

Chapitre 4

Fluctuations de la distribution de rapidités dans les états stationnaires du modèle de Lieb–Liniger homogène

Sommaire

4.1	Fluctuation-réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés	54
4.1.1	Charges généralisées et dérivées fonctionnelles	54
4.1.2	Poids spectral et formulation du GGE	57
4.1.3	Vérification numérique : Echantillonnage du GGE	58
4.2	Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilité	62
4.2.1	Susceptibilité spectrale et structure variationnelle de l'entropie	62
4.2.2	Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique	63
4.2.3	Expression de la Hessienne	65
4.2.4	Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne	65
4.2.5	Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle	66

Introduction

Pourquoi étudier les fluctuations ? On considère un sous-système quantique intégrable, préparé dans un état initial loin de l'équilibre, qui évolue sous l'action de son hamiltonien intégrable du modèle de LL. Après une période de relaxation, le système atteint un état stationnaire décrit par une distribution de rapidité moyenne $\rho_{\text{eq}}(\theta)$.

L'hypothèse selon laquelle, après relaxation, le sous-système est décrit par un *Generalized Gibbs Ensemble* (GGE) constitue un fondement majeur de notre compréhension des dynamiques hors équilibre dans les systèmes intégrables. Cette hypothèse, bien que robuste théoriquement, appelle à être testée expérimentalement.

Toutefois, la seule connaissance de la distribution de rapidité moyenne ρ_{eq} ne permet pas, à elle seule, de confirmer la validité du GGE. En effet, plusieurs ensembles statistiques peuvent mener à une même valeur moyenne de $\rho(\theta)$. Pour lever cette ambiguïté, il est nécessaire d'étudier les **fluctuations** autour de la distribution typique, notées $\delta\rho$, définies par : $\rho = \rho_{\text{eq}} + \delta\rho$. Cela nécessite de pousser le développement fonctionnel de la *fonction thermodynamique effective* $(S_{\text{YY}} - \mathcal{W})[\rho]$ à l'ordre quadratique en $\delta\rho$.

Si la GGE décrit correctement la valeur moyenne de $\rho(\theta)$ après relaxation, il est naturel de se demander si elle capture également les *fluctuations* autour de cette moyenne. Autrement dit, notre objectif est de tester si la GGE constitue le *bon ensemble statistique* pour l'état stationnaire, en analysant non seulement la distribution moyenne des quasi-particules, mais aussi ses fluctuations.

Plusieurs travaux récents ont mis en lumière l'intérêt expérimental de sonder ces fluctuations. De Nardis et al. ont notamment montré que la mesure de la *structure dynamique* de la densité, après un quench, permet de reconstruire entièrement l'état stationnaire, c'est-à-dire la distribution $\rho(\theta)$ du GGE [Nar+17]. En particulier, l'analyse du facteur de structure dynamique permet d'extraire les différentes *températures effectives* β_i du GGE, et donc d'accéder à la distribution macroscopique des quasi-particules [GA14; CK12].

Ainsi, en mesurant les corrélations dynamiques du gaz — accessibles expérimentalement via la spectroscopie ou les fluctuations de densité — on peut tester si les fluctuations observées concordent avec celles prédites par la GGE.

Concrètement, cela consiste à analyser la dispersion des rapidités sur plusieurs répétitions expérimentales d'un même quench. Si la GGE décrit correctement l'état stationnaire, la variance et les corrélations des fluctuations de $\rho(\theta)$ devraient être en accord avec les prédictions du formalisme fluctuationnel issu de on définit la matrice densité $\hat{\rho}_{\text{GGE}}^{(S)}$, cf. (2.2).

Le lien entre fluctuations, fonctions de réponse, et GGE a suscité un intérêt croissant dans les systèmes quantiques intégrables. Le formalisme des charges quasi-locales et des potentiels conjugués dans le GGE a été précisé dans le modèle de Lieb–Liniger par Pálmai et Konik [PK18], qui montrent comment structurer la matrice densité en termes de fonctionnelles de rapidité. L'identité fondamentale liant la dérivée fonctionnelle de l'entropie de Yang–Yang au noyau de fluctuations $\chi_w(\theta, \theta')$ est également dérivée dans ce cadre.

La relation fluctuation–réponse dans les gaz bosoniques unidimensionnels a été étudiée en profondeur par De Nardis et al. [Nar+17], qui proposent une méthode pour reconstruire les fluctuations thermiques à partir de fonctions de réponse dynamiques, en comparant mesures expérimentales et théories thermodynamiques. D'autres travaux, comme ceux de Goldstein et Andrei [GA14], ou de Caux et Konik [CK12], examinent en détail la relaxation vers un GGE à la suite d'un quench quantique, et en particulier le rôle de la distribution de rapidité dans la description des états stationnaires.

En résumé, l'étude des fluctuations de la distribution de rapidités fournit un test clé de la validité du GGE pour modéliser les résultats expérimentaux dans le modèle de LL [Nar+17].

Ce chapitre est consacré à cette extension, qui permettra :

- d'obtenir les matrices de susceptibilité χ_w et les corrélations gaussiennes du GGE;
- de fournir la base théorique des équations d'hydrodynamique généralisée au second ordre.

Nous commencerons par rappeler le formalisme variationnel, puis nous dériverons l'action quadratique régissant $\delta\rho$.

4.1 Fluctuation–réponse et susceptibilités dans les états d'équilibre généralisés

4.1.1 Charges généralisées et dérivées fonctionnelles

Rappel : Formulation fonctionnelle des moments et cumulants des charges. Considérons un sous-système unidimensionnel de taille finie $L^{(S)}$. Dans le chapitre (2), aux équations (2.21) et (2.22), nous avons introduit l'opérateur de charge généralisée $\hat{Q}^{(S)}[f]$, défini à partir d'une fonction test $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ et de l'opérateur densité de rapidité $\hat{\rho}^{(S)}(\theta)$, selon la relation intégrale :

$$\hat{Q}^{(S)}[f] = L^{(S)} \int d\theta f(\theta) \hat{\rho}^{(S)}(\theta), \quad \text{où } \hat{\rho}(\theta) \text{ agit comme } \hat{\rho}^{(S)}(\theta) |\{\theta_a\}\rangle = \frac{1}{L^{(S)}} \sum \delta(\theta - \theta_a) |\{\theta_a\}\rangle \quad (4.1)$$

États d'équilibre généralisés et poids spectral. Dans un sous-système intégrable, on a vu dans l'équation (2.27) qu'un état d'équilibre est décrit par une matrice densité de la forme :

$$\hat{\rho}^{(S)}[w] \doteq \frac{1}{Z^{(S)}[w]} e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]}, \quad \text{avec } Z^{(S)}[w] \doteq \text{Tr} \left(e^{-\hat{Q}^{(S)}[w]} \right), \quad (4.2)$$

où l'opérateur **charge généralisée** $\hat{Q}^{(S)}[w]$ est défini à partir du **poids spectral** $w(\theta)$ par l'équation (4.1).

Dans ce chapitre, le caractère local des charges est implicite ; nous omettons l'exposant (S) , introduit au chapitre (2), qui indiquait le caractère local S associé au support fini des charges.

Rappel : Dérivée fonctionnelle directionnelle. Nous avons introduit dans l'équation (2.50), la **dérivée fonctionnelle dans la direction d'une fonction test** f appliquée à un fonctionnel $F[g]$, comme :

$$\mathcal{D}_{[f]}F[g] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[g + \epsilon f] - F[g]}{\epsilon}. \quad (4.3)$$

À partir de la définition précédente (4.3), il est clair que $\mathcal{D}_{[f]}F[g]$, considérée comme fonctionnelle de f , est linéaire. En effet,

$$\mathcal{D}_{[c_1 f_1 + c_2 f_2]}F[g] = c_1 \mathcal{D}_{[f_1]}F[g] + c_2 \mathcal{D}_{[f_2]}F[g], \quad (4.4)$$

avec c_1 et c_2 des réels et f_1 et f_2 des fonctions de \mathbb{R} dans \mathbb{R} .

La linéarité de $\hat{Q}[g]$ implique que sa différentielle fonctionnelle dans la direction f :

$$\mathcal{D}_{[f]}\hat{Q}[g] = \hat{Q}[f]. \quad (4.5)$$

Cette notation permet une différentiation fonctionnelle claire, notamment dans les calculs de moments et cumulants.

Dans la suite, pour alléger les notations, nous noterons les moyennes $\langle \cdot \rangle_w$ au lieu de $\langle \cdot \rangle_{\hat{g}^{(S)}[w]}$.

