective inverse β_{eff} , on peut aussi essayer de la relier aux deux températures inverses β_\pm . La fonction de grandes déviations $\pi(q)$ relative à la distribution de Q_τ dans la limite des temps grands s'obtient par transformation de Legendre de la fonction génératrice des cumulants. Cette transformation n'est encore pas réalisable analytiquement, cependant, à partir de l'expression de μ , on peut obtenir quelques propriétés. Pour commencer, on voit que $\mu(z)$ présente deux pôles en $z = \beta_+$ et en $z = -\beta_-$. Si on écrit explicitement le lien entre π et μ , cela donne :

$$\pi(q) = \mu(z^*) + z^*q, \quad \text{où } z^* \text{ est tel que } \frac{\partial\mu}{\partial z}(z^*) = -q. \quad (3.10)$$

Or, la dérivée première de μ tend vers l'infini lorsque $z \rightarrow -1/T_-$, et vers moins l'infini, lorsque $z \rightarrow 1/T_+$. À partir de cette remarque, on obtient le comportement asymptotique de $\pi(q)$ lorsque q tend vers plus ou moins l'infini :

$$\pi(q \rightarrow \infty) \sim -\frac{q}{T_+}, \quad \pi(q \rightarrow -\infty) \sim \frac{q}{T_-}. \quad (3.11)$$

Ce comportement linéaire pour $\pi(q)$ correspond à un comportement exponentiel pour $P(Q_\tau)$ déjà présent à temps court. Cependant, aux temps longs le manque de statistique

3 Puissance injectée, énergie dissipée

empêche l'observation de ces queues exponentielles, qui ne jouent donc pas de rôle dans l'apparente vérification de la **FR**. La relation linéaire observée peut par contre s'expliquer en regardant le comportement de $\pi(q) - \pi(-q)$ à faible q . En effectuant un développement limité on trouve :

$$\pi(q) - \pi(-q) = 2\pi'(0)q + \mathcal{O}(q^3) . \quad (3.12)$$

Premièrement, on remarque que, à cause du caractère impair de la fonction $\pi(q) - \pi(-q)$, le terme d'ordre 2 du développement est nul, ce qui renforce l'idée que pour pouvoir véritablement vérifier la **FR** il faut nécessairement avoir une statistique telle pour que q_τ soit suffisamment plus grand que sa valeur typique $\langle q \rangle$. Deuxièmement, si le caractère linéaire observé (expérimentalement et numériquement) pour $\pi(q) - \pi(-q)$ est simplement dû à la faible statistique, alors la pente mesurée β_{eff} peut être reliée aux deux températures du modèle par :

$$\beta_{eff} = 2\pi'(0) = \frac{T_+^\delta - T_-^\delta}{T_+^{\delta+1} + T_-^{\delta+1}} , \quad \delta = \frac{2}{d+2} . \quad (3.13)$$

Ce résultat explique la valeur numérique mesurée expérimentalement dans [58]. En utilisant les températures T_\pm mesurées en utilisant la **pdf** de la puissance injectée, on trouve que la température effective est environ 5 fois plus grande que la température granulaire, ce qui est en accord avec les mesures de [58]. De plus, dans la limite élastique, $T_+ = T_-$, et $\beta_{eff} = 0$. La température effective ainsi définie diverge à l'équilibre, et ne tend pas vers la température thermodynamique. On ne peut donc pas assigner à β_{eff}^{-1} un rôle quelconque de température hors d'équilibre, contrairement à ce que proposent les auteurs de [58].

Même s'il est capable de décrire une grande partie de la phénoménologie observée dans l'expérience, notre modèle simple échoue à un niveau plus quantitatif. Ceci est dû essentiellement à deux raisons, qui peuvent cependant facilement être prises en compte. Premièrement, la température n'est pas isotrope dans le système [22, 87], ce qui conduit en fait à devoir considérer quatre températures (T_\pm^x et T_\pm^y). Deuxièmement, les particules traversant le périmètre Σ n'ont pas une distribution gaussienne dans la direction perpendiculaire aux parois du périmètre. En réalité, cette distribution est biaisée, puisqu'on ne s'intéresse qu'aux particules qui traversent une ligne donnée. L'expression de la **pdf** de la vitesse pour cette composante v_\perp s'écrit donc plutôt :

$$f(v_\perp) \propto v_\perp e^{-\frac{v_\perp^2}{2T_\pm}} . \quad (3.14)$$

Si l'on considère par contre seulement la composante de la vitesse parallèle au périmètre, le modèle plus simple à deux températures devrait être opérationnel. C'est ce qui a été utilisé pour vérifier numériquement la validité, même à un niveau quantitatif de cette approche. Dans la figure 3.4 on montre la **pdf** de la puissance injectée transverse mesurée numériquement. Les coefficients des queues exponentielles sont en parfait accord avec les températures des particules entrantes et sortantes, mesurées directement lors de la simulation. De plus, une fois ces deux températures obtenues, on peut évaluer

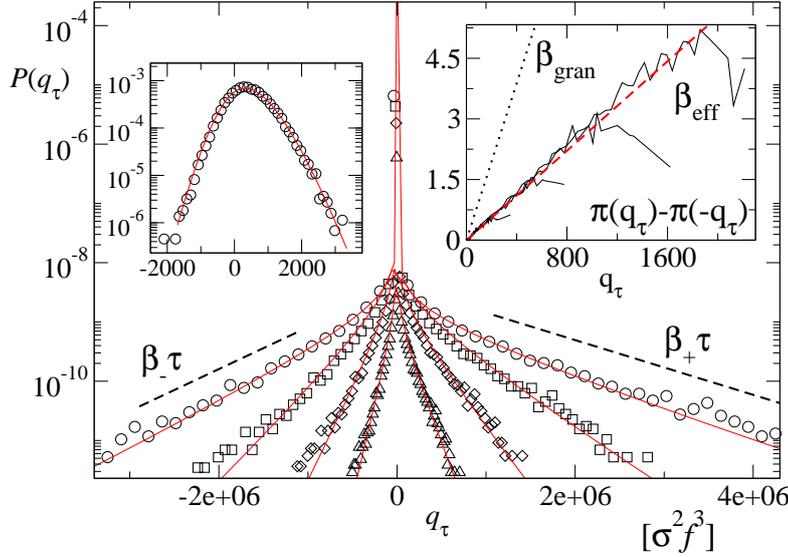


FIG. 3.4: Distribution de la puissance injectée transverse, pour des valeurs de $\tau = (1, 2, 4, 8) \times \tau_{min}$, avec $\tau_{min} = 0.00015 f^{-1}$ (respectivement cercles, carrés, losanges et triangles), pour une simulation MD avec $N = 270$ particules et $\alpha = 0.95$. Les lignes en trait continu représentent les solutions correspondantes du modèle à deux températures. Les tirets indiquent les queues exponentielles $\sim \exp(\mp\beta_{\pm}\tau q_{\tau})$. Encadré de gauche : même fonction aux grands temps, pour $\tau = 6400\tau_{min}$. Encadré de droite : tracé de $(1/\tau) \log[f_q(Q_{\tau})/f_q(-Q_{\tau})]$ en fonction de $q = Q_{\tau}/\tau$ pour des grandes valeurs de τ . Ici $\tau = (1, 2, 4, 8) \times \tau'_{min}$ avec $\tau'_{min} = 3200\tau_{min}$. Les tirets représentent une droite de pente β_{eff} prédite par l'éq.(3.13).

numériquement la transformée de Laplace inverse de (3.7), qui est aussi tracée dans la figure 3.4, est qui est en parfait accord avec la distribution mesurée. On peut aussi voir que la température effective définie par la pente obtenue en essayant de vérifier la FR coïncide avec la température effective prédite par (3.13), ce qui semble confirmer qu'il s'agit bien d'un effet de faible statistique, qui ne permet pas de sonder un probable comportement non linéaire pour des plus grandes valeurs de q .

En conclusion, on a vu qu'un modèle phénoménologique très simple était capable de décrire à un niveau suffisamment précis les propriétés de la pdf de la puissance injectée pour un gaz granulaire entre deux parois vibrantes. Même si cette étude ne prouve pas formellement que la FR n'est pas vérifiée, il permet d'expliquer simplement la raison pour laquelle on voit une relation effectivement linéaire lorsque l'on met cette relation à l'épreuve. Des preuves plus formelles de la non validité de la FR pour les gaz granulaires seront données dans la section suivante, concernant un gaz chauffé par un thermostat stochastique.

3.2.2 Puissance injectée pour le thermostat stochastique

On s'intéresse ici au flux d'énergie traversant un gaz granulaire chauffé par un thermostat stochastique.

Grandes déviations pour le courant d'énergie

On cherche à obtenir une équation cinétique qui décrit l'évolution de la probabilité d'obtenir une valeur donnée de la puissance injectée en un temps t . Cette quantité correspond aussi au travail effectué par la force aléatoire pour maintenir le système dans un état stationnaire hors d'équilibre. Son expression précise s'écrit :

$$\mathcal{W}(t) = \int_0^t dt \sum_i \xi_i \cdot \mathbf{v}_i, \quad (3.15)$$

où ξ représente toujours un bruit blanc. On va s'intéresser en particulier à la fonction de grandes déviations $\pi_\infty(w)$ définie par :

$$\pi_\infty(w) = \lim_{t \rightarrow \infty} \pi_t(w), \quad \pi_t(w) = \frac{1}{t} \log P(\mathcal{W} = wt, t), \quad (3.16)$$

où $w = \mathcal{W}/t$ est le paramètre intensif (en temps) correspondant à \mathcal{W} , et $P(\mathcal{W}, t)$ est la probabilité d'avoir une valeur donnée de \mathcal{W} au temps t . On introduit maintenant la probabilité jointe $\rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}, t)$, pour que le système soit dans un état microscopique $\mathbf{\Gamma}$ et ait une certaine valeur de \mathcal{W} au temps t . La probabilité $P(\mathcal{W}, t)$ est ainsi reliée à la densité ρ par :

$$P(\mathcal{W}, t) = \int d\mathbf{\Gamma} \rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}, t). \quad (3.17)$$

L'observable \mathcal{W} croît dans le temps, et on va s'intéresser aux variations temporelles de la densité $\rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}, t)$. Cette densité varie sous l'effet des collisions, qui affectent exclusivement la variable $\mathbf{\Gamma}$, et des coups aléatoires du thermostat, qui eux affectent $\mathbf{\Gamma}$ et \mathcal{W} . Une équation d'évolution pour $\rho_{\mathcal{W}}$ peut donc bien s'écrire naturellement comme une somme de deux contributions :

$$\partial_t \rho_{\mathcal{W}} = \partial_t \rho_{\mathcal{W}} \Big|_{\text{collisions}} + \partial_t \rho_{\mathcal{W}} \Big|_{\text{coups}}. \quad (3.18)$$

Dans le membre de droite, le premier terme n'est rien d'autre que l'opérateur de pseudo-Liouville (2.4) appliqué à $\rho_{\mathcal{W}}$ qui décrit l'évolution de N sphères dures inélastiques.

La contribution des collisions à \mathcal{W} est nulle. Entre deux collisions, l'énergie fournie par le thermostat à chacune des particules est $\Delta \mathcal{W} = (v(t_{i+1}^-)^2 - v(t_i^+)^2)/2$, où t_i est le temps de la i -ème collision, et les indices $+$ ($-$) précisent qu'il s'agit du temps juste après (avant) l'instant de la collision. Afin de caractériser le rôle du thermostat dans l'évolution de $\rho_{\mathcal{W}}$, il est utile de discrétiser le problème dans l'espace des vitesses, en considérant que l'effet des coups aléatoires sur la vitesse d'une particule n'est rien d'autre qu'une marche aléatoire en temps continu. On définit un réseau (hyper-) cubique en dimension d et de maille élémentaire a . En un temps dt , la particule a une probabilité de sauter

sur un site voisin avec une probabilité γdt . On voit clairement que la quantité \mathcal{W} est markovienne, et l'équation maîtresse qui gouverne l'évolution de la probabilité d'être dans le site \mathbf{n} (qui représente la vitesse discrétisée d'une particule) au temps t , avec une valeur donnée de $\mathcal{W} = \mathbf{n}(t)^2/2$ s'écrit :

$$\partial_t P(\mathbf{n}, \mathcal{W}, t) = \gamma \sum_{\{\mathbf{a}\}} \left(P\left(\mathbf{n} + \mathbf{a}, \mathcal{W} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} + \frac{a^2}{2}, t\right) + P\left(\mathbf{n} - \mathbf{a}, \mathcal{W} - \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} + \frac{a^2}{2}, t\right) \right) - 2d\gamma P(\mathbf{n}, \mathcal{W}, t) . \quad (3.19)$$

Ici $\{\mathbf{a}\}$ est la base des d vecteurs qui définissent le réseau. On peut obtenir la limite continue en développant l'équation précédente en puissances de a jusqu'à l'ordre 2, et considérer ensuite la limite $a \rightarrow 0$ avec $\xi_0^2 = \gamma a^2$, et $\mathbf{n} \equiv \mathbf{v}$. Ceci donne, si en plus on considère que le thermostat agit de manière indépendante sur chaque particule :

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathcal{W}} \right|_{\text{coups}} = \sum_{i=1}^N \mathcal{F}_i(\mathbf{v}_i, \mathcal{W}) \rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}) , \quad (3.20)$$

avec :

$$\mathcal{F}_i = \xi_0^2 \left(d \frac{\partial}{\partial \mathcal{W}} + v_i^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{W}^2} + 2\mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_i \partial \mathcal{W}} + \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} \right)^2 \right) . \quad (3.21)$$

Il est utile, plutôt que de travailler sur une réalisation de \mathcal{W} donnée, d'introduire la transformée de Laplace de $\rho_{\mathcal{W}}$ par rapport à \mathcal{W} , ce qui est l'analogie du passage d'une description microcanonique à une description canonique. On notera $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ la transformée de Laplace de $\rho_{\mathcal{W}}$:

$$\hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t) = \int d\mathcal{W} e^{-\lambda \mathcal{W}} \rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}, t) . \quad (3.22)$$

La propriété (3.17) va avoir aussi son analogue en espace de Laplace :

$$\hat{P}(\lambda, t) = \int d\mathcal{W} e^{-\lambda \mathcal{W}} P(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}, t) = \int d\mathbf{\Gamma} \hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t) . \quad (3.23)$$

De plus, on voit que pour $\lambda = 0$ on a $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, 0, t) = f^N(\mathbf{\Gamma}, t)$, qui est simplement la distribution habituelle à N points de l'espace des phases. L'équation d'évolution pour $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ se déduit directement de l'équation pour $\rho_{\mathcal{W}}$. Le terme dû aux collisions va rester identique, puisqu'il n'agit pas sur \mathcal{W} . Le terme dû au bruit va quant à lui s'écrire :

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_{\mathcal{W}} \right|_{\text{coups}} = \sum_i^N \hat{\mathcal{F}}_i \hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t) , \quad (3.24)$$

avec

$$\hat{\mathcal{F}}_i = \xi_0^2 \Delta_{\mathbf{v}_i} + 2\lambda \xi_0^2 \mathbf{v}_i \cdot \partial_{\mathbf{v}_i} + \xi_0^2 (d\lambda + \lambda^2 v_i^2) . \quad (3.25)$$

La propriété de grandes déviations qui définit la fonction $\pi(w)$ peut également se traduire en termes du paramètre λ , conjugué de \mathcal{W} . Ceci donne :

$$\hat{P}(\lambda, t) \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} e^{\mu(\lambda)t} , \quad (3.26)$$

3 Puissance injectée, énergie dissipée

où $\mu(\lambda)$ est proportionnelle à la fonction génératrice des cumulants (à temps infini) :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \mathcal{W}^n \rangle_c}{t} = (-1)^n \left. \frac{d^n \mu(\lambda)}{d\lambda^n} \right|_{\lambda=0} . \quad (3.27)$$

De plus, si on inverse la transformée de Laplace de \hat{P} aux temps grands, par la méthode du col, on trouve que $\mu(\lambda)$ est relié à la fonction de grandes déviations $\pi_\infty(w)$ par une transformation de Legendre :

$$\pi_\infty(w) = \min_\lambda (\mu(\lambda) + \lambda w) . \quad (3.28)$$

L'évolution de $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ est donc gouvernée par une équation fonctionnelle linéaire :

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_{\mathcal{W}} = \mathcal{L}_\lambda \hat{\rho}_{\mathcal{W}} = \sum_{i,j} \bar{T}_{ij} + \sum_i \hat{\mathcal{F}}_i \hat{\rho}_{\mathcal{W}} . \quad (3.29)$$

La solution aux grands temps est dominée par la plus grande valeur propre de l'opérateur linéaire \mathcal{L}_λ ; or, on peut voir de l'éq.(3.26) que le comportement aux grands temps est dominé par la fonction génératrice des cumulants $\mu(\lambda)$. La solution aux grands temps est donc de la forme :

$$\hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t) \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \tilde{\rho}(\mathbf{\Gamma}, \lambda) e^{\mu(\lambda)t} , \quad (3.30)$$

où $\tilde{\rho}(\mathbf{\Gamma}, \lambda)$ est la projection du vecteur propre associé à μ sur l'état initial $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t = 0)$.

Le problème est maintenant réduit au calcul de la plus grande valeur propre d'un opérateur d'évolution modifié \mathcal{L}_λ . Avant de rentrer dans les détails techniques de résolution (approchée) de cette équation aux valeurs propres, il est utile de faire une remarque importante à propos de l'équation (3.29). Tout d'abord, cette équation ne conserve pas la probabilité : d'une manière générale, l'intégrale $\int d\mathbf{\Gamma} \hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t)$ varie dans le temps. Il semble donc *a priori* injustifié d'interpréter $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ comme une densité de probabilité à N points, munie donc d'un sens physique analogue à celui des distributions apparaissant dans l'équation de Liouville ordinaire, ou dans la hiérarchie BBGKY. Cependant, on va montrer qu'une interprétation physique, en terme d'interactions effectives, de l'éq.(3.29) est en fait possible. Comme on l'a déjà vu, l'opérateur de collisions binaires \bar{T}_{ij} décrit simplement la dynamique de particules effectuant des collisions inélastiques. L'opérateur $\hat{\mathcal{F}}$ peut se réécrire de la manière suivante :

$$\hat{\mathcal{F}}_i = \xi_0^2 \Delta_{\mathbf{v}_i} + 2\lambda \xi_0^2 \partial_{\mathbf{v}_i} \cdot \mathbf{v}_i + \xi_0^2 \lambda^2 v_i^2 - \xi_0^2 d\lambda . \quad (3.31)$$

Le premier terme, un Laplacien, correspond à l'effet du bruit sur la vitesse des particules. Le terme suivant, peut être interprété comme l'effet d'une force de friction $\mathbf{F} = -2\lambda \xi^2 \mathbf{v}$ (pour $\lambda > 0$ il s'agit bien d'une force de friction habituelle, qui amortit le mouvement, cependant, pour $\lambda < 0$, cela va devenir une force qui accroît la vitesse, et qui est par ailleurs du même type que la force employée par le thermostat gaussien). Les deux termes restant dans l'expression de $\hat{\mathcal{F}}$ peuvent s'interpréter comme décrivant un phénomène de perte et duplication de particules. Il s'agit en fait de termes qui apparaissent naturellement si on considère qu'entre t et $t + dt$ chaque particule peut être dupliquée avec une

probabilité $\xi_0^2 \lambda v^2 dt$, et peut être éliminée (si $\lambda > 0$, ou encore dupliquée si $\lambda < 0$) avec une probabilité constante $\xi_0^2 d\lambda$. Finalement, $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t)$ peut très bien être interprétée comme une densité de probabilité à N points, correspondant à l'évolution d'un système de N particules sur lesquelles agit un bruit blanc *et* une force de friction qui dépend de λ . De plus, avec un taux dépendant de la vitesse, chaque particule peut disparaître, ou être clonée (suivant le signe de λ). Dans ce cadre, λ ne joue plus que le rôle d'un paramètre déterminant l'amplitude de ces forces fictives extérieures. De plus, le nombre de particules total du système n'est pas conservé : son évolution est exponentielle en temps, et elle aussi dominée par la plus grande valeur propre $\mu(\lambda)$. On a donc $N(t) = N_0 e^{\mu(\lambda)t}$, ce qui suggère que $\mu(\lambda)$ pourrait également se mesurer numériquement, en simulant le système décrit plus haut¹. De même, l'équation aux valeurs propres

$$\mu(\lambda) \tilde{\rho}(\mathbf{\Gamma}, \lambda) = \mathcal{L}_\lambda \tilde{\rho}(\mathbf{\Gamma}, \lambda) \quad (3.32)$$

peut s'interpréter comme une équation déterminant l'état stationnaire dans un système où en plus on injecte (ou on enlève) des particules à taux constant $\mu(\lambda)$, de manière à ce que le nombre de particules soit conservé. Nous avons exploité cette remarque pour mesurer numériquement la fonction génératrice des cumulants d'une autre quantité : le nombre de collisions. Ce travail est reporté dans l'appendice C.

Afin de résoudre l'équation aux valeurs propres (3.32), on va construire une hiérarchie d'équations, dans le même esprit que la hiérarchie BBGKY, pour l'éq.(3.32). Pour cela, on va définir des "densités à s points"

$$\tilde{f}^s(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_s, \lambda) = \int d\mathbf{v}_{s+1} \dots d\mathbf{v}_N \tilde{\rho}(\mathbf{\Gamma}, \lambda) . \quad (3.33)$$

Si en plus on fait une hypothèse supplémentaire de "chaos moléculaire"

$$\tilde{f}^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \lambda) \simeq \tilde{f}^1(\mathbf{v}_1, \lambda) \tilde{f}^1(\mathbf{v}_2, \lambda) , \quad (3.34)$$

on peut ainsi aboutir à une équation de Boltzmann modifiée :

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{N} \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda, t) = & \xi_0^2 \Delta_{\mathbf{v}_1} \tilde{f} + 2\lambda \xi_0^2 \mathbf{v}_1 \cdot \partial_{\mathbf{v}_1} \tilde{f} + \xi_0^2 (d\lambda + \lambda^2 v_1^2) \tilde{f} \\ & + \frac{1}{\ell} \int_{\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\mathbf{v}_2 d\hat{\sigma} \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} \left[\alpha^{-2} \tilde{f}(\mathbf{v}_1^{**}, \lambda) \tilde{f}(\mathbf{v}_2^{**}, \lambda) - \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) \tilde{f}(\mathbf{v}_2, \lambda) \right] , \end{aligned} \quad (3.35)$$

où on a désormais noté $\tilde{f}^1 \equiv \tilde{f}$. On remarque également que la relation de fermeture (3.34) a un sens physique bien précis même en espace direct. Si on définit les distributions à s points de $\rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}, t)$

$$g^s(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_s, \mathcal{W}, t) = \int d\mathbf{v}_{s+1} \dots d\mathbf{v}_N \tilde{\rho}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}, t) . \quad (3.36)$$

¹Une approche numérique semblable a été développée de manière plus générale et systématique dans [66]

3 Puissance injectée, énergie dissipée

La relation de “chaos moléculaire” exprimée par (3.34) revient alors à préciser que, si une paire de particules \mathbf{v}_1 et \mathbf{v}_2 porte une quantité \mathcal{W} de puissance injectée, alors ce fait est équivalent à ce que la particule 1 porte une fraction \mathcal{W}_1 et la particule 2 une fraction \mathcal{W}_2 , avec $\mathcal{W}_1 + \mathcal{W}_2 = \mathcal{W}$. En terme de fonctions à 1 point cela donne :

$$g^2(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathcal{W} = \mathcal{W}_1 + \mathcal{W}_2, t) \simeq \int d\mathcal{W}_1 d\mathcal{W}_2 g^1(\mathbf{v}_1, \mathcal{W}_1, t) g^1(\mathbf{v}_2, \mathcal{W}_2, t) \delta(\mathcal{W}_1 + \mathcal{W}_2 - \mathcal{W}) . \quad (3.37)$$

Quelques résultats asymptotiques

On va maintenant s’intéresser aux propriétés des solutions de l’équation de Boltzmann modifiée (3.35) dans quelques cas asymptotiques, notamment dans la limite des grandes vitesses et dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$.

L’équation (3.35) peut se réécrire :

$$\frac{\mu}{N} \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) = \xi_0^2 e^{-\frac{\lambda v^2}{2}} \Delta_{\mathbf{v}_1} \left(e^{\frac{\lambda v_1^2}{2}} \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) \right) + \hat{J}[\tilde{f}|\tilde{f}] . \quad (3.38)$$

Si maintenant on définit une nouvelle fonction $F(\mathbf{v}, \lambda) = \exp\left(\frac{\lambda v^2}{2}\right) \tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$, l’équation ci-dessus s’écrit :

$$\frac{\mu(\lambda)}{N} F(\mathbf{v}_1, \lambda) = \Delta_{\mathbf{v}_1} F(\mathbf{v}_1, \lambda) + J_\lambda[F|F] , \quad (3.39)$$

où

$$J_\lambda[F|F] = \frac{1}{\ell} \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) e^{-\frac{\lambda v_2^2}{2}} \left(\frac{1}{\alpha^2} e^{-\frac{\lambda}{4} \left(\frac{1}{\alpha^2} - 1\right) (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2} F(\mathbf{v}_1^{**}, \lambda) F(\mathbf{v}_2^{**}, \lambda) - F(\mathbf{v}_1, \lambda) F(\mathbf{v}_2, \lambda) \right) \quad (3.40)$$

est l’intégrale de collision. En utilisant les mêmes arguments introduits par Van Noije et Ernst [108] on peut avoir accès au comportement des queues de la pdf de la vitesse $\tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda)$. Pour les grandes vitesses $v_{12} \sim v_1$, et pour $\lambda > 0$ le terme de gain dans l’intégrale de collision est négligeable, puisque l’argument de son préfacteur exponentiel est toujours négatif pour $0 < \alpha < 1$. Dans cette limite, la solution de (3.39) est de la forme :

$$\log \tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda) = -\lambda \frac{v^2}{2} - \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\beta_1}{\ell \xi_0^2}} v^{3/2} - \frac{\mu}{N \xi_0^2} \sqrt{\frac{\ell \xi_0^2}{\beta_1}} v^{1/2} + o(v^{1/2}) , \quad (3.41)$$

où $\beta_1 = \pi^{(d-1)/2} / \Gamma((d+1)/2)$ est un facteur géométrique, provenant d’une intégration sur les angles. Ce résultat est significatif puisqu’il montre que les queues de la pdf de la vitesse sont gaussiennes. On peut remarquer que pour $\lambda = 0$ le résultat en exponentielle étirée de [108] est bien retrouvé (cf. l’éq.(2.36)).

De plus, dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$ le terme de gain de l’intégrale de collision est négligeable. Dans cette limite, l’équation (3.39) peut s’interpréter comme une équation de Boltzmann

pour un système de particules qui, interagissant par un potentiel effectif tel que le noyau de collision soit $\propto (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \exp(-\lambda v_{12}^2/2)$, s'annihilent lorsqu'une collision a lieu. Cette équation de Boltzmann s'écrit :

$$\partial_t F = \Delta_{\mathbf{v}} F - \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) e^{-\frac{\lambda v_{12}^2}{2}} F(\mathbf{v}_1) F(\mathbf{v}_2) . \quad (3.42)$$

Ceci montre que pour λ grand, $\mu(\lambda)$ est toujours négatif, puisque la densité de particules (donnée par l'intégrale de F) décroît toujours. Si on considère de plus que $\mu(\lambda = 0) = 0$ et que $\mu(\lambda)$ est une fonction convexe de λ , il s'ensuit que $\mu'(\lambda) < 0$ pour tout λ . Or la fonction de grandes déviations $\pi_\infty(w)$ est reliée à $\mu(\lambda)$ par une transformation de Legendre. On a donc que

$$\pi_\infty(w) = \mu(\lambda^*) + \lambda^* w , \quad (3.43)$$

avec

$$\mu'(\lambda^*) = -w . \quad (3.44)$$

Cette dernière équation montre clairement que, si $\mu'(\lambda)$ est toujours négatif, alors $\pi_\infty(w)$ n'a pas de solution finie² pour $w < 0$. Voilà un argument simple qui montre que la **FR** ne peut pas être vérifiée dans ce système.

Cumulants de \mathcal{W}

Nous nous attachons ici à un calcul perturbatif des premiers cumulants de \mathcal{W} , en développant l'équation (3.35) au voisinage de $\lambda = 0$. On va d'abord introduire une vitesse adimensionnée $\mathbf{c} = \mathbf{v}/v_0(\lambda)$, où $v_0(\lambda)$ joue le rôle d'une vitesse thermique :

$$v_0^2(\lambda) = 2T(\lambda) = \frac{2}{d} \int d\mathbf{v} v^2 \tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda) . \quad (3.45)$$

Ensuite, on peut définir la fonction d'échelle $f(\mathbf{c}, \lambda) = v_0(\lambda)^d \tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$, ainsi que ses moments d'ordre n :

$$m_n(\lambda) = \int d\mathbf{c} c^n f(\mathbf{c}, \lambda) . \quad (3.46)$$

En projetant l'équation (3.35) sur les moments de \mathbf{c} , on obtient une relation de récurrence :

$$\left(\frac{\mu}{N} + \xi_0^2 (2n + d) \lambda \right) m_n = \frac{\xi_0^2}{v_0^2} n(n + d - 2) m_{n-2} + \xi_0^2 \lambda^2 v_0^2 m_{n+2} - v_0 \nu_n , \quad (3.47)$$

où ν_n désigne le moment collisionnel d'ordre n :

$$\nu_n = - \int d\mathbf{c} c^n J[f|f] . \quad (3.48)$$

Puisque pour $\lambda = 0$ l'éq.(3.35) se réduit à l'équation de Boltzmann habituelle pour un gaz granulaire, il est naturel de chercher, pour λ proche de 0, des solutions similaires, approchées par une série en polynômes de Sonine :

$$f(\mathbf{c}, \lambda) = \phi(c) \left(1 + a_1(\lambda) S_1(c^2) + a_2(\lambda) S_2(c^2) \right) + \mathcal{O}(a_3) . \quad (3.49)$$

²en toute rigueur, on trouve que $\pi_\infty(w) = -\infty$ pour tout $w < 0$.

3 Puissance injectée, énergie dissipée

Ici $\phi(\mathbf{c}) = \pi^{-d/2} \exp(-c^2)$ est une gaussienne. Même dans ce cas, la définition de la vitesse thermique $v_0(\lambda)$ impose que le premier coefficient a_1 soit nul. La méthode qu'on va utiliser pour calculer les premiers cumulants consiste à prendre l'équation (3.47) pour $n = 0, 2$ et 4 afin d'obtenir un système fermé d'équations pour μ, v_0 et a_2 dans la limite $\lambda \rightarrow 0$. Les moments collisionnels ont été calculés au premier ordre en a_2 [108]. Leur expression est donnée dans l'appendice A. À l'ordre gaussien (i.e. à l'ordre zéro de la série de Sonine), la température granulaire du gaz est donnée par :

$$T_0 = \left(\frac{2d\xi_0^2 \ell \sqrt{\pi}}{(1-\alpha^2)\Omega_d} \right)^{2/3}. \quad (3.50)$$

L'expression des premiers moments est donnée par :

$$m_0 = 1 \quad (3.51a)$$

$$m_2 = d/2 \quad (3.51b)$$

$$m_4 = \frac{(1+a_2)d(2+d)}{4} \quad (3.51c)$$

$$m_6 = \frac{(1+3a_2)d(2+d)(4+d)}{8}. \quad (3.51d)$$

À l'aide de l'échelle définie par la température granulaire T_0 , on peut maintenant introduire les variables adimensionnées suivantes :

$$\begin{aligned} \tilde{\mu} &= \mu \frac{T_0}{Nd\xi_0^2}, & \tilde{\lambda} &= \lambda T_0, \\ \tilde{v}_0^2 &= \frac{v_0^2}{2T_0}, & \tilde{v}_p &= \frac{\sqrt{2T_0^3}}{\xi_0^2} \nu_p. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Ce changement définit naturellement les échelles pertinentes pour les autres quantités qui nous intéressent. En particulier :

$$\tilde{\pi}_t = \pi_t \frac{T_0}{Nd\xi_0^2}, \quad \tilde{w} = \frac{w}{Nd\xi_0^2}, \quad \tilde{\mathcal{W}} = \frac{\mathcal{W}}{\langle \mathcal{W} \rangle}. \quad (3.53)$$

L'équation (3.47) s'écrit, pour les variables adimensionnées définies ci-dessus :

$$\left(\tilde{\mu}d + (2n+d)\tilde{\lambda} \right) m_n = \frac{n(n+d-2)}{2\tilde{v}^2} m_{n-2} + 2\tilde{\lambda}^2 \tilde{v}^2 m_{n+2} - \tilde{v}\tilde{v}_n. \quad (3.54)$$

On résout d'abord l'équation pour $n = 0$, qui donne le résultat suivant :

$$\tilde{\mu}(\tilde{\lambda}) = -\tilde{\lambda} + \tilde{\lambda}^2 \tilde{v}_0^2(\tilde{\lambda}). \quad (3.55)$$

Puisque pour $\lambda \rightarrow 0$ on a que $v_0^2 = 2T_g + \mathcal{O}(\lambda)$, il est important de remarquer que si on restreignait notre analyse à une approximation gaussienne pour $P(\mathcal{W}, t)$ (ce qui équivaut à tronquer $\mu(\lambda)$ à l'ordre λ^2), l'éq.(3.55) s'écrirait :

$$\frac{\mu}{Nd\xi_0^2} = \lambda(\lambda T_g - 1). \quad (3.56)$$

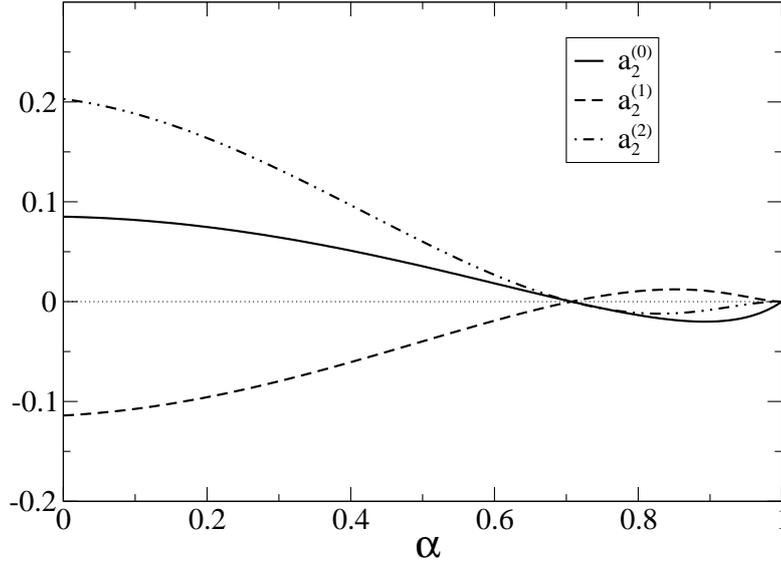


FIG. 3.5: Tracé de $a_2^{(0)}$, $a_2^{(1)}$ et $a_2^{(2)}$ en fonction de α pour des sphères dures inélastiques chauffées par une force aléatoire pour $d = 2$ dimensions.

On aurait alors :

$$\mu(\lambda) = \mu \left(\frac{1}{T_g} - \lambda \right) , \quad (3.57)$$

ce qui aurait impliqué que $\pi_\infty(w) = \max_\lambda \{ \mu(\lambda) + \lambda w \}$ vérifiât

$$\pi_\infty(w) - \pi_\infty(-w) = \frac{w}{T_g} . \quad (3.58)$$

Ceci n'est rien d'autre que la [FR](#). Cependant, les fonctions $m_n(\lambda)$ vont briser cette apparente symétrie, comme on le verra par la suite. Afin de caractériser plus précisément la dépendance de $\tilde{\mu}$ en $\tilde{\lambda}$ pour $\tilde{\lambda}$ petit, il est utile de développer \tilde{v}_0^2 et a_2 en puissances de $\tilde{\lambda}$:

$$\tilde{v}_0^2(\tilde{\lambda}) = \tilde{v}_0^{2(0)} + \tilde{\lambda} \tilde{v}_0^{2(1)} + \tilde{\lambda}^2 \tilde{v}_0^{2(2)} + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^3) \quad (3.59a)$$

$$a_2(\tilde{\lambda}) = a_2^{(0)} + \tilde{\lambda} a_2^{(1)} + \tilde{\lambda}^2 a_2^{(2)} + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^3) \quad (3.59b)$$

De cette manière on peut trouver une expression pour $\tilde{v}_0^{2(i)}(a_2^{(i)})$ en résolvant l'équation [\(3.54\)](#) pour $n = 2$:

$$\tilde{v}_0^{2(0)} = \left(1 - \frac{a_2^{(0)}}{8} \right) , \quad (3.60)$$

$$\tilde{v}_0^{2(1)} = -\frac{4}{3} + \frac{a_2^{(0)}}{3} - \frac{a_2^{(1)}}{8} , \quad (3.61)$$

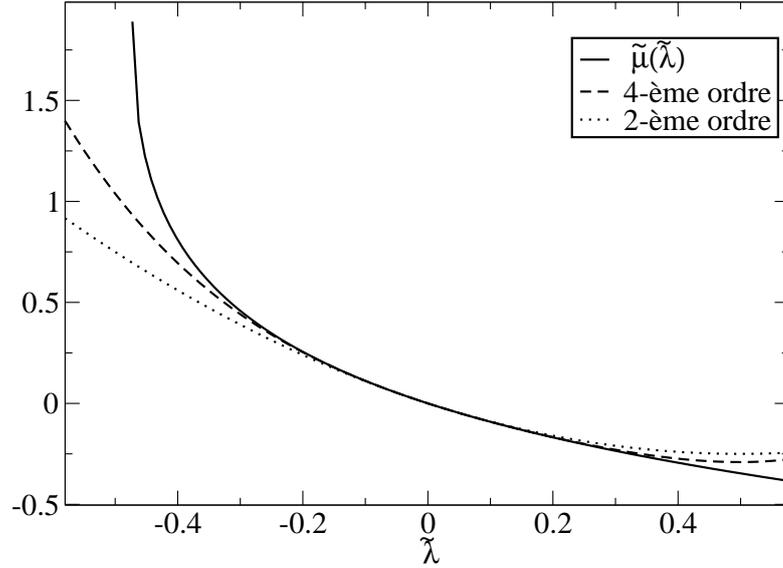


FIG. 3.6: La courbe en trait continu représente l'expression de $\tilde{\mu}$ obtenue dans l'approximation gaussienne. La courbe en tirets est l'expression de $\tilde{\mu}$ obtenue en résolvant de façon perturbative l'éq.(3.55), jusqu'au 4^{ème} ordre en λ pour $d = 2$ et $\alpha = 0.5$. Enfin, la ligne en pointillés représente la même fonction, tronquée au deuxième ordre en λ .

$$\tilde{v}_0^{2(2)} = 2 - a_2^{(0)} \left(\frac{1}{12} + \frac{d}{3} \right) + \frac{a_2^{(1)}}{3} - \frac{a_2^{(2)}}{8}. \quad (3.62)$$

Ensuite, on peut remplacer l'expression de $\tilde{v}_0^2(\tilde{\lambda})$ dans l'équation (3.54) pour $n = 4$. On obtient ainsi une expression pour les $a_2^{(i)}(\alpha)$ qui sont également tracés dans la figure 3.5 :

$$a_2^{(0)} = \frac{4(1-\alpha)(1-2\alpha^2)}{19+14d-3\alpha(9+2d)+6(1-\alpha)\alpha^2} \quad (3.63)$$

$$a_2^{(1)} = -\frac{4(1-\alpha)^2(-1+2\alpha^2)(31+2\alpha^2+16d)}{(19+14d-3\alpha(9+2d)+6(1-\alpha)\alpha^2)^2} \quad (3.64)$$

$$a_2^{(2)} = \frac{A(\alpha)}{B(\alpha)} \quad (3.65)$$

avec

$$A(\alpha) = 16(-1+\alpha)^2(-1+2\alpha^2) \{906+\alpha[-984+\alpha(85+3\alpha(-19+6(-1+\alpha)\alpha))]+985d+\alpha[-951+\alpha(-25+3\alpha(7+6(-1+\alpha)\alpha))]d+(269+3\alpha(-75+2\alpha(-7+3\alpha)))d^2\}, \quad (3.66)$$

et

$$B(\alpha) = 3(-19 - 14d + 3\alpha(9 + 2(-1 + \alpha)\alpha + 2d))^3. \quad (3.67)$$

Pour $\lambda = 0$ les expressions de $v_0^{(0)}$ et de $a_2^{(0)}$ coïncident bien avec les résultats établis pour les gaz granulaires [108, 89]. Le calcul des cumulants est maintenant possible. En utilisant la relation (3.27), on obtient :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \mathcal{W}^n \rangle_c}{t} = (-1)^n N d \xi_0^2 T_0^{n-1} n! \tilde{v}^{2(n-2)}. \quad (3.68)$$

De plus, puisque les corrections des coefficients $a_2^{(i)}$ sont numériquement petites, comme montré par la figure 3.5, l'approximation d'ordre 0 (i.e. gaussienne) donne déjà une très bonne estimation des premiers cumulants. L'expression analytique des cumulants est alors, dans cette approximation, donnée par :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{W} \rangle_c &= t N d \xi_0^2, & \langle \mathcal{W}^2 \rangle_c &= 2t N d \xi_0^2 T_0, \\ \langle \mathcal{W}^3 \rangle_c &= 8t N d \xi_0^2 T_0^2, & \langle \mathcal{W}^4 \rangle_c &= 48t N d \xi_0^2 T_0^3. \end{aligned} \quad (3.69)$$

L'ensemble de ce développement en puissances de λ peut en principe être prolongé jusqu'à un ordre arbitraire : il suffit pour cela de développer v_0 et a_2 dans (3.59) jusqu'à l'ordre souhaité. De plus, il est aussi possible de continuer le développement en polynômes de Sonine (par exemple à l'ordre a_3 [30]). Pour cela il faut par contre prendre en compte un plus grand nombre d'équations à partir de (3.54) (par exemple jusqu'à $n = 6$), ce qui requiert en outre l'expression des moments collisionnels d'ordre plus élevé.

