

Université de Paris
École Doctorale “Physique en Île-de-France”

THÈSE DE DOCTORAT

Discipline : Physique théorique

présentée par

Jérémie O’Byrne

Matière active et irréversibilité : des modèles microscopiques aux théories des champs

dirigée par Julien TAILLEUR

Soutenue le 04 février 2022 devant le jury composé de

| | |
|---------------------|--------------------|
| Julien BARRÉ | rapporteur |
| Giulio BIROLI | examinateur |
| Thierry BODINEAU | examinateur |
| Léonie CANET | rapportrice |
| Jorge KURCHAN | examinateur |
| Vivien LECOMTE | examinateur |
| Julien TAILLEUR | directeur de thèse |
| Éric VANDEN EIJNDEN | examinateur |

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| Table des matières | 3 |
| 1 Introduction | 5 |
| 1.1 La physique statistique | 5 |
| 1.1.1 Thermodynamique : observables et macro-états | 7 |
| 1.1.2 Physique statistique d'équilibre : mesure de probabilité et micro-états | 10 |
| 1.1.3 Séparation d'échelle et équation de Langevin | 12 |
| 1.1.4 La théorie des champs | 15 |
| 1.2 La matière active | 18 |
| 1.2.1 L'omniprésence des systèmes actifs | 19 |
| 1.2.2 Modèles de la dynamique individuelle d'une particule active | 23 |
| 1.2.3 Particules actives en interaction | 26 |
| 1.2.4 Modèle macroscopique de systèmes actifs et (pseudo-) équilibre macroscopique | 28 |
| 1.3 Organisation de la thèse | 33 |
| 2 Symétrie Temporelle et Réversibilité | 35 |
| 2.1 Renversement du temps de systèmes passifs simples | 37 |
| 2.1.1 Renversement du temps dans l'équation de Langevin sur-amortie. | 37 |
| 2.1.2 Renversement du temps dans l'équation de Langevin sous-amortie. | 39 |
| 2.1.3 Renversement du temps en présence d'une force qui ne travaille pas. | 41 |
| 2.2 Formalisation mathématique de la symétrie temporelle des équations stochastiques | 45 |
| 2.2.1 Contexte général | 45 |
| 2.2.2 (P)T-symétrie | 48 |

| | |
|--|-----------|
| 2.2.3 EPT-symétrie : PT-symétrie étendue | 53 |
| 2.3 Réversibilité et courants de probabilité | 56 |
| 2.3.1 T-symétrie des systèmes sur-amortis & courants de probabilité | 56 |
| 2.3.2 PT-symétrie : bilan détaillé & courants projetés dans l'espace réel | 59 |
| 2.4 Irréversibilité et matière active | 61 |
| Appendices | 67 |
| A Approche de Jaynes, multiplicateurs de Lagrange et variables thermodynamiques | 69 |
| B Décroissance de la production d'entropie sous coarse-graining | 71 |
| C Action de groupe | 73 |
| D PT-symétrie | 77 |
| D.1 Mesure à deux points et mesure stationnaire | 77 |
| D.2 Opérateur adjoint – expression formelle | 77 |
| D.3 Opérateur adjoint – expression explicite | 78 |
| E Irréversibilité globale et existence d'une trajectoire irréversible | 81 |
| F Réversibilité de l'équation de Langevin sous-amortie et force gradient | 83 |
| G Matière active et chaleur dissipée | 85 |
| H Opérateur d'évolution PT-dual : généralisation aux bruits multiplicatifs | 87 |
| I Mouvement brownien biaisé en espace courbe, T-réversibilité et descente de gradient | 89 |
| Liste des publications | 93 |
| Bibliographie | 93 |

Chapitre 1

Introduction

1.1 La physique statistique

La physique statistique a pour objet d'étude les systèmes composés d'un grand nombre "d'agents" ou de "particules" élémentaires. Ces agents peuvent être de natures et de tailles très diverses, allant des atomes ou des molécules aux acteurs économiques d'un marché donné, en passant par des grains de sable, des cellules ou des organismes biologiques en général. Dans ce cadre, l'objectif de la physique statistique est de prédire le comportement collectif de ces agents élémentaires.

Pour étudier un système physique, la science a souvent recourt à une démarche réductionniste : elle décompose ce système en sous-systèmes élémentaires, *a priori* plus simples, qu'elle analyse en détails, avant de tenter de comprendre le comportement de l'ensemble du système. Si l'on suppose déjà avoir connaissance du comportement d'un sous-système (i.e. d'un agent) élémentaire, sous la forme d'une équation dynamique décrivant (de manière "satisfaisante") l'évolution d'un agent isolé¹ dans son espace d'état Γ , il peut déjà être compliqué de déduire le comportement d'un nombre restreint d'agents élémentaires interagissant entre eux. Sur le plan analytique, la résolution des équations dynamiques est souvent difficile voire impossible [74], à l'instar du problème à trois corps de la mécanique classique pour lequel il n'existe pas de "solution explicite" générale [45]. Sur le plan numérique, on peut espérer pouvoir "résoudre" l'ensemble des équations dynamiques, c'est à dire, pour un ensemble de conditions initiales données, prédire l'état du système dans le futur avec une précision que l'on s'est donnée au préalable. Cependant, la dynamique de nos quelques agents élémentaires en interaction peut être chaotique,

1. Ce qui est loin d'être toujours facile si l'on pense, par exemple, au cas d'un agent économique.

comme c'est le cas, par exemple, du problème à trois corps. Dans ce cas nos prédictions numériques n'auront la précision fixée qu'à un certain horizon temporel fini. L'élargissement de cet horizon se fait alors au prix d'une plus grande précision dans la connaissance de l'état initial du système, et éventuellement d'une discrétisation numérique plus fine de la variable temporelle.

La physique statistique s'inscrit dans cette démarche scientifique réductionniste, qui consiste à tenter de "déduire" le comportement du tout à partir de celui de ses parties. Mais la physique statistique a ceci de particulier qu'elle s'intéresse à des systèmes généralement composés d'un "très grand" nombre d'agents élémentaires. Pour l'étude d'un volume macroscopique d'un gaz par exemple, ce nombre N est typiquement de l'ordre du nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_A \simeq 6.02 \times 10^{23}$. Pour un tel nombre de particules élémentaires, on ne peut espérer prédire le comportement de l'ensemble du système simplement en simulant la réunion des équations dynamiques de chacun des agents en interaction. En effet, les performances numériques actuelles dans ce domaine permettent de simuler la dynamique (newtonnienne) d'environ 100 millions de particules, sur 10 nanosecondes de temps réel, en une journée de simulation [92, 1, 79]. Autrement dit, pour simuler le comportement de 100 millions de particules sur un temps macroscopique, de l'ordre d'une seconde par exemple, il faudrait effectuer une simulation d'environ 100 millions de jours, c'est à dire 300 milles ans. On peut donc estimer que la simulation de l'évolution de 10^{23} particules sur 1 seconde prendrait environ 1 milliard de milliards d'années, soit bien plus que l'âge de l'univers ! De plus, pour prédire l'évolution d'un système réel sur un temps macroscopique, il faudrait être en mesure de connaître, à un instant donné, l'état de l'ensemble de ses particules élémentaires avec une bonne précision, ce qui est évidemment illusoire si l'on cherche à étudier un volume macroscopique de gaz (à pression atmosphérique par exemple). Enfin, en plus du temps de calcul et de la précision de la mesure des conditions initiales, la capacité de mémoire de stockage serait également un problème majeur si l'on cherchait à prédire numériquement l'évolution d'un trop grand nombre de particules.