Moments non centrés. En utilisant cette notation, nous avons défini les **moments non centrés** d'ordre q des charges de la manière suivante :

$$\langle \hat{Q}[f_1] \hat{Q}[f_2] \cdots \hat{Q}[f_q] \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{Z[w]} \mathcal{D}_{[f_1]} \mathcal{D}_{[f_2]} \cdots \mathcal{D}_{[f_q]} Z[w], \quad (4.6)$$

De même, on a défini les moments d'ordre q de la distribution de rapidité à l'aide des dérivées ponctuelles :

$$\langle \hat{\rho}(\theta_1) \hat{\rho}(\theta_2) \cdots \hat{\rho}(\theta_q) \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{L^q} \frac{1}{Z[w]} \frac{\delta}{\delta w(\theta_1)} \frac{\delta}{\delta w(\theta_2)} \cdots \frac{\delta}{\delta w(\theta_q)} Z[w], \quad (4.7)$$

Cumulants et fluctuations. On définit les **fluctuations des charges et des distributions de rapidité** par :

$$\delta \hat{Q}[f] \doteq \hat{Q}[f] - \langle \hat{Q}[f] \rangle_w, \quad \delta \hat{\rho}(\theta) \doteq \hat{\rho}(\theta) - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w. \quad (4.8)$$

Les **cumulants** d'ordre q des **charges** s'obtiennent comme dérivées fonctionnelles du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle \delta \hat{Q}[f_1] \delta \hat{Q}[f_2] \cdots \delta \hat{Q}[f_q] \rangle_w = (-1)^q \mathcal{D}_{[f_1]} \mathcal{D}_{[f_2]} \cdots \mathcal{D}_{[f_q]} \ln(Z[w]), \quad (4.9)$$

et le cumulant d'ordre q des **distributions de rapidité** comme dérivées ponctuelles du logarithme de la fonction de partition

$$\langle \delta \hat{\rho}(\theta_1) \delta \hat{\rho}(\theta_2) \cdots \delta \hat{\rho}(\theta_q) \rangle_w = (-1)^q \frac{1}{L^q} \frac{\delta}{\delta w(\theta_1)} \frac{\delta}{\delta w(\theta_2)} \cdots \frac{\delta}{\delta w(\theta_q)} \ln(Z[w]). \quad (4.10)$$

Moyennes et corrélations d'ordre faible. À l'ordre 1, les **moments non centrés** sont simplement les **valeurs moyennes**. Les moyennes des charges (4.6) et des distributions de rapidité (4.7) peuvent être exprimées comme dérivées fonctionnelles respectivement ponctuelles du logarithme de la fonction de partition :

$$\langle \hat{Q}[f_1] \rangle_w = -\mathcal{D}_{[f_1]} \ln(Z[w]), \quad \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \rangle_w = -\frac{1}{L} \frac{\delta \ln(Z[w])}{\delta w(\theta_1)}. \quad (4.11)$$

Pour un état donné, la fonction $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ n'est rien d'autre que la distribution de rapidités par unité de longueur.

À l'ordre 2, les **cumulants** correspondent aux **corrélations**. On constate, à partir des expressions ci-dessus (4.11), que les fluctuations des charges (4.9) et des distributions de rapidité (4.10) peuvent être obtenues comme dérivées fonctionnelles respectivement ponctuelles des moyennes :

$$\langle \delta \hat{Q}[f_1] \delta \hat{Q}[f_2] \rangle_w = -\mathcal{D}_{[f_2]} \langle \hat{Q}[f_1] \rangle_w, \quad \langle \delta \hat{\rho}(\theta_1) \delta \hat{\rho}(\theta_2) \rangle_w = -\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}^{(S)}(\theta_1) \rangle_w}{\delta w(\theta_2)}. \quad (4.12)$$

Cette identité relie la fonction de corrélation des fluctuations aux dérivées fonctionnelles de la valeur moyenne : elle exprime une *susceptibilité fonctionnelle*, au sens où elle mesure la réponse linéaire d'une observable à une perturbation infinitésimale du poids $w(\theta)$. La susceptibilité s'identifie ainsi à la covariance entre charges généralisées, illustrant le principe de *fluctuation-réponse*.

Notation susceptibilité et fluctuations. Considérons deux fonctions f_1 et f_2 . On définit la **susceptibilité** (ou **fonction de réponse croisée**), $\chi_w[f_1, f_2]$ par

$$\chi_w[f_1, f_2] \doteq -\mathcal{D}_{[f_2]} \langle \hat{Q}[f_1] \rangle_w. \quad (4.13)$$

Cette fonction de réponse est reliée aux fluctuations dans le **GGE**. Plus précisément, $\chi_w[f_1, f_2]$ vérifie

$$C_w[f_1, f_2] = \chi_w[f_1, f_2], \quad (4.14)$$

où les **corrélations à deux points** $C_w(f_1, f_2)$ sont définies par :

$$C_w[f_1, f_2] \doteq \langle \hat{Q}[f_1] \hat{Q}[f_2] \rangle_w - \langle \hat{Q}[f_1] \rangle_w \langle \hat{Q}[f_2] \rangle_w, \quad (4.15)$$

quantifies les fluctuations dans le **GGE**.

L'équation précédente, qui relie la réponse linéaire aux fluctuations, est une relation très importante qui sera utilisée pour des tests numériques dans cette section.

Lien entre distributions de rapidités et observables locales. À partir de l'équation (4.1), on remarque que

$$\hat{Q}[\delta(\cdot - \theta)/L] = \hat{\rho}(\theta). \quad (4.16)$$

Les moments non centrés des charges (4.6) ainsi que leurs cumulants (4.9) deviennent alors ceux des distributions de rapidités (respectivement (4.7) et (4.10)), en prenant les fonctions $f_i(\theta) = \delta(\cdot - \theta_i)/L$.

Cela est en accord avec le fait que les dérivées fonctionnelles deviennent :

$$\mathcal{D}_{[\delta(\cdot - \theta)]} F[g] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[g + \epsilon \delta(\cdot - \theta)] - F[g]}{\epsilon}, \quad (4.17)$$

$$= \frac{\partial F}{\partial g(\theta)}. \quad (4.18)$$

L'équation (4.13) s'écrit dans ce cas, en utilisant la notation de l'équation (4.17) et la propriété (4.4) :

$$\chi_w(\theta, \theta') \doteq -\frac{1}{L} \frac{\delta \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\delta w(\theta')}. \quad (4.19)$$

où l'on a utilisé la notation $\chi_w(\theta, \theta') = \chi_w \left[\frac{\delta(\cdot - \theta)}{L}, \frac{\delta(\cdot - \theta')}{L} \right]$.

L'équation (4.15), quant à elle, s'écrit :

$$C_w(\theta, \theta') \doteq \langle \hat{\rho}(\theta) \hat{\rho}(\theta') \rangle_w - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \langle \hat{\rho}(\theta') \rangle_w \quad (4.20)$$

où l'on utilise la notation $C_w(\theta, \theta') = C_w \left[\frac{\delta(\cdot - \theta)}{L}, \frac{\delta(\cdot - \theta')}{L} \right]$.

La relation (4.14), qui relie la susceptibilité à la corrélation, implique alors :

$$C_w(\theta, \theta') = \chi_w(\theta, \theta'). \quad (4.21)$$

4.1.2 Poids spectral et formulation du GGE

Rappel : Lien entre poids spectral et multiplicateurs de Lagrange. Dans la formulation fonctionnelle, un GGE est entièrement déterminé par une fonction arbitraire $w(\theta)$, appelée *poids spectral*. Cette description est donc plus générale que l'approche usuelle, où l'on considère uniquement une combinaison discrète de charges locales (ou quasi-locales). Dans ce cas particulier, le poids spectral prend la forme :

$$w(\theta) = \sum_i \beta_i f_i(\theta), \quad (4.22)$$

ce qui ramène le GGE à la forme standard définie par les *multiplicateurs de Lagrange* β_i . Les fonctions régulières f_i sont des densités spectrales associées aux charges \hat{Q}_i , de sorte que les charges soient bien $\hat{Q}_i = \hat{Q}[f_i]$.

Lien entre dérivées fonctionnelles, paramétrisation spectrale et moments des charges. On peut considérer la variation fonctionnelle d'une fonctionnelle $F[w]$ par rapport à la direction f_i , ce qui revient à effectuer une perturbation $w \rightarrow w + \epsilon f_i$, autrement dit $\beta_i \rightarrow \beta_i + \epsilon$. La dérivée fonctionnelle de $F[w]$ dans la direction f_i s'écrit alors :

$$\mathcal{D}_{[f_i]} F[w] \doteq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[\sum_j (\beta_j + \delta_{ij}\epsilon) f_j] - F[\sum_j \beta_j f_j]}{\epsilon}, \quad (4.23)$$

$$= \left. \frac{\partial F}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}}. \quad (4.24)$$

Cette expression est valable tant que les fonctions f_j sont considérées comme fixées. En revanche, si les f_j peuvent varier, ainsi la différentiation par rapport aux β_j ne correspond plus à une dérivée fonctionnelle au sens strict. En injectant cette expression dans l'expression du *moment non-centré* (4.6) nous l'obtenons l'expression (2.11).

Avec la condition (4.22) et la définition (4.23), nous pouvons donc réécrire les moments non centrés (des charges) (4.6) et les cumulants (des charges) (4.9), et ainsi les moyennes (4.11) et corrélations (4.12), en remplaçant les dérivées fonctionnelles $\mathcal{D}_{[f_i]}$ par $\left. \frac{\partial}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}}$.