Une solution approchée

On va maintenant s'intéresser à une approche qui permet d'avoir un résultat explicite pour $\mu(\lambda)$ valable pour tout λ . On a vu dans les paragraphes précédents que la solution $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ de l'équation aux valeurs propres (3.35) est proche d'une gaussienne, aussi bien dans la limite des grandes vitesses que dans la limite des faibles valeurs de λ , où les corrections de Sonine sont effectivement négligeables. Supposer que $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ est une gaussienne semble donc raisonnable. De plus, cette approximation semble devenir exacte dans la limite des grandes dimensions. Premièrement, on voit que toutes les corrections de Sonine, quantifiées par les coefficients $a_2^{(i)}$ se comportent, à l'ordre dominant, en $1/d$. De plus, des résultats numériques semblent montrer que l'intégrale de collision s'annule par une gaussienne, dans la limite $d \rightarrow \infty$. Ceci impliquerait que la gaussienne est une fonction propre exacte de l'opérateur \mathcal{L}_λ .

On est donc amené à considérer, dans la limite $d \rightarrow \infty$, que $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ est une gaussienne, avec une variance qui dépend de λ . Dans ce cadre, la distribution d'échelle f s'écrit :

$$f(\mathbf{c}) = \frac{e^{-c^2}}{\pi^{d/2}}, \quad (3.70)$$

avec $\mathbf{c}(\lambda) = \mathbf{v}/v_0$. Avec cette hypothèse il est possible de résoudre l'équation (3.54) et d'obtenir une expression explicite pour $\mu(\lambda)$. Pour ce faire, on commence par considérer

3 Puissance injectée, énergie dissipée

l'équation (3.54) pour $n = 0$, ce qui donne :

$$\tilde{\mu}(\tilde{\lambda}) = -\tilde{\lambda} + \tilde{\lambda}^2 \tilde{v}_0^2(\tilde{\lambda}), \quad (3.71)$$

où $\tilde{v}_0^2(\tilde{\lambda})$ peut s'obtenir à partir de (3.54) pour $n = 2$:

$$\tilde{\lambda}^2 \tilde{v}^4 - \tilde{v}^3 - 2\tilde{\lambda} \tilde{v}^2 + 1 = 0. \quad (3.72)$$

La seule solution de cette équation qui vérifie la condition physique que $\tilde{v}_0(\lambda = 0) = 1$ est :

$$\tilde{v}_0^2(\tilde{\lambda}) = \frac{1 + 4\tilde{\lambda}^3}{4\tilde{\lambda}^4} + \frac{b_1(\tilde{\lambda})}{2} - \frac{1}{2} \left[-\frac{8}{\tilde{\lambda}^2} + \frac{(1 + 4\tilde{\lambda}^3)^2}{2\tilde{\lambda}^8} + b_2(\tilde{\lambda}) - b_3(\tilde{\lambda}) + \frac{b_4(\tilde{\lambda})}{4b_1(\tilde{\lambda})} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.73)$$

avec

$$\begin{aligned} b_1(\tilde{\lambda}) &= \sqrt{\frac{\tilde{\lambda}^{-8}}{4} + \frac{2}{\tilde{\lambda}^5} - b_2(\tilde{\lambda}) + b_3(\tilde{\lambda})}, & b_2(\tilde{\lambda}) &= \frac{4 \left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{1}{3}}}{\tilde{\lambda}^3 \left(9 + \sqrt{3} \sqrt{27 + 256\tilde{\lambda}^3}\right)^{\frac{1}{3}}}, \\ b_3(\tilde{\lambda}) &= \frac{\left(9 + \sqrt{3} \sqrt{27 + 256\tilde{\lambda}^3}\right)^{\frac{1}{3}}}{2^{\frac{1}{3}} 3^{\frac{2}{3}} \tilde{\lambda}^4}, & b_4(\tilde{\lambda}) &= \frac{32}{\tilde{\lambda}^3} - \frac{24(1 + 4\tilde{\lambda}^3)}{\tilde{\lambda}^6} + \frac{(1 + 4\tilde{\lambda}^3)^3}{\tilde{\lambda}^{12}}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Cette expression de la vitesse thermique est bien cohérente avec la définition de la température granulaire quand $\lambda = 0$. De plus cette expression décroît comme $\lambda^{-1/2}$ quand $\lambda \rightarrow \infty$. Ceci signifie que dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$ \tilde{f} tend vers une distribution de Dirac, centrée en 0. Or, le comportement de $\mu(\lambda)$ quand λ tend vers l'infini nous renseigne sur les événements (rares) pour lesquels on a des faibles valeurs de \mathcal{W} . La connaissance de la fonction propre \tilde{f} nous renseigne par contre sur les configurations typiques du système, lors de telles réalisations. On en déduit donc par exemple que les réalisations de \mathcal{W} très faible sont caractérisées par des configurations typiques où toutes les particules ont une vitesse presque nulle.

Le comportement de $\mu(\lambda)$ est tracé dans la figure 3.6. On voit que cette fonction présente une singularité dans le plan complexe, et une coupure dans la demi-axe négatif pour $\tilde{\lambda} < -\frac{3}{2^{8/3}}$, à cause du terme $\sqrt{27 + 256\tilde{\lambda}^3}$. De plus, à grand λ , le comportement de cette fonction est donné par :

$$\tilde{\mu}(\tilde{\lambda}) \sim -\tilde{\lambda}^{\frac{1}{4}}. \quad (3.75)$$

Au voisinage de la singularité (i.e. quand $\tilde{\lambda} = \lambda_0 = -\frac{3}{2^{8/3}}$) le comportement de la fonction génératrice est :

$$\tilde{\mu}(\tilde{\lambda}) = \frac{3}{2^{2/3}} - 3^{3/2} 2^{1/6} \sqrt{\tilde{\lambda} - \lambda_0} + \mathcal{O}(\tilde{\lambda} - \lambda_0). \quad (3.76)$$

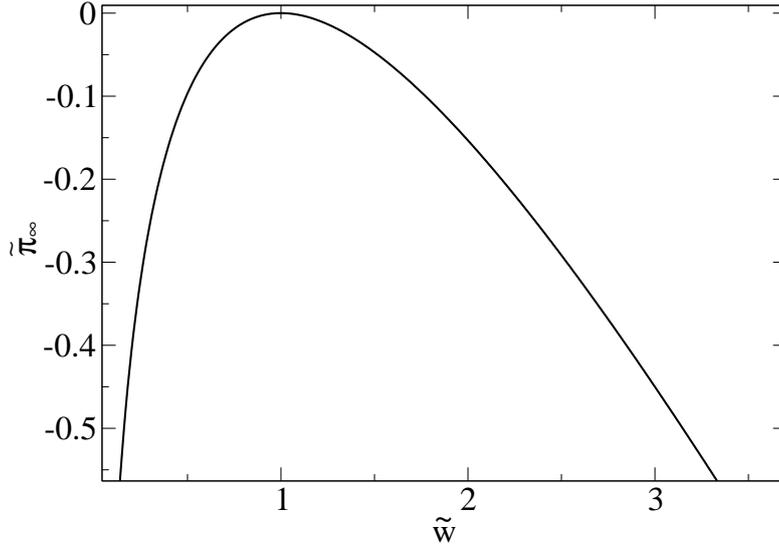


FIG. 3.7: Fonction de grandes déviations $\tilde{\pi}_\infty(\tilde{w})$ dans la limite $d = \infty$. Cette courbe a été obtenue à partir d'une transformation de Legendre numérique de l'équation (3.71).

À partir du comportement à grand $\tilde{\lambda}$ il est possible de retrouver le comportement de la queue gauche de la fonction de grandes déviations π_∞ . D'une manière générale, si $\mu(\lambda) \sim -\lambda^\beta$ pour $\lambda \rightarrow \infty$, on a $\mu'(\lambda_*) = -\beta\lambda_*^{\beta-1} = -w$. Cette égalité nous confirme que pour $\beta < 1$ on est en train de s'intéresser au comportement $w \rightarrow 0^+$ de la fonction de grandes déviations. Ce comportement est alors donné par $\pi_\infty(w) = \mu(\lambda_*) + \lambda_* w \sim w^{\frac{\beta}{\beta-1}}$. Un raisonnement analogue permet de déterminer le comportement de π_∞ lorsque $w \rightarrow \infty$, à partir du comportement de $\mu(\lambda)$ au voisinage de λ_0 . En résumé, les queues de la fonction de grandes déviations sont données par :

$$\tilde{\pi}_\infty(\tilde{w} \rightarrow 0^+) \sim -\tilde{w}^{-1/3}, \quad \tilde{\pi}_\infty(\tilde{w} \rightarrow \infty) \sim -\tilde{w}. \quad (3.77)$$

Comme on s'y attendait, on voit qu'il n'y a pas d'événements négatifs pour \mathcal{W} aux temps longs. Le graphe de $\tilde{\pi}_\infty(\tilde{w})$ peut se retrouver par transformation de Legendre numérique de $\mu(\lambda)$, et il est tracé dans la figure 3.7. Cette fonction de grandes déviations sera comparée à des simulations numériques dans la figure 3.16.

Grandes déviations pour le modèle de Maxwell

On va maintenant montrer comment calculer la fonction génératrice des cumulants pour la puissance injectée dans un gaz composé de molécules de Maxwell inélastiques. Ce modèle, introduit brièvement dans 2.2.6, est analytiquement plus simple, et, comme on le verra par la suite, permet des simulations numériques plus abouties.

La description, présentée auparavant, en terme d'opérateur d'évolution pour la probabilité jointe $\rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W})$ s'applique également au cas des molécules de Maxwell. Dans ce

3 Puissance injectée, énergie dissipée

cas, la seule différence réside dans l'expression de l'opérateur de collisions binaires. En procédant de la même manière qu'au paragraphe précédent, on peut aboutir à l'équation de Boltzmann suivante, qui est l'équivalente de (3.35) :

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{N} \tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda, t) = & \xi_0^2 \Delta_{\mathbf{v}} \tilde{f} + 2\lambda \xi_0^2 \mathbf{v} \cdot \partial_{\mathbf{v}} \tilde{f} + \xi_0^2 (d\lambda + \lambda^2 v^2) \tilde{f} \\ & + \omega_0 \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\sigma} \left[\alpha^{-1} \tilde{f}(\mathbf{v}_1^{**}, \lambda) \tilde{f}(\mathbf{v}_2^{**}, \lambda) - \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) \tilde{f}(\mathbf{v}_2, \lambda) \right], \end{aligned} \quad (3.78)$$

où ω_0 est la fréquence de collision du gaz.

L'expression des premiers cumulants de \mathcal{W} s'obtient suivant la même procédure que pour les sphères dures. À partir de l'éq.(3.78) on obtient la relation de récurrence :

$$\left(\frac{\mu}{N} + \xi_0^2 (2n + d) \lambda \right) m_n = \frac{\xi_0^2}{v_0^2} n(n + d - 2) m_{n-2} + \xi_0^2 \lambda^2 v_0^2 m_{n+2} - \omega_0 \nu_n, \quad (3.79)$$

où les m_n sont les moments n -ièmes de la vitesse (cf. (3.46)), et les ν_n désignent toujours les moments collisionnels³, qui sont donnés dans l'appendice A. Dans ce cas la température granulaire à l'ordre gaussien est donnée par $T_0 = \frac{4d\xi_0^2}{\omega_0(1-\alpha^2)}$. On peut également introduire des variables adimensionnées :

$$\begin{aligned} \tilde{\mu} &= \mu \frac{T_0}{Nd\xi_0^2} & \tilde{\lambda} &= \lambda T_0 \\ \tilde{v}_0^2 &= \frac{v_0^2}{2T_0} & \tilde{\nu}_p &= \frac{\omega_0 T_0}{d\xi_0^2} \nu_p, \end{aligned} \quad (3.80)$$

pour lesquelles l'équation pour les moments (3.79) se réécrit :

$$(d\tilde{\mu} + (2n + d)\tilde{\lambda})m_n = \frac{1}{2\tilde{v}_0^2} n(n + d - 2)m_{n-2} + 2\tilde{\lambda}^2 \tilde{v}_0^2 m_{n+2} - d\tilde{\nu}_n. \quad (3.81)$$

En développant la solution comme une gaussienne multipliée par des polynômes de Sonine avec troncature au deuxième terme, on obtient, en prenant les trois premières équations de la hiérarchie (3.81), un système d'équations fermé pour $\tilde{\mu}$, \tilde{v}_0 , et a_2 . Ces équations peuvent se résoudre au voisinage de $\lambda = 0$ avec l'hypothèse que $|a_2(\lambda)| \ll 1$, de sorte que l'on puisse ne garder que les termes linéaires en a_2 . Cette solution est donnée par :

$$\mu(\lambda) = \frac{1 - \sqrt{1 + 4\lambda}}{2} - a_2 \frac{(2 + d) (-1 + \sqrt{1 + 4\lambda} + 2\lambda (-2 - \lambda + \sqrt{1 + 4\lambda}))}{4\sqrt{1 + 4\lambda}} + \mathcal{O}(a_2^2) \quad (3.82)$$

avec

$$a_2(\lambda) = \frac{-6(1 - \alpha)^2 (1 + \alpha)}{(1 + \alpha) (7 + 3(\alpha - 2)\alpha - 4d) + 8(\alpha - 1)(2 + d)\sqrt{1 + 4\lambda}}. \quad (3.83)$$

³Les moments collisionnels pour les molécules de Maxwell sont différents des moments collisionnels pour les sphères dures inélastiques, et c'est d'ailleurs la seule différence entre l'éq.(3.79) et l'éq.(3.47).

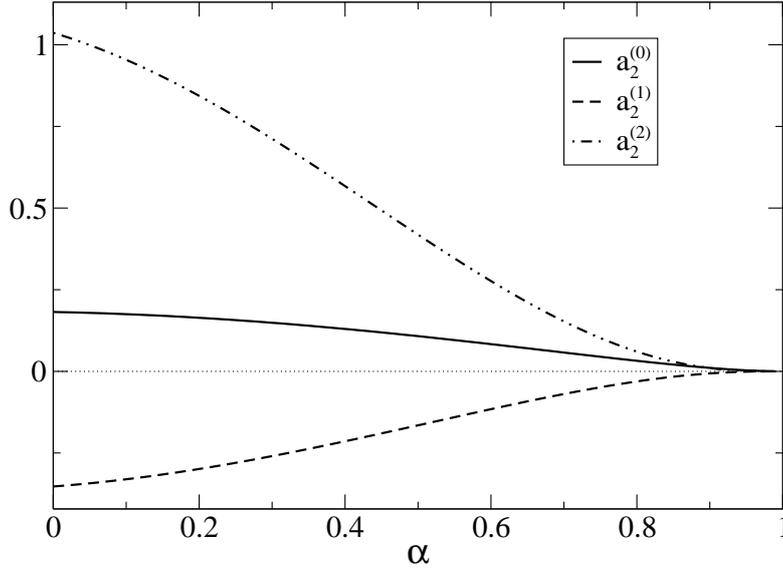


FIG. 3.8: $a_2^{(0)}$, $a_2^{(1)}$ et $a_2^{(2)}$ en fonction de α pour les molécules de Maxwell inélastiques en $d = 2$.

En développant cette dernière expression en puissances de λ , on peut accéder aux coefficients $a_2^{(i)}$ du développement (3.59). Les premiers coefficients sont tracés dans la figure 3.8. Ces résultats permettent aussi de calculer les cumulants, à partir des dérivées de $\tilde{\mu}$:

$$\langle \mathcal{W}^n \rangle_c = Nd\xi_0^2 T_0^{n-1} \left. \frac{d^n \tilde{\mu}}{d\tilde{\lambda}^n} \right|_{\tilde{\lambda}=0}. \quad (3.84)$$

Il apparaît encore que les corrections provenant des coefficients de Sonine sont négligeables par rapport à l'ordre gaussien. L'expression des premiers cumulants est, à cet ordre :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{W} \rangle_c &= tNd\xi_0^2, & \langle \mathcal{W}^2 \rangle_c &= 2tNd\xi_0^2 T_0, \\ \langle \mathcal{W}^3 \rangle_c &= 12tNd\xi_0^2 T_0^2, & \langle \mathcal{W}^4 \rangle_c &= 120tNd\xi_0^2 T_0^3. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Le modèle des molécules de Maxwell est aussi utile pour montrer que la limite des dimensions infinies est effectivement résolue par une fonction propre gaussienne. Afin de simplifier le produit de convolution que constitue l'intégrale de collision, il est utile d'introduire la transformée de Fourier de la pdf de la vitesse :

$$F(\mathbf{k}, \lambda) = \int d\mathbf{v} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}} f(\mathbf{v}, \lambda). \quad (3.86)$$

Puisque la fonction $F(\mathbf{k}, \lambda)$ est une fonction isotrope du vecteur d'onde \mathbf{k} , l'équation

3 Puissance injectée, énergie dissipée

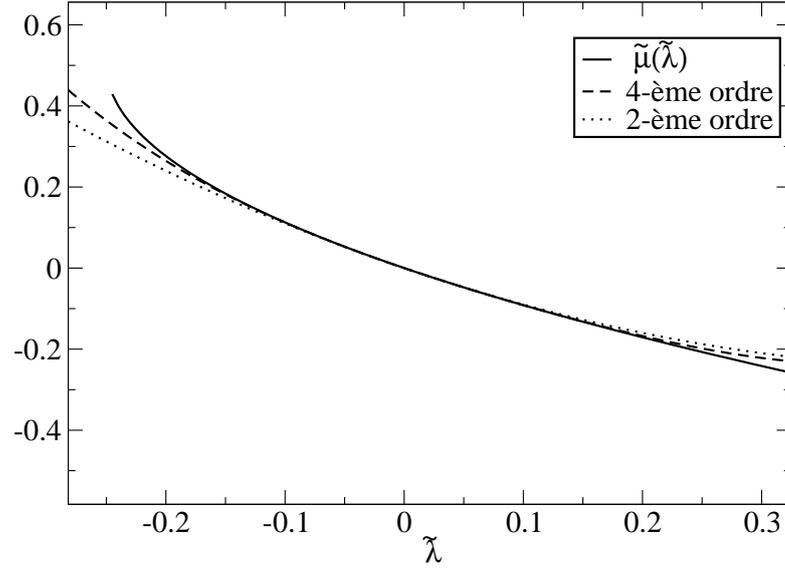


FIG. 3.9: La courbe en trait continu est la fonction $\tilde{\mu}$ pour les molécules de Maxwell, donnée par l'éq.(3.94). Les tirets représentent $\tilde{\mu}$ au quatrième ordre en λ depuis (3.82) pour $d = 2$ et $\alpha = 0.5$. Enfin, les pointillés montrent la même expression tronquée au deuxième ordre en λ .

(3.78) peut se réécrire :

$$\frac{\mu}{N}F(k) = -\xi_0^2 k^2 F(k) - \lambda \xi_0^2 dF(k) - 2\lambda \xi_0^2 k \frac{\partial F(k)}{\partial k} - \lambda^2 \xi_0^2 \frac{\partial^2 F(k)}{\partial k^2} + \omega_0 \left\langle F(\sqrt{\xi}k)F(\sqrt{\eta}k) \right\rangle_{\theta} - \omega_0 F(k), \quad (3.87)$$

où

$$\xi = 1 - \left(1 - \left(\frac{1-\alpha}{2} \right)^2 \right) \theta, \quad \eta = \left(\frac{1+\alpha}{2} \right)^2 \theta, \quad (3.88)$$

et les crochets avec un indice θ représentent une moyenne angulaire :

$$\langle f \rangle_{\theta} = \int_0^1 d\theta \frac{\theta^{-\frac{1}{2}} (1-\theta)^{\frac{d-3}{2}}}{B\left(\frac{1}{2}, \frac{d-1}{2}\right)} f(\theta), \quad (3.89)$$

où B est la fonction Bêta [1]. Si on injecte une solution gaussienne $\phi(k) = e^{-\frac{k^2 T}{2}}$ dans l'équation ci-dessus on obtient la relation suivante :

$$\frac{\mu}{N} = -\xi_0^2 k^2 - \lambda d \xi_0^2 + 2\lambda k^2 T + \lambda^2 \xi_0^2 T - \lambda^2 \xi_0^2 k^2 T^2 + \omega_0 \left\langle e^{-\frac{k^2 (1-\alpha^2) \theta T}{4}} \right\rangle_{\theta} - \omega_0. \quad (3.90)$$

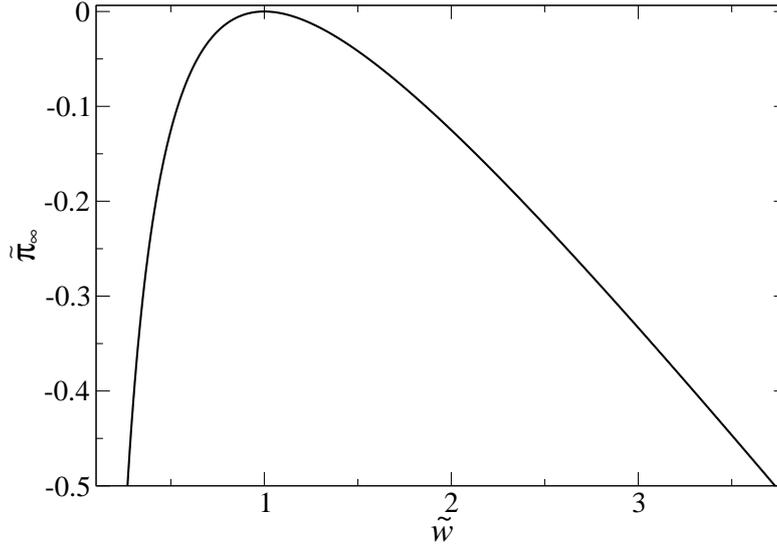


FIG. 3.10: Fonction de grandes déviations $\tilde{\pi}_\infty(\tilde{w})$ pour le modèle des molécules de Maxwell inélastiques, dans la limite $d \rightarrow \infty$.

Ensuite, on peut développer le terme exponentiel en une série entière. En utilisant le comportement asymptotique

$$\langle \theta^p \rangle_\theta = \frac{\Gamma(\frac{d}{2})\Gamma(p + \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(p + \frac{d}{2})} \sim \frac{1}{d^p}, \quad (3.91)$$

valide dans la limite $d \rightarrow \infty$, on peut voir que la relation (3.90) est satisfaite pour tout k , à condition que :

$$\frac{\mu(\lambda)}{N} = -\lambda d \xi_0^2 + \lambda^2 \xi_0^2 T(\lambda), \quad (3.92)$$

et que :

$$T(\lambda) = \frac{1 + 2\lambda T_0 - \sqrt{1 + 4\lambda T_0}}{2\lambda^2 T_0}, \quad (3.93)$$

où T_0 est la température granulaire. Finalement, la forme explicite de la fonction génératrice des cumulants μ est, en utilisant les variables d'échelle définies en (3.80) :

$$\tilde{\mu}(\tilde{\lambda}) = \frac{1 - \sqrt{1 + 4\tilde{\lambda}}}{2}. \quad (3.94)$$

Cette fonction, représentée sur la figure 3.9, a un comportement similaire à son analogue pour le gaz de sphères dures. En particulier, elle présente une coupure dans le demi-axe négatif (pour $\lambda < -1/4$), et elle décroît de manière monotone (comme $-\lambda^{1/2}$) quand $\lambda \rightarrow \infty$. De plus, remarquablement, cette fonction est, à un facteur constant près, identique à la fonction génératrice des cumulants de la puissance injectée dans les processus de Ornstein-Uhlenbeck, qui a été étudiée en détail par Farago [55, 56].

3 Puissance injectée, énergie dissipée

L'expression analytique de la fonction de grandes déviations du travail peut se déduire en calculant la transformée de Legendre de $\tilde{\mu}(\tilde{\lambda})$. Ceci donne :

$$\tilde{\pi}_\infty(\tilde{w}) = -\frac{(\tilde{w} - 1)^2}{4\tilde{w}} \Theta(\tilde{w}) . \quad (3.95)$$

Cette fonction est tracée dans la figure 3.10. On peut voir que, même dans ce modèle, il n'y a pas d'événements négatifs, dans la limite des grands temps. La queue gauche de la fonction de grandes déviations décroît de manière hyperbolique (comme $-1/4\tilde{w}$), et la queue droite décroît linéairement.

3.2.3 Simulations numériques

Afin de vérifier la validité des résultats analytiques obtenus dans les paragraphes précédents, plusieurs approches numériques sont possibles. Avant d'examiner ces approches, il faut d'abord souligner que l'observation numérique d'une fonction de grandes déviations est déjà extrêmement difficile pour des systèmes simples et petits (cf. [55] par exemple). Pour ce qui est des systèmes avec un grand nombre de particules, on peut déjà prévoir que cela relève du tour de force. Pour optimiser au maximum les performances numériques, on va utiliser un algorithme **DSMC** homogène, qui est beaucoup plus rapide que l'algorithme **MD**. Le premier but de ces simulations numériques va être d'essayer de montrer que la **FR** n'est pas vérifiée pour les gaz granulaires. Pour cela, on va procéder à des mesures directes de la distribution de $w = \mathcal{W}/t$, $p(w, t) \equiv P(wt, t)$. D'abord, on peut voir ces distributions pour trois choix différents des paramètres N et ξ_0^2 (à coefficient de restitution α fixé) dans la figure 3.11. Les valeurs des deux premiers cumulants de la distribution sont comparées aux valeurs théoriques dans la table 3.1, avec un très bon accord. Dans la même table on montre également les valeurs de quantités proportionnelles aux troisième et quatrième cumulants.

TAB. 3.1: Premiers cumulants de \mathcal{W} , asymétrie (skewness) $\sigma(t) = \langle \mathcal{W}(t)^3 \rangle_c / (\langle \mathcal{W}(t)^2 \rangle_c)^{3/2}$ et excès de kurtosis $\kappa(t) = \langle \mathcal{W}(t)^4 \rangle_c / (\langle \mathcal{W}(t)^2 \rangle_c)^2$ de la distribution $P(\mathcal{W}, t)$ pour $t = 1$ en unités du temps de vol moyen.

N	ξ_0^2	$\langle \mathcal{W}(t) \rangle / t$	$\langle \mathcal{W}(t)^2 \rangle_c / t$	$N\xi_0^2 d$	$2N\xi_0^2 dT_g$	$\sqrt{t} \sigma(t)$	$t \kappa(t)$
100	0.5	100	20835	100	21052	0.200432	0.355176
100	12.5	2500	13019125	2500	13157900	0.201739	0.361635
200	0.5	199.9	42009	200	42120	0.141589	0.175454

La comparaison avec une gaussienne de même moyenne et variance montre que $P(\mathcal{W}, t)$ n'est pas exactement gaussienne. En particulier, on peut voir des déviations assez importantes pour la queue gauche (positive) de la distribution. Ceci est mis en évidence dans la figure 3.12. Il est aussi important de remarquer que ces déviations apparaissent pour des valeurs de \mathcal{W} plus grandes que la valeur absolue du minimum de \mathcal{W} de la queue négative. De ce fait, les déviations par rapport à la gaussienne ne peuvent être exploitées pour la vérification numérique de la **FR**, montrée dans la figure 3.13.

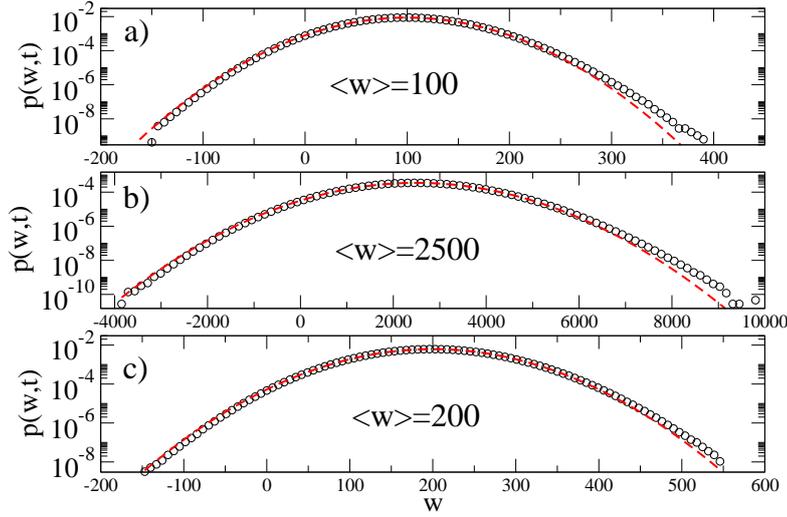


FIG. 3.11: Distribution de probabilité de la puissance injectée, $p(w,t) \equiv tP(\mathcal{W}(t) = wt, t)$, avec $t = 1$ temps de vol moyen et en $d = 2$. Dans les trois cas le coefficient de restitution $\alpha = 0.9$. Les autres paramètres sont : a) $N = 100$, $\xi_0^2 = 0.5$; b) $N=100$, $\xi_0^2 = 12.5$; c) $N = 200$, $\xi_0^2 = 0.5$. Les tirets représentent une distribution gaussienne avec même moyenne et même variance. Ces distributions ont été obtenues avec un nombre $\sim 1.5 \times 10^9$ d'échantillons indépendants de $\mathcal{W}(t)$.

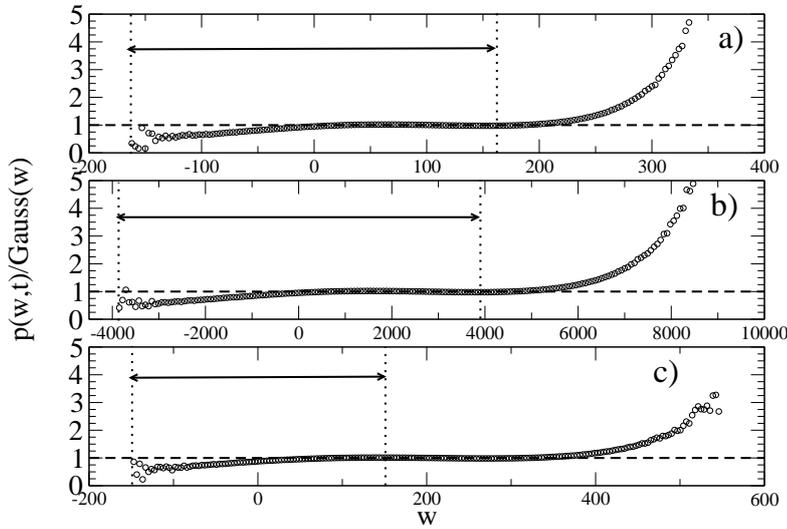


FIG. 3.12: Rapport entre $P(\mathcal{W}, t)$ et une gaussienne de même moyenne et même variance, pour les mêmes paramètres que ceux de la figure 3.11. Les lignes en pointillés verticales montrent la partie de la pdf utile pour la vérification de la FR. On peut ainsi voir que les déviations plus accentuées par rapport à la gaussienne ne sont pas prises en compte lors de la vérification de la FR.

3 Puissance injectée, énergie dissipée

TAB. 3.2: Facteur de proportionnalité de la “FR”, β_{eff} , comparé à la température granulaire inverse $\beta = 1/T_g$.

N	ξ_0^2	β_{eff}	$1/T_g$
100	0.5	0.01	0.01
100	12.5	0.0004	0.00038
200	0.5	0.01	0.0095

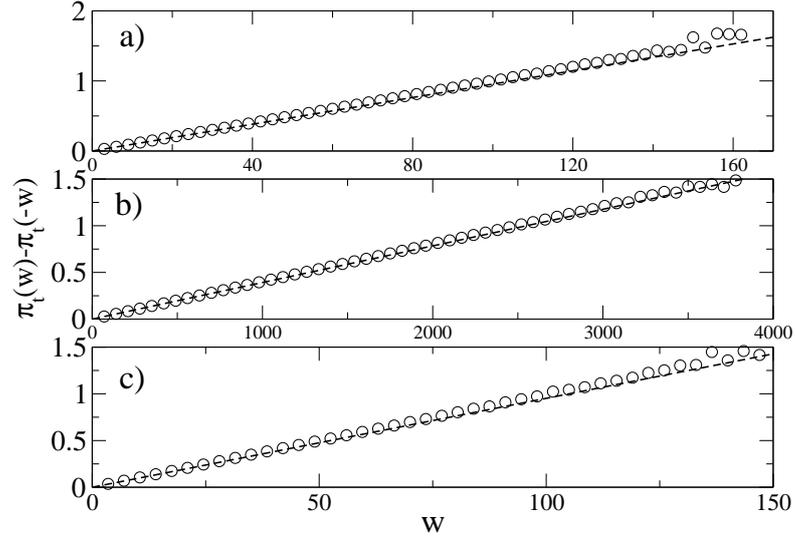


FIG. 3.13: Test de la FR à temps fini $\pi_t(w) - \pi_t(-w) = \beta_{eff}w$, pour les mêmes choix de paramètres que dans la figure 3.11. Les valeurs de la pente β_{eff} , obtenues à partir d’une régression linéaire des points issus des simulations, sont reportées dans la table 3.2.

Dans la figure 3.13, la relation FR à temps fini $\pi_t(w) - \pi_t(-w) = \beta_{eff}w$ est testée pour les mêmes choix de paramètres que plus haut. À ce niveau de résolution numérique, et pour ce choix de temps ($t = 1$ temps de vol), la relation semble bien satisfaite. De plus, comme montré dans la table 3.2, la pente de la droite obtenue correspond à la température granulaire inverse $\beta_{eff} = 1/T_g$. Ceci est cohérent avec le résultat obtenu dans l’équation (3.58), se limitant à l’approximation gaussienne pour $P(\mathcal{W}, t)$. Dans la figure 3.14 on montre le même tracé, pour des différentes valeurs du temps d’intégration t (jusqu’à $t = 3$ temps de vol). Aucune déviation remarquable n’est observée lorsque t est augmenté. De plus, cette figure illustre bien les difficultés que l’on rencontre lorsqu’on souhaite vérifier la FR à des temps suffisamment grands : plus t augmente, plus les événements négatifs sont rares, d’où l’impossibilité d’observer des événements négatifs pour des temps trop importants.

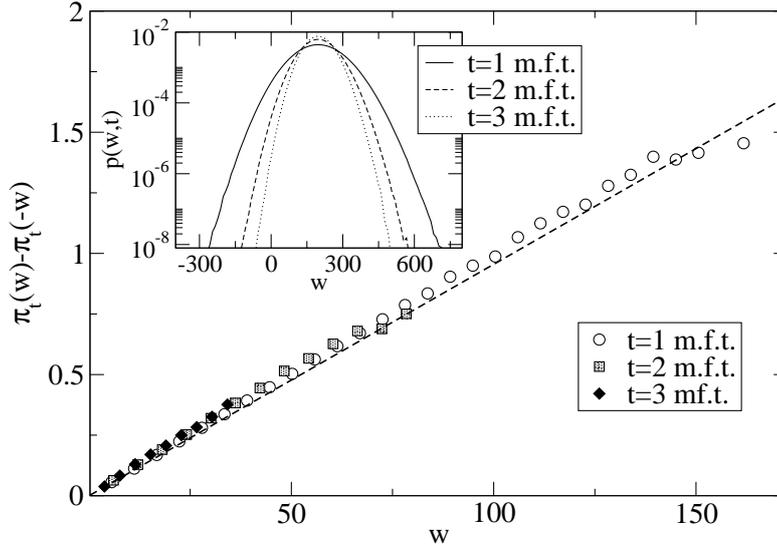


FIG. 3.14: Test de la FR $\pi_t(w) - \pi_t(-w) = \beta_{eff}w$, pour un système avec $N = 100$ particules et $\xi_0^2 = 0.5$, pour différentes valeurs du temps t . Dans ce cas $\langle w \rangle = 100$, ce qui donne une idée des valeurs typiques de w . Les tirets représentent une droite de pente $1/T_g$. Dans l'encadré on montre les pdf correspondantes.

La conclusion principale est que, finalement, il n'y a pas de déviations appréciables, par rapport à la troncature à l'ordre λ^2 de l'expression de $\mu(\lambda)$. Afin de voir de telles déviations, il faudrait une statistique meilleure de plusieurs ordres de grandeur, ce qui est difficilement envisageable avec les capacités numériques disponibles.

Un moyen plus simple, qui permet de tester les résultats obtenus analytiquement, consiste à mesurer directement les premiers cumulants de la distribution de \mathcal{W} . Les deux premiers cumulants sont toujours en très bon accord avec les prédictions théoriques, conformément au théorème de la limite centrale. Le premier cumulant non trivial est donc le troisième. On rappelle que pour la distribution gaussienne tous les cumulants d'ordre supérieur à deux sont nuls. Or ceci n'est pas le cas dans les résultats (3.69). On a donc mesuré, et tracé dans la figure 3.15, la valeur du troisième cumulant de $\widetilde{\mathcal{W}}$ en fonction du temps. On voit que la valeur asymptotique semble converger vers un nombre qui est en accord avec la prédiction de l'éq.(3.69). Cette figure nous renseigne aussi sur l'échelle de temps de convergence vers un régime où les grandes déviations semblent s'appliquer. On voit bien que c'est seulement après un temps de ~ 50 temps de vol que la valeur asymptotique est atteinte⁴. Par contre, on voit bien qu'aux temps courts, le troisième cumulant est presque nul, ce qui est cohérent avec l'observation d'une pdf de $\widetilde{\mathcal{W}}$ presque gaussienne. Afin de rendre évident le manque de statistique dont on dispose aux temps grands, on a tracé dans la figure 3.16 la fonction de grandes déviations $\pi_t(w)$,

⁴On rappelle que cette valeur n'est pas triviale, et en tout cas très différente de la valeur nulle, que l'on aurait dans l'approximation gaussienne pour \mathcal{W} .

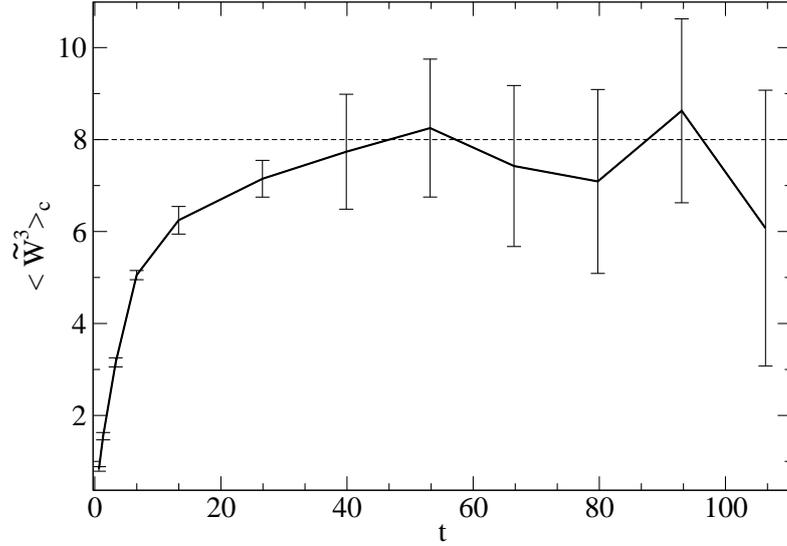


FIG. 3.15: Troisième cumulant de \mathcal{W} adimensionné, $\langle \tilde{\mathcal{W}} \rangle_c = \langle \mathcal{W}^3 \rangle / \langle \mathcal{W} \rangle T_g^2$ pour différents temps d'intégration. Le temps est exprimé en unités de temps de vol moyen. On remarque que le temps au bout duquel la valeur asymptotique est atteinte est considérablement plus grand que le temps caractéristique du système, qui est ~ 1 temps de vol. La ligne horizontale en tirets est la prédiction analytique de (3.69) : $\langle \tilde{\mathcal{W}}^3 \rangle_c = 8$.

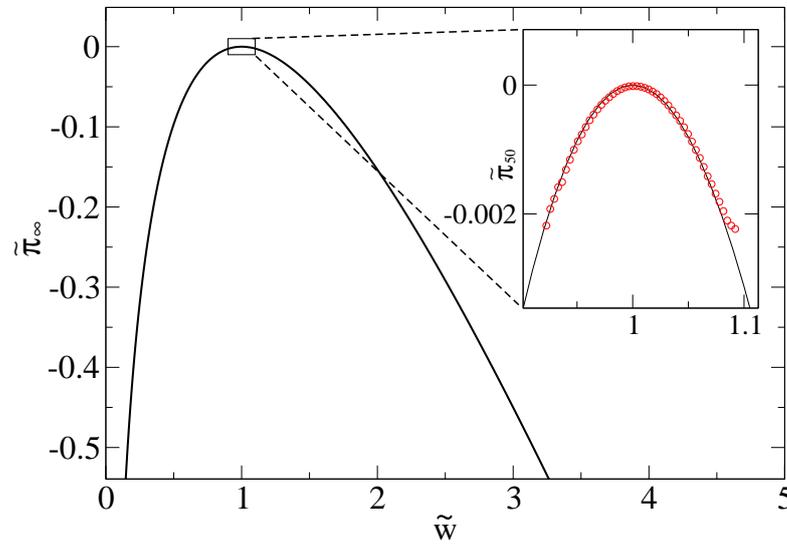


FIG. 3.16: Mesure numérique de $\pi_t(w)$ pour un temps de 50 collisions par particule (cercles). La ligne en trait continu montre l'expression de $\pi_\infty(w)$, obtenue à partir de (3.71), déjà montré dans la figure 3.7.

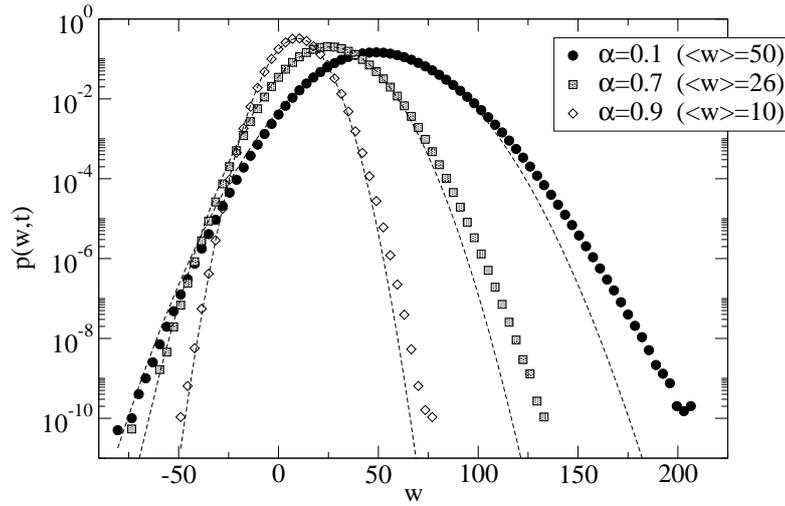


FIG. 3.17: $p(w, t) \equiv tP(wt, t)$ pour différentes valeurs de α (à température constante T_g) pour des molécules de Maxwell inélastiques (en $d = 2$). Le temps d'intégration de \mathcal{W} est ici $t = 1$ temps de vol. Les tirets représentent une distribution gaussienne avec même moyenne et variance. Ces distributions ont été obtenues à partir de $\sim 4 \times 10^{10}$ valeurs indépendantes de \mathcal{W} .