Ainsi on ne peut espérer atteindre l'objectif de la physique statistique qu'en remplaçant la dynamique "microscopique" sur l'espace d'état total Γ^N par une approche mathématique différente, plus à même de décrire le comportement collectif des particules, typiquement sur des échelles d'espace et de temps grandes devant les temps et longueurs caractéristiques d'évolution des particules elles-mêmes. La suite de la présente section consiste en un rapide tour d'horizon des différents points de vue élaborés (essentiellement) au fil des deux derniers siècles pour tenter de décrire les comportements collectifs de ces grands ensembles de particules élémentaires. Loin d'être exhaustive, cette section rétrospective a pour but d'introduire les idées et concepts essentiels sur lesquels se fonde la physique statistique de la matière active, thématique sur laquelle portent les travaux de thèse présentés

dans ce manuscrit.

1.1.1 Thermodynamique : observables et macro-états

La Thermodynamique est une théorie essentiellement fondée entre la seconde moitié du XVIII^e siècle et la première moitié du XIX^e siècle² pour répondre aux défis de la première révolution industrielle. Son objectif initial était de pouvoir discerner les machines thermiques physiquement impossibles de celles réalisables [20] et d'optimiser le rendement de ces dernières. Par la suite la thermodynamique s'est peu à peu imposée non seulement comme la science des transferts et conversions d'énergies mais également dans l'étude des changements d'état.

Sur le plan théorique, la thermodynamique conjecture en premier lieu l'existence d'états particuliers des systèmes simples³, appelés *états d'équilibre thermodynamique*, et définis comme suit [20] : un système simple est dans un état dit d'équilibre thermodynamique lorsqu'il est entièrement caractérisé, à l'échelle macroscopique, par son énergie interne U , son volume V ainsi que par la composition N_1, \dots, N_r des agents chimiques qui le constituent⁴.

Bien que la définition de l'équilibre thermodynamique donnée ci-dessus soit primordiale pour axiomatiser le formalisme thermodynamique, il est expérimentalement impossible de l'utiliser comme telle pour vérifier si un système est à l'équilibre ou non. En pratique, “un système sera considéré à l'équilibre thermodynamique si ses propriétés sont décrites de manière consistante par la théorie de la thermodynamique”(traduit de [20]).

Le premier principe de la thermodynamique consiste ensuite à postuler la conservation de l'énergie⁵, exploitant de manière avant-gardiste une caractéristique commune à toutes les théories physiques “fondamentales” : l'invariance par translation dans le temps⁶. Cette conservation implique que la variation de l'énergie d'un système résulte d'échanges énergétiques avec l'extérieur. Ces échanges peuvent être de deux natures différentes : travail W ou chaleur Q , si bien que la

2. Certains travaux importants ont été réalisés antérieurement, comme ceux de Robert Boyle qui démontrent expérimentalement qu'un gaz maintenu à température constante voit le produit de son volume par sa pression inchangé.

3. Un système est dit simple s'il est macroscopiquement homogène, isotrope, non chargé, non soumis à des champs électromagnétique ou gravitationnel, et s'il est suffisamment grand pour que tout effet de bord soit négligeable [20].

4. On ne parlera pas ici des généralisations de la thermodynamique, considérant par exemple des effets électriques ou mécaniques plus complexes

5. On confondra dans cette section énergie globale et énergie interne du système, supposant ainsi que l'énergie cinétique et potentielle du centre de masse du système est la même au début et à la fin des transformations considérées.

6. qui implique la conservation de l'énergie d'après le célèbre théorème d'Emmy Noether

variation infinitésimale de l'énergie interne s'écrit, selon le premier principe :

$$dU = \delta W + \delta Q . \quad (1.1)$$

Notons que cette théorie fût développée à une époque où la nature atomique de la matière n'était qu'une hypothèse, de surcroît largement critiquée, jusqu'au célèbre article de synthèse publié par Jean Perrin en 1909 [77]. Malgré cela, dans la distinction entre travail et chaleur qu'opère la thermodynamique, se dessine déjà une des caractéristiques fondamentales de la physique statistique — théorie qui s'inscrit dans le prolongement direct de la thermodynamique — l'existence de *plusieurs échelles spatio-temporelles distinctes*. En effet le terme “travail” désigne tous les échanges d'énergie se situant à l'échelle spatio-temporelle macroscopique, à laquelle on observe le système ; tandis que la “chaleur” regroupe tous les modes de transfert d'énergie se situant à des échelles d'espaces et de temps plus petites, caractéristiques des constituants élémentaires du système [20].

Le second principe de la thermodynamique constitue, quant à lui, l'autre grand pilier de la théorie. L'une de ses formulations les plus répandues dans les manuels scolaires modernes [85] consiste à postuler l'existence d'une fonction d'état extensive S , appelée *entropie* du système, dont la différentielle vérifie :

$$dS = \frac{\delta Q}{T} + \delta S^c , \quad \delta S^c \geq 0 . \quad (1.2)$$

δS^c est l'entropie créée au cours de la transformation (infinitésimale). Lorsque celle-ci s'annule, la transformation est dite *réversible*. La formulation (1.2) du second principe, bien que très concise, a le mérite de faire apparaître clairement les deux “miracles” contenus dans le second principe, qui sont à la base du succès de la théorie thermodynamique :

- (i) Pour deux états d'équilibre A et B donnés, le rapport du flux de chaleur sur la température est le même pour toute transformation réversible allant de l'état A à l'état B. Autrement dit, “le long de toute transformation réversible”, $\delta Q/T$ est une différentielle exacte. C'est donc la différentielle d'une fonction⁷ appelée *entropie du système* et notée S . C'est l'existence de ce fait expérimental a priori surprenant qui permet de réaliser des calculs de transfert d'énergie (par exemple de calculer une borne supérieure au travail récupérable) bien que l'on ne connaisse quasiment rien des circonstances (ni même, historiquement, de la nature) du transfère énergétique sous forme de flux de chaleur.

7. Pour toute constante réelle c , $S + c$ est également une fonction qui convient. C'est le troisième principe de la thermodynamique, ou “principe de Nernst”, qui fixe cette constante en exigeant que l'entropie s'annule au zéro absolu.

- (ii) L'entropie d'un système isolé ne peut que croître. Sa variation au cours d'une transformation thermodynamique est nulle si et seulement si ladite transformation est réversible. C'est ce principe de croissance de l'entropie d'un système isolé qui fournit le sens "naturel" d'évolution des échanges énergétiques. Ce faisant il permet aussi de répondre à un des objectifs originels de la thermodynamique : distinguer les machines thermiques réalisables de celle physiquement interdites (selon que l'entropie totale croisse ou décroisse au cours d'un cycle).