De plus en remarquant que $\left. \frac{\partial w(\theta)}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}} = f_i(\theta)$, alors la dérivée selon β_i s'écrit

$$\begin{aligned} - \left. \frac{\partial}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}} &= - \int d\theta \left. \frac{\partial w(\theta)}{\partial \beta_i} \right)_{\beta_{j \neq i}} \frac{\delta}{\delta w(\theta)}, \\ &= L \int d\theta f_i(\theta) \left(- \frac{1}{L} \frac{\delta}{\delta w(\theta)} \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Nous pouvons donc, encore une fois, en utilisant (4.25), réécrire les moments non centrés des charges (4.6) en fonction des moments non centrés des distributions de rapidités (4.7) :

$$\langle \hat{Q}[f_1] \cdots \hat{Q}[f_q] \rangle_w = L^q \int d\theta_1 f_1(\theta_1) \cdots \int d\theta_q f_q(\theta_q) \langle \hat{\rho}(\theta_1) \cdots \hat{\rho}(\theta_q) \rangle_w, \quad (4.26)$$

De même, nous pouvons réécrire les cumulants des charges (4.9) à partir des cumulants des distributions de rapidités (4.10) :

$$\langle \delta \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \cdots \delta \hat{\mathbf{Q}}[f_q] \rangle_w = L^q \int d\theta_1 f_1(\theta_1) \cdots \int d\theta_q f_q(\theta_q) \langle \delta \hat{\rho}(\theta_1) \cdots \delta \hat{\rho}(\theta_q) \rangle_w. \quad (4.27)$$

Ces relations sont naturelles. En particulier, on retiendra que les moyennes et les corrélations des charges s'écrivent :

$$\langle \hat{\mathbf{Q}}[f] \rangle_w = L \int d\theta f(\theta) \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w, \quad (4.28)$$

$$\langle \delta \hat{\mathbf{Q}}[f_1] \delta \hat{\mathbf{Q}}[f_2] \rangle_w = L^2 \iint d\theta_1 d\theta_2 f_1(\theta_1) \langle \delta \hat{\rho}(\theta_1) \delta \hat{\rho}(\theta_2) \rangle_w f_2(\theta_2). \quad (4.29)$$

4.1.3 Vérification numérique : Echantillonnage du GGE

On souhaite tester notre capacité à échantillonner le GGE avec l'algorithme de Metropolis. Pour cela, nous utiliserons le principe de *fluctuation-réponse*, défini à l'équation (4.21). Deux approches numériques seront comparées : (i) le calcul direct des corrélations de la distribution de rapidité à l'aide d'un algorithme de Monte Carlo basé sur les états propres du modèle de LL, et (ii) le calcul indirect à partir de la susceptibilité.

Pour introduire les notations employées dans cette sous-section, rappelons brièvement quelques éléments du chapitre (1) :

Rappel : Cadre de Bethe pour le modèle de Lieb–Liniger.

Équations de Bethe. Les états propres du gaz de LL sont décrits par les équations de Bethe (1.75) :

$$L\theta_a + \sum_{b \neq a} 2 \arctan\left(\frac{\theta_a - \theta_b}{g}\right) = 2\pi I_a, \quad (4.30)$$

où $\{I_a\}$ est un ensemble d'entiers (ou demi-entiers) caractérisant une configuration de type Bethe .

État fondamental. Dans le cas du fondamental, les nombres quantiques sont distribués de façon régulière selon (1.76) :

$$I_a = a - \frac{N+1}{2}, \quad a \in \llbracket 1, N \rrbracket. \quad (4.31)$$

Distribution de rapidité. La configuration $\{\theta_a\}$ définit une densité de rapidité, notée $\rho(\theta)$ (cf Eq (1.80)) :

$$\rho(\theta) = \frac{1}{L} \sum_{a=1}^N \delta(\theta - \theta_a). \quad (4.32)$$

Méthode numérique de Monte Carlo. Nous travaillons avec $\hbar = m = g = 1$.

Paramètres fixés. On fixe un poids spectral , par exemple quadratique

$$w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2, \quad (4.33)$$

et on fixe les paramètres physiques du système : $N = 7$ particules, $L = 10$ la taille du système et $g = 1$ l'intensité des interactions.

Initialisation : état fondamental.

1. On commence par proposer une configuration d'entier de Bethe $\{I_a\}$ correspondant à l'état fondamental. Celle-ci est donnée par l'équation (4.31).
2. On résout ensuite les équations de Bethe (4.30) associées afin d'obtenir l'ensemble des rapidités $\{\theta_a\}$.
3. Ces rapidités définissent une distribution empirique de rapidité, notée $\rho^e(\theta)$, que l'on enregistre sous la forme (4.32). Pour rendre cette distribution exploitable numériquement, on la discrétise sur une grille discrète $\{\theta_a\}$.

À chaque étape du Monte Carlo :

1. Une nouvelle configuration $\{I'_a\}$ est proposée en faisant varier chaque entier I_a aléatoirement de ± 1 , c'est-à-dire en posant $I'_a = I_a \pm 1$, le signe étant choisi au hasard.
 - Si les $\{I'_a\}$ sont tous distincts, on continue ; sinon, on propose une autre configuration.
2. À partir de cette configuration $\{I'_a\}$, on résout les équations de Bethe pour obtenir un nouvel ensemble de rapidités $\{\theta'_a\}$.
3. La nouvelle configuration est ensuite soumise au critère de Metropolis afin de décider si elle est acceptée ou rejetée. L'acceptation se fait avec une probabilité $\min\left(1, e^{-(\sum_a w(\theta_a) - w(\theta'_a))}\right)$, en se basant sur l'énergie associée à la fonction w .
 - Si la configuration est acceptée, on met à jour les ensembles : $\{I_a\} \leftarrow \{I'_a\}$ et $\{\theta_a\} \leftarrow \{\theta'_a\}$.
4. Enfin, on enregistre la i -ième distribution de rapidité empirique, ρ_i^e , associée à la configuration $\{\theta_a\}$, en la discrétisant sur une grille.

Un grand nombre d'itérations est réalisé, conduisant à la génération N_{conf} de configurations (non nécessairement distinctes), permettant d'assurer une bonne convergence statistique des moyennes.

Cela permet de construire numériquement :

- la moyenne empirique du profil de distribution de rapidité, notée $\langle \rho^e(\theta) \rangle$, obtenue en effectuant la moyenne sur l'ensemble des configurations N_{conf} générées par la méthode de Monte Carlo. Il faudra vérifier que N_{conf} suffisamment grand pour pouvoir faire l'approximation

$$\langle \rho^e(\theta) \rangle \approx \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w, \quad (4.34)$$

- les fluctuations locales de la densité de rapidité définies par $\delta \rho_i^e(\theta) = \rho_i^e(\theta) - \langle \rho^e(\theta) \rangle$, obtenues en soustrayant à chaque profil sa valeur moyenne,
- la corrélation empirique, est obtenue en calculant, sur l'ensemble des configurations Monte Carlo, la moyenne du produit des fluctuations locales aux points θ et θ' :

$$C_w(\theta, \theta') \approx \frac{1}{N_{\text{conf}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{conf}}} \delta \rho_k^e(\theta) \delta \rho_k^e(\theta'). \quad (4.35)$$

Autrement dit, il s'agit de la covariance empirique des profils générés, et l'approximation devient une égalité dans la limite $N_{\text{conf}} \rightarrow \infty$.

Vérification de la convergence numérique. Les algorithmes de Monte Carlo produisent des estimations bruitées des grandeurs physiques, notamment de la densité de rapidité moyenne empirique $\langle \rho^e(\theta) \rangle$. Cette quantité présente une incertitude statistique (écart-type) entre deux réalisations indépendantes de la procédure de Monte Carlo. Pour réduire ce bruit, il est nécessaire de générer un grand nombre (N_{conf}) de configurations de I_a , ce qui augmente le coût numérique du calcul.

Pour $N_{\text{conf}} = 2 \cdot 10^6$, nous avons répété dix fois l'algorithme de Monte Carlo afin de calculer l'écart-type des moyennes $\text{std}(\langle \rho^e(\theta) \rangle)$. On observe que, pour les valeurs de θ où $\langle \rho^e(\theta) \rangle$ est petite, le rapport

$$\frac{\text{std}(\langle \rho^e(\theta) \rangle)}{\langle \rho^e(\theta) \rangle} \quad (4.36)$$

est plus grand que pour les valeurs de θ où $\langle \rho^e(\theta) \rangle$ est plus grande. Ainsi, pour quantifier globalement la convergence, nous considérons la moyenne de ce rapport sur l'ensemble des θ . Dans notre cas, cette quantité est inférieure à 2%, ce qui montre que $\langle \rho^e(\theta) \rangle$ constitue une très bonne approximation de la moyenne $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$. Ainsi, pour $N_{\text{conf}} = 2 \cdot 10^6$, les équations (4.34) et (4.35) sont bien vérifiées.

Dans la suite, pour plus de lisibilité, nous noterons $\langle \rho^e(\theta) \rangle$ par $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ et la matrice obtenue empiriquement par $C_w(\theta, \theta')$ (Fig 4.1).

Calcul numérique de la susceptibilité par dérivée fonctionnelle. Pour évaluer la susceptibilité linéaire, définie comme la dérivée de $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ par rapport à une perturbation infinitésimale du poids spectral $w(\theta')$, on adopte une approche numérique fondée sur les différences finies. La procédure est la suivante :

1. On modifie localement le potentiel $w(\theta)$ en y ajoutant une perturbation delta centrée en θ' , selon :

$$w(\theta) \rightarrow w(\theta) + \varepsilon \delta_{\theta'}(\theta), \quad (4.37)$$

où ε est un petit paramètre de perturbation.