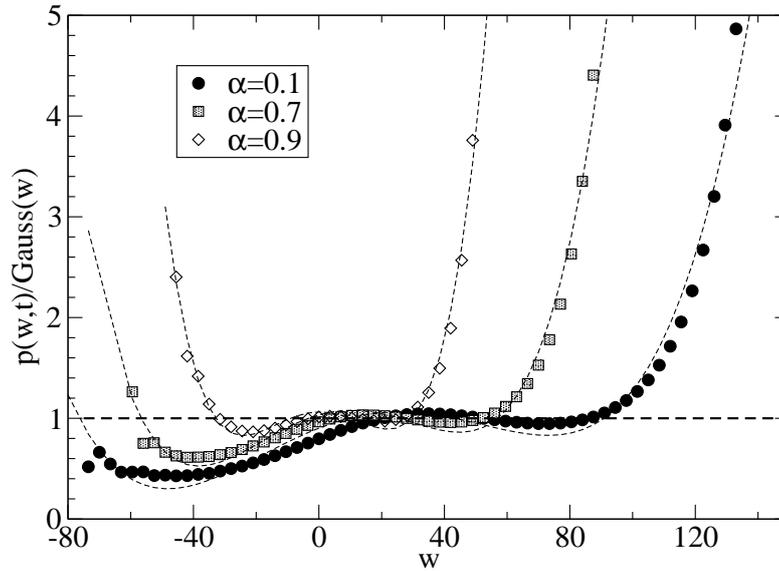


FIG. 3.18: $p(w, t)$ (pour $t = 1$ temps de vol) divisée par une gaussienne de même moyenne et variance, pour différentes valeurs de α pour des molécules de Maxwell. Les tirets montrent une régression avec un polynôme de degré 4.

3 Puissance injectée, énergie dissipée

mesurée à partir de la probabilité de \mathcal{W} pour un temps $t = 50$. Dans ce cas, le régime où les grandes déviations sont bien représentées est atteint. On voit qu'avec une telle statistique on n'est pas capable de mesurer une fonction de grandes déviations sur une plage de valeurs trop éloignée de la moyenne.

Pour les molécules de Maxwell, la phénoménologie et les problèmes rencontrés lors de l'étude des sphères dures, sont aussi présents. Cependant, l'algorithme [DSMC](#) est par construction optimisé pour simuler des molécules de Maxwell. De ce fait, une statistique environ 10 fois meilleure est systématiquement obtenue. Dans la figure [3.17](#) on peut voir des histogrammes de $p(w, t)$, pour quelques valeurs du coefficient de restitution α . L'amplitude du bruit ξ_0^2 a été choisie de sorte que la température granulaire $T_g \simeq 1$. Dans la figure [3.18](#) on montre les déviations par rapport à la gaussienne de $P(\mathcal{W}, t)$. Ces déviations sont importantes, mais plus prononcées dans la queue droite de la distribution, de sorte qu'elles ne sont pas utilisables pour tester la [FR](#). On montre également une régression avec un polynôme d'ordre 4 (tout comme une correction de Sonine tronquée à S_2), qui reproduit bien les résultats numériques. De plus, on observe que l'ajustement de ces régressions s'améliore à mesure que α se rapproche de l'unité, ce qui est réminiscent de la phénoménologie des corrections de Sonine pour la [pdf](#) de la vitesse. Enfin, dans la figure [3.19](#), on montre un test de la [FR](#). Cette fois-ci, la relation semble être violée systématiquement. Cette violation se manifeste de deux manières différentes : premièrement, $\pi_t(w) - \pi_t(-w)$ n'est pas une droite ; et deuxièmement, une régression linéaire sur cette fonction donne une pente qui est systématiquement plus grande que la température granulaire inverse. Ces deux caractéristiques sont d'autant plus prononcées que le coefficient de restitution α est petit, ce qui indique que la cause de cette violation de la [FR](#) est bien l'inélasticité. Il faut préciser que pour obtenir ces résultats, on a dû accumuler une statistique de 4×10^{10} valeurs indépendantes de $\mathcal{W}(t)$, sans quoi on n'aurait pas pu voir de telles déviations, et la [FR](#) aurait été vérifiée, en apparence. Il est aussi remarquable qu'on puisse voir de telles violations à temps fini, alors qu'à temps infini, l'absence de fluctuations négatives, empêche une telle observation.

3.2.4 Puissance injectée pour le thermostat gaussien

Nous allons maintenant nous intéresser à la puissance injectée dans un gaz granulaire chauffé par une force déterministe, de type $\mathbf{F} = \mathbf{a}(\mathbf{v})$. On va ensuite montrer des résultats analytiques pour le cas particulier du thermostat gaussien, où $\mathbf{F} = \gamma \mathbf{v}$. La puissance injectée est toujours égale au travail effectué par la force chauffante, et s'écrit :

$$\mathcal{W} = \int_0^t dt \sum_{i=1}^N \mathbf{F}(\mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{v}_i . \quad (3.96)$$

En introduisant la probabilité jointe $\rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W}, t)$ on aboutit à l'équation d'évolution suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathcal{W}} = \sum (\mathcal{F}_i^{\mathcal{W}} + \bar{T}_{ij}) \rho_{\mathcal{W}} \quad (3.97)$$

où \bar{T}_{ij} est l'opérateur de collision binaire. Celui-ci reste inchangé, car les collisions n'ont pas d'effet direct dans l'expression de \mathcal{W} . L'opérateur $\mathcal{F}_i^{\mathcal{W}}$ va en revanche agir sur \mathcal{W} .

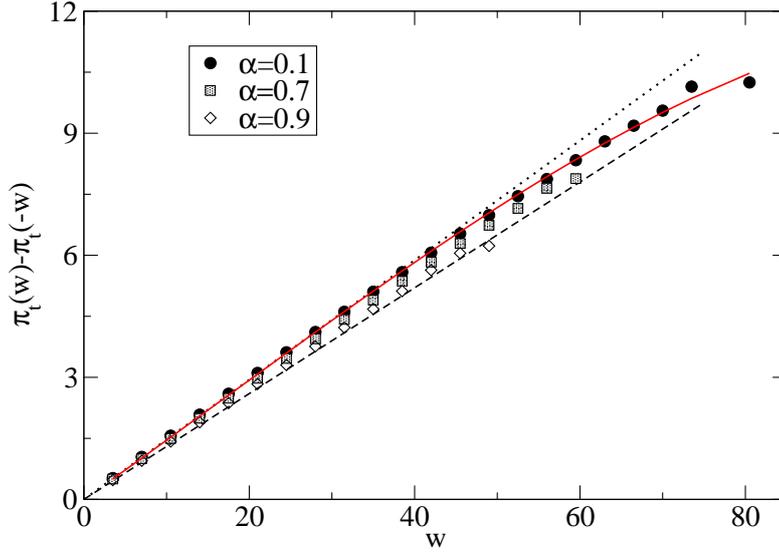


FIG. 3.19: Test à temps fini de la FR, $\pi_t(w) - \pi_t(-w)$ en fonction de w , pour $t = 1$ temps de vol. Les résultats sont issus d'une simulation DSMC de $N = 50$ molécules de Maxwell inélastiques et plusieurs valeurs de α (à T_g fixé). Les tirets montrent une droite de pente $\beta = 1/T_g$, et les pointillés une régression linéaire de la courbe avec $\alpha = 0.1$ près de l'origine. La courbe en trait continu est une régression avec un polynôme cubique ($0.28w + 5.6 \cdot 10^{-4}w^2 - 1.1 \cdot 10^{-5}w^3$).

Son expression est :

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{W}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} \cdot \mathbf{F}_i - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{F}_i \frac{\partial}{\partial \mathcal{W}}. \quad (3.98)$$

En introduisant la transformée de Laplace $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ l'équation d'évolution (3.97) se réécrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_{\mathcal{W}} = \hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}} \hat{\rho}_{\mathcal{W}} = \sum (\hat{\mathcal{F}}_i^{\mathcal{W}} + \bar{T}_{ij}) \hat{\rho}_{\mathcal{W}} \quad (3.99)$$

avec :

$$\hat{\mathcal{F}}_i^{\mathcal{W}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} \cdot \mathbf{F}_i - \lambda \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{F}_i. \quad (3.100)$$

Dans l'expression ci-dessus, le premier terme du membre de droite est le terme habituel, qui décrit l'effet de la force sur chaque particule. Le deuxième terme, lui, décrit les changements de $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ dus aux changements de \mathcal{W} dans le temps. Encore une fois on peut remarquer que l'équation d'évolution (3.99) peut être interprétée comme décrivant l'évolution d'un gaz granulaire où toutes les particules sont soumises à une force \mathbf{F} , et où chaque particule peut être annihilée (ou clonée) avec un taux (dépendant de sa vitesse) $\lambda \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{F}_i$. Ceci confirme que la fonction $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ peut être considérée comme une distribution à N points pour ce système qui a une dynamique modifiée. Il en va évidemment de

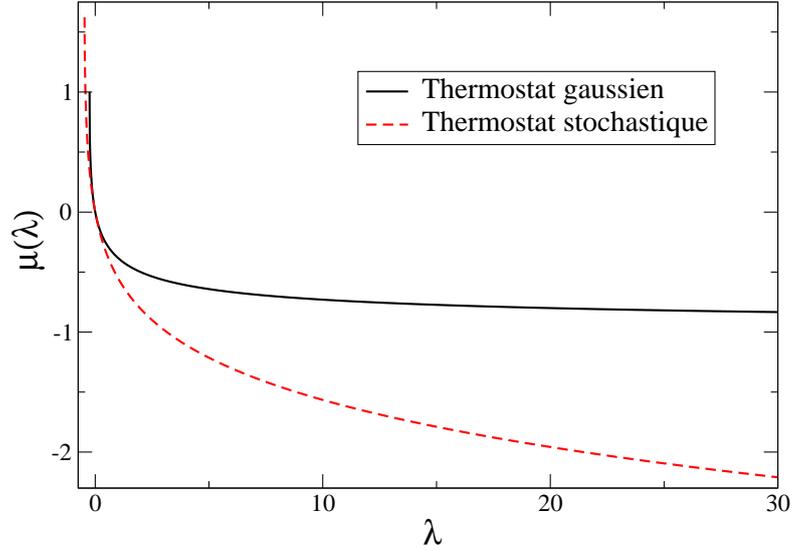


FIG. 3.20: Fonction génératrice des cumulants $\mu(\lambda)$ pour le thermostat gaussien (trait continu) et pour le thermostat stochastique (tirets).

même pour la fonction propre $\tilde{\rho}_{\mathcal{W}}$ correspondante à la plus grande valeur propre $\mu(\lambda)$ de $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}}$. On peut ainsi établir une hiérarchie de type BBGKY et, en faisant l'hypothèse de chaos moléculaire, déjà exprimée dans l'éq.(3.34), on peut aboutir à une équation de type Boltzmann. Dans le cas particulier du thermostat gaussien, cette équation s'écrit :

$$\mu(\lambda)\tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) = -\gamma\partial_{\mathbf{v}_1} \cdot (\mathbf{v}_1\tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda)) - \lambda\gamma v_1^2\tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) + J[\tilde{f}|\tilde{f}], \quad (3.101)$$

où $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ est la distribution réduite à un point de la fonction propre $\tilde{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda)$. Une bonne estimation de la valeur propre $\mu(\lambda)$ peut être obtenue en injectant une solution $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ gaussienne, avec une température dépendante de λ . En effectuant les changements d'échelle suivants :

$$\tilde{\mu} = \mu/(N\gamma), \quad \tilde{\lambda} = \lambda T_g d/2, \quad (3.102)$$

on obtient une expression pour $\tilde{\mu}(\tilde{\lambda})$ qui s'écrit :

$$\tilde{\mu}(\tilde{\lambda}) = -\frac{1 + 2\tilde{\lambda} - \sqrt{1 + 4\tilde{\lambda}}}{2\tilde{\lambda}}. \quad (3.103)$$

Le comportement qualitatif de cette fonction est finalement assez proche du comportement de $\mu(\lambda)$ dans le cas du thermostat stochastique (ces deux fonctions sont comparées dans la figure 3.20). Pour $\tilde{\lambda} < \lambda_c = -1/4$ il y a une coupure dans l'axe réel de $\tilde{\lambda}$, et pour $\tilde{\lambda} \rightarrow \infty$ la fonction décroît vers une valeur asymptotique constante. Ces comportements sont décrits, plus en détail, par :

$$\tilde{\mu}(\tilde{\lambda}) \stackrel{\tilde{\lambda} \rightarrow -1/4}{\sim} 1 - 2\sqrt{1 + 4\tilde{\lambda}} + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}), \quad \tilde{\mu}(\tilde{\lambda}) \stackrel{\tilde{\lambda} \rightarrow \infty}{\sim} -1 + \frac{1}{\sqrt{\tilde{\lambda}}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\tilde{\lambda}}\right). \quad (3.104)$$

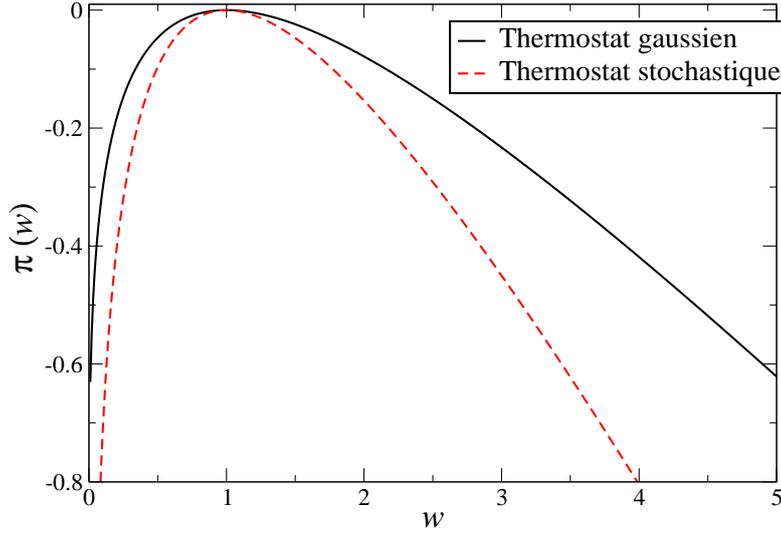


FIG. 3.21: Fonction de grandes déviations $\pi(w)$ pour le thermostat gaussien (trait continu) et pour le thermostat stochastique (tirets).

Ces comportements permettent de trouver l'allure de la fonction de grandes déviations $\pi(w)$ dans les queues :

$$\tilde{\pi}(\tilde{w}) \underset{\tilde{w} \rightarrow 0^+}{\sim} -1 + \frac{3}{2^{2/3}} \tilde{w}^{1/3} + \mathcal{O}(\tilde{w}^{2/3}), \quad \tilde{\pi}(\tilde{w}) \underset{\tilde{w} \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{\tilde{w}}{4} + \mathcal{O}(\sqrt{\tilde{w}}). \quad (3.105)$$

On voit que la queue gauche de la distribution de \mathcal{W} est exponentielle, comme dans le cas du thermostat stochastique. Cette propriété est due à la coupure de $\mu(\lambda)$ dans le demi-axe négatif. Pour les faibles valeurs de w , $\pi(w)$ tend vers une valeur finie, ce qui implique qu'il y a une probabilité finie d'avoir une valeur nulle (à $d\mathcal{W}$ près) de \mathcal{W} . Ce comportement est qualitativement différent du comportement de la fonction de grandes déviations pour le thermostat stochastique. Il est déterminé par le comportement de $\mu(\lambda)$ pour λ grand, qui semble être plus sensible aux détails microscopiques du modèle. Une comparaison de la fonction de grandes déviations pour le thermostat stochastique et le thermostat gaussien est illustrée dans la figure 3.21.

Ce résultat montre l'intérêt que peut susciter l'étude de quantités globales. On voit en effet que la distribution de la puissance injectée pour ces différents modèles permet de souligner certains aspects communs à tous ces modèles, comme l'absence d'événements négatifs, ou la décroissance exponentielle de la queue positive. De même, les aspects liés aux détails microscopiques sont aussi bien représentés, en particulier par le comportement de la pdf pour des faibles valeurs de la puissance injectée, ou par le coefficient qui intervient dans la décroissance exponentielle de la queue positive. Ceci peut donc se révéler utile, dans la recherche de signatures d'une dynamique microscopique particulière lors de l'étude d'une quantité globale.

3.3 Énergie dissipée

Nous allons maintenant étudier le lien entre l'énergie injectée par la force extérieure, afin de maintenir le système dans un état stationnaire hors d'équilibre, et l'énergie dissipée par les collisions inélastiques.

3.3.1 Grandes déviations pour l'énergie dissipée

Le formalisme développé dans 3.2.2, qui définit un opérateur d'évolution pour la puissance injectée, peut s'appliquer d'une manière générale, à toute quantité intégrée dans le temps. On va s'intéresser ici à l'énergie dissipée par les collisions inélastiques. Lors d'une collision, l'énergie perdue par le couple de particules qui participe à la collision est $\Delta E = \frac{1-\alpha^2}{4}(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2$. L'énergie dissipée en un temps t peut donc s'écrire :

$$\mathcal{D}(t) = \sum_{i < j} \sum_k \int_0^t dt' \frac{(\mathbf{v}_{ij}(t^k) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2}{4} (1 - \alpha^2) \delta(t' - t_{ij}^k), \quad (3.106)$$

où t_{ij}^k est l'instant de la k -ème collision entre les particules i et j . On introduit maintenant la probabilité jointe $\rho_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{D}, t)$ d'être dans une configuration $\mathbf{\Gamma}$ à l'instant t , en ayant dissipé une énergie \mathcal{D} depuis l'instant 0. L'équation d'évolution pour \mathcal{D} s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{D}, t) = \sum_i \mathcal{F}_i^{th} \rho_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{D}, t) + \sum_{i < j} \tilde{T}_{ij} \rho_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{D}, t) = \mathcal{L}^{diss} \rho_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{D}, t), \quad (3.107)$$

avec

$$\tilde{T}_{ij} = \sigma^{d-1} \int_{\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} > 0} d\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \left(\frac{1}{\alpha^2} \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \tilde{b}_{ij}^{**} - \delta(\mathbf{r}_{ij} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \right). \quad (3.108)$$

L'opérateur \tilde{b}^{**} s'écrit :

$$\begin{aligned} \tilde{b}_{ij}^{**} g(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_i, \dots, \mathbf{v}_j, \dots, \mathbf{v}_N, h(\mathbf{\Gamma})) = \\ g\left(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_i^{**}, \dots, \mathbf{v}_j^{**}, \dots, \mathbf{v}_N, h(\mathbf{\Gamma}) - \frac{(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2}{4} \left(\frac{1}{\alpha^2} - 1\right)\right). \end{aligned} \quad (3.109)$$

On voit que cet opérateur \tilde{b}_{ij}^{**} , qui est l'analogue de l'opérateur b^{**} décrit dans l'éq.(2.6), non seulement remplace les vitesses i et j par leurs valeurs précollisionnelles correspondantes, mais remplace également \mathcal{D} par sa valeur avant la collision. Enfin, l'opérateur \mathcal{F}^{th} décrit simplement l'effet d'un thermostat homogène sur l'ensemble des particules. Son expression est :

$$\mathcal{F}_i^{th, st} = \xi_0^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_i^2}, \quad \mathcal{F}_i^{th, det} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} \cdot \mathbf{F}_i, \quad (3.110)$$

respectivement pour une force stochastique ou déterministe.

En introduisant la transformée de Laplace :

$$\hat{\rho}_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \kappa, t) = \int d\mathcal{D} e^{-\kappa\mathcal{D}} \rho_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{D}, t), \quad (3.111)$$

l'équation d'évolution (3.107) s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \kappa, t) = \sum_i^N \mathcal{F}_i^{th} \hat{\rho}_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \kappa, t) + \sum_{i<j}^N \hat{T}_{ij} \hat{\rho}_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \kappa, t) = \hat{\mathcal{L}}^{diss} \hat{\rho}_{\mathcal{D}}(\mathbf{\Gamma}, \kappa, t). \quad (3.112)$$

Dans ce cas l'opérateur \hat{T} , associé à l'opérateur de collision, s'écrit :

$$\hat{T}_{ij} = \sigma^{d-1} \int_{\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma} > 0} d\hat{\sigma}(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma}) \left(\frac{1}{\alpha^2} \delta(\mathbf{r}_{ij} - \hat{\sigma}) e^{-\kappa \frac{(\mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\sigma})^2}{4}} \left(\frac{1}{\alpha^2} - 1 \right) b_{ij}^{**} - \delta(\mathbf{r}_{ij} + \hat{\sigma}) \right). \quad (3.113)$$

3.3.2 Lien avec l'énergie injectée

Le lien entre l'énergie injectée et l'énergie dissipée peut s'exprimer simplement par l'équation de bilan d'énergie du système :

$$\Delta E(t) = E(t) - E(0) = \mathcal{W}(t) - \mathcal{D}(t). \quad (3.114)$$

Afin de clarifier les notations, on rappelle que l'on sait écrire une équation d'évolution pour des probabilités jointes $\rho_{\mathcal{D}}$ et $\rho_{\mathcal{W}}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathcal{D}} = \mathcal{L}_{\mathcal{D}} \rho_{\mathcal{D}} = \sum (\mathcal{F}_i + \tilde{T}_{ij}) \rho_{\mathcal{D}}, \quad (3.115)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\mathcal{W}} = \mathcal{L}_{\mathcal{W}} \rho_{\mathcal{W}} = \sum (\mathcal{F}_i^{\mathcal{W}} + \bar{T}_{ij}) \rho_{\mathcal{W}}. \quad (3.116)$$

Afin de noter le lien que la relation (3.114) impose aux deux opérateurs $\mathcal{L}_{\mathcal{D}}$ et $\mathcal{L}_{\mathcal{W}}$, il est utile de remarquer que, pour une fonction f quelconque :

$$b_{ij}^{**} f(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W} - \Delta E) = \tilde{b}_{ij}^{**} f(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W} - \Delta E), \quad (3.117)$$

ce qui implique que

$$\bar{T}_{ij} f(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W} - \Delta E) = \tilde{T}_{ij} f(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W} - \Delta E). \quad (3.118)$$

De plus, on a :

$$\mathcal{F}^{\mathcal{W}} f(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W} - \Delta E) = \mathcal{F} f(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W} - \Delta E). \quad (3.119)$$

Cette dernière relation est vraie pour les thermostats stochastiques et déterministes. À partir de ces relations on vérifie aisément que :

$$\mathcal{L}_{\mathcal{W}} \rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W} - \Delta E, t) = \sum (\mathcal{F} + \tilde{T}_{ij}) \rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{W} - \Delta E, t) = \mathcal{L}_{\mathcal{D}} \rho_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \mathcal{D}, t). \quad (3.120)$$

3 Puissance injectée, énergie dissipée

En introduisant les transformées de Laplace $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ et $\hat{\rho}_{\mathcal{D}}$, la relation (3.114) se traduit, en termes des opérateurs d'évolution de $\hat{\rho}_{\mathcal{W}}$ et $\hat{\rho}_{\mathcal{D}}$ par :

$$\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}}e^{\lambda\Delta E}\hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t) = e^{\lambda\Delta E}\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{D}}\hat{\rho}_{\mathcal{W}}(\mathbf{\Gamma}, \lambda, t) . \quad (3.121)$$

Cette dernière équation donne l'identité suivante :

$$\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}} = e^{\lambda\Delta E}\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{D}}e^{-\lambda\Delta E} , \quad (3.122)$$

qui prouve que $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{D}}$ et $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}}$ ont *exactement le même spectre*. De plus, les fonctions propres associées à une valeur propre donnée de $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}}$ seront égales aux fonctions propres (associées à la même valeur propre) de $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}}$ multipliées par un facteur $e^{\lambda\Delta E}$. En d'autres termes, si $\psi_n(\mathbf{\Gamma}, \lambda)$ est une fonction propre de $\mathcal{L}_{\mathcal{W}}$ avec une valeur propre $\mu_n(\lambda)$:

$$\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}}\psi_n(\mathbf{\Gamma}, \lambda) = \mu_n(\lambda)\psi_n(\mathbf{\Gamma}, \lambda) , \quad (3.123)$$

alors la fonction $e^{\lambda\Delta E}\psi_n$ sera fonction propre de $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{D}}$ avec la même valeur propre :

$$\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{D}}e^{\lambda\Delta E}\psi_n(\mathbf{\Gamma}, \lambda) = \mu_n(\lambda)e^{\lambda\Delta E}\psi_n(\mathbf{\Gamma}, \lambda) . \quad (3.124)$$

Puisque nous nous intéressons plus précisément à la plus grande valeur propre des opérateurs $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}}$ et $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{D}}$ il est évident, d'après ce qui précède, qu'elles seront égales. De cette égalité il devrait suivre systématiquement une égalité des fonctions de grande déviations de \mathcal{W} et de \mathcal{D} . Cette égalité semble également suggérée par l'équation de bilan (3.114). On voit dans cette équation, que le membre de gauche (i.e. $\Delta E(t)$), n'est en fait qu'un terme de bord. Les deux quantités \mathcal{W} et \mathcal{D} sont des quantités extensives en temps. Toutes les deux sont une intégrale temporelle d'une quantité stationnaire, et leurs cumulants sont tous des fonctions linéaires en temps (du moins quand $t \rightarrow \infty$). Par contre, le terme $\Delta E(t)$ est clairement stationnaire en temps (on se place toujours dans un état stationnaire). Si par exemple on considère la même équation (3.114) divisée par le temps :

$$\frac{\Delta E}{t} = \frac{\mathcal{W}}{t} - \frac{\mathcal{D}}{t} = w - \delta , \quad (3.125)$$

on voit clairement que, dans la limite $t \rightarrow \infty$, le membre de gauche va devenir de plus en plus petit, alors que les deux termes du membre de droite vont rester stationnaires. Ceci implique qu'à temps infini on devrait avoir :

$$w \simeq \delta , \quad (3.126)$$

ce qui suggère encore que les fonction de grandes déviations de \mathcal{W} et de \mathcal{D} sont en fait les mêmes. Or, ceci n'est pas toujours le cas, car $\Delta E/t$, même si très petit (en moyenne), reste une quantité fluctuante, et peut donc *a priori* avoir des grandes fluctuations, et briser l'égalité (3.126). Cette brisure se manifeste typiquement par l'apparition de singularités [55, 113, 18, 115, 99, 116, 98], et va être étudiée plus en détail dans le chapitre 4. Ici on va juste donner quelques arguments intuitifs qui permettent de prévoir quand ces singularités apparaissent. Pour cela, il faut se pencher sur la statistique du terme de bord

ΔE , et de sa probabilité $\mathcal{P}(\Delta E)$. Si les quantités \mathcal{W} ou \mathcal{D} sont échantillonnées dans l'état stationnaire, l'invariance par translation dans le temps impose que $E(0)$ et $E(t)$ (pour t suffisamment grand) sont distribuées de la même manière. Il s'ensuit que $\mathcal{P}(\Delta E)$ est une fonction symétrique par rapport à l'origine. Puisque l'on est en train de s'intéresser à des situations dans lesquelles la quantité $\Delta E/t$ pourrait avoir une fluctuation d'ordre t , lorsque t est très grand, il est important de se focaliser sur les queues de la distribution \mathcal{P} , qui caractérisent les événements rares. On va supposer par la suite que les queues de \mathcal{P} ont un comportement en exponentielle étirée, avec un exposant θ :

$$\mathcal{P}(\Delta E) \stackrel{|\Delta E| \rightarrow \infty}{\sim} e^{-|\Delta E|^\theta} . \quad (3.127)$$

Même si ΔE n'est pas une quantité extensive en temps, on peut toujours écrire le changement d'échelle que l'on utilise pour déterminer une fonction de grandes déviations. Ceci revient finalement à s'intéresser à la probabilité d'avoir une fluctuation de ΔE d'ordre t . On peut donc définir une "fonction de grandes déviations" pour l'énergie, qui s'écrit, en fonction de l'exposant θ :

$$\zeta(\epsilon) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \mathcal{P}(\Delta E = \epsilon t) = \begin{cases} 0 , & \text{si } \theta < 1 \\ -|\epsilon| , & \text{si } \theta = 1 \\ -\infty , & \text{si } \theta > 1 . \end{cases} \quad (3.128)$$

On voit que la valeur de l'exposant $\theta = 1$ joue un rôle limite dans le comportement de la fonction ζ . Pour $\theta > 1$, une fluctuation d'ordre t est strictement impossible dans la limite $t \rightarrow \infty$, et dans ce cas \mathcal{W} et \mathcal{D} devraient avoir la même fonction de grandes déviations. En revanche on voit que pour $\theta = 1$, il n'en est pas ainsi : la probabilité d'avoir une fluctuation d'ordre t décroît exponentiellement avec t , mais n'est pas strictement nulle. Pour $\theta < 1$ la décroissance est lente, et la fonction ζ ne permet pas d'avoir des informations supplémentaires. Il faut aussi remarquer que si on définit la transformée de Laplace $\hat{\mathcal{P}}$ de \mathcal{P} , le changement d'échelle qui donne habituellement la fonction génératrice des cumulants, est toujours nul, indépendamment de θ :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \hat{\mathcal{P}} = 0 \quad \forall \theta . \quad (3.129)$$

Ceci explique pourquoi le terme de bord ΔE ne joue aucun rôle dans l'expression de la plus grande valeur propre $\mu(\lambda)$ de $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{W}}$ et $\hat{\mathcal{L}}_{\mathcal{D}}$. On pressent déjà que le problème va venir justement du processus qui permet de passer de la transformée de Laplace à l'espace direct. Dans 3.2.2 on a vu que le lien entre la fonction de grandes déviations π et la fonction génératrice des cumulants μ est une transformée de Legendre. Ce résultat s'obtient simplement en utilisant la méthode du col pour inverser la transformation de Laplace. Le contour d'intégration est alors choisi par défaut le long d'une droite (de Bromwich), et on suppose que le plan complexe ne présente pas de singularités, ni de coupures⁵. Or

⁵Plus généralement, la transformation de Legendre reste valable tant que les coupures/singularités sont bien présentes dans l'expression de $\mu(\lambda)$.

3 Puissance injectée, énergie dissipée

la transformée de Laplace d'une distribution avec des queues exponentielles, présente systématiquement des singularités, voire des coupures : l'intégrale

$$\int d\Delta E e^{z\Delta E} \mathcal{P}(\Delta E) \quad (3.130)$$

n'est pas définie pour tout z , lorsque \mathcal{P} décroît exponentiellement. Ceci donne une indication claire sur le fait que, lorsque le terme de bord est distribué avec des queues à décroissance exponentielle (ou plus lente encore), il est possible qu'il y ait des singularités, et que les fonctions de grandes déviations de \mathcal{W} et \mathcal{D} ne soient pas les mêmes.

D'après l'étude des fluctuations d'énergie de la section 2.3, on voit que pour les gaz granulaires la distribution de l'énergie se comporte comme une distribution gamma, et a donc des queues exponentielles. Cependant, la distribution gamma, lorsque le nombre de degrés de liberté tend vers l'infini, se comporte comme une gaussienne (comme prévu par le théorème de la limite centrale). Les queues de la distribution deviennent donc exponentielles qu'à partir d'une échelle typique d'énergie qui est d'ordre N . On peut donc penser que, à la limite thermodynamique, le problème des singularités ne se pose pas. Cependant, en toute rigueur, la limite thermodynamique doit se faire en considérant les grandes déviations en N également. Il faudrait donc considérer par exemple que :

$$\zeta(\epsilon) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{Nt} \log \mathcal{P}(\Delta E = \epsilon Nt) , \quad (3.131)$$

ce qui fera encore réapparaître la décroissance exponentielle de la pdf de l'énergie. Ceci dit, il reste vrai que, si on se place à une échelle de temps fixée, en augmentant le nombre de particules du système, les queues exponentielles de la pdf de ΔE vont se voir de moins en moins.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre on s'est intéressé à la statistique de la puissance injectée dans un gaz granulaire. Cette quantité représente le travail fourni par le thermostat pour maintenir le système dans un état stationnaire pendant un temps t .

Dans un premier temps, on a considéré les résultats d'une expérience menée par Feitosa et Menon [58], où la distribution de puissance injectée a été mesurée et semble vérifier la Relation de Fluctuation. Afin d'expliquer ce résultat, nous avons introduit un modèle simplifié, qui reproduit l'ensemble de la phénoménologie observée. En particulier, ce modèle permet un calcul analytique de la fonction de distribution de la probabilité de la puissance injectée et en explique le comportement typiquement non gaussien. Dans le cadre de ce modèle, on montre également que la Relation de Fluctuation n'est pas vérifiée.

Dans un deuxième temps, on s'est intéressé à la puissance injectée dans des gaz granulaires chauffés par une force homogène. Ce type de modèle permet une description microscopique précise du système. On peut ainsi calculer explicitement la distribution de puissance injectée pour différents modèles de gaz granulaires, ce qui permet de mettre

en évidence des caractéristiques communes entre ces différents modèles. En particulier, on trouve que la fonction de grandes déviations de la puissance injectée n'a pas de partie négative, ce qui implique que la Relation de Fluctuation n'est pas vérifiée par ces modèles. On essaye également de rendre explicite cette absence de vérification par des simulations numériques. Pour le modèle plus pertinent des sphères dures inélastiques, le manque de statistique empêche d'obtenir un résultat numérique qui permette d'observer les grandes déviations. De ce fait, la distribution de puissance injectée est essentiellement gaussienne et la Relation de Fluctuation paraît satisfaite. En revanche, pour le modèle des molécules de Maxwell inélastiques, on arrive à accumuler une statistique plus importante qui permet de montrer explicitement que la Relation de Fluctuation n'est pas vérifiée.

Enfin, on s'est intéressé à la statistique de la puissance dissipée lors des collisions. Cette quantité est reliée à la puissance injectée par une simple équation de bilan d'énergie. On a réussi à traduire ce lien en termes de distributions de probabilité de la puissance dissipée injectée, ce qui nous permet de montrer rigoureusement que l'énergie dissipée a la même fonction génératrice des cumulants que l'énergie injectée. On annonce également que cette égalité n'implique pas systématiquement qu'énergie injectée et énergie dissipée ont la même fonction de grandes déviations : des problèmes pourraient apparaître lors de l'inversion de la transformée de Laplace.

L'ensemble de ces résultats est obtenu grâce à un formalisme en termes d'opérateurs d'évolution qui est appliqué avec succès à la théorie cinétique. Cette application permet, d'une part, de développer de nouveaux outils dans le cadre de la théorie cinétique. D'autre part, elle constitue un moyen efficace pour calculer explicitement une fonction de grandes déviations dans des systèmes complexes, composés par un grand nombre de particules. De plus, une généralisation directe permet d'étudier d'autres types de modèles, ou également la fonction de grandes déviations d'autres quantités intégrées dans le temps.

Au terme de cette étude, nous concluons que la puissance injectée ne vérifie pas une Relation de Fluctuation. Ceci pourrait simplement impliquer que la puissance injectée ne joue pas un rôle de flux d'entropie pour les gaz granulaires. Malgré cela, il en ressort que c'est une quantité dont l'étude peut se révéler fructueuse, d'un point de vue phénoménologique. Il s'agit en fait d'une quantité globale dont la distribution semble présenter des caractéristiques "robustes", qui semblent indépendantes des détails du modèle, comme la force chauffante, et d'autres caractéristiques qui sont au contraire "sensibles" à ces détails. Ces dernières peuvent se révéler utiles dans des applications phénoménologiques, en permettant l'identification de détails microscopiques à partir de mesures de quantités globales.

3 Puissance injectée, énergie dissipée

4

Fonctionnelle d'action et singularités

4.1 Introduction

4.1.1 État des lieux

Nous avons étudié, dans le chapitre précédent, la distribution de la puissance injectée dans un gaz granulaire. Le propos était de tester si cette quantité vérifie la Relation de Fluctuation (FR) et nous avons montré que ce n'est pas le cas. Bien entendu, la dynamique microscopique des gaz granulaires est irréversible, ce qui est une différence essentielle avec le cadre dans lequel la FR a été établie, mais quoi qu'il en soit, il est légitime de rechercher des quantités qui présentent cette propriété pour les gaz granulaires.

C'est l'objectif du présent chapitre, qui constitue une synthèse des références [P5, P3, P7].

4.1.2 Et la fonctionnelle H ?

Afin d'examiner le plus grand nombre de quantités physiques susceptibles de jouer le rôle du flux d'entropie hors d'équilibre, il semble opportun de considérer la fonctionnelle H de Boltzmann. C'est après tout par ce résultat fondateur que la physique statistique hors d'équilibre a fait un de ses premiers pas. De plus, la théorie des gaz granulaires s'est développée essentiellement dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, en utilisant de nombreux résultats et outils établis bien avant.

Pour fixer les idées, on s'intéressera au cas d'un gaz granulaire chauffé par une force stochastique. Comme déjà discuté dans l'introduction générale, une des caractéristiques principales de l'entropie repose sur la séparation de ses variations en deux termes, d'interprétation distincte. On va commencer par considérer l'entropie de Shannon pour la

4 Fonctionnelle d'action et singularités

distribution à une particule (qui est, à un facteur près, la fonctionnelle H introduite par Boltzmann) :

$$S(t) \equiv -k_B \int d\mathbf{v}_1 f(\mathbf{v}_1, t) \log \left(\frac{f(\mathbf{v}_1, t)}{eh^d} \right), \quad (4.1)$$

où e et h sont des constantes de normalisation. La limite d'équilibre est ici équivalente à la limite élastique ($\alpha \rightarrow 1$) avec l'amplitude du bruit ξ_0^2 qui tend simultanément vers zéro, de sorte que la température granulaire du gaz soit finie. Dans cette limite, la fonctionnelle S définie ci-dessus vérifie le théorème H :

$$\frac{dS}{dt} \geq 0. \quad (4.2)$$

L'évolution de $f(\mathbf{v}, t)$ étant gouvernée par l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = J[f|f] + \xi_0^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}^2} f = 0, \quad (4.3)$$

où J est l'intégrale de collision (2.12), et le laplacien décrit la diffusion des particules dans l'espace des vitesses (cf. l'éq.(2.21)). À partir de l'équation de Boltzmann on déduit ainsi l'évolution temporelle de S :

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= -k_B \int d\mathbf{v}_1 \frac{\partial f(\mathbf{v}_1, t)}{\partial t} \log \left(\frac{f(\mathbf{v}_1, t)}{eh^d} \right) \\ &= -k_B \int d\mathbf{v}_1 J[f|f] \log \left(\frac{f(\mathbf{v}_1, t)}{eh^d} \right) \\ &\quad - k_B \xi_0^2 \int d\mathbf{v}_1 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_1^2} f(\mathbf{v}_1, t) \log \left(\frac{f(\mathbf{v}_1, t)}{eh^d} \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

L'idée est maintenant d'examiner le membre de droite de l'équation ci-dessus, afin de distinguer deux termes séparés, dans le même esprit qu'en thermodynamique des processus irréversibles [40]. La séparation habituelle comprend un terme de source et un terme de flux :

$$\frac{dS}{dt} = \sigma_{\text{irr}} + \sigma_{\text{flux}}. \quad (4.5)$$

Ici $\sigma_{\text{irr}} \geq 0$ est le taux de production d'entropie irréversible du système, et $\sigma_{\text{flux}} = - \int_V dV \nabla \cdot \mathbf{J}_S$ décrit l'effet de forces extérieures conduisant le système dans un état hors d'équilibre. En thermodynamique hors d'équilibre, \mathbf{J}_S est la somme des courants (de particules, d'énergie, etc.) qui traversent le système. De plus σ_{irr} peut souvent s'exprimer comme une forme bilinéaire des flux et de leurs affinités respectives. Ces résultats sont justifiés par une hypothèse d'équilibre local, qui ne peut être adoptée dans le cas présent. Les collisions étant dissipatives, l'irréversibilité du système apparaît déjà à l'échelle microscopique de la particule, ce qui suggère que même localement le système ne peut pas être considéré comme étant à l'équilibre. La séparation (4.5) est alors moins justifiée, et l'identification des deux termes σ_{irr} et σ_{flux} devient complètement arbitraire.

L'analogie avec le cas d'équilibre suggère une expression pour le flux d'entropie qui est la suivante :

$$\sigma_{\text{irr}} = \frac{k_B \sigma^{d-1}}{4} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12} \times (f_1^{**} f_2^{**} - f_1 f_2) \log \left(\frac{f_1^{**} f_2^{**}}{f_1 f_2} \right) + \xi_0^2 \int d\mathbf{v} \frac{(\nabla_{\mathbf{v}} f)^2}{f}. \quad (4.6)$$

Le premier terme du membre de droite est choisi par analogie avec le théorème H . Le deuxième terme est choisi par analogie avec les processus standard de diffusion. Pour ces processus la diffusion a lieu dans l'espace des positions. L'opérateur laplacien s'annule alors à l'équilibre, puisque le système devient spatialement homogène. Ici, par contre, ce terme s'annule à l'équilibre en raison du fait que, dans cette limite, l'amplitude du bruit décroît vers zéro. Cette expression de σ_{irr} apparaît comme la somme de deux termes positifs, et a donc elle-même cette propriété, qui lui est nécessaire. De plus, ce terme s'annule uniquement à l'équilibre, c'est-à-dire quand $\alpha = 1$ et $\xi_0^2 = 0$. Il respecte donc les pré-requis minimum nécessaires à l'identification de la source d'entropie.