Notons que (ii) est souvent qualifié de "flèche du temps" thermodynamique, ce qui peut paraître paradoxalement donné que le temps n'apparaît pas explicitement dans la formulation théorique de la thermodynamique. L'absence de la variable temporelle dans le formalisme thermodynamique est essentiellement une conséquence du point (i) : "l'information maximale" sur une transformation – i.e. la valeur de toutes les variables thermodynamiques au cours de la transformation – est obtenue seulement quand celle-ci est réversible, donc infiniment lente, ce qui implique qu'on se place implicitement dans la limite de temps de transformation infini lorsqu'on manipule les différentielles des fonctions d'état.

Enfin, signalons que la fonction $S(U, V, N_1, \dots, N_r)$ contient toute l'information thermodynamique sur un système donné, à l'équilibre thermodynamique. Elle est ainsi nommée *fonction fondamentale*⁸. En vertu de l'extensivité de S et de ses variables, on peut aisément obtenir l'équation fondamentale d'un système composite⁹ en fonction de celles des systèmes simples qui le composent. Ensuite, le second principe affirme que, de tous les états d'équilibre intérieurement contraints de ce système composite, l'état d'équilibre sans contrainte interne est celui d'entropie maximale. Selon les circonstances de la transformation effectuée (qui consiste formellement à relâcher des contraintes internes), il peut être judicieux de remplacer l'entropie par l'une ou l'autre de ses transformées de Legendre (partielle ou totale). Ces transformées de Legendre sont appelés *potentiels thermodynamiques* et sont aussi extrémalisées lors du relâchement des contraintes appropriées. Dans la pratique, ces potentiels jouent un rôle majeur en thermodynamique, et nous verrons que leurs généralisations "variationnelles" sont d'une grande importance également en physique statistique.

8. C'est plus précisément la formulation entropique de l'équation fondamentale. La connaissance de la fonction $U(S, V, N_1, \dots, N_r)$ est quant à elle appelée "formulation énergétique" de l'équation fondamentale.

9. Un système composite est défini comme la réunion de systèmes simples.

1.1.2 Physique statistique d'équilibre : mesure de probabilité et micro-états

La physique statistique à proprement parler naît de la volonté d'ancrer la thermodynamique sur des bases plus “fondamentales”. Elle voit le jour dans la seconde moitié du XIXe siècle, Boltzmann, Maxwell et Gibbs étant souvent considérés comme ses principaux fondateurs. Bien que formulée en partie avant l'établissement du consensus scientifique autour de la nature atomique de la matière, cette approche met au premier plan l'espace Γ^N des *micro-états* puisqu'elle affirme que les grandeurs thermodynamiques \bar{A} sont des moyennes temporelles (à temps “long”) d’observables A sur Γ^N :

$$\bar{A} \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau A(\mathbf{x}(t)) dt , \quad (1.3)$$

où $(\mathbf{x}(t))_{t \geq 0}$ est la trajectoire du système dans l'espace Γ^N au cours de la mesure de \bar{A} . Mais cette nouvelle approche propose de remplacer dans les calculs la dynamique sur Γ^N par une mesure de probabilité ν sur ce même espace, laissée invariante par la dynamique. C'est le *principe ergodique* selon lequel, pour un système à l'équilibre thermodynamique, la moyenne temporelle sur A peut être remplacée par la moyenne d'ensemble associée à ν :

$$\bar{A} = \langle A \rangle \equiv \int_{\Gamma^N} A(\mathbf{x}) \nu(d\mathbf{x}) . \quad (1.4)$$

Le second postulat, sur lequel se fonde cette physique statistique des systèmes d'équilibre, affirme que, pour un système isolé, cette mesure ν coïncide avec la mesure uniforme sur le sous-ensemble de Γ^N d'énergie constante, égale à celle du système. Ce second postulat permet ensuite de déduire la mesure ν dans des situations plus générales, quand le système est en contact avec divers “réservoirs” (énergie, particules,...). Les mesures ainsi obtenues sont les *mesures de Gibbs*. Par exemple, dans le cas d'un système en contact avec un thermostat à température T , ν est appelée mesure *canonique*, et a pour densité

$$p_{\text{Gibbs}}(\mathbf{x}) = Z^{-1} e^{-\beta H(\mathbf{x})} \quad (1.5)$$

où H est l'Hamiltonien du système, $\beta = (k_B T)^{-1}$ est l'inverse de la température, et $Z(\beta)$ est la constante de normalisation, aussi appelée *fonction de partition*. C'est justement cette fonction de partition qui permet de retrouver toute la thermodynamique du système, puisque $F \equiv -\beta^{-1} \ln Z(\beta)$ coïncide avec l'énergie libre de Gibbs de la thermodynamique¹⁰.

10. Certains ouvrages nomment cette énergie libre : “l'énergie libre de Helmholtz” et réservent le qualificatif “énergie libre de Gibbs” à l'enthalpie libre.

Notons de même que l'entropie thermodynamique S_{th} coïncide (à k_B près) avec *l'entropie de Shannon* associée à la probabilité de Gibbs p_{Gibbs} de l'ensemble approprié :

$$S_{\text{th}} = k_B S_{\text{Sh}}[p_{\text{Gibbs}}] , \quad \text{où} \quad S_{\text{Sh}}[p] \equiv - \int_{\Gamma^N} p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.6)$$

Ce résultat, *a priori* étonnant, est la partie émergée d'un lien profond entre physique statistique, thermodynamique et théorie de l'information, mise au jour par Jaynes dans un article datant de 1957 [48]. Dans cet article, Jaynes montre que les mesures de Gibbs maximisent l'entropie de Shannon — vue comme fonctionnelle de probabilités — sous contrainte de moyenne des observables appropriées. Par exemple, la mesure canonique (1.5) maximise $S_{\text{Sh}}[p]$ à $\langle H \rangle$ fixé.

Si l'on applique la méthode de Lagrange pour maximiser l'entropie de Shannon, en fixant la valeur moyenne de n observables $(A_i)_{i=1\dots n}$, il apparaît que les coefficients de Lagrange $(\lambda_i)_{i=1\dots n}$ correspondent aux variables thermodynamiques conjuguées aux $\langle A_i \rangle$. Ainsi pour des réservoirs donnés, on peut considérer les λ_i comme étant fixés (température, potentiels chimiques,...), et la méthode de Lagrange revient alors simplement à minimiser le *potentiel variationnel* :

$$\Psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}[p] \equiv \sum_{i=1}^n \lambda_i \langle A_i \rangle_p - S_{\text{Sh}}[p] , \quad \text{où} \quad \langle A_i \rangle_p \equiv \int_{\Gamma^N} A_i(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} . \quad (1.7)$$

La résolution de ce problème donne les fameuses mesures de Gibbs :

$$p_{\text{Gibbs}}(\mathbf{x}) = e^{-\sum_i \lambda_i A_i(\mathbf{x}) + \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)} \quad (1.8)$$

où $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ est l'opposée de l'exponentielle de la fonction de partition associée à la mesure. Autrement dit c'est le potentiel thermodynamique de l'ensemble statistique considéré¹¹. A l'équilibre le potentiel variationnel coïncide avec ce potentiel thermodynamique $\Psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}[p_{\text{Gibbs}}] = \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$.

Ainsi l'extrémalisation des potentiels variationnels remplace, au niveau statistique, celle des potentiels thermodynamiques. On verra dans la section suivante, ainsi qu'au chapitre 2, que l'évolution d'un processus stochastique d'équilibre présente généralement une structure de descente de gradient pour un potentiel variationnel.