2. On relance ensuite le Monte Carlo avec ce potentiel perturbé, ce qui permet d'estimer la nouvelle moyenne $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon \delta_{\theta'}}$.
3. Enfin, on évalue la dérivée fonctionnelle par la formule de différence finie suivante :

$$\chi_w(\theta, \theta') \approx -\frac{1}{L} \cdot \frac{\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon \delta_{\theta'}} - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w}{\varepsilon}. \quad (4.38)$$

Cette méthode permet ainsi d'approcher numériquement la matrice de réponse linéaire entre les coordonnées spectrales θ et θ' , que l'on peut comparer à la matrice de corrélation obtenue précédemment.

Difficultés numériques : Le calcul de la susceptibilité nécessite d'estimer la dérivée fonctionnelle de la densité de rapidité par rapport au poids w .

Cependant, pour que cette approximation soit valable, ε doit être suffisamment petit. Or, si ε est trop petit, la différence $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon \delta_{\theta'}} - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ devient du même ordre que leur bruit statistique, et la dérivée est alors noyée dans le bruit.

Pour limiter l'erreur statistique, on peut dans un premier temps ajuster à la fois le nombre de configurations (N_{conf}) et la valeur de ε , de sorte que l'écart-type de plusieurs $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$ soit au moins dix fois plus petit que la variation $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_{w+\varepsilon \delta_{\theta'}} - \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w$, de sorte que (4.38) soit vérifié.

Nous avons généré $N_{\text{conf}} = 2 \cdot 10^6$ configurations et calculé les susceptibilités avec un paramètre de perturbation $\varepsilon = 10^{-1}$. Et l'équation (4.38) était vérifié, la matrice obtenue sera notée $\chi_w(\theta, \theta')$ (Fig 4.1).

Comparaison numérique. Les deux matrices obtenues présentent des différences. Pour quantifier leur similarité, on calcule une *norme relative* en utilisant la norme 2 :

$$\frac{\|C_w - \chi_w\|_2}{\|C_w\|_2} = 13,5\%.$$

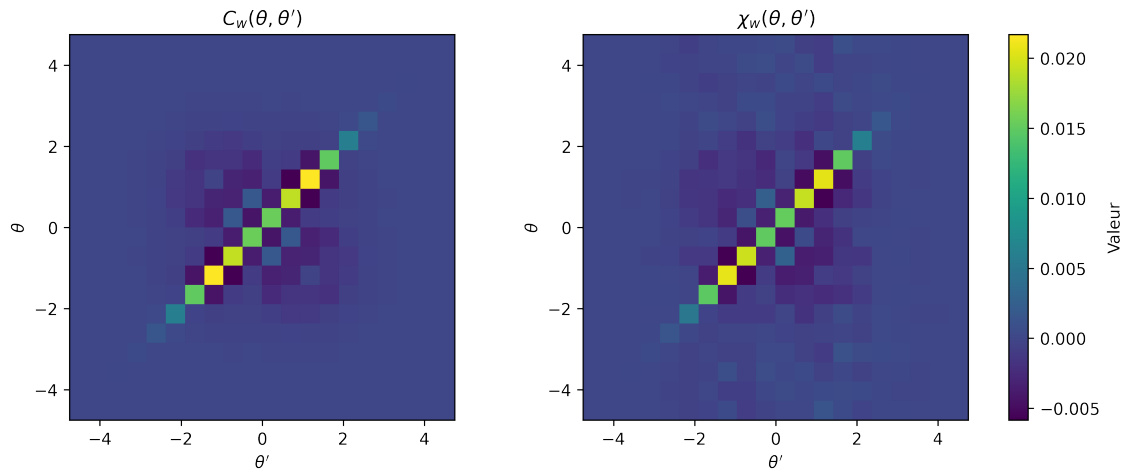


FIGURE 4.1 – Comparaison des matrices pour $\langle \hat{\rho}(\theta) \hat{\rho}(\theta') \rangle_w$: à gauche la corrélation $C_w(\theta, \theta')$; à droite la susceptibilité $\chi_w(\theta, \theta')$ obtenue par dérivée fonctionnelle

Discussion. Les figures montrent une concordance satisfaisante entre les deux matrices. L'écart relatif est d'environ 13,5 %, et provient principalement des erreurs statistiques liées à la méthode Monte Carlo et de l'approximation par différences finies dans le calcul de la dérivée fonctionnelle.

Le principe de fluctuation-réponse dans le cadre du GGE étant supposé valide, l'objectif de cette analyse n'est pas de le confirmer, mais de vérifier que l'on reste en capacité d'échantillonner correctement les fluctuations à partir de $\chi_w(\theta, \theta')$ avec un nombre fini de configurations. L'erreur relative observée est donc acceptable et reflète les limites statistiques de l'expérience numérique.

La précision peut être améliorée en augmentant le nombre de configurations N_{conf} :

- Le calcul de $C_w(\theta, \theta')$ est en $O(N_{\text{conf}})$ et celui de $\chi_w(\theta, \theta')$ en $O(N_{\text{conf}} \cdot N_{\text{cell}})$, où N_{cell} est le nombre de points de la grille en θ .
- Pour $N_{\text{conf}} = 2 \times 10^6$ et $N_{\text{cell}} = 20$, la matrice $C_w(\theta, \theta')$ se calcule en environ 6 minutes et $\chi_w(\theta, \theta')$ en environ 2 heures.
- On peut envisager $N_{\text{conf}} = 10^7$: $C_w(\theta, \theta')$ en 30 minutes et $\chi_w(\theta, \theta')$ en 10 heures.

Pour de petits N_{conf} , la perturbation ε doit être augmentée pour que les fluctuations calculées ne soient pas noyées dans le bruit. Si ε est trop grand, on observe toujours la structure globale de $\chi_w(\theta, \theta')$, mais avec une amplitude réduite :

$$\chi_w(\theta, \theta') \approx \alpha C_w(\theta, \theta'), \quad 0 < \alpha < 1.$$

Par exemple, pour $N_{\text{conf}} = 10^5$, la mesure (4.36) est de 8% ; on peut utiliser $N_{\text{cell}} = 100$ et $\varepsilon = 1$, et obtenir :

$$\frac{\|\alpha C_w - \chi_w\|_2}{\|\alpha C_w\|_2} \sim 27\%$$

avec $\alpha = 0.078$ et pour un temps de calcul de 26 min (Fig 4.2).

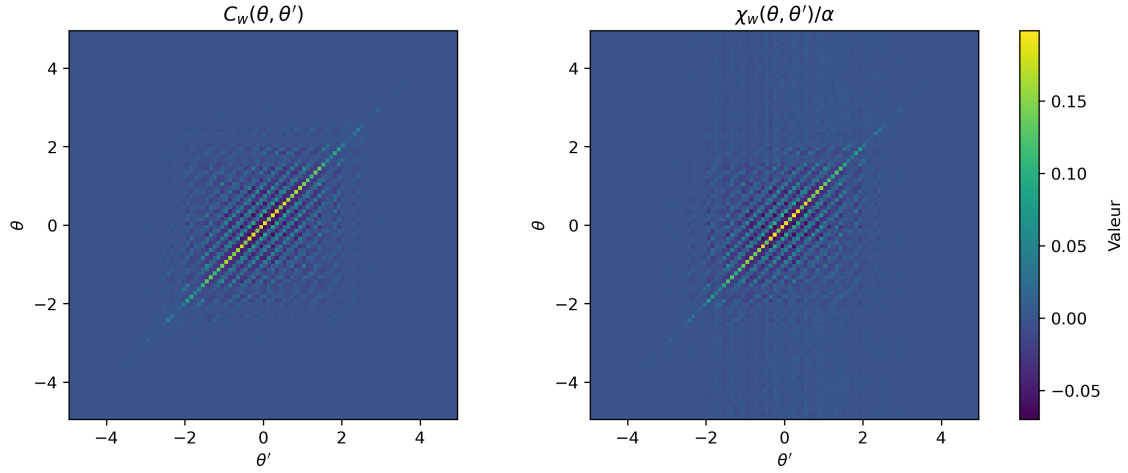


FIGURE 4.2 – Comparaison des matrices pour $\langle \hat{\rho}(\theta) \hat{\rho}(\theta') \rangle_w$: à gauche la corrélation $C_w(\theta, \theta')$; à droite la susceptibilité $\chi_w(\theta, \theta')/\alpha$ obtenue par dérivée fonctionnelle

Physiquement, $\alpha < 1$ reflète le fait que pour un nombre limité de configurations, la réponse calculée par différences finies sous-estime légèrement l’amplitude des fluctuations par rapport à la covariance brute C_w , mais la structure globale reste correcte. En augmentant N_{conf} , $\alpha \rightarrow 1$ et $\chi_w(\theta, \theta')$ converge vers $C_w(\theta, \theta')$ dans la limite des grandes statistiques.

4.2 Limite thermodynamique, structure variationnelle et susceptibilité

4.2.1 Susceptibilité spectrale et structure variationnelle de l’entropie

Rappel : Approche thermodynamique (Yang–Yang et énergie généralisée). Dans l’approximation thermodynamique, le sous-système est décrit en termes de grandeurs macroscopiques, notamment par la distribution de rapidité $\rho(\theta)$. Dans l’équation (2.47), nous avons vu que, dans la limite thermodynamique, la moyenne d’un observable s’écrit :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_w = \frac{\int \mathcal{D}\rho \, e^{L(S_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]}}{\int \mathcal{D}\rho \, e^{L(S_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])}}. \quad (4.39)$$

où S_{YY} est l’entropie de Yang–Yang et \mathcal{W} l’énergie généralisée, introduites respectivement dans (2.45) et (2.46), que l’on rappelle.

$$S_{YY}[\rho] = \int d\theta [\rho_s \ln \rho_s - \rho \ln \rho - (\rho_s - \rho) \ln(\rho_s - \rho)](\theta), \quad (4.40)$$

$$\mathcal{W}[\rho] = \int w(\theta) \rho(\theta) d\theta, \quad (4.41)$$

où $\rho_s(\theta)$ désigne la *densité d’états* liée à ρ par les équations de Bethe (1.88) :

$$2\pi\rho_s = 1 + \Delta \star \rho. \quad (4.42)$$

La quantité $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{[\rho]}$ désigne la valeur propre de l’observable associée aux états caractérisés par la distribution de rapidité ρ .