D'autre part, l'expression du terme de flux est maintenant fixée :

$$\sigma_{\text{flux}} = \frac{k_B \sigma^{d-1}}{4} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \Theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12} \times f_1 f_2 \log \left[\frac{(f_1^{**} f_2^{**})(f_1 f_2)^{1-\alpha^2}}{(f_1^* f_2^*)^{2-\alpha^2}} \right], \quad (4.7)$$

où l'on a utilisé les notations simplifiées $f_{1,2} = f(\mathbf{v}_{1,2}, t)$ et $f_{1,2}^{**} = f(\mathbf{v}_{1,2}^{**}, t)$. La fonctionnelle ci-dessus est négative pour une grande classe de fonctions test, et en particulier dans l'état stationnaire, où elle prend une valeur $\sigma_{\text{flux}} \sim -\frac{1-\alpha^2}{\ell} T_0^{1/2}$. Cependant, dans l'esprit de la thermodynamique des phénomènes irréversibles, la séparation (4.5) est motivée par une distinction précise du processus qui conduit le système hors de l'équilibre. Cette distinction n'est pas prise en compte par l'identification (arbitraire) de la source d'entropie (4.6). On aurait par ailleurs pu choisir de ne retenir que le premier terme de l'expression (4.6) de la production d'entropie. De cette manière, le terme σ_{flux} aurait contenu deux termes, correspondants à la dissipation et à l'injection de l'énergie. Cependant, avec un tel choix le flux d'entropie aurait perdu la propriété d'être une fonctionnelle négative.

Un autre choix qui peut être fait, est une séparation, plus pragmatique d'un point de vue technique, qui consiste à isoler le mécanisme d'injection d'énergie. Dans cette optique on peut identifier un terme de production d'entropie du "système", qui ne comprend que les collisions inélastiques, et un terme "extérieur", qui correspond à l'injection d'énergie :

$$\frac{dS}{dt} = \sigma_{\text{syst}} + \sigma_{\text{ext}}. \quad (4.8)$$

Dans ce cas le terme σ_{ext} est toujours positif. Par conséquent, dans l'état stationnaire le terme σ_{syst} est négatif, ce qui suggère que l'effet de désordre dû aux collisions est compensé par la dissipation, qui a tendance à aligner les particules dans une même direction. De plus, un calcul perturbatif (présenté dans la Réf. [10], et retranscrit dans l'appendice B) permet de montrer que l'extrémalisation de ces deux fonctionnelles ne

4 Fonctionnelle d'action et singularités

permet pas de retrouver des propriétés de la solution stationnaire f (i.e. la température et le coefficient de Sonine a_2).

Une approche en terme de fonctionnelle H ne semble pas permettre l'identification d'une quantité susceptible de représenter le flux d'entropie du système. Une autre approche possible, inspirée par des résultats issus de la théorie des processus de Markov, est présentée dans le paragraphe suivant.

4.1.3 Fonctionnelle d'action

Dans le cadre des processus de Markov, une définition précise de flux d'entropie a été proposée par Lebowitz et Spohn [82]. Cette définition repose sur la comparaison de chaque trajectoire du système dans l'espace des phases avec la même trajectoire, mais renversée dans le temps. Cette comparaison ne peut avoir lieu dans un gaz granulaire, parce que pour chaque trajectoire qui contient au moins une collision, la trajectoire renversée dans le temps n'existe pas. Ceci est simplement dû au caractère microscopiquement irréversible du gaz granulaire : si une paire de particules exécute une collision en dissipant une certaine énergie, la trajectoire renversée dans le temps supposerait que le même couple de particules, avec des vitesses renversées, gagne de l'énergie après avoir effectué une collision. Cependant le système est dans un état stationnaire, invariant par translation dans le temps. On pourrait donc penser qu'il existe un "*coarse graining*" qui puisse rendre le système "comme s'il était réversible". Parmi les nombreux moyens d'obtenir un tel lissage (cf. par exemple [19]), le plus simple semble de se restreindre au sous-espace propre à une seule particule. En effet, si on suit la trajectoire d'une particule qui évolue dans un gaz granulaire, une trajectoire correspondante renversée dans le temps existe toujours. Si l'on se place dans un état homogène (et dilué), on peut considérer comme seul degré de liberté pertinent la vitesse \mathbf{v} de la particule. Chaque trajectoire sera donc constituée d'une succession de valeurs $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n$ de la vitesse, qui n'est modifiée que lors d'une collision. De plus, pour toute transition $\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}_2$, survenue après une collision avec une autre particule de vitesse \mathbf{u}_1 , la trajectoire renversée existe toujours : il suffit pour cela que la collision ait lieu avec une autre particule, de vitesse \mathbf{u}_2 . Cette vitesse doit être telle que précisément $\mathbf{v}_2 \rightarrow \mathbf{v}_1$ à l'issue de la collision.

La pdf de la vitesse $P_*(\mathbf{v}, t)$ du traceur évolue suivant l'équation maîtresse :

$$\frac{dP_*(\mathbf{v}, t)}{dt} = \int d\mathbf{v}_1 P_*(\mathbf{v}_1) K(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}) - \int d\mathbf{v}_1 P_*(\mathbf{v}) K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}_1), \quad (4.9)$$

où $K(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}) d\mathbf{v}$ est la probabilité par unité de temps pour qu'une particule, initialement avec une vitesse \mathbf{v}_1 , ait une transition vers un état de vitesse \mathbf{v} .

Dans de telles conditions Lebowitz et Spohn [82] ont introduit les deux fonctionnelles

d'action suivantes :

$$W(t) = \sum_{i=1}^{n(t)} \log \frac{K(\mathbf{v}_i \rightarrow \mathbf{v}'_i)}{K(\mathbf{v}'_i \rightarrow \mathbf{v}_i)}, \quad (4.10a)$$

$$\begin{aligned} \overline{W}(t) &= \log \frac{P_*(\mathbf{v}_1)}{P_*(\mathbf{v}'_{n(t)})} + \sum_{i=1}^{n(t)} \log \frac{K(\mathbf{v}_i \rightarrow \mathbf{v}'_i)}{K(\mathbf{v}'_i \rightarrow \mathbf{v}_i)} \\ &= \log \frac{\mathcal{P}(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}_2 \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{v}_{n(t)})}{\mathcal{P}(\mathbf{v}_{n(t)} \rightarrow \mathbf{v}_{n(t)-1} \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{v}_1)}. \end{aligned} \quad (4.10b)$$

Dans l'expression ci-dessus, l'indice i indique le nombre de collisions subies par le traceur, \mathbf{v}_i sa vitesse juste avant la i -ème collision et \mathbf{v}'_i sa vitesse post-collisionnelle. De plus, $n(t)$ est le nombre de collisions effectuées en un temps t . On a également utilisé la notation $\mathcal{P}(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}_2 \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{v}_n)$ pour noter la probabilité d'observer une séquence de collisions donnée. Ces deux fonctionnelles ne diffèrent que d'un terme $\log \frac{P_*(\mathbf{v}_1)}{P_*(\mathbf{v}'_{n(t)})}$, qui ne dépend que de l'état initial et de l'état final. Contrairement à W et \overline{W} , il s'agit d'un terme stationnaire en temps. On va donc se référer à cette quantité en tant que "terme de bord". Ces fonctionnelles vérifient un certain nombre de propriétés [82] :

- \overline{W} s'annule lorsque le bilan détaillé est vérifié (i.e. à l'équilibre). Par contre, $W(t) = 0$ ne s'annule que si les taux de transition sont parfaitement symétriques (i.e. $K(\mathbf{v}_i \rightarrow \mathbf{v}_{i+1}) = K(\mathbf{v}_{i+1} \rightarrow \mathbf{v}_i)$), comme à l'équilibre microcanonique.
- À grand temps $\langle W \rangle = \langle \overline{W} \rangle \geq 0$, le signe d'égalité n'étant valable qu'à l'équilibre. De plus, quand le temps t tend vers l'infini, $\frac{W(t)}{t} \simeq \frac{\overline{W}}{t}$.
- Si on considère l'entropie de Shannon $S(t) = - \int dv P_*(v, t) \log P_*(v, t)$ associée à la pdf P_* , on a alors :

$$\frac{d}{dt} S(t) = R(t) - A(t) \quad (4.11)$$

où $R(t) \geq 0$, $A(t)$ est linéaire par rapport à P_* , et $\langle W(t) \rangle \equiv \int_0^t dt' A(t')$. Cette dernière remarque suggère que W peut s'interpréter comme la contribution d'une seule trajectoire au flux d'entropie.

- La fonction de grandes déviations $\pi(w) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log f_W^t(tw)$ associée à la probabilité $f_W^t(x)$ d'avoir $W(t) = x$ au temps t vérifie la FR : $\pi(w) - \pi(-w) = w$.
- La pdf $f_{\overline{W}}^t(x)$ d'avoir $\overline{W}(t) = x$ au temps t vérifie la FR à tout temps : $\overline{\pi}(w, t) - \overline{\pi}(-w, t) = w$, où cette fois-ci $\overline{\pi}(w, t) = \frac{1}{t} \log f_{\overline{W}}^t(tw)$.

Ainsi, on peut montrer rigoureusement que la fonctionnelle \overline{W} vérifie à tout temps la relation de fluctuation. D'autre part, W et \overline{W} ne diffèrent que par un terme de bord, qui devrait devenir négligeable dans la limite de grand temps. C'est par cette remarque que l'on déduit que W vérifie également la FR, mais cette fois-ci seulement dans la limite de temps infini, lorsque le terme de bord est négligeable. On voit dans (4.11) que les variations temporelles d'entropie peuvent (toujours de manière arbitraire) se séparer en un terme de source (R) et un terme de flux (A). Le terme de flux apparaît alors comme la valeur moyenne de la fonctionnelle W , qui joue le rôle d'un flux microscopique, et qui

vérifie par construction la [FR](#). Cependant l'interprétation physique de W ne permet pas une identification simple avec les courants physiques (i.e. d'énergie, de particules, *etc.*) qui participent habituellement à l'expression de l'entropie phénoménologique.

Cependant, ces fonctionnelles d'action sont bien définies, et peuvent être mesurées. Par exemple, l'évolution d'un traceur dans un bain de particules granulaires peut être suivie de manière très précise, même expérimentalement (on pourrait par exemple imaginer le même dispositif utilisé, dans un contexte de turbulence, dans [\[90\]](#)). En adoptant ce point de vue lagrangien, on pourrait mesurer empiriquement les taux de transition, ou les calculer à partir des équations cinétiques. Ensuite, pour chaque trajectoire suivie, on peut mesurer un échantillon de W . Ceci permettrait une mesure du flux d'entropie dans un système loin de l'équilibre.

4.2 Relation de fluctuation pour un traceur granulaire

On va maintenant montrer comment, à partir d'une équation de Boltzmann pour le traceur, on peut obtenir l'expression des taux de transition $K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}')$. On pourra ainsi définir les expressions de W et \bar{W} , pour ensuite mesurer la fonction de distribution de la probabilité de ces deux quantités, et tester la Relation de Fluctuation.

4.2.1 Équation maîtresse et taux de transition

On considère l'évolution d'une particule marquée, de masse M , dans un bain mono-disperse de particules de masse m thermalisé à une certaine température, et avec une distribution de vitesse stationnaire $P(\mathbf{v})$. Le traceur interagit avec les particules du bain via des collisions inélastiques. La loi de collision entre le traceur et une particule du bain, de vitesse \mathbf{V} s'écrit :

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - m \frac{1 + \alpha}{m + M} [(\mathbf{v} - \mathbf{V}) \cdot \hat{\omega}] \hat{\omega}, \quad (4.12)$$

où \mathbf{v} et \mathbf{v}' représentent la vitesse du traceur avant et après une collision. Le vecteur $\hat{\omega}$ est un vecteur unitaire dirigé suivant l'axe qui relie le centre de masse du traceur au centre de masse de la particule du bain, lorsque celles-ci sont en contact. Les trois paramètres impliqués dans la loi de collision [\(4.12\)](#) peuvent se réduire à un seul paramètre effectif :

$$m \frac{1 + \alpha}{m + M} \equiv \frac{1 + \alpha'}{2}, \quad \text{avec} \quad \alpha' = \frac{m - M + 2m\alpha}{m + M}. \quad (4.13)$$

On pourra donc considérer par la suite que le traceur est une particule de masse m , et qu'il interagit avec un coefficient de restitution α qui peut être éventuellement négatif. L'évolution de la [pdf](#) de la vitesse du traceur est gouvernée par une équation de Boltzmann linéaire, qui s'écrit :

$$\frac{dP_*(\mathbf{v}, t)}{dt} = \frac{1}{\ell} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\omega} |(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\omega}| P_*(\mathbf{v}_1) P(\mathbf{v}_2) \times \left\{ \delta \left(\mathbf{v} - \mathbf{v}_1 + \frac{1 + \alpha}{2} [(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \hat{\omega}] \hat{\omega} \right) - \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_1) \right\}. \quad (4.14)$$

4.2 Relation de fluctuation pour un traceur granulaire

La distribution de vitesse du traceur P_* ne dépend que de α et de la distribution des vitesses du bain P . Dans cette description, les interactions entre les particules du bain ne sont pas explicites, mais sont cachées dans l'expression de P . Si par exemple on suppose que le bain est constitué de particules granulaires chauffées par un thermostat stochastique, l'effet de l'inélasticité sera contenu dans la distribution P au travers de la valeur du coefficient de Sonine a_2 .

À partir de l'équation (4.14) on déduit, par identification avec l'équation maîtresse (4.9), l'expression des taux de transition :

$$K(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'_1) = \frac{1}{\ell} \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\omega}} \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\omega}}) |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\omega}}| P(\mathbf{v}_2) \times \delta \left\{ \mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}_1 + \frac{1+\alpha}{2} [\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\omega}}] \hat{\boldsymbol{\omega}} \right\}. \quad (4.15)$$

En utilisant que pour un vecteur en d dimensions $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$ on a $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{1}{r_0^{d-1}} \delta(r - r_0) \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}_0)$, l'expression ci-dessus se réécrit :

$$K(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'_1) = \frac{1}{\ell} \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\omega}} \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\omega}}) \frac{|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\omega}}|}{\Delta v^{d-1}} P(\mathbf{v}_2) \delta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} + \hat{\boldsymbol{\omega}}) \times \delta \left(\Delta v + \frac{1+\alpha}{2} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\omega}}| \right), \quad (4.16)$$

où Δv et $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ sont définis par $\mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}_1 = \Delta v \hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Ensuite, intégrant sur $\hat{\boldsymbol{\omega}}$ on obtient :

$$K(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'_1) = \frac{1}{\ell} \int d\mathbf{v}_2 \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \frac{|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}|}{\Delta v^{d-1}} P(\mathbf{v}_2) \delta \left(\Delta v + \frac{1+\alpha}{2} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \right). \quad (4.17)$$

En notant par $v_{2\sigma}$ la composante de \mathbf{v}_2 parallèle à $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, et par $\mathbf{v}_{2\tau}$ le vecteur dans l'hyperplan à $d-1$ dimensions perpendiculaire à $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, l'expression ci-dessus se réécrit :

$$K(\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'_1) = \frac{1}{\ell} \int dv_{2\sigma} d\mathbf{v}_{2\tau} \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \frac{|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}|}{\Delta v^{d-1}} P(v_{2\sigma}, \mathbf{v}_{2\tau}) \times \delta \left(\Delta v + \frac{1+\alpha}{2} |\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}| \right). \quad (4.18)$$

Enfin, en intégrant sur $dv_{2\sigma}$, on obtient l'expression suivante, pour les taux de transition :

$$K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}') = \left(\frac{2}{1+\alpha} \right)^2 \frac{1}{\ell} |\Delta \mathbf{v}|^{2-d} \int d\mathbf{v}_{2\tau} P[\mathbf{v}_2(\mathbf{v}, \mathbf{v}', \mathbf{v}_{2\tau})]. \quad (4.19)$$

On voit que les taux de transition ne font intervenir que la distribution des composantes parallèles à $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ des vitesses des particules du bain.

Exemples : bain gaussien et corrections de Sonine

On va maintenant étudier les taux de transition dans deux cas intéressants, l'un par simplicité, l'autre par sa pertinence physique. Le cas le plus simple, consiste à considérer que la distribution du bain est une gaussienne. On suppose donc que les particules du bain interagissent entr'elles par des collisions élastiques, et avec le traceur par des collisions inélastiques. Ce modèle a déjà été étudié par Martin et Piasecki [85], qui ont trouvé que la pdf de la vitesse du traceur est une gaussienne, avec une température différente de la température du bain. Si on suppose :

$$P(\mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi T)^{d/2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right), \quad (4.20)$$

où T est la température du bain, alors le taux de transition $K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}')$ s'écrit :

$$K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}') = \left(\frac{2}{1+\alpha}\right)^2 \frac{1}{\ell} |\Delta v|^{2-d} \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} e^{-\frac{v_{2\sigma}^2}{2T}}. \quad (4.21)$$

Un autre cas intéressant consiste à prendre pour la distribution de vitesse du bain une gaussienne multipliée par un polynôme de Sonine. Cet exemple décrirait avec une bonne approximation une situation où le traceur évolue dans un bain de particules inélastiques maintenues dans un état stationnaire homogène par des mécanismes d'injection extérieurs. On sait dans ce cas que la pdf de la vitesse n'est pas gaussienne, et qu'elle est bien approximée par une gaussienne multipliée par un polynôme de Sonine. Dans ce cas on aurait :

$$P(\mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi T)^{d/2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right) \left(1 + a_2 S_2^d\left(\frac{v^2}{2T}\right)\right), \quad (4.22)$$

où S_2^d est le deuxième polynôme de Sonine (cf. éq.(2.23c)), où l'on a explicité la dépendance par la dimension d . À partir de l'expression de P ci-dessus, on obtient le taux de transition suivant :

$$K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}') = \left(\frac{2}{1+\alpha}\right)^2 \frac{1}{\ell} |\Delta v|^{2-d} \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} e^{-\frac{v_{2\sigma}^2}{2T}} \left(1 + a_2 S_2^{d=1}\left(\frac{v_{2\sigma}^2}{2T}\right)\right). \quad (4.23)$$

On va maintenant s'intéresser au rapport entre le taux d'une transition $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}'$ et le taux de la transition inverse $\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}$. Dans une telle transition, le vecteur $\hat{\sigma}$ change de signe. De plus, $v_{2\sigma}(\mathbf{v}, \mathbf{v}') \neq v_{2\sigma}(\mathbf{v}', \mathbf{v})$. Finalement, on trouve :

$$\frac{K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}')}{K(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})} = \frac{\int d\mathbf{v}_{2\tau} P[\mathbf{v}_2(\mathbf{v}, \mathbf{v}')] }{\int d\mathbf{v}_{2\tau} P[\mathbf{v}_2(\mathbf{v}', \mathbf{v})]} \equiv \frac{P[v_{2\sigma}(\mathbf{v}, \mathbf{v}')] }{P[v_{2\sigma}(\mathbf{v}', \mathbf{v})]}. \quad (4.24)$$

On peut remarquer que ce rapport dépend de la pdf du bain, P , et ne dépend pas explicitement du coefficient de restitution α . En introduisant la notation $v_{2\sigma} = v_{2\sigma}(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$, $v'_{2\sigma} = v_{2\sigma}(\mathbf{v}', \mathbf{v})$ et $v_{\sigma}^{(l)} = \mathbf{v}^{(l)} \cdot \hat{\sigma}$, on trouve que :

$$(v'_{2\sigma})^2 = v_{2\sigma}^2 + (v_{\sigma} + v'_{\sigma})^2 - 2v_{2\sigma}(v_{\sigma} + v'_{\sigma}), \quad (4.25)$$

ce qui implique :

$$\Delta_2 = (v_{2\sigma})^2 - (v'_{2\sigma})^2 = -\Delta - 2\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\Delta = -\frac{3-\alpha}{1+\alpha}\Delta, \quad (4.26)$$

où $\Delta = v_\sigma^2 - (v'_\sigma)^2 \equiv |v|^2 - |v'|^2$, c'est-à-dire l'énergie cinétique perdue par le traceur lors d'une collision. Quand $\alpha = 1$, alors $\Delta_2 = -\Delta$, ce qui exprime la conservation de l'énergie. À partir de ces considérations, on déduit que :

– Dans la cas gaussien :

$$\log \frac{K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}')}{K(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})} = \frac{\Delta}{2T} + 2\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\frac{\Delta}{2T} = \frac{3-\alpha}{1+\alpha}\frac{\Delta}{2T}. \quad (4.27)$$

– Dans l'approximation de Sonine :

$$\log \frac{K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}')}{K(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})} = \frac{3-\alpha}{1+\alpha}\frac{\Delta}{2T} + \log \frac{\left\{ 1 + a_2 S_2^{d=1} \left[\frac{\left(\frac{2}{1+\alpha} (v'_\sigma - v_\sigma) + v_\sigma \right)^2}{2T} \right] \right\}}{\left\{ 1 + a_2 S_2^{d=1} \left[\frac{\left(\frac{2}{1+\alpha} (v_\sigma - v'_\sigma) + v'_\sigma \right)^2}{2T} \right] \right\}}. \quad (4.28)$$

Dans le cas où $P(\mathbf{v})$ est une gaussienne, on peut remarquer que l'équation :

$$P_*(\mathbf{v})K(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}') = P_*(\mathbf{v}')K(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}), \quad (4.29)$$

admet une gaussienne pour solution :

$$P_*(\mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi T')^{d/2}} e^{-\frac{v^2}{2T'}} \quad \text{avec } T' = \frac{\alpha+1}{3-\alpha}T \neq T. \quad (4.30)$$

L'expression ci-dessus est la solution de l'équation de Boltzmann trouvée par Martin et Piasecki [85]. On peut voir qu'elle satisfait le bilan détaillé, exprimé par l'équation (4.29). Il apparaît donc que, même si on est en dehors de l'équilibre thermodynamique ($T \neq T'$, il n'y a donc pas d'équipartition de l'énergie), le bilan détaillé est vérifié pour le système traceur, on est donc à l'équilibre¹. Ceci est un artifice dû à la simplicité du modèle : il n'est pas réaliste que la distribution d'un gaz granulaire soit gaussienne. Dès que la pdf $P(\mathbf{v})$ cesse d'être gaussienne, le bilan détaillé est violé, et un flux W non nul apparaît.

4.2.2 Résultats numériques

L'évolution de la particule traceur peut être simulée par un algorithme Monte Carlo, essentiellement inspiré par l'algorithme DSMC. Le temps sera mesuré en unités du temps de vol moyen τ_c . Dans un premier moment, on a vérifié le bon accord entre les prédictions théoriques des taux de transition, et les taux de transition mesurés empiriquement lors d'une simulation numérique. Ces résultats sont présentés dans la figure 4.1, où l'on a tracé la loi marginale de K , pour la composante de la vitesse parallèle à $\hat{\sigma}$ (cf. [100] pour plus de détails sur ce point).

¹Ceci n'est plus vrai dès que le traceur n'est pas sphérique, comme montré dans [114].

4 Fonctionnelle d'action et singularités

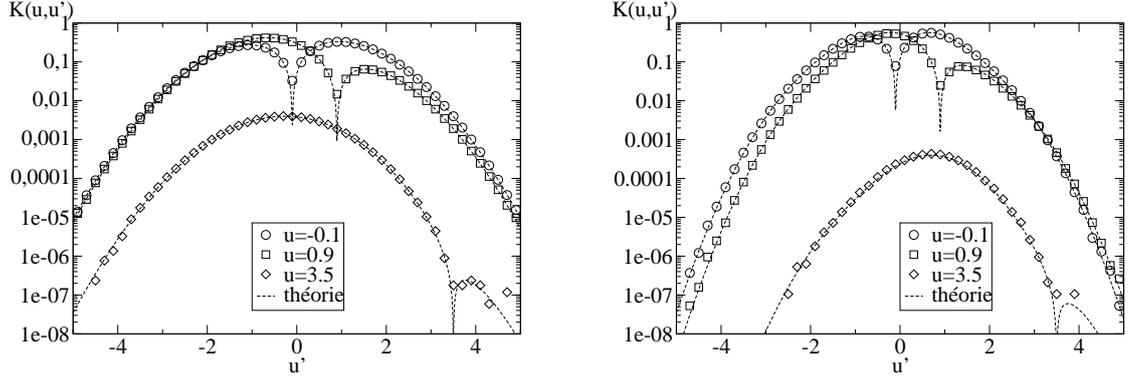


FIG. 4.1: Mesure des taux de transition lors d'une simulation Monte Carlo en 2 dimensions. On montre une section de la fonction $\tilde{K}(u_\sigma, u'_\sigma)$ pour $u_\sigma = -0.1$, $u_\sigma = 0.9$ et $u_\sigma = 3.5$. Cette fonction représente la loi marginale des taux de transition pour les vitesses dans la direction $\hat{\sigma}$. Dans la figure de gauche, le bain a une pdf gaussienne, est les collisions sont élastiques (équilibre). Dans la figure de droite, le bain a une pdf constituée par une gaussienne multipliée par un polynôme de Sonine, de paramètre $a_2 = 0.1$ (ce qui correspond à une valeur de α proche de 0).

Lorsque la pdf du bain est gaussienne, le résultat (4.30) est bien vérifié. Par contre, lorsque la pdf du bain est une gaussienne multipliée par un polynôme de Sonine, on n'est pas capable d'obtenir une solution exacte de l'équation de Boltzmann linéaire correspondante. Cependant, l'observation numérique montre que, lorsque le coefficient a_2 est petit devant l'unité (ce qui est souvent le cas, pour un gaz granulaire), la pdf de la vitesse se comporte de manière similaire :

$$P_*(\mathbf{v}) \simeq \frac{e^{-\frac{v^2}{2T_*}}}{(2\pi T_*)^{d/2}} \left(1 + a_2^* S_2^d \left(\frac{v^2}{2T_*} \right) \right), \quad (4.31)$$

où $T_* \simeq T' = \frac{\alpha+1}{3-\alpha}T$, et $a_2^* < a_2$. Le rapport entre la température T_* du traceur et la température T du bain est toujours de l'ordre de $1 + a_2^*$, et le coefficient a_2^* est toujours plus petit que le coefficient a_2 qui est lui-même petit devant l'unité. De plus, a_2^* est une fonction croissante de a_2 , et ne semble pas dépendre de la température du bain T . On peut considérer le coefficient a_2 comme un paramètre qui permet de conduire le système hors d'équilibre, tout comme l'inélasticité.

On peut maintenant s'intéresser aux fonctionnelles d'action. Les distributions de probabilité de W et \bar{W} peuvent être mesurées empiriquement, pour une valeur finie de la durée τ de la trajectoire. On va plus précisément simuler une seule longue trajectoire (de durée $> N\tau$), et on va échantillonner N réalisations de $W(\tau)$ et $\bar{W}(\tau)$ le long de cette trajectoire. De plus, l'ensemble des N sous-trajectoires de durée τ , le long desquelles W et \bar{W} sont mesurées, ne se superposent jamais. À partir de ces échantillons, on construit les histogrammes f_W^τ et $f_{\bar{W}}^\tau$. On va particulièrement s'intéresser à la FR, que l'on testera

4.2 Relation de fluctuation pour un traceur granulaire

en se servant de la fonction suivante :

$$as_\tau(W) = \log f^\tau(W) - \log f^\tau(\overline{W}) . \quad (4.32)$$

Pour la distribution $f_{\overline{W}}^\tau$, la fonction $as_\tau(\overline{W})$ devrait être, pour toute valeur de τ , une droite de pente 1. En revanche, pour f_W^τ , la fonction $as_\tau(W)$ n'est linéaire que dans la limite $\tau \rightarrow \infty$. Une vérification de la relation de fluctuation pour W demanderait que la vérification de la relation linéaire $as(W) = W$ soit observée *au moins* jusqu'à des valeurs de W d'ordre $\langle W \rangle$. Les mesures de W peuvent s'effectuer directement, en utilisant l'expression des taux de transition. En ce qui concerne les mesures de \overline{W} , on a en principe besoin de la pdf $P_*(\mathbf{v})$, afin de pouvoir mesurer le terme de bord qui apparaît dans l'expression de \overline{W} . On va pour cela utiliser l'expression approximative (4.31) pour P_* . Les paramètres T_* et a_2^* sont alors mesurés en même temps que \overline{W} et W .

Dans la figure 4.2 on montre les mesures de $as_\tau(W)$ et de $as_\tau(\overline{W})$ pour différentes valeurs de τ et de a_2 . On mesure également la moyenne $\langle w \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} W(\tau)/\tau$. Cette quantité représente le taux de production d'entropie, et nous renseigne "quantitativement" sur la distance à l'équilibre. Ainsi, $\langle w \rangle$ est nul lorsque a_2 est nul, croît lorsque α décroît, et croît lorsque a_2 croît. On rappelle également que cette propriété est aussi valable pour \overline{W} , puisque cette quantité a la même moyenne de W .

La pdf de $W(\tau)$, montrée dans les encadrés de la figure 4.2 est fortement non gaussienne. Les queues ont un comportement exponentiel, surtout à faible valeur de τ et lorsque l'on est proche de l'équilibre. À plus grand temps, et plus loin de l'équilibre, la situation est différente, et la statistique de W mesurée est essentiellement gaussienne. L'interprétation de cette observation requiert une certaine prudence. Lorsque l'on observe la distribution d'une somme de variables aléatoires, il n'existe pas de principe clair qui permette de déterminer le seuil à partir duquel on entre dans un régime de grandes déviations. Plus précisément, le théorème de la limite centrale est automatiquement contenu dans le principe des grandes déviations, en tant que comportement limite autour de la moyenne. Pourtant, si on s'intéresse par exemple à la pdf f_W^τ tracée en bas à droite dans la figure 4.2, on n'est pas capable d'affirmer avec certitude si son allure gaussienne est due au théorème de la limite centrale, ou s'il s'agit bien de la fonction de grandes déviations, qui est vraiment quadratique. De plus, à ce stade, on ne dispose pas de plus de statistique que dans les graphes de la figure 4.2. Le dernier graphe de cette figure ne viole pas la FR. Cependant, la plage de valeurs de W sur laquelle la FR est vérifiée, est environ la moitié de l'échelle typique $\langle W \rangle$. À ce stade, la conclusion est que ces données ne sont pas probantes quant à la vérification, par W , de la FR.

En ce qui concerne la fonctionnelle $\overline{W}(\tau)$ l'interprétation est bien plus simple. La distribution de \overline{W} s'écarte toujours de la gaussienne, mais ne présente pas d'aussi grandes déviations que f_W . De plus, la FR est toujours vérifiée avec grande précision, sauf à l'équilibre, lorsque la FR perd son sens, et $as_\tau(\overline{W}) = 0$.

Comme déjà mentionné précédemment, les deux fonctionnelles définies en (4.10) ne diffèrent que d'un terme de bords. On s'attend à ce que les fonctions de grandes déviations de W et de \overline{W} soient les mêmes, ce qui impliquerait également que leurs distributions de probabilités respectives soient quasiment les mêmes [54, 18]. Afin de quantifier l'éventuelle convergence des pdf de W et \overline{W} vers une unique distribution, on a

4 Fonctionnelle d'action et singularités

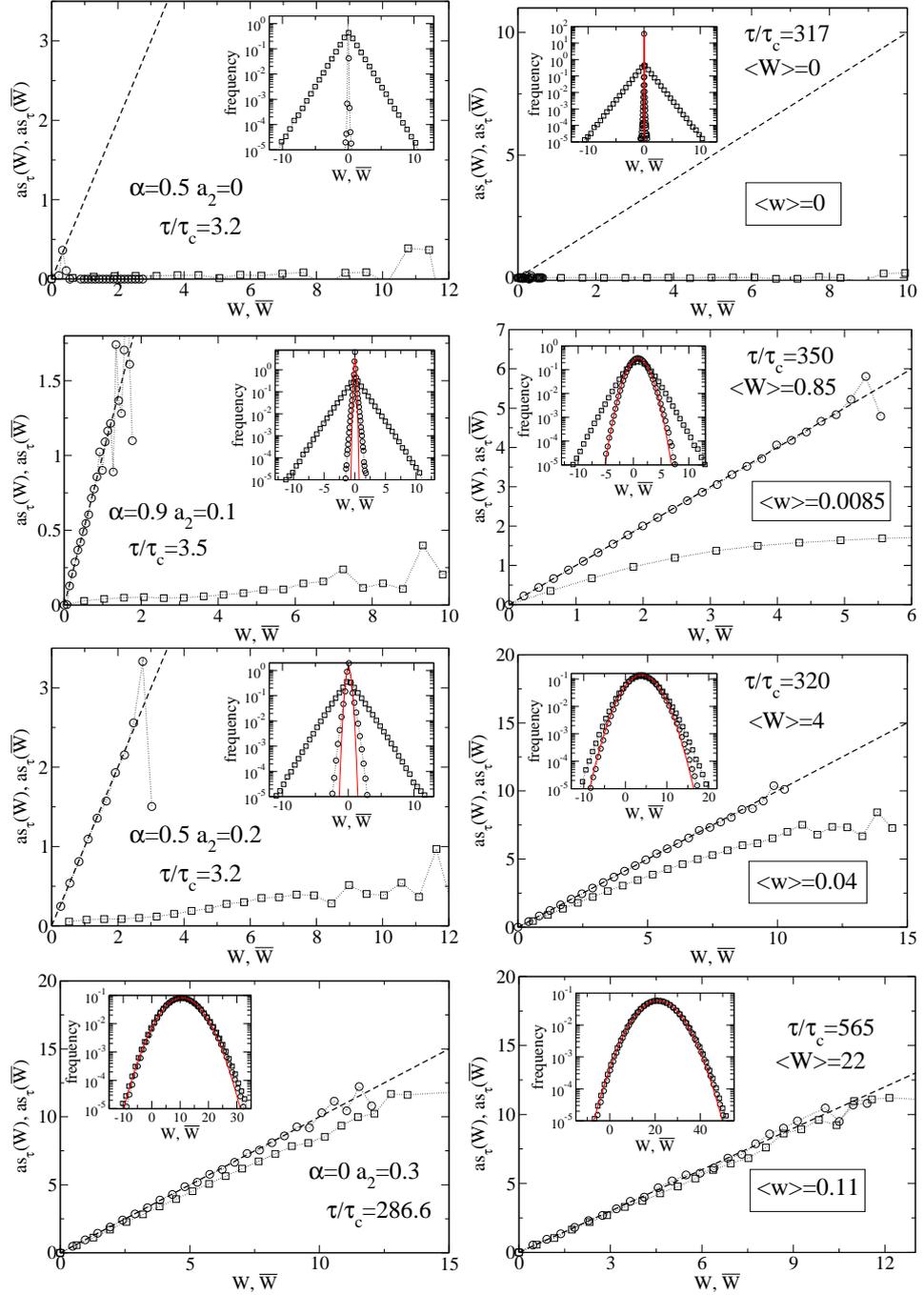


FIG. 4.2: Vérification de la FR pour $W(\tau)$ (carrés) et pour $\bar{W}(\tau)$ (cercles). Chaque ligne est formée de deux graphes qui montrent les résultats pour un choix donné de α et a_2 : à droite pour des temps courts, et à gauche pour des temps longs. La première ligne montre les résultats dans le cas d'équilibre où $a_2 = 0$. En descendant, on s'éloigne de plus en plus de l'équilibre. Dans les encadrés on montre les probabilités f_W et $f_{\bar{W}}$, avec une régression de $f_{\bar{W}}$ avec une gaussienne en trait plein. La ligne en tirets est une droite de pente 1.

comparé la convergence des premiers cumulants vers leur valeur asymptotique. Dans l’encadré A de la figure 4.3 on peut voir que les moyennes $\langle W \rangle$ et $\langle \overline{W} \rangle$ convergent vers une même valeur en moins de 100 temps de vol. Dans les encadrés B et C de cette même figure on s’intéresse au deuxième cumulant. On peut remarquer que le temps de convergence est ici plus grand de plus d’un ordre de grandeur. Il est remarquable que ce temps de convergence est d’autant plus long que l’on s’approche de l’équilibre (ceci est bien visible dans l’encadré C). Enfin, on a essayé de quantifier la possibilité d’observer numériquement une vérification de la FR pour une valeur de τ où les cumulants respectifs ont convergé vers une même valeur. L’obstacle principal à une telle vérification est la difficulté d’observer des événements négatifs, ou des événements qui s’écartent de la moyenne d’une valeur qui est du même ordre que celle-ci. De plus, on a vu que pour les grands temps la partie “mesurable” de f_W est essentiellement gaussienne, ce qui implique une décroissance rapide des queues de la distribution. D’un point de vue numérique, les réalisations les plus faibles de W que l’on mesure sont situées environ 5 écarts-types en dessous de la moyenne. Une condition pratique pour que l’on puisse effectivement mesurer des événements négatifs est donc que $5\sqrt{\langle W^2(\tau) \rangle_c} \gg \langle W(\tau) \rangle$. À ce propos, on a tracé dans l’encadré D de la figure 4.3 le rapport entre $5\sqrt{\langle W^2(\tau) \rangle_c}$ et $\langle W(\tau) \rangle$. On peut voir que, dès que le temps de convergence entre $\langle W^2 \rangle_c$ et $\langle \overline{W}^2 \rangle_c$ est atteint, la probabilité d’observer des événements négatifs devient moindre.

On va maintenant discuter un autre argument, qui pourrait expliquer la lenteur de la convergence des cumulants de $W(\tau)$. Cette explication repose sur des conséquences “catastrophiques” que pourrait avoir le terme de bord sur la distribution de W . En regardant les premiers graphes de la figure 4.2, on peut remarquer que les queues exponentielles de la distribution de W ne semblent pas disparaître à grand temps. Ceci suggère que la distribution de W “se souviennent” de ses fluctuations à temps court. Si on reprend l’expression (4.28), dont W est la somme sur une trajectoire donnée, on peut remarquer que :

$$W(t) = \frac{3 - \alpha}{1 + \alpha} \frac{|\mathbf{v}_1|^2 - |\mathbf{v}_{n(t)}|^2}{2T} + \sum \log \frac{1 + a_{2\dots}}{1 + a_{2\dots}}, \quad (4.33)$$

où, par souci de simplicité, on n’a pas réécrit explicitement les contributions venant du coefficient de Sonine a_2 . Dans la somme des différences d’énergie Δ les vitesses s’éliminent terme à terme, et il ne reste, tout compte fait, qu’une contribution de l’énergie initiale et l’énergie finale, c’est-à-dire encore un terme de bord. Il est évident ensuite que, à l’ordre a_2 , la pdf de ce terme, qui est une différence de deux énergies, a des queues exponentielles. Ce terme est donc le terme dominant des fluctuations de W à faible temps, et il semble parfois même dominer le comportement à grand temps. Ceci dépend en fait des fluctuations des termes successifs, contenant les coefficients de Sonine. Ces termes sont très faibles lorsque l’on est proche de l’équilibre, ce qui explique pourquoi le terme de bord domine dans ce cas, même à temps long. Plus on s’éloigne de l’équilibre, plus ces termes deviennent importants, et ce n’est que très loin de l’équilibre que les effets du terme de bord semblent s’effacer.

La situation est complètement différente lorsque l’on s’intéresse aux fluctuations de

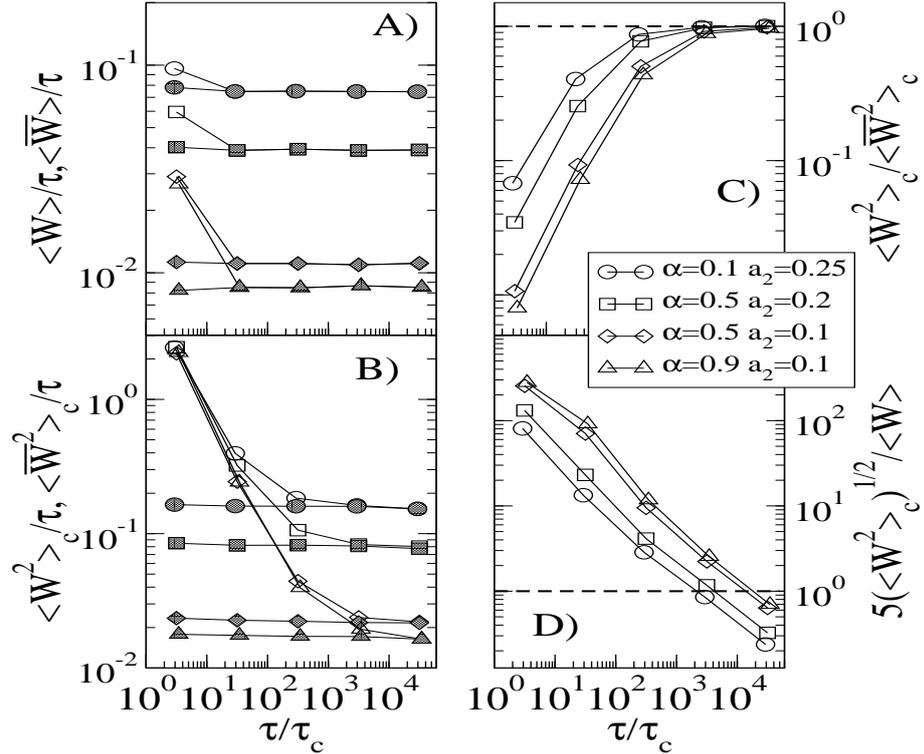


FIG. 4.3: Cumulants de $W(\tau)$ (symboles en blanc) et de \overline{W} (symboles noirs) pour différents choix des paramètres a_2 et α . A) Moyenne de W et \overline{W} en fonction du temps τ . B) Deuxièmes cumulants de W et \overline{W} en fonction de τ . C) Rapport entre le deuxième cumulant de \overline{W} et le deuxième cumulant de W . D) Rapport entre $5\sqrt{\langle \overline{W}(\tau)^2 \rangle_c}$ et $\langle W(\tau) \rangle$. Quand ce rapport est petit devant 1, la probabilité d'observer des fluctuations négatives de $W(\tau)$ est extrêmement faible. Le temps est ici exprimé en unités du temps de vol moyen τ_c .

\overline{W} . Dans ce cas, le terme de bord discuté ci-dessus s'élimine exactement avec le terme de bord supplémentaire qui apparaît dans la définition de \overline{W} . Si on se place dans l'hypothèse que la pdf P_* est bien approximée l'expression (4.31), on peut voir que :

$$\log \frac{P_*(\mathbf{v}_1)}{P_*(\mathbf{v}_{n(t)})} \approx \frac{-|\mathbf{v}_1|^2 + |\mathbf{v}_{n(t)}|^2}{2T_*} \approx \frac{3 - \alpha - |\mathbf{v}_1|^2 + |\mathbf{v}_{n(t)}|^2}{1 + \alpha} \frac{1}{2T}. \quad (4.34)$$

Dans cette approximation, la différence entre ce terme et le premier terme de (4.33) est du même ordre qu'un seul des termes successifs, dus aux corrections de Sonine. Cette observation explique l'absence de queues exponentielles dans la pdf de \overline{W} .