Par ailleurs, notons que l'application des méthodes mentionnées dans ce paragraphe est conditionnée au fait que le système étudié soit à l'équilibre thermodynamique. Mais la définition de l'équilibre au sens thermodynamique est difficilement

11. Pour être tout à fait précis, les λ_i ne coïncident pas totalement avec les grandeurs intensives thermodynamiques “usuelles” T, μ, \dots , et, dans l'équation (1.8), ψ est un potentiel de Massieu (transformées de Legendre de l'entropie) plutôt qu'un potentiel thermodynamique (transformées de Legendre de l'énergie). On explique ces différences dans l'appendice A.

vérifiable directement en pratique, comme nous l'avons discuté dans la section précédente. C'est sans doute pour cette raison que bon nombre d'ouvrages de physique statistique [43, 32] définissent l'état d'équilibre lui-même par les mesures de Gibbs : *un système est dit à l'équilibre thermodynamique si sa distribution dans l'état stationnaire est une mesure de Gibbs.* Nous verrons par la suite qu'il existe encore une autre définition de l'équilibre, sans doute mieux adaptée à l'approche, plus dynamique, des processus stochastiques — approche que nous avons systématiquement adoptée au cours de cette thèse — et qui a trait à la réversibilité temporelle.

Finalement, la physique des ensembles statistiques, présentée brièvement dans cette section, propose d'étudier un système à l'équilibre par le programme suivant : trouver l'ensemble statistique adapté au système que l'on souhaite étudier (c'est à dire, notamment, trouver un Hamiltonien idoine) ; puis calculer la fonction de partition, celle-ci contenant toute l'information thermodynamique du système. Ce programme général, formellement bien compris, peut laisser entendre que l'étude statistique des systèmes à l'équilibre est un problème “résolu” de manière générale. Or, dans les faits, le calcul de la fonction de partition est souvent extraordinairement complexe. On peut alors tenter d'estimer la mesure d'équilibre numériquement, par exemple par des méthodes de type Monte-Carlo. Mais, à nouveau, ces méthodes numériques ne peuvent fonctionner que si le nombre N de particules considérées n'est pas trop grand. En effet, il semble illusoire d'espérer estimer une mesure sur un espace Γ^N dont la dimension est de l'ordre du nombre d'Avogadro. Lorsque N est de l'ordre de \mathcal{N}_A , si on peut négliger les interactions entre les particules, i.e. si l'ensemble des particules constitue un gaz parfait, la mesure se factorise et on est alors ramené à l'étude, considérablement plus simple, d'une mesure sur Γ . Lorsque ce n'est pas le cas, il est nécessaire de réduire encore la complexité de la modélisation mathématique pour décrire le problème. On présente deux autres méthodes de “réduction de complexité” (applicable dans certains contextes) dans les deux sections suivantes.

1.1.3 Séparation d'échelle et équation de Langevin

En 1827, le naturaliste écossais Robert Brown observe et décrit le mouvement erratique de particules issues de grains de pollen de la plante *Clarkia pulchella*, ces particules étant plongées dans de l'eau. Par la suite il reproduit l'expérience avec des particules inorganiques et conclut que l'explication vitaliste – selon laquelle ce serait “l'énergie vitale” présente dans les particules de pollen qui leur conférerait un tel mouvement – ne peut pas être exacte [17]. Bien que Robert Brown ne soit

pas le premier à réaliser de telles expériences¹², et ne propose pas de théorie pour expliquer ses observations, ce mouvement erratique sera par la suite baptisé, en son honneur, mouvement brownien.

A la suite notamment des travaux d’Einstein, Smoluchovski, Perrin et Langevin¹³, il apparaît clairement que ce sont les chocs de ces particules mésoscopiques avec les particules microscopiques du solvant qui sont à l’origine de ce mouvement aléatoire. Pour modéliser de tels types de mouvements, Paul Langevin introduit en 1908 [55] une équation différentielle d’un genre nouveau, contenant une partie stochastique :

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla V(\mathbf{r}) - \gamma\dot{\mathbf{r}} + \boldsymbol{\eta} \quad (1.9)$$

où m est la masse de la particule, \mathbf{r} est sa position, V est un potentiel extérieur dans lequel la particule évolue, γ est le coefficient de friction, et $\boldsymbol{\eta}$ est un processus aléatoire gaussien, centré, et dont les corrélations satisfont $\langle \eta^i(t)\eta^j(s) \rangle = 2\gamma k_B T \delta^{ij} \delta(t-s)$, T étant la température du bain. L’interaction d’une particule mésoscopique avec son bain microscopique environnant est ainsi décomposée en une force moyenne $-\gamma\dot{\mathbf{r}}$ correspondant à un frottement fluide, à laquelle s’ajoute une force aléatoire, de moyenne nulle, représentée par $\boldsymbol{\eta}$.

L’équation (1.9), appelée *équation de Langevin* (sous-amortie), opère une formidable réduction des degrés de liberté du système total {particule mésoscopique + solvant} puisque l’on passe d’une dynamique sur Γ^{N+1} , où le nombre de particule du bain N est grand devant 1, à une dynamique aléatoire sur Γ ; le prix à payer étant que le déterminisme des équations de Newton est remplacé par une dynamique stochastique. De plus, cette méthode se généralise aux cas de plusieurs particules mésoscopiques interagissant les unes avec les autres.

Notons que, dans certains cas, il est possible de procéder analytiquement à une telle opération. Par exemple, en une dimension d’espace, en modélisant les particules du bain par un grand nombre d’oscillateurs harmoniques, couplés à la particule mésoscopique par une interaction elle aussi harmonique, on obtient l’équation suivante pour la dynamique de la particule mésoscopique [122] :

$$m\ddot{r}(t) = -\nabla V(r) - \int_0^t K(t-s)\dot{r}(s)ds + \xi. \quad (1.10)$$

Si la mesure initiale sur l’état des oscillateurs correspond à celle de l’ensemble canonique, ξ est un processus gaussien centré, tel que $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = k_B T K(t-s)$. L’équation obtenue est en tout point similaire à celle de Langevin (1.9), excepté le

12. Par exemple, en 1785, Jan Ingenhousz observe que des particules de charbon flottant dans de l’alcool présentent un mouvement de nature en apparence aléatoire.

13. Louis Bachelier décrit un mouvement similaire au mouvement brownien dans sa thèse, dès 1900. Il avait pour but de décrire les fluctuations du prix des actions boursières, mais ses travaux ne seront re-découverts que plus tard.

fait qu'elle possède *une mémoire* : la force de frottement fluide ainsi que les corrélations du terme stochastique — donc la dynamique de la particule mésoscopique — dépendent de l'état du système à des temps antérieurs, via le noyau de mémoire K . On dit qu'une telle dynamique est *non markovienne*. Notons que ce n'était pas le cas de la dynamique initiale portant sur l'ensemble des couples position-vitesse (r_i, v_i) qui, elle, était bien markovienne. Ainsi la projection de degrés de libertés déterministes et markoviens se fait au prix, non seulement du caractère déterministe, mais également du caractère markovien de la dynamique. Cependant en prenant la limite de "mémoire infiniment courte" $K(t-s) \rightarrow 2\gamma\delta(t-s)$ de l'équation (1.10), on retrouve (la version unidimensionnelle de) l'équation de Langevin (1.9). Celle-ci apparaît ainsi comme une situation limite, valide quand le temps typique de relaxation de la particule mésoscopique (donné par sa masse m divisée par l'amplitude typique de K) est grand devant le temps caractéristique de "mémoire du bain" (le temps typique de décroissance de K).