Rappel : Condition variationnelle du GGE. À l'équilibre thermodynamique ; dans la limite $L \rightarrow \infty$, la distribution $\rho_{\text{eq}}(\theta)$ satisfait l'équation (2.34), et coïncide alors avec la moyenne de l'opérateur de densité de rapidité :

$$\rho_{\text{eq}}(\theta) = \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w, \quad (4.43)$$

représentant ainsi la densité continue de quasi-particules dans l'état stationnaire d'équilibre.

Dans le cadre du GGE continu, l'état macroscopique est entièrement déterminé par une densité spectrale $\rho(\theta)$ qui maximise l'entropie de Yang–Yang, $\mathcal{S}_{YY}[\rho]$, sous la contrainte de conservation des charges généralisées. Le poids spectral $w(\theta)$ est alors fixé. Comme nous l'avons vu (au chapitre (2)), la condition d'équilibre (2.56) peut s'écrire sous la forme variationnelle :

$$\left. \frac{\delta \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta)} \right|_{\rho=\rho_{\text{eq}}} = w(\theta). \quad (4.44)$$

Dérivée fonctionnelle. On peut considérer l'équation d'équilibre comme une relation implicite définissant le poids spectral w comme une fonctionnelle de la distribution de rapidité ρ . La dérivée fonctionnelle de cette relation s'écrit :

$$\left. \frac{\delta w(\theta)}{\delta \rho(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{\text{eq}}} = \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{\text{eq}}}, \quad (4.45)$$

où le membre de droite représente l'opérateur hessien (ou courbure fonctionnelle) de l'entropie de Yang–Yang, évalué à l'équilibre. Cet opérateur est négatif défini, conformément à l'interprétation de \mathcal{S}_{YY} comme une entropie à maximiser.

Inversion. On en déduit que la réponse de ρ à une variation infinitésimale du poids spectral w est donnée par l'inverse fonctionnel de (4.45) :

$$\left. -\frac{1}{L} \frac{\delta \rho(\theta)}{\delta w(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{\text{eq}}} = - \left(L \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}_{YY}[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{\text{eq}}} \right)^{-1}. \quad (4.46)$$

La susceptibilité fonctionnelle $\chi_w(\theta, \theta')$, définie dans (4.19), coïncide avec cette expression.

4.2.2 Fluctuations gaussiennes autour de l'équilibre thermodynamique

Une autre approche pour accéder aux fluctuations de la distribution de rapidité $\rho = \rho_{\text{eq}} + \delta\rho$ en étudiant

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\text{eq}} + \delta\rho] = \exp\{\mathcal{D}[\delta\rho]\} ((\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\text{eq}}]).$$

Dans la limite thermodynamique, l'intégrale fonctionnelle définissant le GGE est dominée par les configurations proches du point-selle ρ_{eq} . Cette approximation, dite gaussienne, repose alors sur le développement quadratique de l'action effective en $\delta\rho$.

On peut ainsi développer l'action $\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W}$ au second ordre autour de ce point d'équilibre :

$$(\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho] \approx (\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho_{\text{eq}}] - \frac{1}{2} \int d\theta d\theta' \delta\rho(\theta) \mathcal{H}(\theta, \theta') \delta\rho(\theta') + \mathcal{O}(\delta\rho^3) \quad (4.47)$$

où $\mathcal{H}(\theta, \theta') = - \left. \frac{\delta^2 (\mathcal{S}_{YY} - \mathcal{W})[\rho]}{\delta \rho(\theta) \delta \rho(\theta')} \right|_{\rho=\rho_{\text{eq}}}$ est la hessienne de l'action effective.

Sous l'approximation gaussienne autour de l'état d'équilibre (en particulier lorsque $L \rightarrow \infty$, cf. Fig. 4.3), la covariance des fluctuations s'exprime comme suit :

$$\begin{aligned} \langle \delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta') \rangle_w &= \frac{\int \mathcal{D}\delta\rho \, \delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta') \exp \left[-\frac{L}{2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \, \delta\rho(\theta_1) \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) \delta\rho(\theta_2) \right]}{\int \mathcal{D}\delta\rho \exp \left[-\frac{L}{2} \iint d\theta_1 d\theta_2 \, \delta\rho(\theta_1) \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) \delta\rho(\theta_2) \right]}, \\ &= (L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta'), \end{aligned} \quad (4.48)$$

Ces relations posent les bases d'une description quantifiée des fluctuations de densité de rapidité, essentielles pour tester expérimentalement la validité du GGE, comprendre les corrélations à longue distance, et accéder aux propriétés dynamiques fines des systèmes intégrables en une dimension.

Ce développement quadratique justifie le caractère gaussien des fluctuations dans le régime thermodynamique, et sera à la base des extensions hydrodynamiques de type MFT (Macroscopic Fluctuation Theory).

Structure de \mathcal{H} . L'opérateur hessien de l'action effective se décompose naturellement comme la différence entre deux contributions fonctionnelles :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(\mathcal{W})} - \mathcal{H}^{(S_{YY})}, \quad (4.49)$$

$$\text{où } \mathcal{H}^{(\mathcal{W})}(\theta, \theta') \doteq \frac{\delta^2 \mathcal{W}[\rho]}{\delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta')} \bigg|_{\rho=\rho_{\text{eq}}}, \quad \text{et } \mathcal{H}^{(S_{YY})}(\theta, \theta') \doteq \frac{\delta^2 S_{YY}[\rho]}{\delta\rho(\theta) \delta\rho(\theta')} \bigg|_{\rho=\rho_{\text{eq}}}. \quad (4.50)$$

L'opérateur inverse \mathcal{H}^{-1} est défini par la relation fonctionnelle :

$$(\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H})(\theta, \theta') = (\mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \, \mathcal{H}(\theta, \theta'') \mathcal{H}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (4.51)$$

où $\delta(\theta - \theta')$ désigne la distribution de Dirac, et non une variation.

On remarque tout d'abord que $\mathcal{H}^{(\mathcal{W})} = 0$, car l'énergie généralisée par unité de longueur s'écrit simplement comme un couplage linéaire en ρ avec un poids spectral $w(\theta)$ fixé (4.41).

En revanche, la courbure fonctionnelle provient entièrement de l'entropie de Yang–Yang, donnée par l'expression (4.40).

Ainsi, l'opérateur de fluctuation \mathcal{H} coïncide avec la hessienne négative de l'entropie S_{YY} , et détermine complètement la covariance spectrale à l'équilibre.

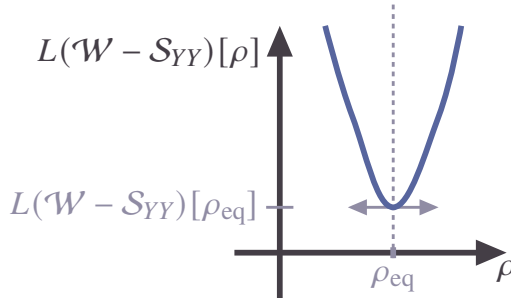


FIGURE 4.3 – Représentation schématique de l'action effective $L(S_{YY}[\rho] - \mathcal{W}[\rho])$ en fonction de la distribution de rapidité ρ . La configuration la plus probable, (associée à ρ_{eq}), correspond au minimum (point-selle) de l'action. Les fluctuations autour de l'équilibre sont modélisées par un développement quadratique de l'action, conduisant à une approximation gaussienne des fluctuations de ρ . Pour faciliter la compréhension, on représente ici ρ comme une variable unidimensionnelle, alors qu'en réalité il s'agit d'une fonction définie dans un espace de dimension infinie.

4.2.3 Expression de la Hessienne

En calculant la dérivée fonctionnelle seconde de l'entropie de Yang–Yang, définie en (4.40), dans la direction d'une variation $\delta\rho$, on obtient l'opérateur hessien $\mathcal{H}^{(S_{YY})}$. L'opérateur hermien \mathcal{H} est donné par $\mathcal{H} = -\mathcal{H}^{(S_{YY})}$, et se décompose comme suit :

$$\mathcal{H}(\theta, \theta') = \mathcal{D}(\theta, \theta') + \mathcal{V}(\theta, \theta') \quad (4.52)$$

La contribution diagonale locale, notée $\mathcal{D}(\theta, \theta')$, présente une singularité caractéristique d'une structure de type Fermi–Dirac. Elle reflète l'exclusion statistique effective induite par l'intégrabilité, y compris dans un système bosonique. Elle s'écrit :

$$\mathcal{D}(\theta, \theta') = \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) v_{eq}(\theta) (1 - v_{eq}(\theta))} \right) \delta(\theta, \theta'). \quad (4.53)$$

La partie régulière symétrique, notée $\mathcal{V}(\theta, \theta')$, regroupe quant à elle les contributions non locales issues des interactions entre quasi-particules.

$$\mathcal{V}(\theta, \theta') = - \left\{ \begin{aligned} & \left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) (1 - v_{eq}(\theta))} + \frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta') (1 - v_{eq}(\theta'))} \right) \frac{\Delta(\theta - \theta')}{2\pi} \\ & + \int d\theta'' \frac{v_{eq}(\theta'')}{\rho_{s,eq}(\theta'') (1 - v_{eq}(\theta''))} \frac{\Delta(\theta - \theta'')}{2\pi} \frac{\Delta(\theta'' - \theta')}{2\pi} \end{aligned} \right\} \quad (4.54)$$

avec $\rho_{eq}(\theta) = v_{eq}(\theta) \rho_{s,eq}(\theta)$.