L'influence des termes de bord ne se fait pas seulement sentir au niveau numérique, mais aussi sur un plan théorique. Même avec une précision numérique infinie, les queues exponentielles de W seraient toujours présentes, ce qui serait dû essentiellement à la

présence de singularités [54, 55, 113, 18].

La compréhension des mécanismes associés motive l'étude d'un modèle simple et exactement soluble, qui fait l'objet de la section suivante.

4.3 Un exemple exactement soluble : le cas d'une particule brownienne entre deux thermostats

Afin d'illustrer plus précisément le rôle des singularités dans la détermination d'une fonction de grandes déviations et dans les restrictions à la Relation de Fluctuation, on utilisera un modèle simple, initialement introduit par Derrida et Brunet à des fins pédagogiques [42].

On considère une particule en contact avec deux bains thermiques, à des températures différentes T_1 et T_2 . La vitesse $v(t)$ de la particule évolue suivant l'équation de Langevin suivante :

$$m\dot{v} = -(\gamma_1 + \gamma_2)v + \xi_1(t) + \xi_2(t) , \quad (4.35)$$

avec $\langle \xi_i \rangle = 0$ et

$$\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = 2\gamma_i T_i \delta_{ij} \delta(t - t') = 2D_i \delta_{ij} \delta(t - t') , \quad (4.36)$$

où la constante de Boltzmann est considérée égale à 1. Une telle équation décrit la dynamique de systèmes en apparence très différents. Par exemple, la dynamique d'une tige dont les extrémités sont au contact de bains thermiques différents (ce qui représente une variation du modèle introduit par Van den Broeck *et al.* [41]), comme illustré dans la figure 4.4. De même, un autre modèle, constitué de deux particules browniennes sur-amorties, reliées par un ressort (*Brownian transducers* [69, 112]), est décrit par la même équation différentielle. Enfin des analogies en termes de circuits électriques, dans le même esprit que [36], peuvent donner lieu à d'autres modèles, également décrits par cette même équation de Langevin.

En toute rigueur, la dynamique de la particule est une dynamique d'équilibre. En effet, dans l'équation (4.35), la somme des bruits gaussiens est à nouveau un bruit gaussien, de variance $D = D_1 + D_2$ et de viscosité $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$. La pdf de la vitesse de la particule est donc une gaussienne de variance $T_0 = D/\gamma$. Cependant, pour notre propos, il est utile de distinguer les deux thermostats, afin de s'intéresser au flux de chaleur qui s'écoule d'un thermostat (par exemple le thermostat 1), vers la particule, en un temps t . Cette quantité est exactement le travail total fourni par le thermostat, qui s'écrit :

$$Q_i = \int_0^t d\tau v(\tau) F_i , \quad \text{avec} \quad F_i = \xi_i(\tau) - \gamma_i v(\tau) , \quad (4.37)$$

où $i = 1, 2$. La pdf de la puissance injectée $P(Q_1, t)$ est l'objet central de notre étude, ainsi que sa fonction de grandes déviations, qui s'écrit :

$$\pi(q) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln P(qt, t) , \quad (4.38)$$

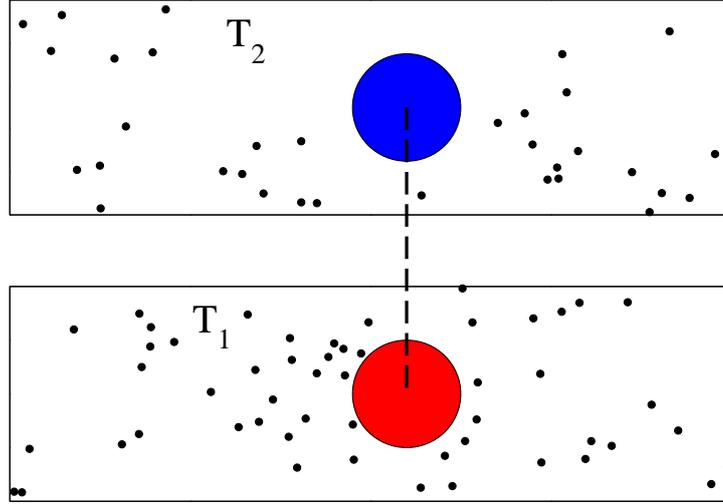


FIG. 4.4: Schéma du modèle, inspiré par [41], décrit par l'équation de Langevin 4.35. Les deux particules sont contraintes à se déplacer le long de l'axe horizontal, et elles sont en contact avec des bains à températures différentes.

où $q = Q_1/t$ est le flux moyenné sur un temps t . En particulier, on s'intéressera à la vérification de la FR :

$$\pi(q) - \pi(-q) = \epsilon q, \quad (4.39)$$

où $\epsilon = \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}$ joue le rôle d'un champ extérieur, qui pilote le flux de chaleur. Dans la suite, on va également s'intéresser à la relation de fluctuation limitée à un intervalle fini (c'est-à-dire pour $|q| < q^*$, où q^* est une constante qui dépend du système), en analogie avec la phénoménologie des systèmes déterministes [61, 18]. On désignera cette dernière relation comme Relation de Fluctuation Étendue (EFR), en empruntant le vocabulaire de Van Zon et Cohen [113]. D'une manière générale, la Relation de Fluctuation est supposée être vérifiée par le flux d'entropie $\mathcal{S} = Q_1/T_1 + Q_2/T_2$, qui ne diffère de ϵQ_1 que par un terme de bords. Par conséquent, en suivant [18], Q_1 au moins, devrait vérifier une Relation de Fluctuation Étendue.

On va maintenant s'intéresser directement à $P(Q_1, t)$ et à sa fonction de grandes déviations. Les techniques utilisées sont proches de celles employées dans la section 3.2. On introduit d'abord la probabilité jointe $\rho(v, Q_1, t)$, que la particule ait une vitesse v et une valeur Q_1 au temps t . La pdf $P(Q_1, t)$ s'obtient ainsi par intégration sur la vitesse. On définit également la transformée de Laplace :

$$\hat{\rho}(v, \lambda, t) = \int dQ_1 e^{-\lambda Q_1} \rho(v, Q_1, t), \quad (4.40)$$

qui vérifie :

- $\hat{\rho}(v, 0, t) = f(v, t)$, où $f(v, t)$ est la pdf de la vitesse de la particule brownienne.
- $\hat{P}(\lambda, t) = \int dv \hat{\rho}(v, \lambda, t)$, où $\hat{P}(\lambda, t)$ est la transformée de Laplace de $P(Q_1, t)$.

La fonction $\hat{\rho}(v, \lambda, t)$ vérifie l'équation de Fokker–Planck :

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(v, \lambda, t) = L_\lambda \hat{\rho}(v, \lambda, t) , \quad (4.41)$$

où²

$$L_\lambda = D \frac{\partial^2}{\partial v^2} + (\gamma + 2\lambda D_1) \frac{\partial}{\partial v} v + (D_1 \lambda^2 + \gamma_1 \lambda) v^2 - D_1 \lambda . \quad (4.42)$$

Afin d'obtenir une solution de l'équation ci-dessus, on remarque d'abord que l'équation aux valeurs propres :

$$L_\lambda f_n(v, \lambda) = \mu_n(\lambda) f_n(v, \lambda) \quad (4.43)$$

est résolue par :

$$\mu_n(\lambda) = \frac{\gamma}{2} (1 - (1 + 2n)\eta) , \quad (4.44)$$

$$f_n(v, \lambda) = \frac{e^{-\frac{v^2}{2T(\lambda)}}}{\sqrt{2\pi T(\lambda)}} H_n \left(\frac{v}{\sqrt{2T^*(\lambda)}} \right) / \sqrt{2^n n!} , \quad (4.45)$$

où :

$$\eta = \sqrt{1 + \frac{4\lambda}{\gamma^2} (\gamma_2 D_1 - \gamma_1 D_2 - \lambda D_1 D_2)} , \quad (4.46)$$

$$T(\lambda) = \frac{2D}{\gamma(1 + \eta) + 2\lambda D_1} , \quad T^*(\lambda) = T_0 / \eta , \quad (4.47)$$

et $H_n(x)$ représente le polynôme d'Hermite d'ordre n [1]. On peut remarquer que tout le spectre vérifie la symétrie :

$$\mu_n(\lambda) = \mu_n(\epsilon - \lambda) , \quad (4.48)$$

ce qui est réminiscent de la “conjugate pairing rule” [45]. Si $\pi(q)$ était exactement la transformée de Legendre de la plus grande valeur propre $\mu_0(\lambda)$, alors cette dernière relation aurait impliqué que $\pi(q)$ vérifie la FR [82]. La solution de l'équation (4.41), pour une condition initiale donnée, s'écrit :

$$\hat{\rho}(v, \lambda, t|v_0) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{\mu_n(\lambda)t} C_n(\lambda|v_0) f_n(v, \lambda) , \quad (4.49)$$

où $C_n(\lambda|v_0)$ est la projection de la n -ème fonction propre sur l'état initial, qui a été ici choisi comme étant une distribution de Dirac centrée en $v = v_0$.

Afin de simplifier les notations, on va poser toutes les échelles égales à 1 (i.e. $\gamma = D = T_0 = 1$), et on introduit :

$$\tilde{\gamma}_1 = \frac{\gamma_1}{\gamma} = \frac{1 + \Delta\gamma}{2} , \quad \tilde{\gamma}_2 = \frac{\gamma_2}{\gamma} = \frac{1 - \Delta\gamma}{2} , \quad (4.50)$$

²L'expression de cet opérateur se trouve de manière analogue à celle présentée en 3.2.2

4 Fonctionnelle d'action et singularités

$$\tilde{D}_1 = \frac{D_1}{D} = \frac{1 + \Delta D}{2}, \quad \tilde{D}_2 = \frac{D_2}{D} = \frac{1 - \Delta D}{2}, \quad (4.51)$$

où $\Delta\gamma$ et ΔD prennent des valeurs entre -1 et 1 . Donc, quand $T_1 = T_2$, on a $\Delta\gamma = \Delta D$. En intégrant $\hat{\rho}$ sur la vitesse, on obtient une expression de $\hat{P}(\lambda, t)$ pour une vitesse initiale v_0 donnée :

$$\begin{aligned} \hat{P}(\lambda, t|v_0) = e^{\frac{t}{2}} & \left(\cosh(\eta t) + (\lambda(1 + \Delta D) + 1) \frac{\sinh(\eta t)}{\eta} \right)^{-\frac{1}{2}} \\ & \times \exp \left(\frac{v_0^2}{2} \left(\frac{\lambda(1 + \Delta\gamma + (1 + \Delta D)\lambda)}{1 + \lambda(1 + \Delta D) + \eta \coth(\eta t)} \right) \right). \end{aligned} \quad (4.52)$$

Le comportement à grand temps de $\hat{P}(\lambda, t)$ est clairement dominé par $\hat{P}(\lambda, t) \sim e^{\mu_0(\lambda)t}$, où $\mu_0(\lambda)$ est la plus grande valeur propre de l'opérateur d'évolution L_λ . Ce résultat avait déjà été trouvé dans la référence [42]. L'expression de μ_0 présente deux coupures sur l'axe réel, pour $\lambda > \lambda_+$ et $\lambda < \lambda_-$, avec :

$$\lambda_{\pm} = \frac{\Delta D - \Delta\gamma}{1 - \Delta D^2} \pm \sqrt{\frac{1 - 2\Delta D\Delta\gamma + \Delta\gamma^2}{(1 - \Delta D^2)^2}}. \quad (4.53)$$

Cependant, il est possible de voir que le préfacteur sous-dominant qui apparaît dans l'expression (4.52) présente une coupure supplémentaire, pour $\lambda < \lambda_-^*$, où, dans la limite de temps infini :

$$\lambda_-^* = -\frac{1 + \Delta\gamma}{1 + \Delta D}. \quad (4.54)$$

Ces coupures n'existent que pour $\Delta\gamma > 0$, et impliquent que la queue droite de la fonction de grandes déviations $\pi(q)$ décroît linéairement, avec une pente différente de la pente que l'on aurait eu si $\pi(q)$ avait été déterminée par la transformation de Legendre de $\mu_0(\lambda)$. C'est précisément la présence de cette coupure que peut être à l'origine des phénomènes décrits dans la section précédente.

Cette coupure supplémentaire peut se comprendre qualitativement en considérant le bilan d'énergie du système, exprimé par l'équation :

$$\Delta E(t) = E(t) - E(0) = Q_1 + Q_2, \quad (4.55)$$

où Q_2 représente le travail effectué par le thermostat à la température T_2 sur la particule, et est défini par l'équation (4.37). Intuitivement on pourrait penser que pour un temps grand le terme de bord ΔE devient négligeable, et que donc Q_1 et Q_2 ont la même fonction de grandes déviations. Cependant, dans plusieurs exemples [55, 56, 113, 100, 18], on a remarqué que ce terme peut jouer un rôle, même à temps infini, lorsque la distribution du terme de bord, à savoir ΔE , présente des queues exponentielles. Dans de tels cas, Q_1 et Q_2 n'auraient pas systématiquement la même fonction de grandes déviations. Ici la distribution de l'énergie est clairement exponentielle. De plus, à condition initiale v_0 fixée, seule la queue positive de la distribution de ΔE sera exponentielle. C'est précisément cette queue qui va affecter l'expression de la fonction de grandes déviations de Q_1 , par

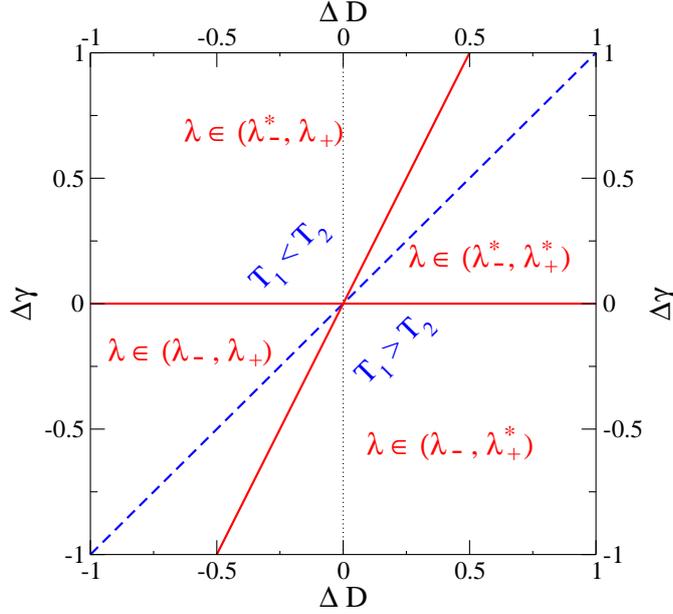


FIG. 4.5: Diagramme qui schématise l'apparition des coupures supplémentaires en $\lambda = \lambda_{\pm}^*$. Les lignes en trait plein séparent les régions de l'espace des paramètres pour lesquelles $\hat{P}(\lambda)$ a différents domaines de définition sur l'axe réel. La ligne en tirets montre la valeur des paramètres pour lesquels $T_1 = T_2$.

la présence de la coupure supplémentaire (qui apparaît dans un terme sous-dominant en temps). D'autre part, si la condition initiale est échantillonnée sur l'état stationnaire, la distribution de ΔE est symétrique, et les deux queues seront exponentielles. De ce fait, une coupure supplémentaire est susceptible d'apparaître. L'effet de cette coupure supplémentaire affecterait la queue négative de la fonction de grandes déviations.

Lorsque la condition initiale v_0 est échantillonnée dans l'état d'équilibre, on trouve :

$$\hat{P}(\lambda) = \int dv_0 e^{-\frac{v_0^2}{2}} \hat{P}(\lambda|v_0) = e^{\frac{t}{2}} \times \left(\cosh(\eta t) + \frac{\sinh(\eta t)}{\eta} (1 - \lambda(\Delta\gamma + \Delta D(\lambda - 1) + \lambda)) \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.56)$$

Dans la limite de temps infini, cette expression présente toujours une coupure pour $\lambda < \lambda_-^*$, quand $\Delta\gamma > 0$. De plus, une nouvelle coupure apparaît pour $\Delta D > \Delta\gamma/2$ et pour $\lambda > \lambda_+^*$, où :

$$\lambda_+^* = \frac{1 + 2\Delta D - \Delta\gamma}{1 + \Delta D}. \quad (4.57)$$

Ces coupures sont schématisées dans un diagramme dans la figure 4.5. La transformée de Laplace (4.56) peut être inversée en utilisant la transformation de Legendre seulement dans la région où :

$$\max(\lambda_-, \lambda_-^*) < \lambda < \min(\lambda_+, \lambda_+^*). \quad (4.58)$$

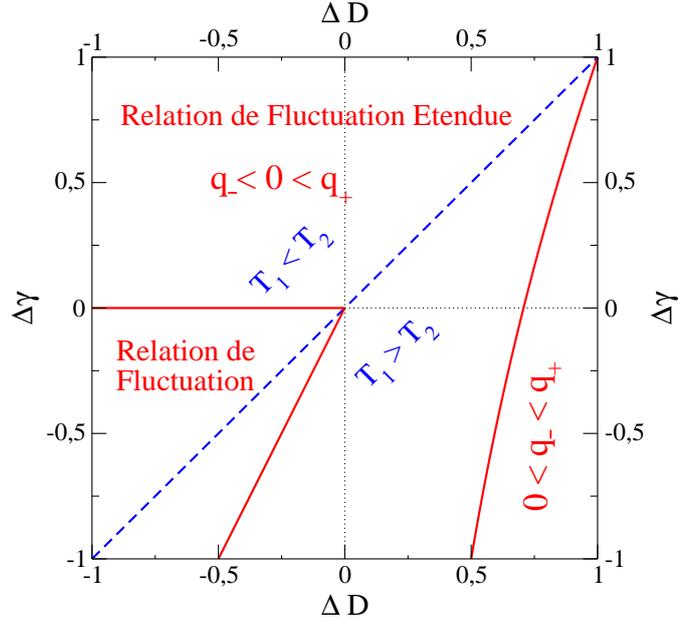


FIG. 4.6: Diagramme schématisant les domaines de validité de la Relation de Fluctuation et de la Relation de Fluctuation Étendue.

Pour ces valeurs de λ , on obtient, après transformation de Legendre :

$$\pi_c(q) = -\frac{1 - \Delta D^2 + 2q(\Delta\gamma - \Delta D) + \sqrt{(1 + \Delta\gamma^2 - 2\Delta\gamma\Delta D)(1 + 4q^2 - \Delta D^2)}}{2(1 - \Delta D^2)}. \quad (4.59)$$

Dans les cas où les coupures de $\hat{P}(\lambda)$ sont données par λ_+ et λ_- , alors l'expression ci-dessus est correcte pour toute valeur de q , et la EFR est vérifiée. Cependant, si la coupure droite (resp. gauche) est déterminée par λ_-^* (resp. λ_+^*), La transformée de Legendre de $\mu_0(\lambda)$ n'est correcte que pour $q < q_+ = \mu'_0(\lambda_-^*)$ (resp. $q > q_- = \mu'_0(\lambda_+^*)$). Dans ces cas, l'expression de $\pi(q)$ à l'extérieur de l'intervalle (q_-, q_+) est une droite : $\pi(q) = \alpha + \beta q$. Les coefficients α et β peuvent être déterminés en utilisant la condition de continuité de $\pi(q)$ et de sa dérivée première (cette condition, qui rappelle que la phénoménologie observée est analogue à une transition de phase du deuxième ordre, est suggérée par la référence [55], qui est un cas particulier de ce modèle). Par exemple, dans la région où $\Delta\gamma > 0$ et $\Delta D > \Delta\gamma/2$, on a :

$$\pi(q) = \begin{cases} \pi_l(q) & q < q_- \\ \pi_c(q) & q_- < q < q_+ \\ \pi_r(q) & q > q_+ \end{cases}, \quad (4.60)$$

avec :

$$q_- = \frac{\Delta D}{2} - \frac{1}{2(2\Delta D - \Delta\gamma)}, \quad q_+ = \frac{1}{2\Delta\gamma} - \frac{\Delta D}{2}, \quad (4.61)$$

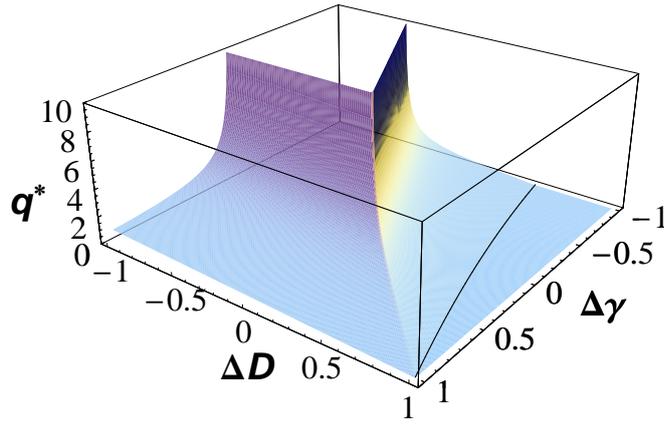


FIG. 4.7: Graphe tridimensionnel de q^* en fonction des paramètres du système. Dans la région où $q^* = \infty$ la Relation de Fluctuation est vérifiée. La Relation de Fluctuation Étendue est vérifiée partout ailleurs, sauf dans la région démarquée par une ligne en trait plein, à l'intérieur de laquelle $q^* = 0$, et la Relation de Fluctuation Étendue cesse d'être valable.

$$\pi_l(q) = -\frac{(1 + 2\Delta D - \Delta\gamma)(1 + \Delta D - 2q)}{2(1 + \Delta D)}, \quad (4.62)$$

$$\pi_r(q) = -\frac{(1 + \Delta\gamma)(1 + \Delta D + 2q)}{2(1 + \Delta D)}. \quad (4.63)$$

Le comportement de $\pi(q)$ dans les autres régions peut s'obtenir de manière similaire. Si une coupure apparaît en λ_-^* , alors pour $q > q_+$ la fonction $\pi(q)$ est donnée par $\pi_r(q)$. De manière analogue, si une coupure supplémentaire apparaît en λ_+^* , alors, pour $q < q_-$, on a $\pi(q) = \pi_l(q)$. La **FR** est satisfaite exclusivement lorsque $\pi = \pi_c(q)$. En revanche, la **EFR** est satisfaite dans tous les cas où $q_- < 0 < q_+$ (cf. le diagramme de la figure 4.6). Dans ce cas, la borne q^* est le minimum de $|q_-|$ et $|q_+|$, et elle est tracée dans la figure 4.7.

Il y existe également une région dans l'espace des paramètres (quand $\Delta\gamma < 2\Delta D - 1/\Delta D$) où $0 < q_- < q_+$. Dans ce cas $q^* = 0$, et ni la **FR** ni la **EFR** ne sont vérifiées. En particulier, on trouve que pour q petit :

$$\pi(q) - \pi(-q) = \pi_l(q) - \pi_l(-q) = \zeta q, \quad |q| < q_-, \quad (4.64)$$

où $\zeta = 4/T_0 - 2/T_1$ (une illustration est donnée par la figure 4.8).

On va maintenant exposer une dernière remarque, à propos de l'importance de l'échantillonnage des conditions initiales. Lorsque les deux températures T_1 et T_2 sont identiques, il est clair que le flux moyen $\langle Q_1 \rangle$ est nul, et que $\pi(q) = \pi(-q)$ (i.e. les fluctuations de Q sont symétriques). En revanche, si la fonction de grandes déviations $\pi(q|v_0)$ est mesurée avec une condition initiale v_0 fixée, on aurait $\pi(q|v_0) \neq \pi(-q|v_0)$, à cause de la coupure supplémentaire. Ceci donnerait la (fausse) impression qu'un flux non nul traverse le

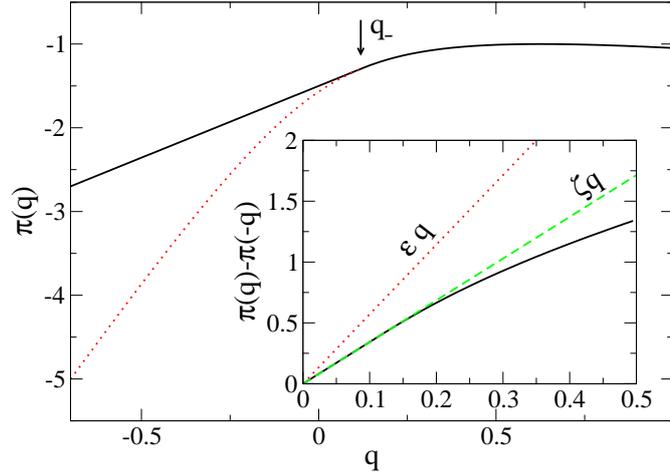


FIG. 4.8: Fonction de grandes déviations $\pi(q)$ pour $\Delta D = 0.75$ et $\Delta\gamma = -0.5$. La ligne en pointillés montre $\pi_C(q)$, qui vérifie la FR. Dans l'encadré on montre la fonction $\pi(q) - \pi(-q)$. La ligne en pointillés est une droite de pente ϵ , et la ligne en tirets est une droite de pente ζ .

système, même si les deux thermostats sont à la même température. Bien sûr, si $\pi(q)$ est mesuré en échantillonnant les conditions initiales dans l'état stationnaire, une nouvelle coupure apparaît. Cette coupure va précisément restaurer la symétrie $\pi(q) = \pi(-q)$. Ceci peut se comprendre par une remarque simple : la queue droite de $\pi(q|v_0)$ est dominée par les événements avec une condition finale “énergétique”, où l'énergie a des grandes fluctuations [55]. Si la condition initiale est fixée, d'éventuelles conditions initiales énergétiques sont interdites, ce qui conduit à l'apparition d'un flux non physique. En revanche, si les conditions initiales sont données par l'état stationnaire, la présence de conditions initiales énergétiques compenserait, en moyenne, les conditions finales correspondantes, en rétablissant ainsi la symétrie des flux.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre on a étudié plusieurs quantités susceptibles de représenter le flux d'entropie hors d'équilibre. L'identification d'une telle grandeur constituerait un progrès substantiel, et pourrait impliquer par exemple l'existence d'un principe de production d'entropie extremum. De plus, cette quantité pourrait vérifier la Relation de Fluctuation, ainsi que toutes les propriétés (relations de Green-Kubo, relations d'Onsager) qui en découlent.

Une première étape s'est concrétisée par l'étude de la fonctionnelle H . D'une part, le théorème H , ainsi que les premiers pas de la physique statistique hors d'équilibre, ont pris corps dans le cadre de la théorie cinétique des gaz. D'autre part, tous les outils de cette théorie ont trouvé une application quasi-systématique dans la description des gaz granulaires. Une telle étape semble donc nécessaire, afin de vérifier si, en partant de la

fonctionnelle H , une identification du flux d'entropie s'avère possible. Nous avons dû répondre par la négative.

Une deuxième approche s'est appuyée sur les propriétés des fonctionnelles d'action, pour des processus markoviens. Il s'agit d'une fonctionnelle bien précise, qui n'est malheureusement pas définie pour les systèmes microscopiquement irréversibles. Avec un *coarse graining* simple, tout de même, on arrive à contourner ce problème, en s'intéressant à l'évolution d'une particule marquée : le traceur. En adoptant ce point de vue lagrangien, les fonctionnelles d'action introduites par Lebowitz et Spohn [82] sont bien définies. Pourtant, leur signification physique directe reste mystérieuse, et significativement éloignée des quantités qui, habituellement, jouent le rôle de flux d'entropie. On peut mesurer ces quantités lors d'expériences numériques, et essayer de vérifier la FR, dont la validité devrait être garantie. On trouve cependant que des restrictions à cette relation apparaissent. Ceci est dû à la présence d'un terme de bord qui, *a priori* négligeable, se révèle crucial. Cette violation de la FR semble, en l'absence d'arguments analytiques solides, impossible à confirmer d'une manière définitive par un résultat empirique.

Afin d'apporter une réponse sans équivoque, on s'est intéressé à un modèle simplifié : une particule brownienne en contact avec deux bains thermiques. Dans le cadre de ce modèle, la fonction de grandes déviations du flux d'entropie peut être calculée exactement, et on montre qu'en raison de possibles conditions initiales ou finales trop énergétiques, la Relation de Fluctuation n'est pas vérifiée.

4 Fonctionnelle d'action et singularités

5

Conclusion générale et perspectives

Dans cette thèse, on s'est intéressé à une classe de systèmes pour lesquels il n'existe quasiment aucun résultat général : les systèmes microscopiquement irréversibles, qui ne conservent pas l'énergie, et brisent ainsi la symétrie par renversement du temps. Parmi ces systèmes les gaz granulaires sont un exemple simple, dont l'intérêt est multiple. D'une part, il s'agit de systèmes simples à réaliser expérimentalement. D'autre part, une description analytique permet d'utiliser et d'élargir les nombreux outils développés auparavant, dans le cadre de la théorie cinétique. L'application de la théorie cinétique à une description des gaz granulaires s'est révélée fructueuse, et a permis la compréhension d'un certain nombre de phénomènes nouveaux.

Dans cette thèse, on a porté une attention particulière à l'étude de quantités susceptibles d'avoir un lien étroit avec le flux d'entropie hors d'équilibre. Une telle quantité n'a pas de définition précise pour les systèmes hors d'équilibre. Son identification serait donc importante, afin d'établir une description des systèmes hors d'équilibre en des termes analogues à la description féconde mise en place pour les systèmes à l'équilibre. Une propriété récemment découverte, dont jouit le flux d'entropie, est la Relation de Fluctuation. Cette relation, valide pour des systèmes chaotiques et stochastiques, avec une dynamique réversible, n'a pas encore d'équivalent pour les systèmes irréversibles. Elle constitue donc une bonne pierre de touche, en tant que propriété susceptible d'être vérifiée par le flux d'entropie.

Dans une première étape, on s'est intéressé à la distribution de puissance injectée, qui heuristiquement pourrait s'interpréter en tant qu'entropie phénoménologique. En ce qui concerne l'interprétation des résultats expérimentaux de Feitosa et Menon [58], un modèle phénoménologique est capable de montrer de manière convaincante que, malgré les apparences, la puissance injectée ne vérifie pas la Relation de Fluctuation. Dans un modèle similaire, une approche microscopique peut être développée, et menée à terme. Pour ce faire, un formalisme en termes d'opérateurs d'évolution est mis en place, et

5 Conclusion générale et perspectives

adapté avec succès à la théorie cinétique. L'aboutissement d'une telle approche est un résultat explicite pour la fonction de grandes déviations de la puissance injectée. Ce résultat, qui confirme que la Relation de Fluctuation n'est pas vérifiée, garde tout de même un intérêt important, en s'inscrivant dans l'ensemble très varié des distributions de quantités globales. On arrive également à éclaircir le lien entre injection et dissipation d'énergie, en montrant que la distribution de ces deux quantités est la même.

Une autre étape naturelle dans la recherche d'une identification du flux d'entropie, est l'étude de la fonctionnelle H . Dans ce cas, on évoque plusieurs possibilités qui permettent une identification (arbitraire mais physiquement motivée) du flux d'entropie. En essayant d'utiliser cette quantité comme étant à l'origine d'un principe variationnel, de la même manière qu'en thermodynamique phénoménologique, il apparaît qu'une telle approche ne permet pas une identification claire du flux d'entropie.

Enfin, on s'est intéressé à la définition de flux d'entropie proposée par Lebowitz et Spohn dans le cadre des processus de Markov. Cette quantité n'est pas définie dans le cas des gaz granulaires, à cause de l'irréversibilité microscopique. Cependant, on peut détourner ce problème en s'intéressant à la dynamique d'un traceur, évoluant dans un bain hors d'équilibre. On arrive alors à déterminer le flux d'entropie, et à le mesurer dans des simulations numériques. On s'aperçoit pourtant que cette quantité ne vérifie pas tout à fait la Relation de Fluctuation. On soupçonne, à l'origine de cet échec, la présence d'un terme de bord temporel qui, en apparence négligeable, joue un rôle important. Afin d'éclaircir l'importance d'un tel terme, on s'est intéressé à un modèle simple de particule brownienne couplée à deux thermostats. Ce modèle permet une solution analytique du problème, et met en lumière les conséquences du terme de bord, qui apparaissent sous la forme de singularités et de coupures dans le plan complexe.

L'ensemble de ces résultats permet de comprendre les difficultés que l'on rencontre lorsqu'on essaye de définir une entropie pour des systèmes irréversibles.

Dans des modèles exactement solubles, comme le modèle simple introduit en 4.3, ou comme des modèles de gaz sur réseau entre deux réservoirs [43], on voit clairement que, lorsque l'une des températures (ou un des potentiels chimiques) s'annule, la distribution du flux microscopique n'a pas de partie négative, exactement comme la distribution de puissance injectée dans un gaz granulaire. Ceci est cohérent avec le fait que, dans de tels cas, le "champ" $\epsilon \equiv 1/T_2 - 1/T_1$ diverge, et la Relation de Fluctuation n'est plus vérifiée. Tout ceci suggère que finalement les systèmes microscopiquement irréversibles ont des propriétés qui semblent comparables aux propriétés de systèmes en contact avec un thermostat à température nulle. De plus, le flux d'entropie permet en quelque sorte de quantifier la "flèche du temps". Ceci est particulièrement manifeste dans l'expression de la fonctionnelle d'action, qui compare explicitement la probabilité d'une trajectoire donnée dans l'espace des phases, à la probabilité de la même trajectoire renversée dans le temps. Or, dans les modèles de gaz granulaires, la direction de la flèche du temps est déjà inscrite dans les équations du mouvement. Un modèle de gaz granulaire où ce problème n'apparaît pas, est le modèle où le coefficient de restitution α n'est plus une constante mais une variable aléatoire [7]. Dans ce cas, si la distribution de α permet des valeurs de $\alpha > 1$, la dynamique (stochastique) du système va être (microscopiquement) réversible, et des quantités comme la fonctionnelle d'action auront un sens. On pour-

rait alors penser à s'intéresser à l'expression de la fonctionnelle d'action, et à son lien éventuel avec, par exemple, l'énergie échangée par les particules lors des collisions. De plus, un tel modèle permettrait d'étudier la limite où le système devient microscopiquement irréversible (en particulier, la limite où la distribution du coefficient de restitution tend vers une distribution de Dirac, centrée sur une constante entre 0 et 1). Dans ce cas, on pourrait essayer de trouver un moyen (par exemple un changement d'échelle) qui permet d'éliminer la divergence de l'entropie.

D'autres perspectives envisageables concernent le développement de l'étude de grandes déviations temporelles. Indépendamment des liens éventuels avec la Relation de Fluctuation, les fonctions de grandes déviations semblent être un bon outil pour comprendre la phénoménologie des systèmes hors d'équilibre. Dans cette direction, le développement d'algorithmes qui permettent de mesurer des fonctions de grandes déviations est essentiel. On a vu dans la section 3.2.2 que l'opérateur qui gouverne l'équation d'évolution de la transformée de Laplace de la probabilité de la puissance injectée peut s'interpréter comme un opérateur qui décrit une dynamique modifiée. En simulant cette dynamique modifiée, il serait alors possible d'avoir accès numériquement à la fonction génératrice des cumulants d'une quantité intégrée pendant un temps infini. Ceci représenterait bien sûr un gain de temps significatif. On a effectué de telles simulations dans le cas d'une quantité légèrement plus simple que la puissance injectée : le nombre de collisions. Cette étude est présentée dans l'appendice C, et conduit au résultat *a priori* contre-intuitif que la statistique collisionnelle d'une particule marquée, dans un fluide de sphères dures à l'équilibre, n'est pas poissonnienne. Des algorithmes similaires, dans le même esprit, ont été développés pour les processus de Markov [66].

5 Conclusion générale et perspectives

A

Moments collisionnels

Dans cette appendice on donnera l'expression des premiers moments collisionnels pour le gaz de sphères dures inélastiques, et pour les molécules de Maxwell inélastiques.

A.1 Sphères dures inélastiques

Dans le cas du gaz de sphères dures inélastiques, les moments collisionnels sont donnés par :

$$\nu_p = - \int d\mathbf{v}_1 v_1^p J[f|f] = \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\boldsymbol{\sigma}} v_1^p (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \left[\frac{1}{\alpha^2} f(\mathbf{v}_1^{**}) f(\mathbf{v}_2^{**}) - f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2) \right]. \quad (\text{A.1})$$

Dans l'approximation de Sonine, on a

$$f(\mathbf{v}) = \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right) \left(1 + a_2 S_2\left(\frac{v^2}{2T}\right)\right). \quad (\text{A.2})$$

Dans ce cas, l'expression des premiers moments collisionnels est donnée par [108] :

$$\nu_2 = (1 - \alpha^2) \frac{\Omega_d}{\ell \sqrt{\pi}} T^{3/2} \left\{1 + \frac{3}{16} a_2\right\}, \quad (\text{A.3})$$

$$\nu_4 = 2(1 - \alpha^2) \frac{\Omega_d}{\ell \sqrt{\pi}} T^{5/2} \{T_1 + a_2 T_2\}, \quad (\text{A.4})$$

avec

$$T_1 = d + \frac{3}{2} + \alpha^2 \quad (\text{A.5})$$

$$T_2 = \frac{3}{32} (10d + 39 + 10\alpha^2) + \frac{(d-1)}{(1-\alpha)}. \quad (\text{A.6})$$

A.2 Molécules de Maxwell inélastiques

Dans le cas des molécules de Maxwell, les moments collisionnels sont donnés par :

$$\nu_p = -\omega_0 \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} v_1^p \left[\frac{1}{\alpha^2} f(\mathbf{v}_1^{**}) f(\mathbf{v}_2^{**}) - f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2) \right] . \quad (\text{A.7})$$

Dans l'approximation de Sonine, leur expression est [105] :

$$\nu_2 = \omega_0 T \frac{1 - \alpha^2}{4} , \quad (\text{A.8})$$

et

$$\nu_4 = \omega_0 T^2 \frac{1 - \alpha^2}{32} (T_1 + a_2 T_2) , \quad (\text{A.9})$$

avec :

$$T_1 = 2(5 + 3\alpha^2 + 4d) , \quad (\text{A.10})$$

$$T_2 = 3\alpha^2 - \frac{\alpha(17 + 4d) - 3(3 + 4d)}{1 - \alpha} . \quad (\text{A.11})$$

B

Stationary state of a heated granular gas : fate of the usual H -functional

On reporte dans cette appendice la publication [P5](#) dans son intégralité.



Stationary state of a heated granular gas: Fate of the usual H -functional

Ioana Bena^{a,*}, François Coppex^a, Michel Droz^a, Paolo Visco^{b,c},
Emmanuel Trizac^b, Frédéric van Wijland^d

^a*Department of Theoretical Physics, University of Geneva, CH-1211 Geneva 4, Switzerland*

^b*Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques, UMR CNRS 8626, Bâtiment 100,
Université Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex, France*

^c*Laboratoire de Physique Théorique, UMR CNRS 8627, Bâtiment 210, Université Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex, France*

^d*Laboratoire Matière et Systèmes Complexes, CNRS UMR 7057, Université Denis Diderot, 2 place Jussieu, 75251 Paris Cedex 05, France*

Received 24 February 2006

Available online 4 April 2006

Abstract

We consider the characterization of the nonequilibrium stationary state of a randomly driven granular gas in terms of an entropy-production-based variational formulation. Enforcing spatial homogeneity, we first consider the temporal stability of the stationary state reached after a transient. In connection, two heuristic albeit physically motivated candidates for the nonequilibrium entropy production are put forward. It turns out that none of them displays an extremum for the stationary velocity distribution selected by the dynamics. Finally, the relevance of the relative Kullback entropy is discussed.

© 2006 Elsevier B.V. All rights reserved.

Keywords: Granular gas; Entropy production; H -theorem; Nonequilibrium stationary state

1. Introduction

Apart from being the subject of intense experimental activity, granular gases are also a particularly fertile testing ground for new theoretical ideas and problems, especially within the field of nonequilibrium statistical physics. One such a problem is the role of entropy production as a Lyapunov functional for nonequilibrium steady states. This problem has its roots in the fifties, in the works of the Brussels group around Prigogine [1] on the minimum entropy production theorem. The limitations of this theorem, that relies essentially on the linear response formalism (i.e., has a domain of validity that is restricted to close-to-equilibrium situations), were rather clear already at that time, and a first extension to far-from-equilibrium situations was proposed under the form of the phenomenological “general evolution criterion” of Glansdorff and Prigogine (see Ref. [2] and references therein).

*Corresponding author. Tel.: +41 3796302; fax: +41 3796870.

E-mail address: Ioana.Bena@physics.unige.ch (I. Bena).

Since then, there was steady effort, and a huge body of literature, in the search for a variational principle for steady states that are arbitrarily far from equilibrium. Several candidates for a “nonequilibrium entropy production” with extremal properties at stationarity were proposed in different contexts, and at various levels of coarse-graining of the description—from the microscopic to the phenomenological ones. Some success was encountered for Markovian systems described by a master equation for the probability distribution function (pdf) of the microstates—starting with the pioneering work of Jiu-li et al. [3], and intensively studied afterwards (see, e.g., Refs. [4,5] to cite only a few). Also, a connection between the phase space contraction rate in dissipative, externally driven systems and an entropy production rate was established in some cases, see e.g., [6] for a critical discussion. An extension of Jaynes’ maximum entropy inference principle (MaxEnt) to nonequilibrium situations was proposed [7], and illustrated recently on several examples [8]. The resulting picture is, however, rather confusing and sometimes even contradictory (e.g., some of the above-mentioned papers speak of a “maximum” entropy production rate at stationarity, while others refer to a “minimum”).