Par ailleurs, l'équation de Langevin (1.9) elle-même présente une situation limite intéressante. Celle-ci s'applique lorsque le système étudié évolue dans des conditions telles que l'inertie de la particule est négligeable devant le frottement fluide, i.e quand le nombre de Reynolds est très petit devant 1. L'équation (1.9) peut alors être approximée par *l'équation de Langevin sur-amortie* :

$$\dot{\mathbf{r}} = -\gamma^{-1} \nabla V(\mathbf{r}) + \gamma^{-1} \boldsymbol{\eta} . \quad (1.11)$$

Toutes les situations étudiées durant cette thèse rentrent dans cette catégorie. C'est pourquoi on s'intéressera dans la suite essentiellement aux propriétés de tel systèmes "sur-amortis".

A toute équation différentielle stochastique markovienne, telle que les équations (1.9) et (1.11), on peut associer une équation aux dérivées partielles (déterministe), dite de Fokker–Planck, donnant l'évolution de la mesure de probabilité du système au cours du temps. Notons que pour le cas sur-amorti, cette équation de Fokker–Planck prend une forme bien particulière :

$$\partial_t p_t(\mathbf{r}) = \gamma^{-1} \nabla \cdot \left[p_t(\mathbf{r}) \nabla \frac{\delta \mathcal{F}[p_t]}{\delta p(\mathbf{r})} \right] , \quad (1.12)$$

où

$$\mathcal{F}[p] = \int p(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \beta^{-1} \int p(\mathbf{r}') \log p(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' . \quad (1.13)$$

Nous verrons au chapitre 5 qu'un espace tel que celui des densités de probabilité sur Γ peut être muni d'une structure riemannienne permettant d'interpréter l'équation (1.12) comme une descente de gradient de la fonctionnelle \mathcal{F} , qui n'est rien d'autre que l'énergie libre variationnelle. Ainsi, il n'est pas surprenant que la mesure stationnaire associée à la particule sur-amortie soit la mesure de Gibbs

de l'ensemble canonique (1.5) avec l'énergie $H = V$. Notons que, bien que l'équation de Fokker–Planck associée à l'équation de Langevin sous-amortie (1.9) soit un peu plus compliquée à interpréter géométriquement que celle (1.12) associée à une équation de Langevin sur–amortie (descente de gradient fonctionnelle), sa mesure stationnaire est également une mesure de Gibbs canonique (1.5) d'hamiltonien $H = V + m|\mathbf{v}|^2/2$. Ainsi une particule dont le comportement est décrit par l'équation (1.9) ou (1.11) constitue bien un système à l'équilibre thermodynamique, selon la définition donnée à la section 1.1.2.

Cependant, dans de tels contextes, où l'on modélise l'évolution (de certains degrés de liberté) du système par une équation différentielle stochastique, il existe une autre définition, plus dynamique, de l'équilibre : celle du *bilan détaillé*. Un système est à l'équilibre au sens du bilan détaillé (ou “vérifie le bilan détaillé”) si et seulement si, dans son état stationnaire, toute trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in [0; T]}$ (dans l'espace Γ d'états de la particule et sur un intervalle temporel $[0; T]$) est aussi probable que sa trajectoire “renversée en temps” $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in [0; T]}$. Pour l'équation de Langevin, le réversement temporelle d'une trajectoire $(\mathbf{r}_t)_{t \in [0; T]}$ consiste simplement à parcourir la trajectoire en sens inverse $(\bar{\mathbf{r}}_t)_{t \in [0; T]} \equiv (\mathbf{r}_{T-t})_{t \in [0; T]}$. Nous verrons au chapitre 2 que l'équation de Langevin (sous–amortie (1.9) comme sur–amortie(1.11) est également réversible au sens du bilan détaillé. Dans des situations plus générales, telles que celle d'une particule colloïdale chargée soumise à un champ magnétique, ou celle d'une simple particule active, la notion de “trajectoire renversée en temps” peut être plus subtile et sera discutée en détails au chapitre 2.

1.1.4 La théorie des champs

Une autre limite de l'approche de la physique statistique classique, qui met au premier plan l'étude d'une mesure sur Γ^N , est la difficulté de faire le lien entre les propriétés du système en différents points de l'espace “réel” et ce qu'il se passe dans l'espace des états Γ^N (du moins quand les calculs exactes sont hors d'atteinte). En effet, caractériser un système par une mesure sur l'espace des micro-états Γ^N met structurellement au premier plan des “informations” sur le comportement de chacune des particules. Tandis que pour étudier les comportements collectifs de telles particules, se déployant dans l'espace réel, on aimerait plutôt une approche mathématique structurant l'information — sur le comportement du système — au voisinage de chaque point de l'espace, *i.e.* une description du système via des fonctions (en autres) de la variable spatiale. Cette dernière approche, qui met l'espace réel au premier plan, est celle de la théorie des champs¹⁴.

14. Notons que ces deux types d'approche mathématique coïncident seulement lorsque les particules sont fixes, sur un réseau par exemple. D'où la pertinence de l'approche des ensembles statistiques aux modèles tels que ceux d'Ising ou d'Heisenberg par exemples, pour étudier les transitions de phase. En effet, le modèle d'Ising en dimension d , par exemple, a pour espace des

Dans la suite, on note de manière générique E l'espace “réel” ou “physique” du contexte étudié. Par exemple, dans la plupart des conditions expérimentales auxquelles nous allons nous intéresser, les particules évoluent dans un espace euclidien, de telle sorte $E \subseteq \mathbb{R}^d$. Ou encore, pour des simulations numériques en 2D avec conditions aux bords périodiques, E est le tore de dimension 2 — conditions dans lesquelles toutes les simulations de cette thèse ont été réalisées.

Un *champ* sur E est alors une application de E dans un espace \mathcal{A} — qui est généralement muni d'une structure d'espace vectoriel. Une *théorie des champs* est alors une description dynamique et/ou statistique d'un ensemble de champs $\phi_k : E \rightarrow \mathcal{A}_k$ censés caractériser un système physique à une échelle donnée.

La théorie de l'hydrodynamique nous enseigne que, pour décrire un système (classique) à de grandes échelles d'espace et de temps, il suffit d'établir la dynamique de ses champs ϕ_k dits “hydrodynamiques”. Ces champs sont les modes lents du système, i.e. ceux dont le temps typique de relaxation diverge avec la taille du système. Ces champs peuvent être de natures distinctes, par exemple :

- des champs associés à des quantités conservées. On parle encore de “modes hydrodynamiques fondamentaux”. Ce sont : la densité de matière (en masse ou en nombre), la densité d'énergie, ainsi que la densité d'impulsion¹⁵.
- des champs associés à des symétries continues spontanément brisées, encore appelés modes de Nambu-Goldstone.
- des champs associés à modes “critiques”, tels que la polarisation dans le modèle A par exemple.