4.2.4 Fluctuations autour de la distribution moyenne et inversion de la Hessienne

On cherche alors \mathcal{H}^{-1} aussi sous la forme

$$\mathcal{H}^{-1}(\theta, \theta') = \mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') + \mathcal{B}(\theta, \theta') \quad (4.55)$$

avec une partie diagonale sans interaction

$$\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta') = (\rho_{s,eq}(\theta) v_{eq}(\theta) (1 - v_{eq}(\theta))) \delta(\theta, \theta') \quad (4.56)$$

tel que

$$(\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{D})(\theta, \theta') = (\mathcal{D} \cdot \mathcal{D}^{-1})(\theta, \theta') = \int d\theta'' \mathcal{D}(\theta, \theta'') \mathcal{D}^{-1}(\theta'', \theta') = \delta(\theta - \theta'), \quad (4.57)$$

avec une partie symétrique régulière avec interaction \mathcal{B} .

Les équations (4.52), (4.55), (4.51) et (4.57), il vient que cette série d'équivalences

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{-1} = \delta \\ \mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{H} = \delta \end{array} \right. \text{ i.e. } \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H} \cdot \mathcal{B} = -\mathcal{V} \cdot \mathcal{D}^{-1} \\ \mathcal{B} \cdot \mathcal{H} = -\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \end{array} \right. \text{ i.e. } \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{B} = -\mathcal{H}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{D}^{-1} \\ \mathcal{B} = -\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{H}^{-1} \end{array} \right.$$

Du fait que toutes ces fonctions (\mathcal{H} , \mathcal{D} , \mathcal{V} et inverse) soit symétriques alors les équations ci-dessus sont tous équivalentes et \mathcal{B} étant donc symétrique. Donc en utilisant (4.54) et (4.56)

$$\begin{aligned} \mathcal{B}(\theta, \theta') &= -(\mathcal{D}^{-1} \cdot \mathcal{V} \cdot \mathcal{H}^{-1})(\theta, \theta'), \\ &= (\rho_{s,eq}(\theta) v_{eq}(\theta) (1 - v_{eq}(\theta))) \times \\ &\quad \left\{ \frac{\Delta}{2\pi} \star \left[\left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta) (1 - v_{eq}(\theta))} + \frac{1}{\rho_{s,eq}(\cdot) (1 - v_{eq}(\cdot))} \right) \mathcal{H}^{-1}(\cdot, \theta') \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{v_{eq}(\cdot)}{\rho_{s,eq}(\cdot) (1 - v_{eq}(\cdot))} \left(\frac{\Delta}{2\pi} \star \mathcal{H}^{-1}(\cdot, \theta') \right) \right] \right\} (\theta), \end{aligned} \quad (4.58)$$

où $(f \star g)(x)$ désigne la convolution définie par $(f \star g)(x) = \int f(x - t) g(t) dt$, l'intégration portant explicitement sur la variable t . En injectant cette dernière équation ainsi que (4.55) dans (4.48), on obtient

l'équation implicite suivante :

$$(L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta') = (L\mathcal{D})^{-1}(\theta, \theta') + \left\{ \begin{aligned} & \frac{1}{L}(\rho_{s,eq}(\theta)v_{eq}(\theta)(1-v_{eq}(\theta))) \times \\ & \left\{ \frac{\Delta}{2\pi} \star \left[\left(\frac{1}{\rho_{s,eq}(\theta)(1-v_{eq}(\theta))} + \frac{1}{\rho_{s,eq}(\cdot)(1-v_{eq}(\cdot))} \right) \mathcal{H}^{-1}(\cdot, \theta') \right] \right. \\ & \left. - \frac{v_{eq}(\cdot)}{\rho_{s,eq}(\cdot)(1-v_{eq}(\cdot))} \left(\frac{\Delta}{2\pi} \star \mathcal{H}^{-1}(\cdot, \theta') \right) \right] \right\}(\theta), \end{aligned} \right\} \quad (4.59)$$

Cette expression explicite des corrélations permet d'évaluer les fluctuations des grandeurs macroscopiques comme le nombre total de particules ou l'énergie, en les exprimant comme des observables linéaires de la densité $\rho(\theta)$. Une autre dérivation alternative est en annexe C.

4.2.5 Vérification numérique thermodynamique : inversion de la courbure et dérivée fonctionnelle

Dans cette sous-section, nous proposons de tester l'expression (4.58).

4.2.5.1 Méthode.

Calcul de la matrice hessienne On considère un gaz de bosons unidimensionnels intégrable, décrit par l'équation de Bethe, dans un état d'équilibre généralisé caractérisé par la *taille du sous-système* L , l'*intensité d'interaction* g , et un *poids spectral* fixé $w(\theta)$.

À partir de ces paramètres, on résout numériquement les *équations TBA* (cf (2.59)), ce qui permet d'obtenir les grandeurs thermodynamiques d'équilibre :

- la *distribution de rapidité* $\rho_{eq}(\theta)$,
- la *densité d'états* $\rho_{s,eq}(\theta)$
- et la *fonction d'occupation* $v_{eq}(\theta) = \rho_{eq}(\theta)/\rho_{s,eq}(\theta)$.

Ces quantités permettent ensuite de construire :

- la contribution diagonale singulière $\mathcal{D}(\theta, \theta')$, définie par (4.53), ainsi que son inverse $\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta')$ (voir (4.56)) ;
- la contribution régulière non locale $\mathcal{V}(\theta, \theta')$, définie par (4.54).

La matrice de fluctuations $\mathcal{H}(\theta, \theta')$, définie par (4.52), est obtenue en combinant ces deux contributions. Son inverse $(L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta')$ s'obtient en inversant directement la matrice $L\mathcal{H}(\theta, \theta')$.

La partie avec interaction, $\mathcal{B}(\theta, \theta')/L$ (définie par (4.58)), peut être déterminée de deux façons équivalentes : soit en soustrayant la partie sans interaction (diagonale), $(L\mathcal{D})^{-1}(\theta, \theta')$, de l'inverse $(L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta')$, soit directement en utilisant (4.58).

Susceptibilité. Le membre de gauche de l'équation (4.46), à savoir

$$\chi_w(\theta, \theta') \left(= -\frac{1}{L} \frac{\delta \rho_{eq}(\theta)}{\delta w(\theta')} \right),$$

peut être évalué numériquement sans avoir à recourir à l'entropie de Yang–Yang. Il suffit en effet de calculer la variation de la *distribution de rapidité à l'équilibre* $\rho_{eq}(\theta)$ en réponse à une petite perturbation ε du *poids spectral* $w(\theta')$ (exactement (4.38)).

4.2.5.2 Dans un équilibre thermodynamique généralisé

Paramètres fixés. On fixe un *poids spectral*, par exemple quadratique

$$w(\theta) = \frac{1}{2}\theta^2, \quad (4.60)$$

et on fixe les paramètres physiques du sous-système : $L = 10$, et $g = 1$.

Le nombre de particules N est fixé par ces paramètres, contrairement aux simulations de la partie Monte-Carlo faites dans la section précédente.

On fait ces calculs numériques avec $\varepsilon = 10^{-10}$ suffisamment petit pour que l'approximation (4.38) soit vérifiée.

Comparaison. Nous obtenons deux matrices $(L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta')$ et $\chi_w(\theta, \theta')$ (Fig (4.4)). Afin de tester la validité l'expression (4.59), nous quantifions leur similarité, en calculant une *norme relative* en utilisant la norme 2 :

$$\frac{\|(L\mathcal{H})^{-1} - \chi_w\|_2}{\|(L\mathcal{H})^{-1}\|_2} = 0.015\%.$$

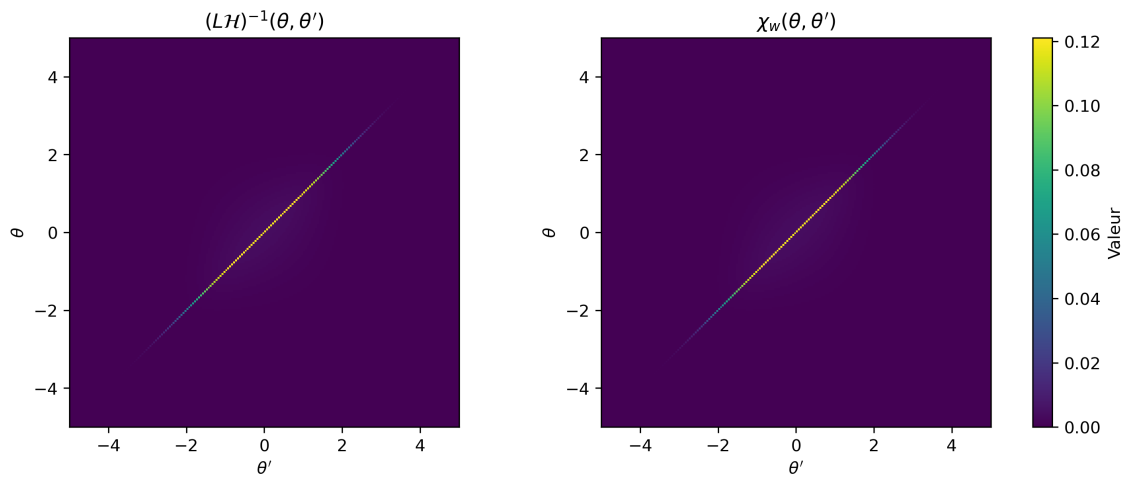


FIGURE 4.4 – Vérification numérique dans le régime thermodynamique. Gauche : $(L\mathcal{H})^{-1}$ par inversion de la courbure. Droite : χ_w par dérivée fonctionnelle.