One of the main difficulties of nonequilibrium statistical mechanics is the scarcity of solvable models, on the basis of which one could, eventually, get some clarification on these controversial points. The purpose of the present work is to consider such a solvable model, namely a granular gas modeled as an assembly of inelastic hard-spheres with *constant restitution coefficient*, in which energy is injected by means of random forces acting independently upon the particles. The balance between dissipation and the random kicks allows the system to reach a nonequilibrium steady state (NESS). In a Boltzmann equation description, one can compute (in some perturbative expansion) the single-particle pdf. This model is widely used and very successful in explaining many features of granular systems (see, e.g., Refs. [9–11]). One of the question is thus whether this model is also appropriate in describing *thermodynamical* properties of granular systems—in particular, the entropy production rate and its eventual relationship with the relaxation to NESS. We propose two heuristic—albeit physically motivated—candidates for the nonequilibrium entropy production rate, as functionals of the pdf, and we discuss their extremal properties in NESS. Such a granular gas has a strong “built-in” irreversible element at the very level of the grain dynamics, which is represented by the inelasticity of the collisions. However, one may ask whether in the limit of a very weak inelasticity (i.e., for steady states that are arbitrarily “close to equilibrium”) one could recover a kind of “minimum entropy production theorem” in a stochastic formulation—an equivalent of that described in Ref. [3]. We will also address this point here.

In the next section we are introducing the model, and in Section 3 we study the nonequilibrium steady state and its linear stability. Section 4 is devoted to the discussion of the nonequilibrium entropy production issue, and the behavior of the relative Kullback entropy. We conclude in Section 5 with a brief discussion of the limitations of this model as far as describing the thermodynamics.

2. The model

We consider a granular gas of inelastic hard spheres in dimension $d \geq 2$, uniformly heated by a stochastic thermostat, as described in detail in Refs. [9,10]. The particles undergo binary inelastic collisions, modeled through a *constant restitution coefficient* $\alpha \in [0, 1]$ that is meant to characterize the *degree of inelasticity*; the limit $\alpha = 1$ corresponds to perfect elastic collisions, while $\alpha = 0$ corresponds to the perfect inelastic ones. Each particle i (of mass m) is subjected to an external Gaussian white noise force $\xi_i(t)$; these forces are uncorrelated for different particles, and homogeneous in space,

$$\langle \xi_{i,\alpha}(t) \xi_{j,\beta}(t') \rangle = m^2 \xi_0^2 \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'), \quad \alpha, \beta = 1, \dots, d. \quad (1)$$

We describe the system at the level of the kinetic theory, and for simplicity, without affecting the overall conclusions, we shall concentrate on the *spatially homogeneous* case. For the single particle distribution function $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t) = f(\mathbf{v}_1, t)$, the Boltzmann equation reads then:

$$\partial_t f(\mathbf{v}_1, t) = \chi I[f, f] + \frac{\xi_0^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_1^2} f(\mathbf{v}_1, t). \quad (2)$$

The extra term $(\xi_0^2/2)(\partial^2/\partial \mathbf{v}_1^2)f(\mathbf{v}_1, t)$ accounts for the change in the distribution function caused by the random “kicks” the external thermostat is applying on the grains. It corresponds to an injection of energy at constant

rate $d\xi_0^2/2$ per unit mass. χ is the pair correlation function at contact and

$$I[f, f] = \sigma^{d-1} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) \left(\frac{1}{\alpha^2} b^{-1} - 1 \right) f(\mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{v}_2, t) \quad (3)$$

represents the inelastic two-particle collision operator. Here, σ is the diameter of the hard spheres; $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ is a unit vector joining the centers of the particles at contact; $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$; $\theta(\dots)$ is the Heaviside step-function; and b^{-1} is an operator that restitutes the pre-collisional velocities, i.e.,

$$b^{-1}\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1^{**} = \mathbf{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (4a)$$

$$b^{-1}\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_2^{**} = \mathbf{v}_2 + \frac{1 + \alpha}{2\alpha} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (4b)$$

Note that the post-collisional velocities are

$$b\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1^* = \mathbf{v}_1 - \frac{1 + \alpha}{2} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (5a)$$

$$b\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_2^* = \mathbf{v}_2 + \frac{1 + \alpha}{2} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (5b)$$

3. Scaling solution and stationary state

3.1. Scaling solution of Boltzmann's equation

It turns out to be convenient to introduce the pdf \tilde{f} of rescaled velocities $\mathbf{c} = \mathbf{v}/v_T$:

$$f(\mathbf{v}, t) = \frac{n}{v_T(t)^d} \tilde{f}(c, t), \quad (6)$$

where n is the number particle density and

$$v_T(t) = \sqrt{\frac{2k_B T(t)}{m}} \quad (7)$$

is the thermal velocity associated to the kinetic temperature of the particles,

$$\frac{d}{2} k_B T(t) = \frac{1}{n} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v} \frac{m}{2} v^2 f(\mathbf{v}, t) \quad (8)$$

(k_B is Boltzmann's constant).

For inelastic collisions, $\tilde{f}(c, t)$ is different from a Gaussian

$$\phi(c) = \frac{1}{\pi^{d/2}} e^{-c^2}, \quad (9)$$

and it is customary to characterize its deviation from a Gaussian through a series development in terms of Sonine polynomials $S_n(c^2)$, which, in practice, is truncated to the first non-zero term [11]

$$\tilde{f}(c, t) = \phi(c) [1 + a_2(t) S_2(c^2)], \quad (10)$$

where

$$S_2(c^2) = \frac{1}{2} c^4 - \frac{d+2}{2} c^2 + \frac{d(d+2)}{8}. \quad (11)$$

The possible explicit temporal dependence of $\tilde{f}(c, t)$ appears through the time-dependent coefficient $a_2(t)$ of the Sonine polynomial $S_2(c^2)$.

For consistency of the description, it is found that the kinetic temperature $T(t)$ and the coefficient $a_2(t)$ obey a set of two coupled nonlinear first-order differential equations:

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{m\xi_0^2}{k_B} - \sqrt{\frac{k_B}{\pi m}} \frac{n\chi\sigma^{d-1}(1-\alpha^2)S_d}{d} T^{3/2}(t) \left[1 + \frac{3}{16}a_2(t) + \frac{9}{1024}a_2^2(t) \right], \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{da_2(t)}{dt} + \frac{2m\xi_0^2}{k_B T(t)} a_2(t) + \sqrt{\frac{k_B T(t)}{\pi m}} \frac{4n\chi\sigma^{d-1}(1-\alpha^2)S_d}{d(d+2)} \left[1 + \frac{3}{16}a_2(t) + \frac{9}{1024}a_2^2(t) \right] \left[1 + \frac{d(d+2)}{8}a_2(t) \right] \\ = \sqrt{\frac{2k_B T(t)}{\pi m}} \frac{4n\chi\sigma^{d-1}S_d}{d(d+2)} \left[\frac{1-\alpha^2}{1+\alpha^2} + D_1 a_2(t) + D_2 a_2^2(t) \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

Here, $S_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ is the surface of the unit-radius sphere in dimension d , Γ being Euler's Gamma function. Eq. (12) follows from the definition (8) of the kinetic temperature, while Eq. (13) is obtained from the limit of vanishing velocities of the Boltzmann (2), see Ref. [12]. The coefficients D_1 and D_2 are given, respectively, by [12]

$$D_1 = \frac{1-2d-d^2}{8} + \frac{1}{8(1+\alpha^2)^3} [2(1+\alpha^2)^2(d^2-2d-5) + 4(d-1)(\alpha-1)^2(1+\alpha^2) + 8(\alpha^4+6\alpha^2+1)], \quad (14)$$

$$\begin{aligned} D_2 = \frac{d(d+2)}{64} + \frac{1}{32(1+\alpha^2)^5} [12\alpha^3(1+\alpha^2)(d-1)(d-2) - 4\alpha^2(1+\alpha^4)(24+4d-d^2) \\ + 4\alpha(1+\alpha^6)(d+6)(d-1) - (1+\alpha^8)(26+28d+9d^2)]. \end{aligned} \quad (15)$$

3.2. Stationary state

In the asymptotic limit, the granular system will reach a stationary state, that results from the balance between the energy injection by the external thermostat, and the energy dissipation through inelastic collisions between the particles. The stationary temperature T_0 is thus related both to the restitution coefficient α and to the amplitude ξ_0^2 of the Gaussian thermostat. Or, to state it differently, in order to ensure a given value of T_0 (for a fixed value of α), as resulting from the stationary form of Eq. (12), one has to tune the amplitude ξ_0^2 of the stochastic thermostat to

$$\xi_0^2 = \frac{n\chi\sigma^{d-1}(1-\alpha^2)S_d}{d\sqrt{\pi}} \left(\frac{k_B T_0}{m} \right)^{3/2} \left(1 + \frac{3}{16}a_{20} + \frac{9}{1024}a_{20}^2 \right). \quad (16)$$

Here, a_{20} is the stationary value of the coefficient of the first correction to the Gaussian. Its expression can be obtained from the stationary form of Eq. (13) and it is the solution of the third-order nonlinear equation (see, e.g., Ref. [11] for a discussion concerning the relevance of the corresponding three roots in the case of a force-free system):

$$\begin{aligned} (1-\alpha^2) \left(1 + \frac{3}{16}a_{20} + \frac{9}{1024}a_{20}^2 \right) \left[1 + a_{20} \frac{(d+2)(d+4)}{8} \right] \\ = \sqrt{2} \left(\frac{1-\alpha^2}{1+\alpha^2} + D_1 a_{20} + D_2 a_{20}^2 \right). \end{aligned} \quad (17)$$

The coefficient a_{20} can be obtained in a closed analytical form through a Taylor expansion of the above equation. It was however shown in previous works [12,10] that there are some ambiguities from this linearization procedure that may affect a_{20} . We therefore chose the linearizing scheme that yields the closest result to the Monte Carlo simulations of Ref. [12]:

$$\begin{aligned} a_{20} = -16(1-\alpha^2)(1+\alpha^2)(1-\sqrt{2}+\alpha^2)\{16\sqrt{2}+13+4d(3\sqrt{2}+1)+2d^2(\sqrt{2}-1) \\ + \alpha^2(-75+44d-2d^2) - \alpha^4[16\sqrt{2}-3+2d(d+6)(\sqrt{2}-1)] + \alpha^6(-5+4d+2d^2)\}^{-1}. \end{aligned} \quad (18)$$

Considering instead the expression derived by van Noije and Ernst [9] would not alter the following discussion. Note that a_{20} becomes zero in the elastic limit $\alpha = 1$, when the stationary probability distribution recovers trivially the Gaussian, equilibrium shape.

The corresponding stationary pdf is therefore

$$f_0(\mathbf{v}) = \frac{n}{v_{T_0}^d} \tilde{f}_0(c) = \frac{n}{v_{T_0}^d} \phi(c)[1 + a_{20}S_2(c^2)], \tag{19}$$

where $v_{T_0} = \sqrt{2k_B T_0/m}$ is the stationary value of the thermal velocity.

3.3. Linear stability analysis of the stationary state

The stability of the aforementioned steady state has not been investigated in the literature, even if the hydrodynamic-like equations have been derived recently for the (dilute) system considered here [13]. A complete linear stability analysis (and its eventual comparison with the existing results for the homogeneous cooling state [14]) is a tedious task, and a separate research subject that we shall not address here further. Instead, we shall consider a simplified version of it, in which the homogeneity of the state is not affected by the perturbations. This will by no mean influence our general conclusions.

Let us then consider small deviations of the temperature and of the coefficient a_2 from their stationary values,

$$T = T_0(1 + \delta\theta), \quad a_2 = a_{20} + \delta a_2, \tag{20}$$

with $|\delta\theta| \ll 1, |\delta a_2| \ll |a_{20}|$.

The linearized evolution equations of these perturbations result from Eqs. (12) and (13),

$$\frac{d}{dt}(\delta\theta) = -\frac{m\xi_0^2}{k_B T_0} \left[\frac{3}{2} \delta\theta + \frac{3/16 + (9/512)a_{20}}{1 + (3/16)a_{20} + (9/1024)a_{20}^2} \delta a_2 \right], \tag{21}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\delta a_2) = & -\frac{m\xi_0^2}{k_B T_0} \left\{ a_{20} \delta\theta + \left\{ \frac{d+4}{2} + \frac{4}{d+2} \left[\left(1 + a_{20} \frac{d(d+2)}{8} \right) \left(\frac{3}{16} + \frac{9}{512} a_{20} \right) \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. - \frac{\sqrt{2}}{1-\alpha^2} (D_1 + 2D_2 a_{20}) \right] \left(1 + \frac{3}{16} a_{20} + \frac{9}{1024} a_{20}^2 \right)^{-1} \right\} \delta a_2 \right\}. \end{aligned} \tag{22}$$

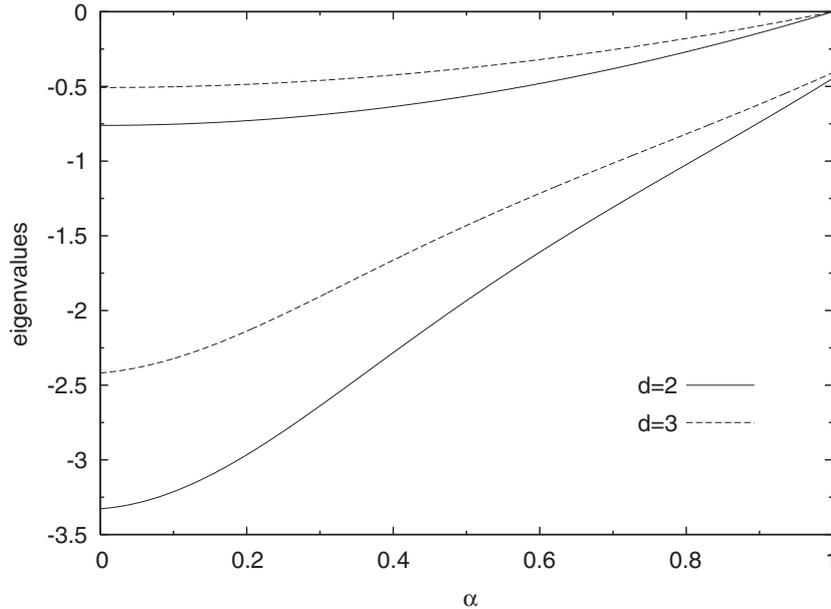


Fig. 1. The eigenvalues of the linear stability matrix for the stationary state as a function of α for $d = 2$ and 3 . The eigenvalues are measured in units $t_0^{-1} = n\sigma^{d-1}\chi S_d v_{T_0}/\sqrt{2\pi}$.

In Fig. 1, we have represented the two eigenvalues of the corresponding stability matrix as a function of the restitution coefficient α , for both $d = 2$ and 3 cases.

One notices that the two eigenvalues are strictly negative for $\alpha < 1$, which indicates the *stability* of the stationary state with respect to small perturbations in the temperature and in the shape of the pdf (in the scaling form). We emphasize again that spatial homogeneity has been enforced here. As expected, in the elastic limit $\alpha = 1$ one of the eigenvalues becomes zero (while the other one remains negative)—which corresponds to the temperature becoming a marginal mode, and to a relaxation of the distribution function to its equilibrium Gaussian shape.

4. Entropy production

We now turn to the issue of entropy. For our *homogeneous* system, we consider the Shannon information entropy

$$S(t) \equiv -k_B \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v}_1 f(\mathbf{v}_1, t) \ln \left(\frac{f(\mathbf{v}_1, t)}{eh^d} \right) \quad (23)$$

(with Euler's number e , Planck's constant h , and eh^d the volume of the semiclassical elementary phase-space cell). It is known that in the elastic limit $\alpha = 1$ (and in the absence of an external drive) this reduces to the appropriate expression of the usual thermodynamic entropy and leads to the classical “*H*-theorem”. We now consider the time evolution of $S(t)$ as governed by the Boltzmann equation (2), which reads

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} = & -k_B \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v}_1 \frac{\partial f(\mathbf{v}_1, t)}{\partial t} \ln \left(\frac{f(\mathbf{v}_1, t)}{eh^d} \right) = -\chi k_B \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v}_1 I[f, f] \ln \left(\frac{f(\mathbf{v}_1, t)}{eh^d} \right) \\ & - \frac{k_B \zeta_0^2}{2} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v}_1 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_1^2} f(\mathbf{v}_1, t) \ln \left(\frac{f(\mathbf{v}_1, t)}{eh^d} \right). \end{aligned} \quad (24)$$

As mentioned in the Introduction, we wish to introduce a heuristic—albeit physically motivated—entropy production functional that, hopefully, displays extremal properties in NESS. We shall propose two approaches. But before proceeding further, we would like to remind the reader the status of dS/dt within the framework of phenomenological thermodynamics as discussed in standard textbooks [15–17], as well as some of its extensions to stochastic systems [3–5]. Entropy variations are usually split into two parts:

$$\frac{dS}{dt} = \sigma_{\text{irr}} + \sigma_{\text{flux}}, \quad (25)$$

where $\sigma_{\text{irr}} \geq 0$ is the entropy production arising due to the dissipative processes that take place inside the system (that is positively defined according to the second principle of thermodynamics), while the entropy flux $\sigma_{\text{flux}} = -\int_V dV \nabla \cdot \mathbf{J}_S$ accounts for the external forces driving the system into a nonequilibrium state (the related contribution is often reduced to boundary terms). The “art” of phenomenological thermodynamics precisely bears on \mathbf{J}_S and on how to decompose it in terms of the energy, particle, momentum, chemical, etc., currents. This is done, usually, on the basis of the local equilibrium hypothesis. In a similar way, σ_{irr} often appears as a bilinear form in the fluxes running through the system and the conjugate affinities. In the near-to-equilibrium regime, the fluxes are usually proportional to the conjugated affinities, with the Onsager coefficients as proportionality factors, and one recovers Prigogine's minimum theorem for σ_{irr} under the hypothesis of time-reversibility of the underlying microscopic dynamics.

However, in view of the local character of the energy injection mechanism, as well as of the spatial homogeneity of the system, the situation is completely different in the case we are considering. Indeed, unlike the above-mentioned “conventional” NESS, there are neither macroscopic, however weak, currents running across the system, nor the related phenomenological Onsager response coefficients. Therefore, the separation into “source” and “flow” for the entropy variation is much more tricky.

First approach: A first proposed choice of the “entropy production” is

$$\sigma_{\text{irr}} = \frac{k_B \chi \sigma^{d-1}}{4} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12} (f_1^{**} f_2^{**} - f_1 f_2) \ln \left(\frac{f_1^{**} f_2^{**}}{f_1 f_2} \right) + \frac{\xi_0^2}{2} \int d\mathbf{v} \frac{(\nabla_{\mathbf{v}} f)^2}{f}, \quad (26)$$

the form of the first r.h.s. term being simply chosen by analogy with the elastic-limit case. The second term has been chosen by analogy with standard diffusion processes. In those processes this term vanishes at equilibrium because the gradients disappear. Note, however, that here the diffusion process happens in the velocity space, and thus the vanishing of this term at equilibrium is not due to the system becoming homogeneous in \mathbf{v} -space, but because of the energy source strength ξ_0^2 being tuned to 0. The above σ_{irr} appears to be the sum of two positive definite terms, and it is therefore also positive definite. Furthermore, σ_{irr} can only be zero *at equilibrium*, namely when both the energy source (the random kicks) and the energy sink (the dissipative collisions) are tuned to zero. In that respect, it fulfills the properties expected from standard phenomenological thermodynamics.

On the other hand, the form of the entropy flux σ_{flux} is now constrained to be

$$\sigma_{\text{flux}} = \frac{k_B \chi \sigma^{d-1}}{4} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12} f_1 f_2 \ln \left[\frac{(f_1^{**} f_2^{**})(f_1 f_2)^{1-\alpha^2}}{(f_1^* f_2^*)^{2-\alpha^2}} \right], \quad (27)$$

where we have used the shorthand notations $f_{1,2} = f(\mathbf{v}_{1,2}, t)$, respectively $f_{1,2}^{**} = f(\mathbf{v}_{1,2}^{**}, t)$ for the distribution functions corresponding to the pre-collisional velocities (4). The above functional of f is negative for a large class of trial functions, and must definitely assume a negative value $\sigma_{\text{flux}} \sim -((1 - \alpha^2)/\ell) T_0^{1/2}$ in the steady state ($\ell \sim 1/\chi \sigma^{d-1}$ is the mean free path). However, aside from conveying the shrinking of phase space volumes, we must dismiss both σ_{irr} and σ_{flux} as relevant candidates for an extremum-entropy functional. Indeed, in the spirit of phenomenological thermodynamics, the splitting of dS/dt into σ_{irr} and σ_{flux} is motivated by the desire to isolate the driving processes (the source and sink referred to above) from the irreversible processes inside the system. However, there is no simple and univoque manner to do so, and definitely this first choice is not accomplishing this physically motivated requirement. It must be noted that the last term of Eq. (26) could have also chosen as a part of σ_{flux} , which would then have featured both the source and the sink, at the price of abandoning its negative definiteness.

Second approach: We now propose an alternative and perhaps more pragmatic route, which consists in isolating as the only driving mechanism the random kicks provided by the thermostat. The inelastic collisions, viewed above as an energy sink, are now incorporated into a term describing the system’s intrinsic dissipative microscopic dynamics. Along these lines we henceforth write that

$$\frac{dS}{dt} = \sigma_{\text{sys}t} + \sigma_{\text{ext}}. \quad (28)$$

The first contribution $\sigma_{\text{sys}t}$ corresponds to the entropy production inside the system, i.e., it comes from the changes of the particles velocities during the binary inelastic collisions,

$$\sigma_{\text{sys}t} = \frac{k_B \chi \sigma^{d-1}}{2} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v}_1 \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}_{12}) f_1 f_2 \ln \left(\frac{f_1 f_2}{f_1^* f_2^*} \right), \quad (29)$$

where we have used the shorthand notation $f_{1,2}^* = f(\mathbf{v}_{1,2}^*, t)$ for the distribution functions corresponding to the post-collisional velocities (5). Of course, in the limit of elastic collisions $\alpha = 1$ the expression of $\sigma_{\text{sys}t}$ reduces to the usual positive-definite expression of the hard-disk gas that enters the H -theorem. However, in general $\sigma_{\text{sys}t}$ does not have a definite sign. One can imagine the entropy production inside the system as resulting from two antagonist (although actually undissociated) mechanisms, namely a generic disordering effect of any particle collisions (e.g., that is also present for elastic hard spheres) in $d \geq 2$, and an ordering effect due to the inelastic character of the collisions (i.e., to the reduction of the translational agitation of the particles). Depending on the actual shape of the distribution function, one of these two mechanisms may prevail on the other, thus determining the sign of the instantaneous value of $\sigma_{\text{sys}t}$.

The second contribution σ_{ext} is determined by the effect of the thermostat on the distribution function of the particles of the system. It corresponds to an energy injection into the system, and to a disordering effect of the

particles velocities (through “random kicking”), and therefore, as expected, is always a *positively defined* quantity,

$$\sigma_{ext} = \frac{k_B \zeta_0^2}{2} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v} \frac{1}{f(\mathbf{v}, t)} [\nabla_{\mathbf{v}} f(\mathbf{v}, t)]^2. \quad (30)$$

Introducing the dimensionless quantities

$$\tilde{\sigma}_{syst,ext} = \frac{2\sigma_{syst,ext}}{\chi \sigma^{d-1} v_{T_0} n^2}, \quad (31)$$

one obtains the expressions for the dimensionless time-dependent entropy production sources:

$$\tilde{\sigma}_{syst} = \left[\frac{T(t)}{T_0} \right]^{1/2} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{c}_1 \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{c}_2 \int d\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{c}_{12}) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{c}_{12}) \tilde{f}(\mathbf{c}_1, t) \tilde{f}(\mathbf{c}_2, t) \ln \left[\frac{\tilde{f}(\mathbf{c}_1, t) \tilde{f}(\mathbf{c}_2, t)}{\tilde{f}(\mathbf{c}_1^*, t) \tilde{f}(\mathbf{c}_2^*, t)} \right], \quad (32)$$

respectively,

$$\tilde{\sigma}_{ext} = \left[\frac{T_0}{T(t)} \right] \frac{(1 - \alpha^2) S_d}{2d \sqrt{2\pi}} \left[1 + \frac{3}{16} a_2(t) + \frac{9}{1024} a_2^2(t) \right] \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{c} \frac{1}{\tilde{f}(\mathbf{c}, t)} [\nabla_{\mathbf{c}} \tilde{f}(\mathbf{c}, t)]^2. \quad (33)$$

In the stationary regime at temperature T_0 one has, obviously, $\tilde{\sigma}_{syst} = -\tilde{\sigma}_{ext} \equiv -\tilde{\sigma}_0$. The quantity $\tilde{\sigma}_0$ is positive and decaying monotonously with α , as illustrated in Fig. 2. Note that $\tilde{\sigma}_0$ is nonzero as long as the collisions are inelastic, i.e., as long as the stationary probability distribution is non-Gaussian. Note also the negativity of $\tilde{\sigma}_{syst}$ in the stationary state—the ordering effect due to the inelastic character of the collisions prevails on the generic disordering effect of the collisions.

Let us now address the question whether the entropy production (as a whole, or one of its parts $\tilde{\sigma}_{syst}$ or $\tilde{\sigma}_{ext}$) can play the role of some kind of “nonequilibrium potential” for the system, i.e., whether or not it can account for the linear stability of the stationary state of the system. The particular case of the quasi-elastic limit $\varepsilon \equiv 1 - \alpha \ll 1$ is especially interesting, given that the stationary state is close to equilibrium. One might then expect a priori that a “minimum entropy production theorem” (in the spirit of the “extended Prigogine theory” [3]) might be valid in this case.

Consider thus small perturbations of the temperature and of the coefficient a_2 around their stationary values, as in Eq. (20). A Taylor development of the entropy production terms $\tilde{\sigma}_{syst}$ and $\tilde{\sigma}_{ext}$ leads to nonzero

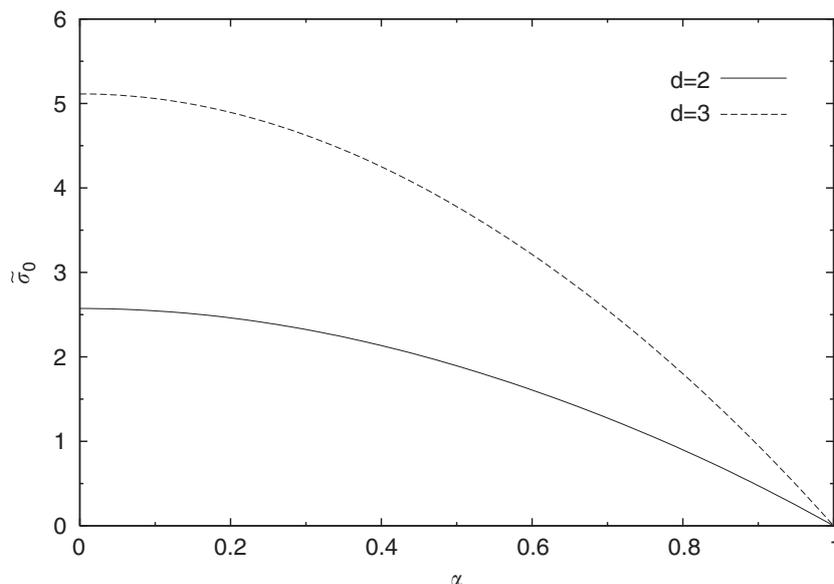


Fig. 2. The dimensionless stationary entropy production $\tilde{\sigma}_0$ as a function of α in $d = 2$ and 3 .

linear contributions in the perturbations $\delta\theta$ and δa_2 ,

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{\text{sys}} - (-\tilde{\sigma}_0) = & -\delta\theta \left(\frac{\tilde{\sigma}_0}{2} \right) + \delta a_2 \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{dc}_1 \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{dc}_2 \int \mathbf{d}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \theta(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{c}_{12}) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{c}_{12}) \tilde{f}_0(c_1) \tilde{f}_0(c_2) \left\{ \left[\frac{S_2(c_1^2)}{1 + a_{20} S_2(c_1^2)} \right. \right. \\ & + \left. \frac{S_2(c_2^2)}{1 + a_{20} S_2(c_2^2)} - \frac{S_2(c_1^{*2})}{1 + a_{20} S_2(c_1^{*2})} - \frac{S_2(c_2^{*2})}{1 + a_{20} S_2(c_2^{*2})} \right] \\ & \left. + \left[\frac{S_2(c_1^2)}{1 + a_{20} S_2(c_1^2)} + \frac{S_2(c_2^2)}{1 + a_{20} S_2(c_2^2)} \right] \ln \left[\frac{\tilde{f}_0(\mathbf{c}_1) \tilde{f}_0(\mathbf{c}_2)}{\tilde{f}_0(\mathbf{c}_1^*) \tilde{f}_0(\mathbf{c}_2^*)} \right] \right\} + O(\delta\theta^2, \delta a_2^2, \delta\theta\delta a_2), \end{aligned} \quad (34)$$

respectively,

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{\text{ext}} - (\tilde{\sigma}_0) = & -\delta\theta(\tilde{\sigma}_0) + \delta a_2 \left\{ \frac{3/16 + (9/512)a_{20}}{1 + (3/16)a_{20} + (9/1024)a_{20}^2} \tilde{\sigma}_0 + \frac{(1 - \alpha^2)S_d}{2d\sqrt{2\pi}} \left(1 + \frac{3}{16}a_{20} + \frac{9}{1024}a_{20}^2 \right) \right. \\ & \left. \times \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{dc} \left[\frac{2(\nabla_{\mathbf{c}} \tilde{f}_0(\mathbf{c})) \cdot [\nabla_{\mathbf{c}}(e^{-c^2} S_2(c^2))]}{\pi^{d/2} \tilde{f}_0(\mathbf{c})} - \frac{(\nabla_{\mathbf{c}} \tilde{f}_0(\mathbf{c}))^2 (e^{-c^2} S_2(c^2))}{\pi^{d/2} \tilde{f}_0^2(\mathbf{c})} \right] \right\} + O(\delta\theta^2, \delta a_2^2, \delta\theta\delta a_2). \end{aligned} \quad (35)$$

The total entropy production $\tilde{\sigma}_{\text{sys}} + \tilde{\sigma}_{\text{ext}}$ also contains linear terms in the perturbations $\delta\theta$ and δa_2 .

The same holds true even in the quasielastic limit $\varepsilon \equiv 1 - \alpha \ll 1$, when one can evaluate explicitly to $O(\varepsilon^2)$ the expression of the coefficients of the perturbations. More precisely,

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{\text{ext}} - (-\tilde{\sigma}_0) = & -\delta\theta \left(\frac{\tilde{\sigma}_0}{2} \right) - \delta a_2 \frac{\sqrt{2}\pi^{(d-1)/2}}{\Gamma(d/2)} \left[2(d-1)a_{20} + \frac{4d+5}{8}\varepsilon + O(\varepsilon^2) \right], \\ \tilde{\sigma}_{\text{sys}} - \tilde{\sigma}_0 = & -\delta\theta(\tilde{\sigma}_0) + \delta a_2 \left[\frac{3}{16}\tilde{\sigma}_0 + O(\varepsilon^2) \right], \end{aligned} \quad (36)$$

where the stationary values are

$$\tilde{\sigma}_0 = \frac{2\sqrt{2}\pi^{(d-1)/2}}{\Gamma(d/2)} \varepsilon + O(\varepsilon^2) \quad (37)$$

and

$$a_{20} = -\frac{\sqrt{2}(\sqrt{2}-1)}{d-1} \varepsilon + O(\varepsilon^2). \quad (38)$$

The meaning of this result is that the entropy production as defined above cannot be used for a variational description of the relaxation of the system towards the stationary state, not even in the quasi-elastic limit.

One may argue that the choice of the definition of the entropy production inside the system might be inappropriate, since it refers only to the translational degrees of freedom, and it does not take into account properly the internal degrees of freedom of the particles—that are, in fact, responsible for the inelastic character of the collisions. The description of the inelasticity through a constant restitution coefficient α might thus be incompatible with a thermodynamic description of the system in terms of entropy production. We note that it is known that such a model, although being a useful approximation which captures important physical effects, is in fact incompatible with basic mechanical laws (see, e.g., Ref. [11], Chapter 3).

Let us now discuss briefly another issue that recently drew some attention, see Refs. [18,19], namely that of the *Kullback relative entropy*, defined as

$$\begin{aligned} S_R(t) = & -k_B \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{dv} f(\mathbf{v}, t) \ln \left(\frac{f(\mathbf{v}, t)}{f_0(\mathbf{v})} \right) \\ = & -\frac{k_B n}{v_T^d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{dc} \phi(c) [1 + a_2 S_2(c^2)] \ln \left(\frac{v_{T_0}^d}{v_T^d} \frac{1 + a_2 S_2(c^2)}{1 + a_{20} S_2(c^2)} \right). \end{aligned} \quad (39)$$

$S_R(t)$ is a measure of the “distance” between the actual pdf $f(\mathbf{v}, t)$ and its stationary profile $f_0(\mathbf{v})$, and, of course, is equal to zero at the stationary state. Following Ref. [19], one can parametrize $S_R(t)$ through the two sets of parameters, $\{\gamma_1 = a_2(t), \gamma_2 = T(t)\}$ for the nonstationary state, respectively $\{\gamma_{10} = a_{20}, \gamma_{20} = T_0\}$ for the stationary pdf. Considering as above (Section 3.3) small deviations of the temperature and of the coefficient a_2 (that result in a small deviation $\delta f(\mathbf{v}, t)$ of the pdf) from their stationary values, one finds:

$$\delta S_R \approx -\frac{k_B}{2} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v} \frac{1}{f_0(\mathbf{v})} [\delta f(\mathbf{v}, t)]^2 = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1,2} F_{ij} \delta\gamma_1 \delta\gamma_2 \leq 0, \quad (40)$$

where $\delta\gamma_1 = \delta a_2$, $\delta\gamma_2 = T_0 \delta\theta$, and F_{ij} is the positively defined Fisher information matrix [20]

$$F_{ij} = k_B \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) \left(\frac{\partial \ln f_0(\mathbf{v})}{\partial \gamma_{i0}} \right) \left(\frac{\partial \ln f_0(\mathbf{v})}{\partial \gamma_{j0}} \right). \quad (41)$$

It looks therefore as if this relative entropy has the required property of extremum at the steady state (and monotonous exponential asymptotic relaxation towards it). This property has already been demonstrated for other types of nonequilibrium stochastic systems (e.g., in Ref. [18], the one-dimensional Ornstein–Uhlenbeck and Rayleigh processes, noise-perturbed harmonic oscillator, dichotomous noise). The question arises about its relationship with the thermodynamic entropy production; in Ref. [19] it was shown that in the case of the usual Smoluchowski diffusion the Kullback entropy time-variation rate coincides with the Shannon entropy production rate. However, some further case-studies (in particular, on systems described by kinetic Boltzmann-like equations) are necessary before generalizing this important conclusion to other nonequilibrium situations. In particular, although very appealing, the Kullback entropy does not reduce to the usual H -functional in the limit of an elastic gas of particles relaxing to equilibrium. Besides that, computing Kullback entropy requires the knowledge of the steady-state pdf, while the expected approach would be to define a proper Lyapunov functional of the system from which to *deduce* the stationary state.

5. Conclusions

We illustrated on the well-known model of a randomly driven granular gas with constant restitution coefficient the difficulties that one encounters when trying to construct a variational principle for NESS based on an “entropy production”. Two approaches were proposed for the interpretation of the entropy balance equation in terms of “sources” and “flows”, but none of them lead to the formulation of such a principle. The main reason for this failure seems to be the intrinsic irreversible microscopic dynamics of the granular gas. Modeling the internal degrees of freedom of the grains (that are responsible for the inelasticity of the collisions) through a constant restitution coefficient is thus not appropriate for a thermodynamic description. This shows thus a major limitation of this model. A further step in the rather involved question of the refinement of the description would be the use of *random restitution coefficients* (as done, e.g., in Ref. [21]). These are meant to describe the possible flow of energy (at the collision) both towards and *from* the internal degrees of freedom to the translational degrees of freedom. Such a model, however, cannot be treated analytically, and no simple analytic conclusions can be therefore drawn on the fate of the corresponding H -functional. Numerical results are left for further studies.

Moreover, the problem of the Kullback relative entropy, its monotonous relaxation to the steady state, and its relationship with the thermodynamic entropy production of a nonequilibrium system represent a very promising direction for further studies.

Acknowledgements

We thank Ph. Martin and J. Piasecki for suggestions and discussions. I. B., F. C., and M. D. acknowledge partial support from the Swiss National Science Foundation.

References

- [1] P. Glansdorff, I. Prigogine, *Thermodynamic Theory of Structure, Stability, and Fluctuations*, Wiley, New York, 1971.
- [2] P. Glansdorff, *Physica* 19 (1953) 737.
- [3] L. Jiu-li, C. Van den Broeck, G. Nicolis, *Z. Phys. B* 56 (1984) 165.
- [4] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona Lasinio, C. Landim, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001) 040601;
L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona Lasinio, C. Landim, *J. Stat. Phys.* 107 (2002) 635;
L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona Lasinio, C. Landim, *J. Stat. Phys.* 116 (2004) 831.
- [5] P. Gaspard, *J. Chem. Phys.* 120 (2004) 8898;
P. Gaspard, *J. Stat. Phys.* 117 (2004) 599;
D. Andrieux, P. Gaspard, *J. Chem. Phys.* 121 (2004) 6167;
P. Gaspard, in: P. Collet, et al. (Eds.), *Chaotic Dynamics and Transport in Classical and Quantum Systems*, Kluwer, Amsterdam, 2005.
- [6] D. Daems, G. Nicolis, *Phys. Rev. E* 59 (1999) 4000;
C. Maes, K. Netočný, *J. Stat. Phys.* 110 (2003) 269.
- [7] E.T. Jaynes, *Phys. Rev.* 108 (1957) 171;
E.T. Jaynes, *Ann. Rev. Phys. Chem.* 31 (1980) 579.
- [8] K. Hyeon-Deuk, H. Hayakawa, *J. Stat. Phys. Soc. Japan* 72 (2003) 2473;
R. Dewar, *J. Phys. A* 36 (2004) 631;
C.R. Shalizi, preprint, arXiv:cond-mat/0410063;
R.M.L. Evans, *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 150601;
R.M.L. Evans, *Phys. A* 340 (2004) 364;
R.M.L. Evans, *J. Phys. A* 38 (2005) 293.
- [9] T.P.C. van Noije, M.H. Ernst, *Granular Matter* 1 (1998) 57;
See also T.P.C. van Noije, Ph.D. Thesis, Utrecht University, Netherlands, 1999.
- [10] J.M. Montanero, A. Santos, *Granular Matter* 2 (2000) 53.
- [11] N.V. Brilliantov, T. Pöschel, *Kinetic Theory of Granular Gases*, Oxford University Press, Oxford, 2004.
- [12] F. Coppex, M. Droz, J. Piasecki, E. Trizac, *Physica A* 329 (2003) 114;
F. Coppex, Ph.D. Thesis, University of Geneva, 2005, (<http://mpej.unige.ch/~coppex/download/phd.ps>).
- [13] V. Garzò, J.M. Montanero, *Physica A* 313 (2002) 336.
- [14] J.J. Brey, J.W. Dufty, C.S. Kim, A. Santos, *Phys. Rev. E* 58 (1998) 4638.
- [15] S.R. de Groot, P. Mazur, *Non-equilibrium Thermodynamics*, Dover, New York, 1984.
- [16] H.J. Kreuzer, *Phenomenological Thermodynamics and its Statistical Foundations*, Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [17] P. Résibois, M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Fluids*, Wiley Interscience, New York, 1977.
- [18] M.C. Mackey, M. Tyran-Kamińska, preprint, arXiv:cond-mat/0501092; arXiv:cond-mat/0509649.
- [19] P. Garbaczewski, *Phys. Lett. A* 341 (2005) 33.
- [20] R.A. Fisher, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 22 (1925) 700.
- [21] G. Giese, A. Zippelius, *Phys. Rev. E* 54 (1996) 4828;
F. Gerl, A. Zippelius, *Phys. Rev. E* 59 (1999) 2361;
T. Aspelmeier, A. Zippelius, *Physica A* 282 (2000) 450.

C

Statistique collisionnelle du gaz de sphères dures

On reporte dans cette appendice la pré-publication [P11](#) dans son intégralité.

Collisional statistics of the hard-sphere gas

Paolo Visco,¹ Frédéric van Wijland,² and Emmanuel Trizac¹

¹Université Paris-Sud, LPTMS, UMR 8626, Orsay Cedex, F-91405 and CNRS, Orsay, F-91405

² Laboratoire Matière et Systèmes Complexes (CNRS UMR 7057), Université Denis Diderot (Paris VII), 10 rue Alice Domon et Léonie Duquet, 75205 Paris cedex 13, France

(Dated: May 3, 2007)

We investigate the probability distribution function of the free flight time and of the number of collisions in a hard sphere gas at equilibrium. At variance with naive expectation, the latter quantity does not follow Poissonian statistics, even in the dilute limit which is the focus of the present analysis. The corresponding deviations are addressed both numerically and analytically. In writing an equation for the generating function of the cumulants of the number of collisions, we came across a perfect mapping between our problem and a previously introduced model: the probabilistic ballistic annihilation process [Coppex *et al.*, Phys. Rev. E **69** 11303 (2004)]. We exploit this analogy to construct a Monte-Carlo like algorithm able to investigate the asymptotically large time behavior of the collisional statistics within a reasonable computational time.

I. INTRODUCTION

Despite the great interest that the hard sphere gas has triggered since the early days of statistical physics, there are still, to this day, simple questions which have not been deeply investigated yet. In this paper we address one such question: what is the probability of having a given number of collisions in a time t ? Apart from the simplicity of the question, relevant in its own right, the collisional statistics of the hard sphere gas turns out to be useful in several purposes, such as the estimation of transport coefficients or the characterization of the dissipation in the closely related granular gases.

In a low density hard sphere gas at equilibrium, the velocities of two colliding particles are uncorrelated just before the collision: this is the molecular chaos (stosszahlansatz) statement. This remark could naively lead to the conclusion that collisions are uncorrelated random events, implying therefore that the number of collision is simply a Poisson random variable. However, even if molecular chaos is exactly verified, the collision number is *not a Poisson random variable*. This fact has been already noticed in the literature (see e.g. [1]) but to our knowledge, has resisted analytical investigations. It is our purpose here to fill this gap.