Mathématiquement, le passage à une théorie des champs commence par l'identification des observables $\varphi_k^i : \Gamma^N \rightarrow \mathcal{A}_k$, permettant d'attribuer à chaque particule i des grandeurs physiques dont les ϕ_k sont les densités spatiales. Ce sont, par exemple, les observables d'énergie, ou d'impulsion de chacune des particules. Ensuite on définit les *champs empiriques* :

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_k^{(N)} &: \Gamma^N \longrightarrow \mathbb{A}_k \\ \mathbf{x} &\longmapsto \hat{\phi}_k^{(N)}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=1 \dots N} \varphi_k^i(\mathbf{x}) \delta_{\mathbf{r}_i} \end{aligned}$$

où on a noté \mathbb{A}_k l'espace des champs sur E à valeur dans \mathcal{A}_k ¹⁶, $\mathbf{x} \in \Gamma^N$ le micro-état, \mathbf{r}_i la position de la i ème particule dans le micro-état \mathbf{x} , et $\delta_{\mathbf{r}}$ le delta de Dirac en $\mathbf{r} \in E$. Par exemple, si on part de la description microscopique d'un système hamiltonien de particules de masse m interagissant via un potentiel de paires V

d'état $\Gamma^N = \{-1; 1\}^N$. Si les spins sont disposés sur un réseau $R \subset \mathbb{R}^d$, l'état du système dans Γ^N est équivalent à la valeur d'une fonction de R dans $\{-1; 1\}$, i.e. à l'état d'un champ.

15. La conservation du moment angulaire des systèmes microscopiques hamiltoniens est particulière et ne donne généralement pas lieu à un mode hydrodynamique [40]

16. qui ne sont en fait pas vraiment des fonctions sur E , mais des distributions à valeur dans \mathcal{A}_k .

alors $\mathbf{x} = (\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)_{i=1,\dots,N}$ et si ϕ_k est, par exemple, la densité d'énergie, alors

$$\varphi_k^i(\mathbf{x}) = \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (1.14)$$

Enfin, si $\mathbf{x}(t)$ est une solution de la dynamique sur Γ^N , dériver par rapport au temps les $\hat{\phi}_k^{(N)}(\mathbf{x}(t))$ donne un système d'équations dynamiques sur les $\hat{\phi}_k^{(N)}$, ce système n'étant pas nécessairement fermé¹⁷. Un problème ouvert est alors de calculer la limite de ce système d'équations quand $N \rightarrow \infty$ et de déterminer si celle-ci correspond à un ensemble fermé d'équations sur les $\phi_k = \lim_{N \rightarrow \infty} \hat{\phi}_k^{(N)}$.

Les calculs étant très difficiles à mener en général, il faut faire des approximations. Tout d'abord on peut par exemple faire un développement en gradients des équations génériques sur ϕ_k . Ensuite, en hydrodynamique des systèmes passifs (comme pour l'équation de Navier-Stokes classique par exemple), on fait généralement une hypothèse d'équilibre local¹⁸ qui permet d'obtenir notamment les coefficients de réponse en fonction d'observables microscopiques du système (via les relations de Green-Kubo).

Une autre approche consiste à se contenter d'une forme phénoménologique des équations dynamiques des ϕ_k , en prenant des développements en gradients aux ordres "les plus bas possibles" (mais rendant toujours compte de la phénoménologie), en respectant les symétries du système microscopique sous-jacent. On étudiera de telles équations phénoménologiques de champs notamment au chapitre 5.

Dans le cadre des systèmes actifs, où aucune hypothèse d'équilibre local ne peut être faite *a priori*, nous adopterons une méthode légèrement différente pour réaliser des coarse-graining de manière explicite au chapitre 3. Celle-ci consistera à prendre une limite diffusive de grande taille et de grand temps, explicitement au niveau de Γ^N , pour se ramener à un espace d'état réduit à E^N . Puis nous prendrons simplement le pushforward de la dynamique effective obtenue sur E^N pour se ramener à une dynamique stochastique sur les sommes de N masses de Dirac sur E . Enfin, nous utiliserons le calcul stochastique [26, 97] pour étendre cette équation stochastique aux champs continus sur E , ce qui sera suffisant dans le cas de la "matière active scalaire sèche" qui est l'objet d'étude cette thèse et que nous présentons à présent.

17. Cet opération de transport de la dynamique de Γ^N à un système d'équations hydrodynamiques correspond moralement au pushforward (au sens géométrique) du champ de vecteur sur Γ^N par $\hat{\Phi}^{(N)} : \mathbf{x} \in \Gamma^N \mapsto (\hat{\phi}_k^{(N)}(\mathbf{x}))_k \in \mathbb{A}$, où \mathbb{A} est l'espace des application de E dans $\prod_k \mathcal{A}_k$.

18. Qui consiste à supposer que le pushforward de la mesure sur Γ^N par $\hat{\Phi}^{(N)}$ est une mesure de Gibbs généralisée, dans laquelle les produits $\lambda_i A_i$ de (1.8) sont remplacés par les intégrales $\int_E \lambda_i(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ [61].

1.2 La matière active

Les théories de la thermodynamique et de la physique statistique des systèmes d'équilibre ont non seulement constitué de formidables avancées en terme de compréhension des “lois de la nature”, mais elles ont également permis d'incroyables progrès technologiques tels que la conception et l'optimisation de machines thermiques (chauffage ; conservation alimentaire ; propulsion des véhicules thermiques ; production d'électricité à partir de la combustion d'énergie fossile où de la désintégration d'éléments radioactifs, via des turbines), l'essor des industries pharmaceutiques et cosmétiques (*via* le développement de la chimie thermodynamique et cinétique notamment), ou également la fabrication des écrans LCD (“liquid crystal display”) qui se partagent le marché de l'affichage des appareils électroniques avec la technologie OLED (“organic light emitting diode”).

Cependant, la portée de ces théories reste tout de même limitée puisqu'elles ne permettent pas de décrire les systèmes qui ne sont pas à l'équilibre thermodynamique. Parmi ces systèmes hors équilibre, on peut prendre pour exemple les *systèmes vitreux*, qui restent bloqués dans certains secteurs d'un paysage d'énergie libre accidenté et n'atteignent un état d'équilibre que pour des temps infiniment longs. Ou encore les systèmes auxquels on impose des *conditions aux bords non-homogènes*, comme une barre de fer que l'on met en contact à ses extrémités avec deux thermostats à des températures différentes. Un autre exemple consiste à *imposer un champ* (non gradient) à un système diffusif. Par exemple un champ électrique “solénoïdale” (que l'on peut créer en faisant circuler un courant alternatif dans une bobine) imposé à des ions en solution, de telle sorte que, si le temps caractéristique d'évolution du champ est très grand devant le temps typique de relaxation de la solution ionique, alors on peut considérer une échelle de temps intermédiaire, sur laquelle le champ est approximativement constant. L'état du système peut alors être considéré comme stationnaire : la densité ionique ne varie plus mais il existe des courants dissipatifs de particules (les charges négatives se propageant dans un sens, et les positives dans le sens opposé).