Conclusion. Nous avons vérifié la formule (4.59) de deux manières. D'une part, en évaluant directement à un *poids spectral* w fixé $(L\mathcal{H})^{-1}$; d'autre part, en calculant le différentiel de la distribution de rapidité par rapport au poids spectral χ_w , c'est-à-dire en appliquant le principe de fluctuation-réponse. Pour le *poids spectral* et les paramètres considérés, les deux approches donnent des résultats numériques concordants, ce qui constitue une validation de la formule (4.59).

Dans un second temps, il est naturel de vouloir tester ce principe pour différentes formes du *poids spectral* w . Dans le cas général du GGE, w appartient à un espace de dimension infinie. Afin de réduire cette complexité, nous nous restreignons à une sous-famille à deux paramètres, en nous plaçant dans le cadre de l'équilibre thermique. Ce choix permet de comparer explicitement les fluctuations de grandeurs thermodynamiques macroscopiques, telles que le nombre total de particules et l'énergie cinétique.

4.2.5.3 Vérification numérique thermique : énergie et nombre de particules

Nous testons à présent notre expression des fluctuations dans le cas particulier de l'équilibre thermique. Le sous-système est supposé en contact avec un bain à température T et potentiel chimique μ .

Calcul de la matrice hermitienne. Dans la section 2.2.2, nous avons présenté les différentes étapes de la résolution numérique de l'équation de TBA. Nous reprenons ici le formalisme de l'équation (4.22), dans lequel le poids spectral s'écrit comme une combinaison linéaire :

$$w(\theta) = \beta_0 f_0(\theta) + \beta_2 f_2(\theta), \quad (4.61)$$

où $f_0(\theta) = 1$ et $f_2(\theta) = \frac{1}{2}m\theta^2$ correspondent aux densités locales associées aux charges conservées. Les coefficients $\beta_0 = -\beta\mu$ et $\beta_2 = \beta(= (k_B T)^{-1})$ sont fixés de manière à imposer une température T et un potentiel chimique μ .

Le **paramètre de Lieb** et la **température réduite**, définis respectivement en (2.63) et (2.66),

$$\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}, \quad t = \frac{\hbar^2}{m\beta g^2},$$

permettent également de paramétrer le couple (T, μ) (voir section 2.2.2).

Remarque

On rappelle que le paramètre de Lieb γ caractérise la force d'interaction relative entre les particules, tandis que la température réduite t quantifie l'importance des effets thermiques par rapport aux interactions. En variant ces deux paramètres, on explore différents régimes physiques du système.

Remarque

Dans cette continuité, nous allons définir des unités naturelles adaptées au système étudié. Ces unités facilitent l'interprétation physique des résultats numériques en les reliant directement aux grandeurs expérimentales.

Conversion vers les unités réelles. Mais avant pour faciliter la comparaison avec les expériences, nous allons définir des unités caractéristiques :

$$\ell_0 = \frac{\hbar^2}{mg}, \quad (\text{longueur}) \quad (4.62)$$

$$\tau_0 = \frac{m\ell_0^2}{\hbar}, \quad (\text{temps}) \quad (4.63)$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{mL_0^2}, \quad (\text{énergie}) \quad (4.64)$$

$$T_0 = \frac{E_0}{k_B}, \quad (\text{température}). \quad (4.65)$$

Mes résultats numériques sont exprimés en unités naturelles adimensionnées. Pour revenir aux valeurs réelles, il suffit de les multiplier par les unités caractéristiques définies ci-dessus.

Paramètres fixes. Dans toute la suite, nous travaillons avec les conventions naturelles $\hbar = m = k_B = 1$, ainsi qu'avec

$$L = 10, \quad g = 1.$$

Choix des paramètres. Nous considérons le point

$$\gamma = 0.02, \quad t = 70,$$

qui est représenté par un **point rouge** dans le diagramme de phase du modèle de LL, présenté en figure 4.5a.

Remarque

Les paramètres choisis ne sont pas arbitraires : ils sont proches des régimes expérimentaux que nous considérons. La taille du sous-système L est en unité réelle de $22 \mu m$, la densité linéaire n est de l'ordre de $23 \mu m^{-1}$ et la température T est d'environ $81 nK$.

À partir de ce paramètre, et suivant la même procédure numérique que dans la sous-section précédente, on obtient la distribution de rapidité à l'équilibre $\langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w \equiv \rho_{\text{eq}}(\theta)$, ainsi que les composantes de l'inverse de l'opérateur hessien $(L\mathcal{H})^{-1}$: la contribution diagonale sans interaction $(L\mathcal{D})^{-1}$ (Fig. 4.5b) et la contribution non locale issue des interactions \mathcal{B}/L (Fig. 4.5c).

Plus précisément, dans la figure 4.5b, on représente

$$\frac{\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta')}{\delta(\theta - \theta')} \quad (= \rho_{s,\text{eq}}(\theta) v_{\text{eq}}(\theta) (1 - v_{\text{eq}}(\theta))),$$

la fonction delta dans (4.56) étant approximée numériquement par un pas de discrétisation, la matrice \mathcal{D}^{-1} est proportionnelle à ce pas.

Enfin, en faisant varier t (*i.e.* la température T), on répète l'ensemble des calculs précédents. Les régimes ainsi obtenus sont indiqués par des **points bleus** dans le diagramme de phase (figure 4.5a).

Corrélation des observables thermodynamiques. Conformément à l'équation (4.29), nous calculons les fluctuations du nombre total de particules ainsi que celles de l'énergie totale, respectivement données par :

$$C_w[f_0, f_0] = L^2 \iint d\theta d\theta' f_0(\theta) (L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta') f_0(\theta'), \quad (4.66)$$

$$C_w[f_2, f_2] = L^2 \iint d\theta d\theta' f_2(\theta) (L\mathcal{H})^{-1}(\theta, \theta') f_2(\theta'). \quad (4.67)$$

Pour chaque régime simulé (correspondant aux **points bleus** et **rouges** sur la figure 4.5a), nous évaluons numériquement les quantités $C_w[f_0, f_0]$ et $C_w[f_2, f_2]$, qui représentent les fluctuations extensives des observables associées aux charges \hat{Q}_0 (nombre de particules) et \hat{Q}_2 (énergie cinétique).

Ces résultats sont représentés par des **points orange** dans la figure 4.6, illustrant l'évolution des fluctuations en fonction du régime thermodynamique du sous-système.

Susceptibilité des observables thermodynamiques. En parallèle, pour chaque régime simulé (correspondant aux **points bleus** et **rouges** de la figure 4.5a), et conformément à l'équation (4.28), nous calculons les moyennes des charges associées au nombre total de particules et à l'énergie cinétique totale, données respectivement par :

$$\langle \hat{Q}[f_0] \rangle_w = L \int d\theta f_0(\theta) \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w, \quad (4.68)$$

$$\langle \hat{Q}[f_2] \rangle_w = L \int d\theta f_2(\theta) \langle \hat{\rho}(\theta) \rangle_w. \quad (4.69)$$

Nous souhaitons ensuite approximer les susceptibilités thermodynamiques définies par :

$$\chi_w[f_i, f_i] = - \left. \frac{\partial \langle \hat{Q}[f_i] \rangle_w}{\partial \beta_i} \right|_{\beta_{j \neq i} \text{ fixés}}. \quad (4.70)$$

Pour cela, nous procédons à une variation infinitésimale du poids spectral w :

- Une variation infinitésimale ϵ_μ du potentiel chimique μ correspond à une perturbation du poids spectral de la forme :

$$w \rightarrow w - \beta \epsilon_\mu f_0.$$

On résout alors numériquement les équations TBA pour ce nouveau poids, afin de calculer :

$$\langle \hat{Q}[f_0] \rangle_{w - \beta \epsilon_\mu f_0}.$$

- On effectue ensuite une variation infinitésimale ϵ_β de l'inverse de la température, de sorte que la combinaison $(\beta + \epsilon_\beta)(\mu + \epsilon_\mu) = \beta\mu$ reste constante, maintenant ainsi β_0 fixe. Cela conduit à une variation du poids spectral de la forme :

$$w \rightarrow w + (\beta + \epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0 + f_2).$$

On résout à nouveau les équations TBA pour obtenir :

$$\langle \hat{Q}[f_2] \rangle_{w+(\beta+\epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0+f_2)}.$$

Ces simulations permettent d'estimer numériquement les susceptibilités :

$$\chi_w[f_0, f_0] \approx \frac{\langle \hat{Q}[f_0] \rangle_{w-\beta\epsilon_\mu f_0} - \langle \hat{Q}[f_0] \rangle_w}{\beta\epsilon_\mu}, \quad (4.71)$$

$$\chi_w[f_2, f_2] \approx -\frac{\langle \hat{Q}[f_2] \rangle_{w+(\beta+\epsilon_\beta)(-\epsilon_\mu f_0+f_2)} - \langle \hat{Q}[f_2] \rangle_w}{\epsilon_\beta}. \quad (4.72)$$

Ces approximations numériques sont représentées par des **points bleus** dans la figure 4.6, et permettent de confronter les résultats issus de la dérivée fonctionnelle avec ceux provenant de la réponse directe à une perturbation du poids spectral.