The reason for the non-Poissonian behavior alluded to above is that the probability for a collision to take place depends on the scattering cross section of the colliding pair (which depends on the relative velocity \mathbf{g} of the colliding pair). Namely, for the hard sphere gas, the probability of a collision behaves roughly as $\mathbf{g} \cdot \hat{\sigma} \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\sigma})$, where $\hat{\sigma}$ is a unitary vector joining the centers of mass of the two particles at contact (directed along the apse line). For a gas made up of particles interacting through a potential other than the hard-sphere potential, the probability of having a “collision” is of course different, which affects the distribution of the number of collisions. Of particular interest is the gas of particle interacting through a pair potential $V(\mathbf{r}) \sim 1/r^{2(d-1)}$, where d is the space dimension. Such particles are known as Maxwell molecules

[2] and lead to a velocity independent probability of having a collision. Within this model, it then appears that the collisions are truly uncorrelated random events, and hence that the number of collision is a Poisson random variable.

In the next section we report some results concerning the free flights time distribution of a hard sphere gas. In section III we present some analytical results on the statistics of the number of collisions, and in section IV we show the results of numerical simulations.

II. FREE FLIGHTS TIME DISTRIBUTION

A. General results

We consider a hard sphere gas in d dimensions composed of N particles of equal mass m and equal diameter σ . The gas is thermalized at some temperature T_0 in a homogeneous state of (constant) density ρ , so that the one point distribution function of the system is a Gaussian:

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv \phi(\mathbf{v}) = \rho(2\pi T_0)^{-d/2} \exp\left(-\frac{v^2}{2T_0}\right). \quad (1)$$

If one decides to follow the evolution of one particle among the N , then the velocity probability distribution function (pdf) of that particle will evolve accordingly to the homogeneous linear Boltzmann equation:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}_1, t) = \frac{1}{\ell} \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\sigma} \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} [f_1^{**} \phi_2^{**} - f_1 \phi_2], \quad (2)$$

where $\ell = (\sigma^{d-1} \rho \chi)^{-1}$ is a length proportional to the mean free path denoted l below and $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$. The factor χ is the pair correlation function at contact and is the so called Enskog correction factor [3]. In the dilute limit where the molecular chaos assumption is justified, it tends to unity. Moreover, the primed integral means that the integration has to be performed in the domain for which $\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} > 0$. Finally, we are employing the

short-hand notation $f_i^{**} \equiv f(\mathbf{v}_i^{**}, t)$, where the two star superscript refers to the precollisional velocity:

$$\mathbf{v}_1^{**} = \mathbf{v}_1 - (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \mathbf{v}_2^{**} = \mathbf{v}_2 + (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (3)$$

In this framework the evolution of our tagged particle is exactly a Markov process. The probability of hopping from a state with velocity \mathbf{v} to another state of velocity in a narrow interval $d\mathbf{v}'$ around \mathbf{v}' and in a time interval dt is given by $W(\mathbf{v}'|\mathbf{v})d\mathbf{v}'dt$, where

$$W(\mathbf{v}'|\mathbf{v}) = \frac{1}{\ell} |\mathbf{v}' - \mathbf{v}|^{2-d} (2\pi T_0)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2T_0} \times \left[v'^2 - v^2 + \mathbf{v} \cdot \left(\frac{\mathbf{v}' - \mathbf{v}}{|\mathbf{v}' - \mathbf{v}|} \right) \right] \right\} \quad (4)$$

is the transition rate density per unit time (see *e.g.* [4]). For any general Markov process the probability of leaving a given configuration $\mathbf{\Gamma}$ in a time interval dt is $r(\mathbf{\Gamma})dt$, where

$$r(\mathbf{\Gamma}) = \int d\mathbf{\Gamma}' W(\mathbf{\Gamma}'|\mathbf{\Gamma}). \quad (5)$$

This is simply the loss term of the Linear Boltzmann equation 2, and it reads for the hard sphere gas:

$$r(v) = \frac{\omega}{\sqrt{2}} \left(\frac{v^2}{dT_0} {}_1F_1 \left(\frac{1}{2}, 1 + \frac{d}{2}, -\frac{v^2}{2T_0} \right) + e^{-\frac{v^2}{2T_0}} {}_1F_1 \left(\frac{d-1}{2}, \frac{d}{2}, \frac{v^2}{2T_0} \right) \right), \quad (6)$$

where ${}_1F_1$ is the confluent hyper-geometric function of the first kind [5], and ω is the collision frequency of the gas:

$$\omega = \int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{v}) r(v) = \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}} \sqrt{T_0}}{\Gamma(d/2)}. \quad (7)$$

From the Markovian property it follows that the probability of having a given velocity \mathbf{v} for a given time t and making a collision exactly at time t is exponential:

$$P_{FFT}(t|\mathbf{v}) = r(v) \exp(-r(v)t). \quad (8)$$

The probability density of the free flight time follows:

$$P_{FFT}(t) = \int d\mathbf{v} \phi_{coll}(\mathbf{v}) P_{FFT}(t|\mathbf{v}), \quad (9)$$

where $\phi_{coll}(\mathbf{v})$ is the velocity pdf of the colliding particles (i.e. obtained sampling the velocity of the particle only on collision):

$$\phi_{coll}(\mathbf{v}) = \frac{r(v)}{\omega} \phi(\mathbf{v}), \quad (10)$$

where the normalization factor ω is exactly the collision frequency of the gas. The free flights time distribution for

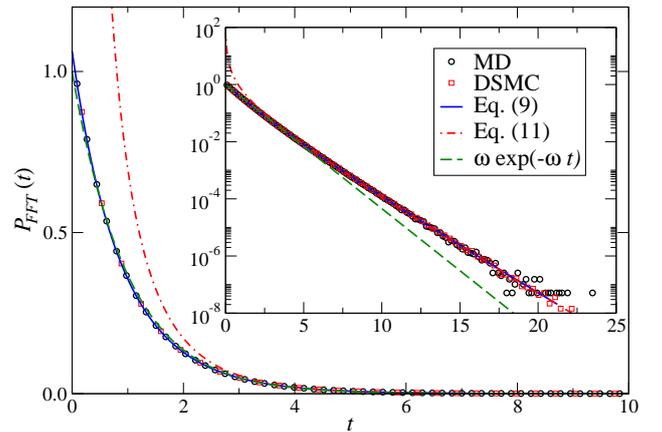


FIG. 1 Free flights time distribution of a hard disc gas. The circles and squares correspond to the results of Molecular Dynamics (MD) and Direct Simulation Monte-Carlo (DSMC) methods. MD simulations in all this work are shown at density $\rho = 0.01\sigma^{-2}$. The full line is the numerical integration of Eq. (9). The dot-dashed line shows the asymptotic large time behavior of Eq. (11), and the dashed line is the exponential distribution, which leads to the Poisson distribution. Time is measured in units of the mean free time ($\omega = 1$).

hard spheres was already investigated in [6], but the authors used the equilibrium velocity distribution ϕ instead of the on collision velocity distribution ϕ_{coll} as a weight in (9), and hence obtained an incorrect result (this issue is further commented in Appendix A). Two measurements of the free flights time distribution in an event driven molecular dynamic simulation of hard spheres and in a Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) [7] are shown in Fig. 1, together with the expression of Eq. (9). The agreement is excellent. The molecular dynamics simulations are performed at a low density ($\rho\sigma^2 = 10^{-2}$) to ensure that molecular chaos holds, whereas the DSMC technique relies by construction on the molecular chaos approximation, and can therefore be considered as providing a $\rho \rightarrow 0$ benchmark. Figure 1 also provides a comparison with the exponential law that would hold for a constant $r(v)$, as is the case for Maxwell molecules. The latter expectation [$\omega \exp(-\omega t)$] is seen to hold at early times, but significantly fails at large t , a time regime that we investigate in more details in the next section.

B. Large time and high dimension analysis

A simple exact analytical expression for the free flights time distribution seems to be hard to extract (mainly because of the particular behavior of the hyper-geometric function involved in the expression of the collision rate $r(v)$). In order to get a simpler approximated result one has to look at limiting cases. For large times, the integral involved in Eq. (9) can be estimated through the saddle-point approximation (a.k.a. method of steepest descent,

see e.g. [8]), yielding:

$$P_{FFT}(t) \sim \exp\left(-\frac{\omega t}{\sqrt{2}}\right) \frac{\omega}{2} \left(1 - \frac{2}{d} + \frac{\omega t}{\sqrt{2}d}\right)^{-d/2}. \quad (11)$$

The above function is plotted in Fig. 1, and seen to be in very good agreement with our numerical data provided t is large enough. Note that expression (11) does not provide a normalized probability (a feature visible on Fig. 1), but only an asymptotic expansion.

Besides, a way to get an explicit expression for the collision rate $r(v)$ is to investigate the infinite dimension limit. In this case the saddle-point approximation yields:

$$r(v) \simeq \frac{\omega}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{v^2}{2T_0 d}}. \quad (12)$$

A detailed derivation of this result is given in Appendix B.

C. Free path length distribution

From the knowledge of the free flights time distribution, it is straightforward to compute the distribution of the free path length. In fact, for a particle with a velocity \mathbf{v} , the length covered in a time t is $x = |\mathbf{v}|t = vt$. Therefore, the conditional distribution of free path length is obtained as:

$$\begin{aligned} P_{FPL}(x|\mathbf{v}) &= \frac{1}{v} P_{FFT}\left(\frac{x}{v} \middle| \mathbf{v}\right) \\ &= \frac{r(v)}{v} \exp\left(-\frac{r(v)}{v}x\right). \end{aligned} \quad (13)$$

The free path length distribution can be obtained averaging the above expression with the weight ϕ_{coll} :

$$P_{FPL}(x) = \int d\mathbf{v} \phi_{coll}(\mathbf{v}) P_{FPL}(x|\mathbf{v}). \quad (14)$$

Although the conditional probability of free path length is very similar to the conditional probability of free flights time, the step of averaging over the collisional velocity distribution may drastically change the shape of the distribution. A case worthy of attention is discussed in Appendix C, for Maxwell molecules: the free flights time distribution is a pure exponential, while the free path length distribution has a stretched exponential decay. In the case of hard particles, the dominant large path behavior remains exponential, as for the free flights time. Nevertheless, the leading exponential prefactor changes. The free flights time distribution is dominated by $e^{-r(0)t}$, where $r(0)$ is the minimum of the function $r(v)$. In the case of free path length, the dominant exponential behavior is e^{Ax} , where A is the minimum of $r(v)/v$, which takes place in the limit $v \rightarrow \infty$:

$$A = \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{r(v)}{v} = \frac{1}{l\sqrt{2}} = \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\ell \Gamma(\frac{d+1}{2})}, \quad (15)$$

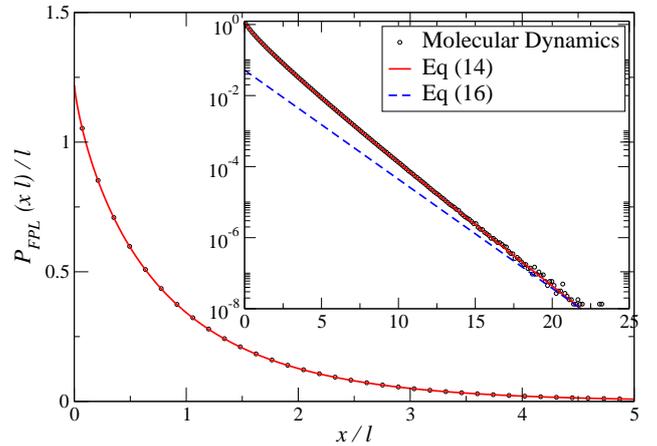


FIG. 2 Plot of the free path length distribution from MD simulations (at density $\rho = 0.01\sigma^{-2}$) and from a numerical integration of Eq. (14). In the inset, the dashed line is the dominant exponential term, Eq. (16).

where $l = \langle v \rangle / \omega$ is the mean free path. This yields:

$$P_{FPL}(x) \sim e^{\frac{x}{\sqrt{2}l}}, \quad (16)$$

(here the \sim should be understood as an equivalence between the logarithms in the large x limit). Unfortunately this expression only gives the behavior of the dominating exponential term, which is visible only at a length scales significantly larger than the mean free path. Hence, if one analyzes the result of MD simulations as in Fig. 2, one sees that there are sub-leading (algebraic) terms in the asymptotic behavior, which still play a role and that are responsible for the mismatch between Eq. (16) and MD data in Fig. 2. A similar feature holds for the free flight time distribution: upon neglecting the algebraic sub-dominant correction in Eq. (11), the agreement displayed at late times in the inset of Fig. 1 would be spoilt.

III. THE NUMBER OF COLLISIONS

A. Uncorrelated approach

After having shown how the probability of the time between two subsequent collisions behaves, our interest goes to the probability of the sum of many such times, and in particular, the probability of having \mathcal{N} collisions in a time t . The time interval t in which the \mathcal{N} collisions take place can be decomposed in a sum of $\mathcal{N} + 1$ (correlated) times:

$$t = t_{in} + t_1 + \dots + t_{\mathcal{N}-1} + t_f. \quad (17)$$

We are considering that a given particle begins a trajectory with a given initial velocity, and then waits a time t_{in} before it makes a collision and gets a new velocity. During a time t_1 , it then flies freely, before colliding again etc. The successive behavior of the particle's trajectory

will be a sequence of collisions, spaced by other free flight times $t_2, t_3, \dots, t_{\mathcal{N}-1}$, until the last \mathcal{N} -th collision, which will be followed by a final time interval t_f which is not ended with a collision. The free flight times t_1 to $t_{\mathcal{N}-1}$ are of course distributed following the probability P_{FFT} given by Eq. (9). We will denote by P_{in} and P_f the pdf of t_{in} and t_f , although their precise statistics are irrelevant for our purposes, as becomes clear below.

If one would assume these $\mathcal{N} + 1$ times to be uncorrelated, then the probability $P(\mathcal{N}, t)$ of having \mathcal{N} collisions in a time t could be deduced from the knowledge of the free flight time probability as follows. We first introduce the Laplace transform:

$$\tilde{P}(z) = \int dt e^{-zt} P(t), \quad (18)$$

where P can be either P_{FFT} , P_{in} , or P_f . The Fourier Transform of $P(\mathcal{N}, t)$ can hence be expressed as:

$$\tilde{P}(\mathcal{N}, z) = \tilde{P}_{in}(z) \tilde{P}_{FFT}(z)^{\mathcal{N}-1} \tilde{P}_f(z). \quad (19)$$

Of course, since P_{FFT} cannot be computed analytically, a closed form expression for $\tilde{P}(\mathcal{N}, z)$ is not available. One interesting limit to analyze the behavior of the probability of the number of collisions is that of large times. The expression of $P(\mathcal{N}, t)$ is then given by:

$$P(\mathcal{N}, t) = \int dz e^{zt} \tilde{P}_{in}(z) \tilde{P}_{FFT}(z)^{\mathcal{N}-1} \tilde{P}_f(z). \quad (20)$$

To get an asymptotic solution of the above integral one has to make explicit the large time behavior of \mathcal{N} . In particular, since the number of collisions increases with time (linearly, on average), one can define a time intensive counterpart to \mathcal{N} , a fluctuating collision rate, which we denote by $n \equiv \mathcal{N}/t$. The integral of Eq. (20) then reads:

$$P(\mathcal{N}, t) = \int dz \exp\left(t(z + n \ln(\tilde{P}_{FFT}(z))) + \mathcal{O}(1)\right). \quad (21)$$

Finally, when $t \rightarrow \infty$, the above probability behaves as:

$$P(\mathcal{N}, t) \sim e^{\pi(n)t}, \quad (22)$$

where $\pi(n)$ is a large deviation function, and is related to \tilde{P}_{FFT} through the following relation:

$$\pi(n) = \min_z (z + n \ln(\tilde{P}_{FFT}(z))). \quad (23)$$

B. Large time behavior

The result of the previous subsection leads to an approximate evaluation of the large deviation function of the number of collisions that neglects temporal correlations. We will now investigate this large deviation function keeping into account these correlations. Let us define the joint probability $f(\mathbf{v}, \mathcal{N}, t)$ of having a velocity \mathbf{v} and

having suffered \mathcal{N} collisions up until time t . In a homogeneous state, the time evolution of the above defined probability is governed by a slightly different form of the linear Boltzmann equation:

$$\partial_t f(\mathbf{v}_1, \mathcal{N}, t) = \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \times [f(\mathbf{v}_1^{**}, \mathcal{N} - 1, t) \phi(\mathbf{v}_2^{**}) - f(\mathbf{v}_1, \mathcal{N}, t) \phi(\mathbf{v}_2)], \quad (24)$$

The function $\phi(\mathbf{v})$ still represents the one point velocity pdf of the gas, which is in equilibrium. Moreover, since the particle whose collisions we are counting has the same velocity pdf, we deduce that:

$$\sum_{\mathcal{N}=0}^{\infty} f(\mathbf{v}, \mathcal{N}) = \phi(\mathbf{v}). \quad (25)$$

It is useful to introduce the generating function of f as:

$$\hat{f}(\mathbf{v}, \lambda, t) = \sum_{\mathcal{N}=0}^{\infty} e^{-\lambda \mathcal{N}} f(\mathbf{v}, \mathcal{N}, t). \quad (26)$$

It is straightforward to see that \hat{f} evolves according to

$$\partial_t \hat{f}(\mathbf{v}_1, \lambda, t) = \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\sigma} \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \times [e^{-\lambda} f(\mathbf{v}_1^{**}, \lambda, t) \phi(\mathbf{v}_2^{**}) - f(\mathbf{v}_1, \lambda, t) \phi(\mathbf{v}_2)]. \quad (27)$$

The large time behavior of the solution of the above equation is dominated by the largest eigenvalue $\mu(\lambda)$ of the evolution operator:

$$\mu(\lambda) \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) = L_\lambda \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) = \int d\mathbf{v}_2 \int d\hat{\sigma} \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \times [e^{-\lambda} \tilde{f}(\mathbf{v}_1^{**}, \lambda) \phi(\mathbf{v}_2^{**}) - \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) \phi(\mathbf{v}_2)], \quad (28)$$

where \tilde{f} denotes the eigenfunction of L_λ associated with μ :

$$\hat{f}(\mathbf{v}, \lambda, t) \propto e^{\mu(\lambda)t} \tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda). \quad (29)$$

Moreover, since $\hat{P}(\lambda) \sim e^{\mu(\lambda)t}$, one sees that $\mu(\lambda)$ is proportional to the cumulant generating function:

$$\langle \mathcal{N}^p \rangle_c = t(-1)^p \left. \frac{\partial^p \mu}{\partial \lambda^p} \right|_{\lambda=0}. \quad (30)$$

Furthermore, $P(\mathcal{N}) \sim \int d\lambda e^{\lambda \mathcal{N}} \hat{P}(\lambda)$, and hence, applying the saddle point method for $t \rightarrow \infty$, one has that

$$P(\mathcal{N}, t) \sim \exp(t\pi(n)), \quad (31)$$

where $n = \mathcal{N}/t$ and the large deviation function π is related to μ through a Legendre transform:

$$\pi(n) = \min_\lambda (\mu(\lambda) + \lambda n). \quad (32)$$

1. Large λ behavior

Before trying to solve Eq. (28) extending the methods of kinetic theory, we shall first provide exact results, which can be extracted from the analysis of asymptotically large values of λ . The evolution operator appearing in Eq. (28) can be cast in the form:

$$L_\lambda = L_0 + e^{-\lambda} L_1, \quad (33)$$

where

$$L_0 \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) = - \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) \phi(\mathbf{v}_2) = - r(v_1) \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda), \quad (34a)$$

$$L_1 \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) = \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\sigma} (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \tilde{f}(\mathbf{v}_1^{**}, \lambda) \phi(\mathbf{v}_2^{**}). \quad (34b)$$

For large values of λ , the coefficient $e^{-\lambda}$ plays the role of a small parameter, and therefore the eigenvalue equation (28) can be solved in perturbation theory. We will therefore try to get an expression of $\mu(\lambda)$ for large λ of the form:

$$\mu(\lambda) \simeq \mu^{(0)} + e^{-\lambda} \mu^{(1)} + \mathcal{O}(e^{-2\lambda}). \quad (35)$$

At the zero-th order, the largest eigenvalue of L_λ is given by the maximum of the function $-r(v)$, whose expression is written in Eq. (6). The maximum of this function occurs at $v = 0$, and

$$\mu^{(0)} = -r(0) = -\frac{\omega}{\sqrt{2}}. \quad (36)$$

The eigenfunction associated with this eigenvalue is indeed a delta function, centered in $\mathbf{v} = \mathbf{0}$. In order to get the first order correction to the eigenvalue (36) one has to project the zero-th order eigenfunction on the operator proportional to the small parameter:

$$\mu^{(1)} = \int d\mathbf{v}_1 L_1 \delta(\mathbf{v}_1) = \frac{\omega}{\sqrt{2}}. \quad (37)$$

Finally one finds that for large λ the largest eigenvalue μ behaves like:

$$\mu(\lambda) \sim \frac{\omega}{\sqrt{2}} (e^{-\lambda} - 1) + \mathcal{O}(e^{-2\lambda}), \quad (38)$$

and hence, the probability of having \mathcal{N} collisions behaves, for values of \mathcal{N} small with respect to its average $\langle \mathcal{N} \rangle = \omega t$, as a Poisson distribution with a frequency equal to $\omega/\sqrt{2}$:

$$P(\mathcal{N}) \sim \frac{e^{-\frac{\omega t}{\sqrt{2}}}}{\mathcal{N}!} \left(\frac{\omega t}{\sqrt{2}} \right)^{\mathcal{N}}, \quad \text{for } \mathcal{N} \ll \omega t. \quad (39)$$

For such a distribution the large deviation function π easily follows:

$$\pi(n) = n - n \log(n\sqrt{2}/\omega) - \omega/\sqrt{2} \quad (40)$$

The result obtained in Eq. (39) is compatible with the large time behavior embodied in Eq. (11): the time derivative of the probability of having $\mathcal{N} = 0$ collisions is of course (minus) the free flight time distribution function. We emphasize that both results (39) and (11) hold for large times. In addition, we note that the only space dimension dependence involved is through ω [see Eq. (7)].

2. An approximate solution

In order to get an approximate expression for the largest eigenvalue $\mu(\lambda)$ we will suppose the associated eigenvector $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ to be a Gaussian with a given temperature $T(\lambda)$. We expect that this approximation will provide accurate results for small values of λ , given that for $\lambda = 0$ $\tilde{f}(\mathbf{v}, 0)$ is exactly a Gaussian with a temperature T_0 , but it is not *a priori* a systematic approximation for larger values of λ . Projecting the Boltzmann-like equation (28) onto the first two velocity moments of the eigenfunction we want to compute, we are left with two closed equations for $\mu(\lambda)$ and for $T(\lambda)$:

$$\mu(\lambda) = \nu_0, \quad \mu(\lambda) dT(\lambda) = \nu_2, \quad (41)$$

where the ν_n are the collisional moments (the expression of the first ones is given in the Appendix D):

$$\nu_n = \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \int' d\hat{\sigma} v_1^n (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \times \left[\tilde{f}(\mathbf{v}_1^{**}, \lambda) \phi(\mathbf{v}_2^{**}) - \tilde{f}(\mathbf{v}_1, \lambda) \phi(\mathbf{v}_2) \right]. \quad (42)$$

Solving simultaneously Eqs. (41), one obtains:

$$\mu(\lambda) = -\frac{\omega}{\sqrt{2}} (1 - e^{-\lambda}) \sqrt{1 + \frac{T(\lambda)}{T_0}}, \quad (43a)$$

$$T(\lambda) = \frac{\sqrt{2} T_0}{\sqrt{1 + e^\lambda}}. \quad (43b)$$

One may notice that this result satisfies some of the previous requirements obtained from the asymptotic large λ analysis. In particular $\mu(\infty) = -\omega/\sqrt{2}$, as in the previous subsection. Moreover, the fictitious temperature $T(\lambda)$ vanishes for infinite λ , meaning that the eigenfunction associated with μ does indeed tend towards a delta function. Nevertheless, while these features concerning the zero-th order perturbation results of the previous section are fulfilled, the behavior of Eq. (43) is different at the next order. In fact, one can see from Eq. (43) that, for $\lambda \rightarrow \infty$:

$$\mu(\lambda) \sim -\frac{\omega}{\sqrt{2}} - \omega \frac{\sqrt{e^{-\lambda}}}{2} + \mathcal{O}(e^{-\lambda}), \quad (44)$$

to be compared with Eq. (38). This is a deficiency of the Gaussian approximation.

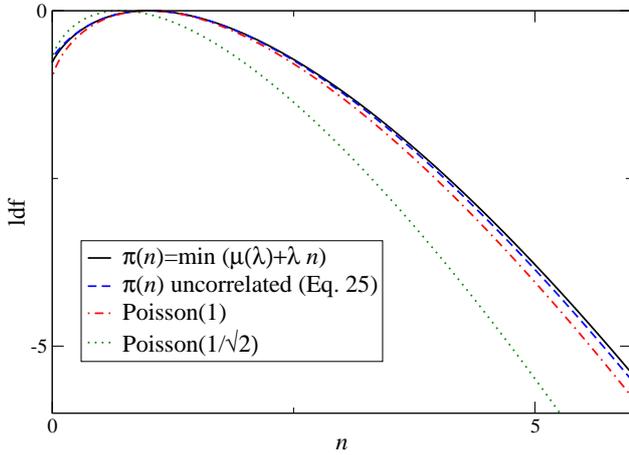


FIG. 3 Plot of $\pi(n)$ obtained in several fashions ($\omega = 1$). The solid line has been obtained from the numerical Legendre Transform of $\mu(\lambda)$ from Eq. (43). The dashed line corresponds to the uncorrelated result obtained in Eq. (23), while the dot-dashed and the dotted lines are respectively the large deviation functions of the Poisson distribution of average 1 and $1/\sqrt{2}$.

In order to get an expression of $\pi(n)$ one should compute the Legendre Transform of $\mu(\lambda)$. This seems not feasible analytically, but can be achieved numerically. The function $\pi(n)$ is plotted in Fig. 3, together with the result of uncorrelated estimation of Eq. (23), as well as two Poisson distributions, of average ω and $\omega/\sqrt{2}$. One can see that the two estimations carried out are in very close agreement, apart from a slight difference in the behavior of the right tail. Moreover, the two new results presented here are clearly different from the Poisson distribution [denoted Poisson(1) since $\omega = 1$ in Fig. (3)], which is narrower, and underestimates extreme events, characterized by either very few or many collisions with respect to typical realizations.

3. Sonine perturbation and cumulants

We now further exploit the property that for $\lambda = 0$ the solution of the Boltzmann equation (28) is exactly a Gaussian. This incites us, for λ close to 0, to search for a solution $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ as a small perturbation of a Gaussian distribution. One of the most widely used expansions in kinetic theory is the Sonine polynomials expansion¹. In practice this expansion consists in looking for solutions expressed as a Gaussian times a series of Sonine poly-

nomials, denoted $S_n(x)$:

$$\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda) = (2\pi)^{-d/2} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right) \sum_{n=0}^{\infty} a_n S_n\left(-\frac{v^2}{2T}\right). \quad (45)$$

The first Sonine polynomials are:

$$S_0(x) = 1, \quad (46a)$$

$$S_1(x) = -x + \frac{d}{2}, \quad (46b)$$

$$S_2(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{d+2}{2}x + \frac{d(d+2)}{8}. \quad (46c)$$

These polynomials have the property of being orthogonal with respect to a Gaussian measure in dimension d . From this property, it follows that the coefficient of the series (45) $a_0 = 1$ and that $a_1 = 0$. Hence, the first non-trivial correction to the Gaussian approximation comes from the term proportional to a_2 in the expansion (45). The procedure, in order to get an estimate of the coefficient a_2 consists in solving a closed system of equations obtained projecting the equation (28) onto the first velocity moments :

$$\mu(\lambda)m_n = \nu_n, \quad (47)$$

where:

$$m_n(\lambda) = \int d\mathbf{v} \tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda), \quad (48)$$

and $\nu_n(\lambda)$ denotes the collisional moment of order n defined in Eq. (42). Truncating the expansions (45) up to the second Sonine polynomial, one gets for the moments m_n :

$$m_0 = 1, \quad m_2 = dT(\lambda), \quad (49a)$$

$$m_4 = d(d+2)T^2(\lambda) (1 + a_2(\lambda)). \quad (49b)$$

The expression of the first collisional moments in the Sonine approximation is given in the Appendix D. Hence, taking the moment equation (48) for $n = 0, 2$ and 4 gives a closed system of equations for $\mu(\lambda)$, $T(\lambda)$ and $a_2(\lambda)$. This system can be solved perturbatively expanding its solutions in power series around $\lambda = 0$. The cumulants of \mathcal{N} obtained by means of the latter expansion are remarkably accurate. The expansion of $\mu(\lambda)$ up to the 3rd order in λ gives access to the first three cumulants, which read:

$$\frac{\langle \mathcal{N} \rangle_c}{\omega t} = 1, \quad (50a)$$

$$\frac{\langle \mathcal{N}^2 \rangle_c}{\omega t} = \frac{9}{64} \left(8 + \frac{1}{4d+3} \right), \quad (50b)$$

$$\frac{\langle \mathcal{N}^3 \rangle_c}{\omega t} = \frac{28d(64d(320d+729) + 35775) + 257391}{8192(4d+3)^3}, \quad (50c)$$

As can be noted from these values, already the variance of the number of collisions deviates by more than 12.5% from its Poisson value (equal to unity).

¹ For a general treatment of Sonine polynomials in kinetic theory, see *e.g.* [9] and references therein.

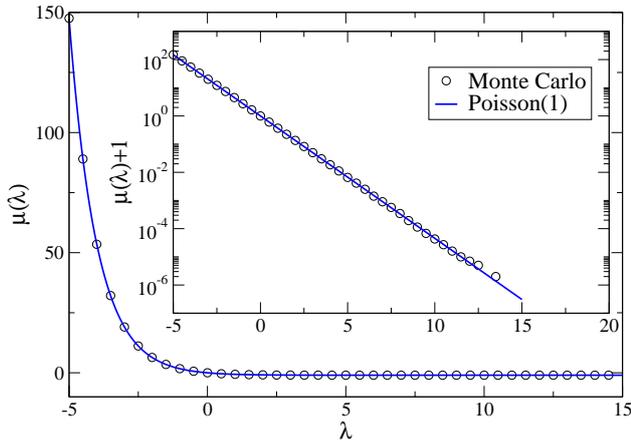


FIG. 4 The circles are the numerical measurements of $\mu(\lambda)$ for the Maxwell model. The solid line is the generating function of the Poisson distribution. The inset shows the same data, shifted vertically by one (in such a way that $\mu(\lambda) + 1$ is always positive), in semi-logarithmic scale.

IV. NUMERICAL RESULTS

In this section we compare the theoretical results obtained in the previous sections against numerical simulations. Two kind of simulation approaches are worked out. First, we have constructed a Monte Carlo algorithm in order to solve the eigenvalue equation (28), and second, we have performed Molecular Dynamics (MD) simulations measuring the statistics of the number of collisions suffered by each particle.

4. Monte Carlo approach

In order to derive an algorithm describing Eq. (28), it is useful to rewrite this equation in the form:

$$\mu(\lambda)\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda) = e^{-\lambda}I[\tilde{f}|\phi] + (1 - e^{-\lambda})A[\tilde{f}|\phi], \quad (51)$$

where

$$I[f|g] = \int d\mathbf{v} \int' d\hat{\sigma}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma})[f_1^{**}g_2^{**} - f_1g_2], \quad (52)$$

is the collision integral describing the elastic collision between two particles having respectively a velocity pdf f and g . We are using the short-hand notation $f_i^{(**)} \equiv f(\mathbf{v}_i^{(**)})$. The functional $A[f|g]$ is the loss term of the above collision integral. It actually describes the statistics of hard spheres which annihilate after each collision:

$$A[f|g] = - \int d\mathbf{v} \int' d\hat{\sigma}(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma})f_1g_2. \quad (53)$$

In the context of the nonlinear Boltzmann Equation, i.e. when $\phi = \tilde{f}$ in Eq. (51), and for positive values of λ , the rhs of Eq. (51) exactly describes the time evolution

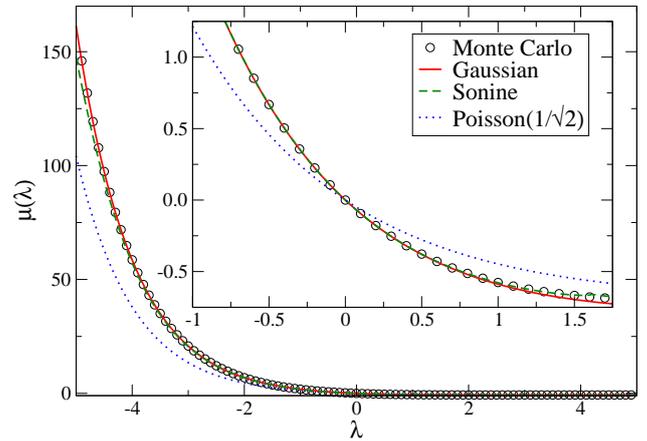


FIG. 5 Numerical measurement of $\mu(\lambda)$ for the hard-sphere model. The circles are the results of Monte Carlo simulations. The solid line is the theoretical prediction in the framework of the Gaussian approximation. The dashed line is the theoretical prediction (obtained solving numerically (48) in the framework of the first Sonine correction). Finally the dotted line is the generating function of a Poisson distribution of parameter $\omega/\sqrt{2}$, which should asymptotically dominate for large λ (see Fig. 6). The inset shows a zoom near $\lambda = 0$ of the same data.

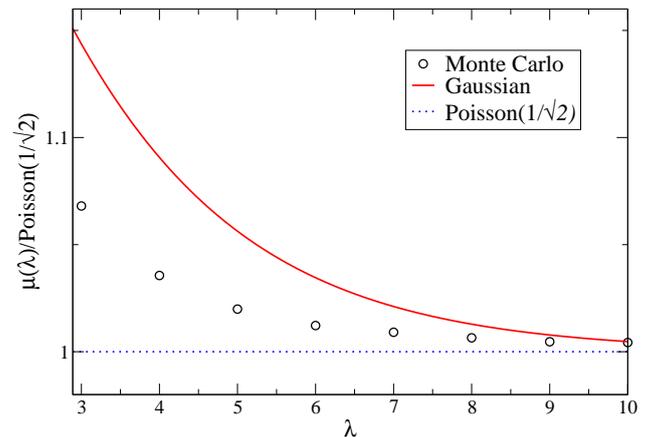


FIG. 6 Same data as in Fig. 5 divided by the generating function of a Poisson distribution of parameter $\omega/\sqrt{2}$.

of the velocity pdf of the probabilistic ballistic annihilation process. This model, introduced in [10], consists in a system of N particles which move ballistically, and interact when at contact. The interaction may be an elastic collision, with probability $e^{-\lambda}$, or an annihilation (with probability $1 - e^{-\lambda}$). In the context of the linear Boltzmann equation, this process can be extended in the following way. Consider a set of N independent systems, one of each is just a single particle, characterized by its velocity $\mathbf{v}_i(t)$, ($i = 1, \dots, N$) assuming spatial homogeneity. If each of these systems (particles) evolves in a hard sphere gas (in the thermodynamic limit) thermalized at temperature T_0 , with a one point velocity pdf ϕ , and can both collide elastically (with probability $e^{-\lambda}$), or anni-

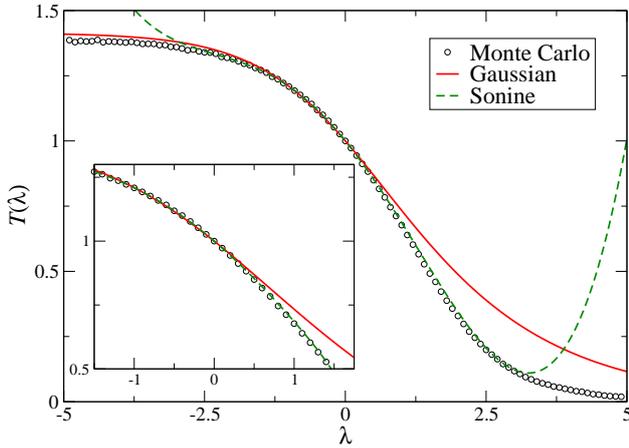


FIG. 7 Temperature of the eigenfunction $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ measured in Monte Carlo simulations. The solid and dashed lines are the predictions of the Gaussian and Sonine approximations respectively.

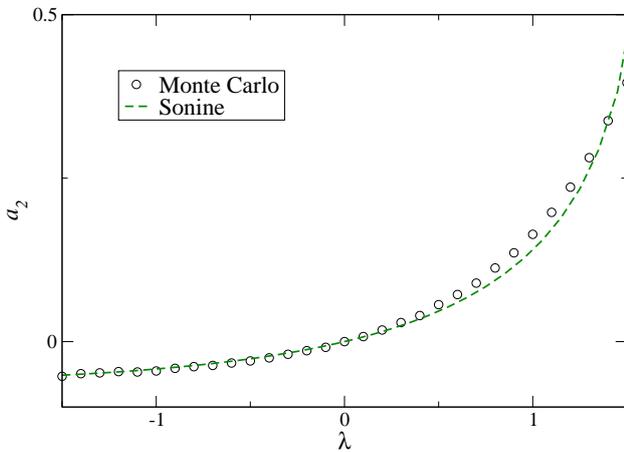


FIG. 8 Coefficient a_2 measured in a Monte Carlo simulation. The dashed line corresponds to the numerical solution of the system (49), which is correct only for small values of a_2 .

hilate (with probability $1 - e^{-\lambda}$), then, the reduced one point velocity pdf $g(\mathbf{v}, t) = \langle \sum_i^N \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i(t)) \rangle$ will verify the Boltzmann Equation

$$\frac{\partial g(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = L_\lambda g(\mathbf{v}, t). \quad (54)$$

Since $N(t) = \int d\mathbf{v} g(\mathbf{v}, t)$ is the number of particles at time t , and since we know that for long times $g(\mathbf{v}, t) \sim e^{\mu t}$, it is clear that for long times one has that $N(t) \sim N_0 e^{\mu t}$. Note that so far this is valid only for positive λ . Moreover, the particles can only annihilate or collide; then the total number of particles can only decrease, and hence μ must be negative. The above observations already provide a numerical tool for measuring $\mu(\lambda)$ as the decay rate of the total number of particles. The main difficulty, which we have successfully addressed, with the above algorithm is that the number of particles constantly decreases, and there is no steady state

but the trivial state $N = 0$. In order to set this situation right we have introduced an external source of particles (systems), acting in such a way that the total number of particles is conserved. If every time that an annihilation takes place, a new particle is inserted, as the clone of one of the $N - 1$ remaining particles (chosen uniformly among this population), then the evolution equation of $g(\mathbf{v}, t)$ will read:

$$\partial_t g(\mathbf{v}, t) = L_\lambda g(\mathbf{v}, t) + s g(\mathbf{v}, t), \quad (55)$$

where s is a constant rate. At late times, if the above equation has a steady state, the largest eigenvalue of the operator $L_\lambda + s$ will be zero, and hence one has that $\mu(\lambda) + s = 0$. Finally one can measure $\mu(\lambda)$ simply as the steady state average of the number of particles injected by the external source.

So far, we showed how to construct a Markov chain in order to simulate the eigenvalue equation (28) for positive values of λ . For negative values of λ the procedure is almost identical. Introducing a new time scale $\tilde{t} = (2e^{-\lambda} - 1)t$ Eq. (54) can be rewritten as:

$$\partial_{\tilde{t}} g(\mathbf{v}, \tilde{t}) = \frac{e^{-\lambda}}{2e^{-\lambda} - 1} I[g|\phi] - \frac{e^{-\lambda} - 1}{2e^{-\lambda} - 1} A[g|\phi]. \quad (56)$$

All the previous physical interpretations and remarks still hold, except that now instead of having annihilation (with probability $(e^{-\lambda} - 1)/(2e^{-\lambda} - 1)$), one has duplication (or cloning). Hence $\mu(\lambda)$ will be positive, and one can add an external source in order to remove particles when new particles are created. Summarizing, the algorithm proceeds as follows:

- (o) The velocity of the N particles are stored in a $N \times d$ matrix. A scalar s is set to 0. A (small) time step dt is chosen.
- (i) A particle is chosen randomly with uniform probability. Its velocity is denoted \mathbf{v}_1 .
- (ii) An eventual interaction is accepted with a probability $\propto \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma} \Theta(\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}) \times dt$, where $\hat{\sigma}$ is a random direction in d dimensions, and \mathbf{v}_2 a d -dimensional zero-mean Gaussian random variable of variance T_0 . In practice, dt has to be chosen in such a way that $|\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\sigma}| dt$ is always smaller than (or equal to) one.
- (iii) When the interaction is accepted, if $\lambda > 0$ (resp. $\lambda < 0$), the particle will have a post-collisional velocity \mathbf{v}_1^* with probability $e^{-\lambda}$ (resp. $\frac{e^{-\lambda}}{2e^{-\lambda} - 1}$) or will be removed (resp. duplicated) otherwise.
- (iv) If the particle has been removed (resp. duplicated) in step (iii), one of the $N - 1$ remaining particles is chosen randomly and uniformly, and is duplicated (resp. removed). s is increased by 1.
- (v) Time is increased by an amount dt (resp. $d\tilde{t}$).

(vi) Back to (i).

This algorithm bears some similarities with the approach proposed in [11], also intended to directly measure large deviation functions. Nonetheless, the version proposed here is more inspired by some variants of the DSMC algorithm for systems which do not conserve the total number of particles [12]. In order to check the reliability of the algorithm we have first performed some simulations in the case of Maxwell molecules, where the number of collisions is exactly distributed following the Poisson distribution (cf. the Introduction). The measurements of $\mu(\lambda)$ for this particular model are shown in Fig. 4, together with the generating function of the Poisson distribution, and are in perfect agreement. In the simulations the temperature scale is set by the temperature of the heat bath T_0 , which we set to unity. The time scale is set by the mean free time, which we also set to unity. Therefore in the simulation data the mean collision frequency is $\omega = 1$.