Les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit ont eu pour but l'étude d'une autre classe de systèmes hors d'équilibre, celles des *systèmes actifs*. Dans ces systèmes les agents élémentaires transforment (et dissipent) de l'énergie pour exercer une force persistante sur leur environnement leur permettant de se propulser. Contrairement aux exemples des systèmes pilotés par les bords ou par un champ global présentés ci-dessus, la violation du bilan détaillé dans les systèmes actifs provient non pas d'une force extérieure imposée mais d'une force “interne”, qui constitue un degré de liberté propre à chaque particule : sa force d'autopropulsion.

1.2.1 L'omniprésence des systèmes actifs

Le monde du vivant constitue un extraordinaire vivier de systèmes actifs, et ce à de nombreuses échelles.

Les cellules d'un organisme vivant pluricellulaire, par exemple, possèdent un cytosquelette (Fig 1.1 (f)) qui, couplé à des protéines appelées "moteurs moléculaires", remplit un grand nombre de fonctions [90]. Par exemple, le déplacement (alimenté par l'hydrolyse de l'ATP) des kinésines et les dynéines (qui sont des familles de protéines) le long des microtubules du cytosquelette est notamment responsable du transport intra-cellulaire de vésicules. Chez les vertébrés, la contraction musculaire est, quant à elle, assurée par le déplacement (également alimenté par l'hydrolyse d'ATP) des myosines le long des filaments d'actine du cytosquelette.

Par ailleurs, toujours à l'échelle cellulaire, certaines bactéries, telles que *Escherichia Coli*, sont munies de flagelles, contrôlés par des moteurs moléculaires, grâce auxquels ces bactéries peuvent acquérir un mouvement persistant, leur permettant notamment de mieux explorer leur environnement [78, 58, 34]. De même, les spermatozoïdes [44], gamètes mâles des espèces à mode de reproduction sexué (mais aussi de certains végétaux tels que l'algue Chlamydomonas [8, 3]), sont également propulsés par des flagelles, eux-même mis en mouvement par des moteurs moléculaires "consommant" de l'ATP. Des suspensions de tels organismes constituent ainsi des systèmes actifs à part entière.

A une échelle légèrement plus grande, un tissu de cellules (rendues motiles grâce à des moteurs moléculaires, également) constitue, dans son entièreté, un système actif [90]. La morphogenèse [69, 73], la cicatrisation [94] (Fig 1.1 (d)), ou le développement tumoral [119] sont des exemples de comportement collectifs de tels systèmes actifs.

A une échelle plus macroscopique, les groupes d'animaux, tels les essaims de criquets [117, 86] (Fig 1.1(c)), les vols d'étourneaux [6, 24, 11] (Fig 1.1(a)), les bancs de maquereaux [50, 21] (Fig 1.1(b)) ou même les foules humaines [95], constituent également des systèmes actifs, capables de comportements collectifs.

Les systèmes biologiques ont été la source de motivation première qui encouragea les physiciens à étudier les propriétés des systèmes actifs. Mais, depuis une vingtaine d'années, des systèmes actifs synthétiques ont vu le jour dans les laboratoires, non seulement dans le but de mieux comprendre les systèmes biologiques, mais également dans l'espoir de créer un genre nouveau de matériaux, biomimétiques, aux propriétés inédites. De tels systèmes actifs synthétiques peuvent être alimentés par des sources d'énergie très variées. Cette source énergétique peut être, entre autres, de nature mécanique, comme dans le cas de disques à symétrie polaire déposés sur une plaque vibrante [27, 28] (Fig 1.1(g)), électrique, par exemple pour des "Quincke rollers" [14, 15] (Fig 1.1(h)), ou chimique, comme dans

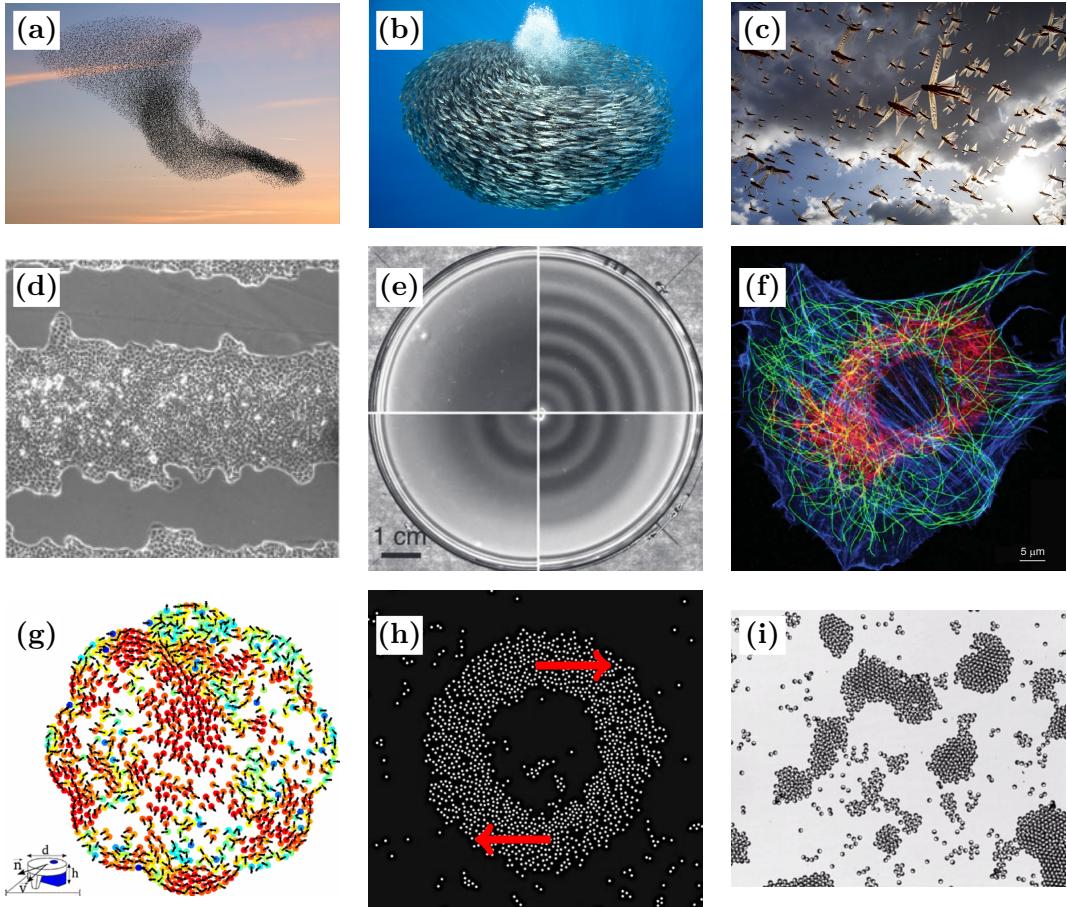


Figure 1.1 – (a) Vol d’étourneaux. (b) Banc de maquereaux. (c) Nuée de criquets. (d) Cicatrisation d’un tissu épithérial [84]. (e) Colonies de bactéries formant des motifs en anneaux concentriques [58]. (f) Microscopie à fluorescence du cytosquelette d’un fibroblaste. Les filaments d’actine sont en bleu, les filaments intermédiaires en rouge et les microtubules en vert [82]. (g) Mouvement collectif de disques polaires vibrés [27]. (h) Anneau de “Quincke rollers” en rotation (les flèches rouges indiquant le sens de rotation) [60]. (i) Clusters de colloïdes Janus [111].

le cas de colloïdes Janus propulsés par diffusiophorèse [47, 109, 76] (Fig 1.1(i)).