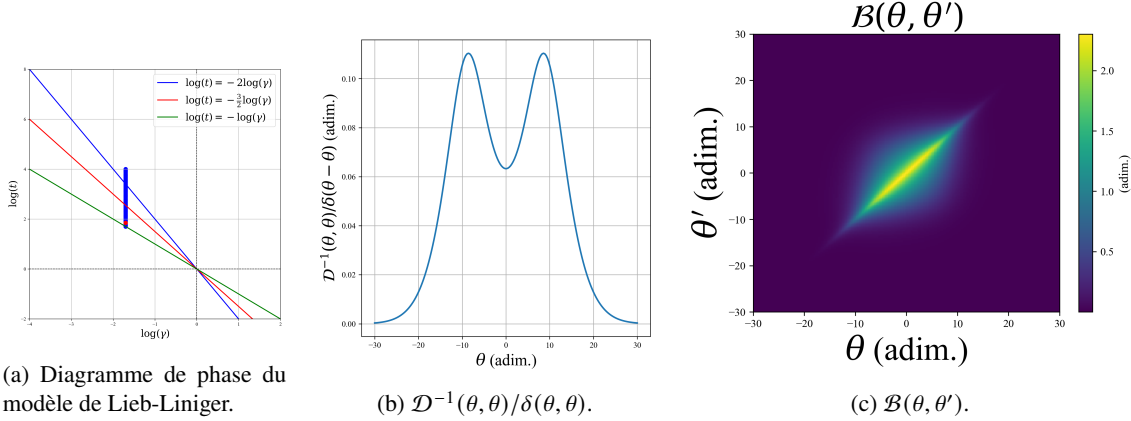


FIGURE 4.5 – (a) Diagramme de phase du modèle de Lieb–Liniger à l’équilibre thermique. Différents régimes asymptotiques sont séparés par des transitions progressives. Les points bleus représentent les fluctuations calculées numériquement pour différentes températures. Les coordonnées sont données par $\gamma = \frac{mg}{\hbar^2 n}$ et $t = \frac{k_B T}{mg^2/\hbar^2}$. Les régimes choisis pour les simulations sont indiqués par les points bleus ($\gamma = 0.02$ constant) et le point rouge correspond à $t = 70$, utilisé dans les sous-figures (b) et (c). (b) Représentation de la diagonale $\mathcal{D}^{-1}(\theta, \theta)/\delta(\theta, \theta)$. (c) Représentation en niveaux de couleur de la partie régulière \mathcal{B} des fluctuations $\delta\rho$ pour $t = 70$ et $\gamma = 0.02$ (point rouge dans (a)).

Comparaison avec les dérivées thermodynamiques. Les résultats obtenus à partir de l’analyse quadratique de l’action (fluctuations de ρ) sont comparés aux fluctuations extraites directement par différentiation des observables thermodynamiques $\langle \hat{Q} \rangle_w$ et $\langle \hat{H} \rangle_w$. Ces comparaisons sont présentées dans la Fig. 4.6 et révèlent une excellente concordance. On le quantifie avec :

$$\left| \frac{C_w[f_0, f_0] - \chi_w[f_0, f_0]}{C_w[f_0, f_0]} \right| < 0.004\%, \quad \left| \frac{C_w[f_2, f_2] - \chi_w[f_2, f_2]}{C_w[f_2, f_2]} \right| < 0.14\%.$$

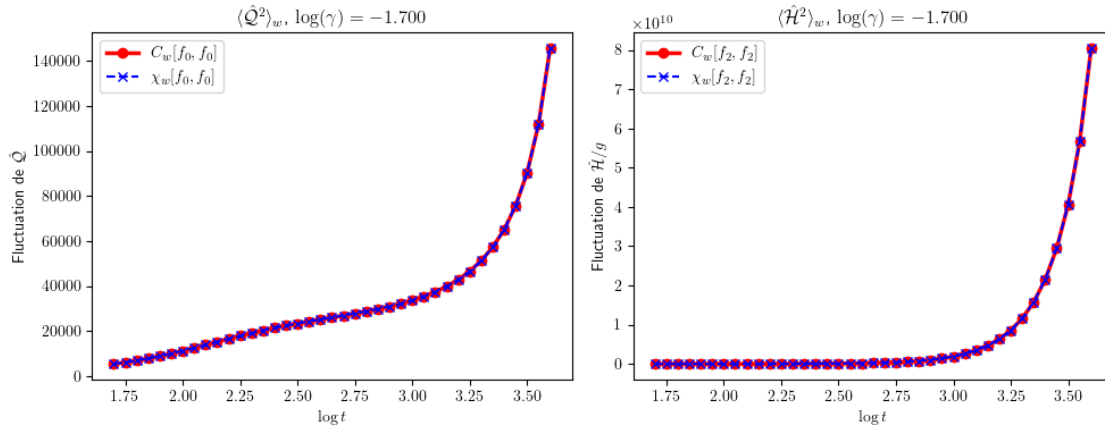


FIGURE 4.6 – Comparaison numérique entre $C_w[f_0, f_0]$ et $\chi_w[f_0, f_0]$ et entre $C_w[f_2, f_2]$ et $\chi_w[f_2, f_2]$.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les fluctuations de la distribution de rapidité dans les états GGE, en mettant en lumière le lien fondamental entre corrélations et réponse linéaire.

Nous avons d’abord introduit le formalisme général des GGE, dans lequel les observables macroscopiques sont dérivées fonctionnellement du potentiel conjugué $w(\theta)$. Dans ce cadre, nous avons montré que la matrice de susceptibilité spectrale $\chi_w(\theta, \theta')$ décrit à la fois la réponse linéaire de la densité spectrale moyenne à une perturbation infinitésimale du potentiel, et les corrélations entre fluctuations de la densité, conformément au principe de fluctuation-réponse. En utilisant ce lien, nous avons vu que nous pouvons échantillonner GGE.

Nous avons ensuite approfondi l’étude de la limite thermodynamique, où les fluctuations autour de l’état d’équilibre deviennent gaussiennes. Dans cette approximation, les susceptibilités s’expriment comme l’inverse de la courbure fonctionnelle de l’entropie de Yang-Yang, formalisée par l’opérateur hessien $\mathcal{H}^{(SY)}$. Nous avons donné une formulation explicite de cet opérateur, ainsi que de sa matrice inverse.

Enfin, nous avons relié ces objets locaux à des susceptibilités globales via une projection sur les fonctions test $f_i(\theta)$, en considérant le poids spectral $w(\theta)$ comme une combinaison linéaire des charges \hat{Q}_i . Ce formalisme nous a permis d’interpréter la dérivée de l’observable $\langle \hat{Q}_i \rangle_w$ par rapport au multiplicateur de Lagrange β_i comme une dérivée fonctionnelle projetée de la matrice $\chi_w(\theta, \theta')$, et d’en valider la structure par une comparaison numérique explicite sur l’énergie et le nombre de particules.

Nous avons vérifié numériquement la validité de notre formule des fluctuations (Eq. (4.59)), ce qui confirme son exactitude et sa pertinence dans le cadre du formalisme développé.

Bibliographie du chapitre

- [CK12] Jean-Sébastien CAUX et Robert M. KONIK. “Constructing the Generalized Gibbs Ensemble after a Quantum Quench”. In : *Phys. Rev. Lett.* 109 (17 oct. 2012), p. 175301. DOI : [10.1103/PhysRevLett.109.175301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.175301). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.175301>.
- [GA14] Garry GOLDSTEIN et Natan ANDREI. *Equilibration and Generalized GGE in the Lieb Liniger gas*. 2014. arXiv : [1309.3471](https://arxiv.org/abs/1309.3471) [cond-mat.quant-gas]. URL : <https://arxiv.org/abs/1309.3471>.
- [Nar+17] Jacopo De NARDIS et al. “Probing non-thermal density fluctuations in the one-dimensional Bose gas”. In : *SciPost Phys.* 3 (2017), p. 023. DOI : [10.21468/SciPostPhys.3.3.023](https://doi.org/10.21468/SciPostPhys.3.3.023). URL : <https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.3.3.023>.

- [PK18] T. PALMAI et R. M. KONIK. “Quasilocal charges and the generalized Gibbs ensemble in the Lieb-Liniger model”. In : *Phys. Rev. E* 98 (5 nov. 2018), p. 052126. doi : [10.1103/PhysRevE.98.052126](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.052126). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.98.052126>.