In the case of the hard-sphere model, a measurement of the largest eigenvalue $\mu(\lambda)$ is shown in Fig. 5. One can see that the numerical results are in very good agreement both with the Gaussian and the Sonine approximations. Figure 6 shows the large λ behavior of $\mu(\lambda)$ divided by the prediction (38). Also in this case, a good agreement between the numerical data and the theoretical predictions is found. In the framework of the above described Monte Carlo algorithm it is also possible to measure the stationary velocity pdf $g(\mathbf{v}, t = \infty, \lambda)$ which is equal to the eigenfunction $\tilde{f}(\mathbf{v}, \lambda)$ associated with $\mu(\lambda)$. Hence one can also compare the analytical predictions for the temperature $T(\lambda)$ and for the Sonine coefficient $a_2(\lambda)$ with the Monte Carlo results, see Figs. 7 and 8. In Fig. 7, one can see the temperature $T(\lambda)$. Here the Gaussian approximation is already able to capture the general behavior of this “effective” temperature, and for small values of λ the Sonine corrections compare very well with the simulation data. In Fig. 8, one can see the coefficient a_2 as a function of λ . As expected, for small values of λ the expansion carried out in the previous section correctly describes the result of the simulations.

5. Molecular Dynamics

The most direct way to measure the large deviation function of the number of collisions \mathcal{N} is of course to count it in a (numerical) experiment, and then construct its probability distribution function. To this end, we have performed Molecular Dynamics (MD) simulations of a two dimensional hard-disk gas of $N = 10^3$ particles of diameter $\sigma = 1$ at density $\rho = N/V = 10^{-3}\sigma^{-2}$ and $10^{-2}\sigma^{-2}$. The particles evolve in a square box with periodic boundary conditions, and the time is measured in mean free time units, in such a way that $\langle \mathcal{N} \rangle = t$. We measured the statistics of the number of collisions \mathcal{N} suffered by each particle. The value of the first cumulants is reported in Table I, together with the Poisson prediction, as well as the results from the Gaussian and Sonine

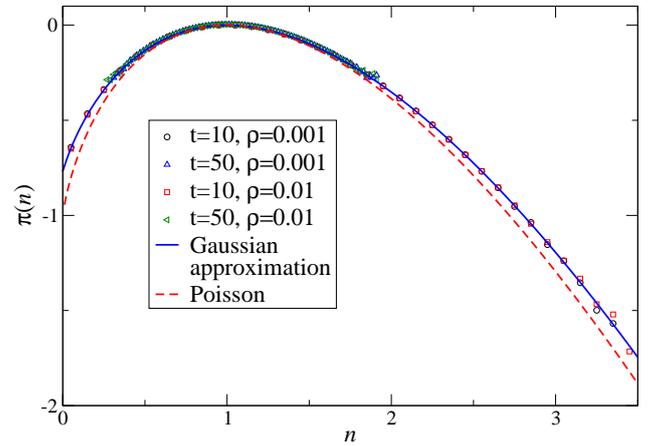


FIG. 9 Large deviation function $\pi(n)$ of the number of collisions \mathcal{N} suffered by each single particle. The solid line is the result in the framework of the Gaussian approximation, and the dashed line is the large deviation function of the Poisson distribution, of average 1: $\pi(n) = n - n \log n - 1$.

TABLE I Cumulants for the number of collisions \mathcal{N} from MD simulations, and comparison with the Gaussian and Sonine approximations (time is measured in units of the mean-free time).

	$\langle \mathcal{N} \rangle_c / t$	$\langle \mathcal{N}^2 \rangle_c / t$	$\langle \mathcal{N}^3 \rangle_c / t$
$t = 10$	1.	1.1228	1.1282
$t = 50$	1.	1.1354	1.1045
Poisson	1	1	1
Gaussian	1	1.125	1.1289
Sonine	1	1.1377	1.1073

approximations. It seems that, when time increases, the cumulants converge towards a value which is close to the Sonine predictions. However, it must be noted that even if increasing time makes finite time corrections smaller, the statistics become poorer and poorer. Figure 9 shows two measurements of the large deviation function of the number of collisions for two different times, $t = 10$ and $t = 50$ (with $\sigma = 1$ and $T_0 = 1$). The agreement with the results from the Sonine approximation is very good, while the Gaussian order already provides a reliable estimation.

V. CONCLUSION

We have shown that the collisional statistics of the hard sphere gas exhibits clear deviations from the Poisson distribution. These deviations have been consistently quantified both analytically and numerically. Interestingly, the present formalism can be extended to the study of out of equilibrium systems, such as granular gases, where the question of the collisional statistics has been the focus of recent interest [14, 15, 16]. In particular,

the strong effect of dissipation on the distribution of free flight times reported in [15] calls for further investigations. In addition, if one considers a gas of inelastic smooth hard spheres, kept in a steady state by a velocity independent force (as e.g. a vibrating wall of the container, or a stochastic force acting independently on each particle), then the phase space volume of the system has been reduced, after a time t , by a factor $(1-\alpha)^{N(t)}$, where α is the coefficient of normal restitution [13]. Hence one sees that in this non-equilibrium system, the number of collisions can be exactly identified, up to a constant prefactor, with the integrated phase space contraction rate. This quantity has already been the subject of many works in non-equilibrium statistical mechanics, and is often intimately related with the irreversible entropy production (see e.g. [17] and references therein).

Acknowledgments

The authors acknowledge useful discussions with J. Piascki, J. M. J. van Leeuwen, M. H. Ernst, D. Frenkel and H. van Beijeren. This work was supported by the French Ministry of Education through a JCJC ANR grant.

APPENDIX A: Comment on the free flights time distribution

We shall give here some supplementary arguments on the incorrectness of Eq. (9), when used with a Gaussian weight ϕ , instead of the weight ϕ_{coll} defined in Eq.(10). We shall refer to this (wrong) distribution as P_{FFT}^W :

$$P_{FFT}^W(t) = \int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{v}) P(t|\mathbf{v}). \quad (\text{A1})$$

A first argument bears on the inconsistency between the above relation and the definition of the collision frequency $\omega = \langle r(v) \rangle$, where the brackets denote an average over a Gaussian weight. Indeed, the average time τ between two subsequent collisions (mean free time) of a given particle is equal to the inverse of the collision frequency: $\tau = 1/\langle r(v) \rangle$. Besides, from Eq. (A1) the mean free time τ is obtained as:

$$\tau = \int_0^\infty dt t P_{FFT}^W(t) = \left\langle \frac{1}{r(v)} \right\rangle \neq \frac{1}{\langle r(v) \rangle}. \quad (\text{A2})$$

Hence we see that expression (A1) is in contradiction with the definition of the collision frequency. On the other hand, the counterpart of Eq. (A2) with the distribution provided by (9) and (10), yields

$$\tau = \int_0^\infty dt t \int d\mathbf{v} \frac{r^2(v)}{\omega} e^{-r(v)t} \phi(\mathbf{v}) = \frac{1}{\langle r \rangle}, \quad (\text{A3})$$

which the required relation.

Second, expression (A1) explicitly slightly differs from the correct free flight time distribution in two limiting cases.

- At small values of t , P_{FFT}^W behaves as:

$$P_{FFT}^W(t) \sim \langle r(v) \rangle - \langle r(v)^2 \rangle t + \mathcal{O}(t^2), \quad (\text{A4})$$

while the true distribution behaves as

$$P_{FFT}(t) \sim \frac{\langle r(v)^2 \rangle}{\omega} - \frac{\langle r(v)^3 \rangle}{\omega^2} t + \mathcal{O}(t^2), \quad (\text{A5})$$

so that even the value in $t = 0$ is different, although this difference is numerically small (see also Fig. 10). For instance, in $d = 2$ one has:

$$\frac{\langle r(v)^2 \rangle}{\omega^2} \simeq 1.06354 \quad (\text{A6})$$

and

$$\frac{\langle r(v)^3 \rangle}{\omega^3} \simeq 1.21204. \quad (\text{A7})$$

- The large time behavior of the probability also slightly differs from Eq. (11):

$$P_{FFT}^W \sim \exp\left(-\frac{\omega t}{\sqrt{2}}\right) 2^{\frac{d-1}{2}} \omega \left(2 - \frac{2}{d} + \frac{\sqrt{2}\omega t}{d}\right)^{-d/2}. \quad (\text{A8})$$

In the above expression, the leading exponential term remains the same as in Eq. (11), since it is only determined by the minimum of the function $r(v)$. Nonetheless, the subleading prefactor is slightly different, as it can be appreciated in Fig. 10.

APPENDIX B: Saddle-point approximation for the collision rate

In this appendix we show how to recover Eq. (12) with the saddle point method. We first note that $r(v)$ can be expressed as the difference of two different integrals:

$$r(v) = \Omega_{d-1} (I_1(v) - I_2(v)), \quad (\text{B1})$$

where

$$I_1(v) = \int_{-\infty}^{+\infty} dv_{2\sigma} \int_0^\pi d\theta \sin \theta^{d-2} (v \cos \theta) \times \Theta(v \cos \theta - v_{2\sigma}) \phi(v_{2\sigma}), \quad (\text{B2})$$

$$I_2(v) = \int_{-\infty}^{+\infty} dv_{2\sigma} \int_0^\pi d\theta \sin \theta^{d-2} v_{2\sigma} \times \Theta(v \cos \theta - v_{2\sigma}) \phi(v_{2\sigma}). \quad (\text{B3})$$

For the first integral it is more convenient to perform first the integration over the angle θ , which leads to:

$$I_1(v) = \frac{v}{d-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dv_{2\sigma} \left(1 - \left(\frac{v_{2\sigma}}{v}\right)^2\right)^{\frac{d-1}{2}} \phi(v_{2\sigma}). \quad (\text{B4})$$

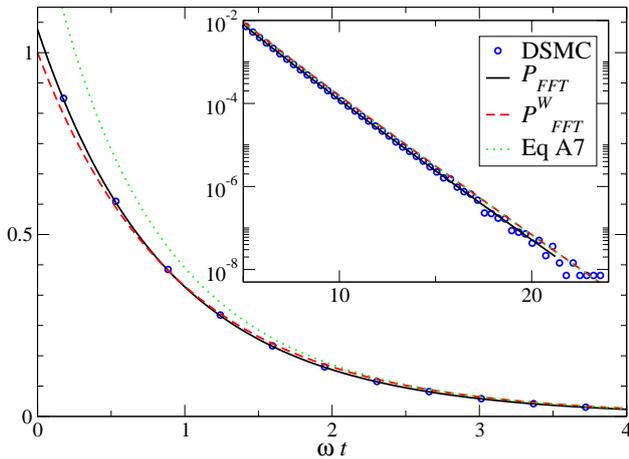


FIG. 10 Free flights time distribution of a hard disc gas. The circles corresponds to the results of Molecular Dynamics (MD) simulations at density $\rho = 0.01\sigma^{-2}$. The full line is the numerical integration of Eq. (9). The dashed line is the numerical integration of P_{FFT}^W , and the dotted line its large time behavior described by Eq. (A8). The inset shows the same data in semi-logarithmic scale, where it is possible to note that at large times the prediction of P_{FFT}^W is always above the true distribution. Time is measured in units of the mean free time ($\omega = 1$).

Then, defining the rescaled variables $\tilde{v} = v/\sqrt{2T_0d}$ and $\tilde{v}_{2\sigma} = v_{2\sigma}/\sqrt{2T_0d}$ one finds, to leading order in d :

$$I_1(\tilde{v}) \simeq \tilde{v} \sqrt{\frac{T_0}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{v}_{2\sigma} \times \exp \left[d \left(-\tilde{v}_{2\sigma}^2 + \frac{1}{2} \ln \left(1 - \left(\frac{\tilde{v}_{2\sigma}}{\tilde{v}} \right)^2 \right) \right) \right]. \quad (\text{B5})$$

When d is very large, the above integral is dominated by the maximum of the function inside the exponential, which turns out to be located in $\tilde{v}_{2\sigma} = 0$. One can then perform a series expansion around $\tilde{v}_{2\sigma} = 0$ up to the second order. This results in a Gaussian integral which is easily integrated, and yields:

$$I_1(\tilde{v}) \simeq \sqrt{\frac{T_0}{d}} \frac{2\tilde{v}^2}{\sqrt{1+2\tilde{v}^2}}. \quad (\text{B6})$$

For what concerns the second integral involved in the expression of $r(v)$ the simplest is to first perform the integration over $v_{2\sigma}$; one hence obtains, to leading order in d :

$$I_2(\tilde{v}) = -\sqrt{\frac{T_0}{2\pi}} \int_0^\pi \exp [d(-\tilde{v}^2 \cos^2 \theta + \ln \sin \theta)] d\theta. \quad (\text{B7})$$

The only maximum of the function in the exponential between 0 and π is in $\theta = \pi/2$. Then, expanding as usual this function around the maximum up to the second order, and extending the range of integration from $-\infty$

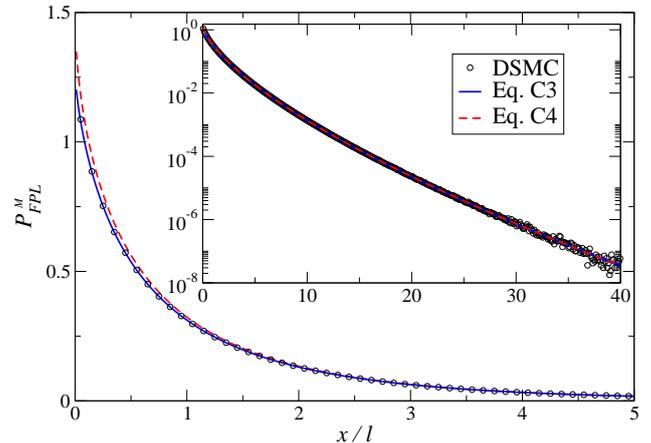


FIG. 11 Free path length distribution for Maxwell molecules in two dimensions. The circles are the result of a DSMC simulation, while the solid line is the numerical integration of Eq. (C3). The dashed line is the large length approximation of Eq. (C4). All data are reported in units of mean free path.

to $+\infty$, one finds:

$$I_2(\tilde{v}) \simeq \sqrt{\frac{T_0}{d}} \frac{1}{\sqrt{1+2\tilde{v}^2}}. \quad (\text{B8})$$

Finally, noting that $\Gamma(d/2)/\Gamma((d-1)/2) \stackrel{d \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{d}{2}}$, Eq. (12) follows.

APPENDIX C: Free path length distribution for Maxwell molecules

In this appendix, we investigate the free path length distribution for Maxwell molecules. As already mentioned, in this case the collision rate is a constant, ω , independently of the velocity of the particle. It follows then that the free flight time probability is exponential:

$$P_{FFT}^M(t|\mathbf{v}) = P_{FFT}^M(t) = \omega e^{-\omega t}. \quad (\text{C1})$$

Besides, the free path length distribution for a given velocity \mathbf{v} reads:

$$P_{FPL}^M(x|\mathbf{v}) = \frac{\omega}{v} \exp\left(-\frac{\omega}{v}x\right), \quad (\text{C2})$$

and the free path length distribution is simply the average of the above probability over a Gaussian weight (for Maxwell molecules the on collision distribution ϕ_{coll} is still a Gaussian):

$$P_{FPL}^M(x) = \int d\mathbf{v} \phi(\mathbf{v}) P_{FPL}^M(x|\mathbf{v}). \quad (\text{C3})$$

This last expression can be expressed analytically in terms of Meijer G-functions [5], but here we shall focus only on the large length behavior, for which simpler

expressions are available. In particular, the saddle point approximation gives:

$$P_{FPL}^M(x) \sim \frac{\sqrt{2}\omega\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)}{\sqrt{T}3^{(d-1)/2}\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \exp\left(-3\left(\frac{\omega x}{\sqrt{T}}\right)^{2/3}\right) \times {}_1F_1\left(\frac{d-1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\left(\frac{\omega x}{\sqrt{T}}\right)^{2/3}\right), \quad (C4)$$

which leads to a stretched exponential behavior at large x ($\sim \exp -x^{2/3}$) (cf Fig. 11).

APPENDIX D: Collisional moments

We provide here the expressions of the first collisional moments, defined by Eq. (42), for \tilde{f} a Gaussian, and a Gaussian multiplied by a Sonine Polynomial. We note

$$\nu_n^{(0)} = \int d\mathbf{v}_1 v_1^n L_\lambda \frac{e^{-\frac{v_1^2}{2T}}}{(2\pi T)^{d/2}}, \quad (D1)$$

$$\nu_n^{(1)} = \int d\mathbf{v}_1 v_1^n L_\lambda \frac{e^{-\frac{v_1^2}{2T}}}{(2\pi T)^{d/2}} S_2\left(\frac{v_1^2}{2T}\right). \quad (D2)$$

Hence in the Gaussian approximation one has $\nu_n \equiv \nu_n^{(0)}$, while in the Sonine approximation $\nu_n \equiv \nu_n^{(0)} + a_2 \nu_n^{(1)}$. The expressions of the first $\nu_n^{(i)}$ are:

$$\nu_0^{(0)} = -\left(\frac{(e^{-\lambda} - 1)\sqrt{T+T_0}}{\sqrt{2\pi}}\right) \quad (D3)$$

$$\nu_2^{(0)} = \frac{T^2 + 2TT_0 + 2T_0^2 - e^{-\lambda}T(3T + 2T_0)}{e^{-\lambda}\sqrt{2\pi}\sqrt{T+T_0}} \quad (D4)$$

$$\nu_4^{(0)} = \left\{ \sqrt{\pi} \left(- (e^{-\lambda} T^2 (8T^2 + 12TT_0 + 3T_0^2)) + T_0^2 (3T^2 + 12TT_0 + 8T_0^2) \right) - 4T(T+T_0) \left(\frac{3(-1+e^{-\lambda})\sqrt{\pi}T(T+T_0)}{4} + \frac{\sqrt{\pi}(e^{-\lambda}T(2T+T_0) - T_0(T+2T_0))}{2} \right) \right\} / \left\{ \sqrt{2}e^{-\lambda}\pi(T+T_0)^{\frac{3}{2}} \right\} \quad (D5)$$

$$\nu_0^{(1)} = \frac{(-1+e^{-\lambda})T^2}{8e^{-\lambda}\sqrt{2\pi}(T+T_0)^{\frac{3}{2}}} \quad (D6)$$

$$\nu_2^{(1)} = \frac{T^2(-3(1+e^{-\lambda}+2(-1+e^{-\lambda})))T^2 - (-6+22e^{-\lambda})TT_0 - 2(-3+8e^{-\lambda})T_0^2}{8e^{-\lambda}\sqrt{2\pi}(T+T_0)^{\frac{5}{2}}} \quad (D7)$$

$$\nu_4^{(1)} = \left\{ T^2(-45(-1+5e^{-\lambda})T^4 + 6(28-132e^{-\lambda})T^3T_0 - (-228+1000e^{-\lambda})T^2T_0^2 + 4(36-128e^{-\lambda})TT_0^3 + 8(3-8e^{-\lambda})T_0^4) \right\} / \left\{ 8e^{-\lambda}\sqrt{2\pi}(T+T_0)^{\frac{7}{2}} \right\} \quad (D8)$$

References

- [1] L. Lue, J. Chem. Phys. **122**, 044513 (2005).
- [2] M. H. Ernst, Phys. Reports **78**, 1 (1981).
- [3] D. Enskog, Physik Z. **12**, 56 (1911).
- [4] A. Puglisi, P. Visco, E. Trizac, and F. van Wijland, Phys. Rev. E **73**, 021301 (2006).
- [5] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables* (Dover, New York, 1972).
- [6] F. W. Wiegel and J. P. J. Michels, Chem. Phys. Lett. **40**, 23 (1976).
- [7] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Clarendon, Oxford, 1994).
- [8] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953).
- [9] S. Chapman and T. G. Cowling, *The mathematical theory of nonuniform gases* (Cambridge University Press,

- London, 1960).
- [10] F. Coppex, M. Droz, and E. Trizac, *Phys. Rev. E* **69**, 011303 (2004).
 - [11] C. Giardinà, J. Kurchan, and L. Peliti, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 120603 (2006).
 - [12] E. Trizac, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 160601 (2002).
 - [13] T. Pöschel and S. Luding, editors, *Granular Gases*, Berlin, 2001, Springer, Lecture Notes in Physics 564.
 - [14] I. Pagonabarraga, E. Trizac, T.P.C. van Noije and M.H. Ernst, *Phys. Rev. E* **65**, 011303 (2002).
 - [15] D. L. Blair and A. Kudrolli, *Phys. Rev. E* **67**, 041301 (2003).
 - [16] E. Falcon, S. Aumaître, P. Évesque, F. Palencia, C. Lecoutre-Chabot, S. Fauve, D. Beysens and Y. Garra-bos, *Europhys. Lett.* **74**, 830 (2006).
 - [17] P. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, E. Trizac and F. van Wijland, *Europhys. Lett.* **72**, 55 (2005).

Liste des acronymes

pdf fonction de distribution de la probabilité

DSMC Direct Simulation Monte Carlo

MD Dynamique Moléculaire

FR Relation de Fluctuation

EFR Relation de Fluctuation Étendue

Acronymes

Bibliographie

- [1] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, New York, 1964.
- [2] S. Aumaître, J. Farago, S. Fauve, and S. McNamara. Energy and power fluctuations in vibrated granular gases. *Eur. Phys. J. B*, 42 :255, 2004.
- [3] S. Aumaître, S. Fauve, S. McNamara, and P. Poggi. Power injected in dissipative systems and the fluctuation theorem. *Eur. Phys. J. B*, 19 :449–460, 2001.
- [4] A. Baldassarri, U. M. B. Marconi, and A. Puglisi. Influence of correlations on the velocity statistics of scalar granular gases. *Europhys. Lett.*, 58 :14–20, 2002. cond-mat/0111066.
- [5] A. Barrat and E. Trizac. A molecular dynamics “Maxwell demon” experiment for granular mixtures. *Mol. Phys.*, 101(11) :1713–1719, 2003. cond-mat/0212054.
- [6] A. Barrat, E. Trizac, and M. H. Ernst. Granular gases : dynamics and collective effects. *J. Phys. Condens. Matter*, 17 :S2429, 2005.
- [7] A. Barrat, E. Trizac, and J.-N. Fuchs. Heated granular fluids : the random restitution coefficient approach. *Eur. Phys. J. E*, 5 :161, 2001.
- [8] E. Ben-Naim and P. Krapivsky. The inelastic Maxwell model. In *Lecture Notes in Physics*, volume 624, page 65, Berlin, 2003. Springer. cond-mat/0301238.
- [9] E. Ben-Naim and P. L. Krapivsky. Nontrivial velocity distributions in inelastic gases. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 35 :L147–L152, 2002. cond-mat/0111044.
- [10] I. Bena, F. Coppex, M. Droz, P. Visco, E. Trizac, and F. van Wijland. Stationary state of a heated granular gas : fate of the usual H -functional. *Physica A*, 370 :179, 2006.
- [11] E. Bertin. Global fluctuations and Gumbel statistics. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :170601, 2005.
- [12] E. Bertin and M. Clusel. Generalised extreme value statistics and sum of correlated variables. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 39 :7607, 2006.
- [13] G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon, Oxford, 1994.
- [14] A. V. Bobylev, J. A. Carrillo, and I. M. Gamba. On some properties of kinetic and hydrodynamic equations for inelastic interactions. *J. Stat. Phys.*, 98 :743, 2000.
- [15] T. Bodineau and B. Derrida. Current fluctuations in nonequilibrium diffusive systems : An additivity principle. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :180601, 2004.

Bibliographie

- [16] L. Boltzmann. Weitere studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen. *Wien. Ber.*, 66 :274, 1872.
- [17] F. Bonetto, G. Gallavotti, and P. Garrido. Chaotic hypothesis : an experimental test. *Physica D*, 105 :226, 1997.
- [18] F. Bonetto, G. Gallavotti, A. Giuliani, and F. Zamponi. Chaotic hypothesis, fluctuation theorem and singularities. *J. Stat. Phys.*, 123(1) :39, 2006. cond-mat/0507672.
- [19] F. Bonetto, G. Gallavotti, A. Giuliani, and F. Zamponi. Fluctuations relation and external thermostats : an application to granular materials. *J. Stat. Mech.*, (P05009), 2006.
- [20] S. T. Bramwell, K. Christensen, J.-Y. Fortin, P. C. W. Holdsworth, H. J. Jensen, S. Lise, J. M. López, M. Nicodemi, J.-F. Pinton, and M. Sellitto. Universal fluctuations in correlated systems. *Phys. Rev. Lett.*, 84(17) :3744–3747, Apr 2000.
- [21] S. T. Bramwell, P. C. W. Holdsworth, and J.-F. Pinton. Universality of rare fluctuations in turbulence and critical phenomena. *Nature*, 396 :552–554, 1998.
- [22] J. J. Brey and D. Cubero. Steady state of a fluidized granular medium between two walls at the same temperature. *Phys. Rev. E*, 57(2) :2019–2029, 1998.
- [23] J. J. Brey, M. I. G. de Soria, P. Maynar, and M. J. Ruiz-Montero. Energy fluctuations in the homogeneous cooling state of granular gases. *Phys. Rev. E*, 70(011302), 2004.
- [24] J. J. Brey, M. I. G. de Soria, P. Maynar, and M. J. Ruiz-Montero. Scaling and universality of critical fluctuations in granular gases. *Phys. Rev. Lett.*, 94 :098001, 2005.
- [25] J. J. Brey, J. W. Dufty, C. S. Kim, and A. Santos. Hydrodynamics for granular flow at low density. *Phys. Rev. E*, 58(4) :4638, 1998.
- [26] J. J. Brey, J. W. Dufty, and A. Santos. Dissipative dynamics for hard spheres. *J. Stat. Phys.*, 87(5/6) :1051–1067, 1997.
- [27] J. J. Brey, F. Moreno, R. Garcia-Rojo, and M. J. Ruiz-Montero. Hydrodynamic Maxwell demon in granular systems. *Phys. Rev. E*, 65(011305), 2002.
- [28] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, and D. Cubero. Origin of density clustering in a freely evolving granular gas. *Phys. Rev. E*, 60 :3150, 1999.
- [29] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero, and F. Moreno. Boundary conditions and normal state for a vibrated granular fluid. *Phys. Rev. E*, 62 :5339–5346, 2000.
- [30] N. V. Brilliantov and T. Pöschel. Breakdown of the Sonine expansion for the velocity distribution of granular gases. *Europhys. Lett.*, 74 :424, 2006.
- [31] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J. M. Hertzsch, and T. Pöschel. Model for collisions in granular gases. *Phys. Rev. E*, 53(5) :5382, 1996.
- [32] R. Brito and M. H. Ernst. Extension of Haff’s cooling law in granular flows. *Europhys. Lett.*, 43(15) :497–502, 1998. cond-mat/9807224.

- [33] H. B. Callen and R. F. Greene. On a theorem of irreversible thermodynamics. *Phys. Rev.*, 86(5) :702–710, Jun 1952.
- [34] F. Cecconi, F. Diotallevi, U. M. B. Marconi, and A. Puglisi. Fluid-like behavior of a one-dimensional granular gas. *J. Chem. Phys.*, 120 :35, 2004.
- [35] S. Chapman and T. G. Cowling. *The mathematical theory of nonuniform gases*. Cambridge University Press, London, 1960.
- [36] S. Ciliberto. Power and heat fluctuation theorems for electric circuits. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :130601, 2004.
- [37] S. Ciliberto, N. Garnier, S. Hernadez, C. Lacpatia, J.-F. Pinton, and G. R. Chavarria. Experimental test of the Gallavotti-Cohen fluctuation theorem in turbulent flows. *Physica A*, 340 :240–250, 2004.
- [38] S. Ciliberto and C. Laroche. An experimental test of the Gallavotti-Cohen fluctuation theorem. *Journal de Physique IV*, 8 :215, 1998.
- [39] M. Clusel, J.-Y. Fortin, and P. C. W. Holdsworth. Criterion for universality class independent critical fluctuations : example of the 2d ising model. *Phys. Rev. E*, 70 :046112, 2004.
- [40] S. R. de Groot and P. Mazur. *Non-equilibrium thermodynamics*. North-Holland, Amsterdam, 1969.
- [41] C. V. den Broeck, R. Kawai, and P. Meurs. Microscopic analysis of a thermal brownian moto. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :090601, 2004.
- [42] B. Derrida and E. Brunet. Le mouvement brownien et le théorème de fluctuation-dissipation. In *Einstein aujourd'hui*. EDP Sciences, Les Ulis, 2005.
- [43] B. Derrida, B. Doucot, and P. E. Roche. Current fluctuations in the one dimensional symmetric exclusion process with open boundaries. *J. Stat. Phys.*, 115 :717, 2004.
- [44] B. Derrida and J. L. Lebowitz. Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process. *Phys. Rev. Lett.*, 80(2) :209–213, Jan 1998.
- [45] C. P. Dettmann and G. P. Morriss. Proof of Lyapunov exponent pairing for systems at constant kinetic energy. *Phys. Rev. E*, 53(6) :R5545–R5548, 1996.
- [46] J. Eggers. Sand as Maxwell’s demon. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :5322–5325, 1999. cond-mat/9906275.
- [47] A. Einstein. über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen. *Ann. d. Phys.*, 17 :549, 1905.
- [48] R. S. Ellis. Large deviations for a general class of random vectors. *The Annals of Probability*, 12(1) :1–12, 1984.
- [49] M. H. Ernst. Nonlinear model-Boltzmann equations and exact solutions. *Phys. Rep.*, 78 :1–171, Nov. 1981.
- [50] M. H. Ernst and R. Brito. High-energy tails for inelastic Maxwell models. *Europhys. Lett.*, 58 :182, 2002.

Bibliographie

- [51] M. H. Ernst and E. G. D. Cohen. Nonequilibrium fluctuations in μ -space. *J. Stat. Phys.*, 25(1) :153, 1981.
- [52] M. H. Ernst, J. R. Dorfmann, W. R. Hoegy, and J. M. J. van Leeuwen. Hard-sphere dynamics and binary-collision operators. *Physica*, 45 :127, 1969.
- [53] D. J. Evans, E. G. D. Cohen, and G. P. Morriss. Probability of second law violations in shearing steady states. *Phys. Rev. Lett.*, 71 :2401, 1993.
- [54] D. J. Evans, D. J. Searles, and L. Rondoni. Application of the gallavotti-cohen fluctuation relation to thermostated steady states near equilibrium. *Phys. Rev. E*, 71 :056120, 2005.
- [55] J. Farago. Injected power fluctuations in Langevin equation. *J. Stat. Phys.*, 107 :781, 2002.
- [56] J. Farago. Power fluctuations in stochastic models of dissipative systems. *Physica A*, 331 :69–89, 2004.
- [57] K. Feitosa and N. Menon. Breakdown of energy equipartition in a 2d binary vibrated granular gas. *Phys. Rev. Lett.*, 88(19) :198301–1, 2002.
- [58] K. Feitosa and N. Menon. Fluidized granular medium as an instance of the fluctuation theorem. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :164301, 2004.
- [59] W. Feller. *Probability Theory and its Applications*. John Wiley & Sons, New York, 1971.
- [60] G. Gallavotti. Chaotic principle : Some applications to developed turbulence. *J. Stat. Phys.*, 86(5-6) :907, 1996.
- [61] G. Gallavotti. Reversible Anosov diffeomorphisms and large deviations. *MPEJ*, 1(1), 95.
- [62] G. Gallavotti and E. G. D. Cohen. Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics. *Phys. Rev. Lett.*, 74 :2694, 1995.
- [63] C. W. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods*. Springer Verlag, Berlin, 1983.
- [64] N. Garnier and S. Ciliberto. Nonequilibrium fluctuations in a resistor. *Phys. Rev. E*, 71 :060101(R), 2005.
- [65] J. Gärtner. On large deviations from the invariant measure. *Theory of Probability and its Applications*, 22(1) :24–39, 1977.
- [66] C. Giardinà, J. Kurchan, and L. Peliti. Direct evaluation of large-deviation functions. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :120603, 2006.
- [67] P. Glansdorff and I. Prigogine. *Thermodynamic Theory of Stability, Structure, Fluctuation*. Wiley, New York, 1971.
- [68] I. Goldhirsch and G. Zanetti. Clustering instability in dissipative gases. *Phys. Rev. Lett.*, 70(11) :1619–1622, 1993.
- [69] A. Gomez-Marin and J. M. Sancho. Heat fluctuations in brownian transducers. *Phys. Rev. E*, 73 :045101(R), 2006.

- [70] H. Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. *Commun. Pure Appl. Math.*, 2 :331, 1949.
- [71] M. S. Green. Markoff random processes and the statistical mechanics of time-dependenet phenomena. ii. irreversible processes in fluids. *J. Chem. Phys.*, 22 :398, 1954.
- [72] E. J. Gumbel. *Statistics of Extremes*. Columbia University Press, New York, 1958.
- [73] G. Györgyi, P. C. W. Holdsworth, B. Portelli, and Z. Rácz. Statistics of extremal intensities for gaussian interfaces. *Phys. Rev. E*, 68(5) :056116, Nov 2003.
- [74] P. K. Haff. Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon. *J. Fluid Mech.*, 134 :401–430, 1983.
- [75] J.-M. Hertzsch, F. Spahn, and N. V. Brilliantov. On low-velocity collisions of viscoelastic particles. *J. Phys. II*, 5 :1725–1738, 1995.
- [76] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer. Granular solids, liquids, and gases. *Rev. Mod. Phys.*, 68(4) :1259–1273, Oct 1996.
- [77] E. T. Jaynes. Violation of Boltzmann’s h theorem in real gases. *Phys. Rev. A*, 4(2) :747–750, Aug 1971.
- [78] J. T. Jenkins and M. W. Richman. Kinetic theory for plane shear flows of a dense gas of identical, rough, inelastic, circular disks. *Phys. of Fluids*, 28 :3485–3494, 1985.
- [79] R. Kubo. Statistical mechanical theory of irreversible processes. *Proc. Soc. Japan*, 12 :570, 1957.
- [80] J. Kurchan. Fluctuation theorem for stochastic dynamics. *J. Phys. A.*, 31 :3719, 1998.
- [81] R. Labbe, J.-F. Pinton, and S. Fauve. Power fluctuations in turbulent swirling flows. *Journal de Physique II*, 6 :1, 1996.
- [82] J. L. Lebowitz and H. Spohn. A Gallavotti-Cohen-type symmetry in the large deviation functional for stochastic dynamics. *J. Stat. Phys.*, 95 :333, 1999.
- [83] C. K. K. Lun. Kinetic theory for granular flow of dense, slightly inelastic, slightly rough spheres. *J. Fluid Mech.*, 233 :539–559, 1991.
- [84] C. K. K. Lun and S. B. Savage. A simple kinetic theory for granular flow of rough, inelastic, spherical particles. *J. Appl. Mech.*, 54 :47, 1987.
- [85] P. A. Martin and J. Piasecki. Thermalization of a particle by dissipative collisions. *Europhys. Lett.*, 46(5) :613, 1999.
- [86] J. C. Maxwell. On the dynamical theory of gases. *Phil. Trans.*, 157 :49, 1867.
- [87] S. McNamara and S. Luding. Energy flows in vibrated granular media. *Phys. Rev. E*, 58 :813–822, 1998.
- [88] S. McNamara and S. Luding. Energy nonequipartition in systems of inelastic, rough spheres. *Phys. Rev. E*, 58 :2247–2250, 1998.

Bibliographie

- [89] J. M. Montanero and A. Santos. Computer simulation of uniformly heated granular fluids. *Granular Matter*, 2(2) :53–64, 2000. cond-mat/0002323.
- [90] N. Mordant, P. Metz, O. Michel, and J.-F. Pinton. Measurement of lagrangian velocity in fully developed turbulence. *Phys. Rev. Lett.*, 87(21) :214501, Nov 2001.
- [91] A. Noullez and J.-F. Pinton. Global fluctuations in decaying Burgers turbulence. *Eur. Phys. J. B*, 28 :231, 2002.
- [92] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes I. *Phys. Rev.*, 37(4) :405–426, Feb 1931.
- [93] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes II. *Phys. Rev.*, 38(12) :2265–2279, Dec 1931.
- [94] I. Pagonabarraga, E. Trizac, T. P. C. van Noije, and M. H. Ernst. Randomly driven granular fluids : Collisional statistics and short scale structure. *Phys. Rev. E*, 65(1) :011303, 2002.
- [95] J.-F. Pinton, P. C. W. Holdsworth, and R. Labbé. Power fluctuations in a closed turbulent shear flow. *Phys. Rev. E*, 60(3) :R2452–R2455, Sep 1999.
- [96] B. Portelli and P. C. W. Holdsworth. Relevance of soft modes for order parameter fluctuations in the two-dimensional XY model. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 35 :1231, 2002.
- [97] A. Prevost, D. A. Egolf, and J. S. Urbach. Forcing and velocity correlations in a vibrated granular monolayer. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :084301, 2002.
- [98] A. Puglisi, L. Rondoni, and A. Vulpiani. Relevance of initial and final conditions for the fluctuation relation in markov processes. *J. Stat. Mech.*, P08010, 2006.
- [99] A. Puglisi, P. Visco, E. Trizac, and F. van Wijland. Dynamics of a tracer granular particle as a non-equilibrium markov process. *Phys. Rev. E*, 73 :021301, 2005. cond-mat/0509493.
- [100] A. Puglisi, P. Visco, E. Trizac, and F. van Wijland. Dynamics of a tracer granular particle as a non-equilibrium markov process. *Phys. Rev. E*, 73 :021301, 2006.
- [101] Z. A. Rácz. Scaling functions for nonequilibrium fluctuations : a picture gallery. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, 5112 :248, 2003.
- [102] P. Reis, R. Ingale, and M. Shattuck. Universal velocity distributions in an experimental granular fluid. cond-mat/0611024, 2006.
- [103] P. M. V. Résibois and M. D. Leener. *Classical Kinetic Theory of Fluids*. John Wiley & Sons, 1977.
- [104] D. Ruelle. *Thermodynamic Formalism*. Addison-Wesley, Reading, 1978.
- [105] A. Santos. Transport coefficients of d -dimensional inelastic Maxwell models. *Physica A*, 321 :442, 2003.
- [106] K. van der Weele, D. van der Meer, M. Versluis, and D. Lohse. Hysteretic clustering in granular gas. *Europhys. Lett.*, 53(3) :328–334, 2001.
- [107] N. van Kampen. *Stochastic processes in physics and chemistry*. North-Holland, Amsterdam, 1992.

- [108] T. P. C. van Noije and M. H. Ernst. Velocity distributions in homogeneously cooling and heated granular fluids. *Granular Matter*, 1(2) :57–64, 1998.
- [109] T. P. C. van Noije and M. H. Ernst. Cahn-hilliard theory for unstable granular flows. *Phys. Rev. E*, 61 :1765–1782, 2000.
- [110] T. P. C. van Noije, M. H. Ernst, and R. Brito. Ring kinetic theory for an idealized granular gas. *Physica A*, 251 :266–283, 1998.
- [111] T. P. C. van Noije, M. H. Ernst, E. Trizac, and I. Pagonabarraga. Randomly driven granular fluids : Large scale structure. *Phys. Rev. E*, 59 :4326–4341, 1999.
- [112] F. van Wijland. Comment on heat fluctuations in brownian transducers. *Phys. Rev. E*, 74 :063101, 2006.
- [113] R. van Zon and E. G. D. Cohen. Extension of the fluctuation theorem. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :110601, 2003.
- [114] P. Viot and J. Talbot. Thermalization of an anisotropic granular particle. *Phys. Rev. E*, 69 :051106, 2004.
- [115] P. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, E. Trizac, and F. van Wijland. Fluctuations of power injection in randomly driven granular gases. *J. Stat. Phys.*, 125(3) :259, 2006. cond-mat/0509487.
- [116] P. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, F. van Wijland, and E. Trizac. Energy fluctuations in vibrated and driven granular gases. *Eur. Phys. J. B*, 51 :377, 2006.
- [117] G. M. Wang, E. M. Sevick, E. Mittag, D. J. Searles, and D. J. Evans. Experimental demonstration of violations of the second law of thermodynamics for small systems and short time scales. *Phys. Rev. Lett.*, 89(5) :050601, Jul 2002.
- [118] R. D. Wildman and D. J. Parker. Energy nonequipartition in a vibrated granular gas mixture. *Phys. Rev. Lett.*, 88(19) :064301, 2002.

Bibliographie

Liste de publications

Revue à comité de lecture

- P1. P. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, E. Trizac, F. van Wijland
Injected power and entropy flow in a heated granular gas,
Europhys. Lett. **72**, 55 (2005).
- P2. A. Puglisi, P. Visco, A. Barrat, E. Trizac, F. van Wijland,
Fluctuations of internal energy flow in a vibrated granular gas,
Phys. Rev. Lett. **95**, 110202 (2005).
- P3. A. Puglisi, P. Visco, E. Trizac, F. van Wijland,
Dynamics of a tracer granular particle as a non-equilibrium Markov process,
Phys. Rev. E **73**, 021301 (2006).
- P4. P. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, E. Trizac, F. van Wijland,
Fluctuations of power injection in randomly driven granular gases,
J. Stat. Phys. **125** (2006) 529.
- P5. I. Bena, F. Coppex, M. Droz, P. Visco, E. Trizac, F. van Wijland,
Stationary state of a heated granular gas : fate of the usual H-functional,
Physica A **370**, 179-189 (2006).
- P6. P. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, F. van Wijland, E. Trizac,
Energy fluctuations in vibrated and driven granular gases,
Eur. Phys. J. B **51**, 377-387 (2006).
- P7. P. Visco,
Work fluctuations for a Brownian particle between two thermostats,
J. Stat. Mech. P06006 (2006).

Annales de conférences

- P8. A. Puglisi, A. Barrat, E. Trizac, P. Visco, F. van Wijland,
On the validity of Gallavotti-Cohen Fluctuation Relation in granular gases,
Powder & Grains 2005, 1201, R.Garca-Rojo, H.J. Herrmann & S. McNamara, Eds.
A.A.Balkema, Rotterdam, 2005
- P9. A. Puglisi, P. Visco, A. Barrat, E. Trizac, F. van Wijland,
Fluctuations in granular gases,
Proceedings of the Reggio conference Granular Matter : Mathematical Modeling
and Physical Instances, June 2005.

Pré-publications

- P10. P. Visco, A. Puglisi, A. Barrat, E. Trizac, F. van Wijland,
Power injected in a granular gas,
Contribution aux annales de la conférence "Work, Dissipation, and Fluctuations in
Nonequilibrium Physics", Bruxelles, 2006. A paraître dans Comptes rendus Phy-
sique.
- P11. P. Visco, F. van Wijland, E. Trizac, *Collisional statistics of the hard-sphere gas*,
soumis à J. Chem. Phys.