Un domaine connexe est celui de la “robotique en essaim” qui consiste à étudier les propriétés d’ensembles de robots ou de drones (autopropulsés) en interaction. Le fait que ces robots soient munis d’une forme d’autonomie et interagissent entre eux et avec leur environnement *via* des règles simples — plutôt que leurs com-

portements et leur trajectoires soient imposés de manière déterministe par des programmes informatiques — peut permettre d'améliorer leur adaptabilité à un environnement complexe [33, 113, 112, 53]. Ce domaine de recherche, qui se situe à l'interface entre la robotique et la physique de la matière active, porte de grands espoirs en terme d'applications. On peut prendre pour exemple : les essaims de drones que certains espèrent un jour capable d'effectuer des tâches de contrôle ou de maintenance de structures agricoles par exemple ; ou de nano-robots qui seront peut être un jour employés pour des traitements médicaux ciblés à petite échelle [33].

Au niveau phénoménologique, les systèmes actifs peuvent faire montre de comportements collectifs nouveaux, inaccessibles aux systèmes à l'équilibre thermodynamique. Un premier exemple paradigmique de tels comportement émergents est le mouvement collectif de particules actives (Fig 1.1 (a–d),(g) et (h)) qui correspond au déplacement de ces particules selon une direction corrélée sur des échelles de longueur grandes devant la distance typique entre les particules [110, 114, 46, 18, 70, 65]. Un second exemple de comportement émergent, paradigmique de la matière active scalaire (que nous avons étudiée au cours de cette thèse), est la séparation de phase induite par la motilité (figure 1.1(e), (h), (i) et figure 1.2) qui fait l'objet d'un chapitre d'ouvrage à la rédaction duquel j'ai participé [P1]. MIPS consiste en la possible coexistence (à l'état stationnaire) de deux phases scalaires homogènes de densités différentes. Bien que MIPS et la séparation liquide-gaz d'un système à l'équilibre soient phénoménologiquement très similaires, les mécanismes microscopiques qui sous-tendent ces deux comportements émergents sont pourtant très différents. Tandis qu'une séparation liquide-gaz d'équilibre nécessite que l'interaction entre les particules soit attractive dans un certain intervalle de distance, MIPS peut avoir lieu dès que les interactions entre particules actives provoquent leur ralentissement lorsque la densité locale de particules augmente : ce phénomène peut en effet engendrer un boucle de rétroaction dans laquelle un agrégat de particule entraîne le ralentissement des particules dans son voisinage, ces dernières s'accumulant alors dans l'agrégat pour faire croître sa taille et donc sa région “d'influence”, menant *in fine* à une séparation de phase [22, 23, 87, 38]. Il a été montré (voir figure 1.2) que MIPS peut avoir lieu notamment dans deux types différents de systèmes actifs : le premier correspondant à des particules activent interagissant via des interactions répulsives de paires, et le second à des particules interagissant *via* “quorum-sensing”, un mode d'interaction que l'on présente à la section 1.2.3 et que nous avons étudié au cours de cette thèse.

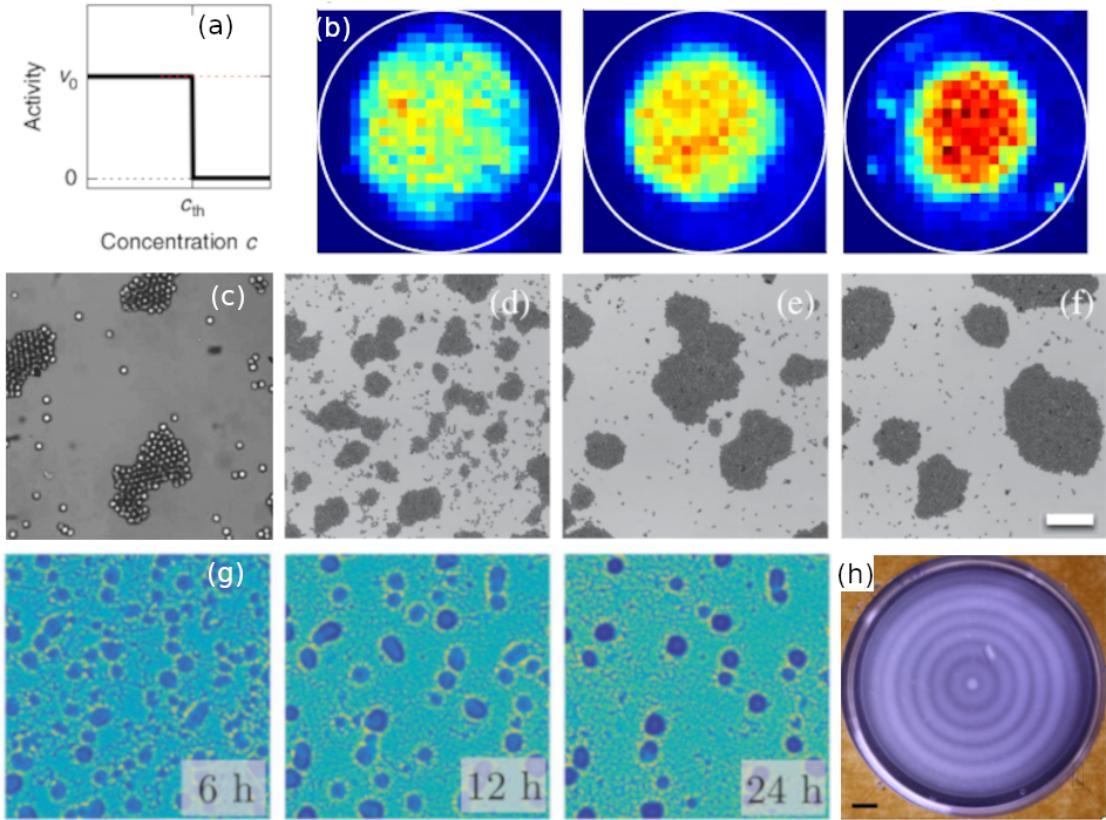


Figure 1.2 – Réalisations expérimentale de MIPS. (a,b) Colloïdes auto-propulsés donc l’auto-propulsion est contrôlée numériquement pour produire le quorum-sensing souhaité (a), v_0 correspondant à l’amplitude de l’autoproulsion des particules (reproduit de [9]). On observe une séparation de phase (b) où des couleurs plus chaudes indiquent une densité plus élevée. Les trois images correspondent à trois valeur de la concentration seuil c_{th} qui augmente de gauche à droite. (c) Colloïdes autopropulsés interagissant par des forces répulsives de paires (reproduit de [19]). (d–f) Colloïdes auto-propulsés s’agrégant (d,e) jusqu’à une certaine taille typique (e,f) où MIPS est arrêtée du fait de l’alignement au seins des “clusters” (reproduits d [111]). (g) Formation d’agrégats de bactéries *Myxococcus xanthus* (reproduit de [59]). (h) MIPS arrêtée dans une colonie de bactéries *E. Coli* génétiquement modifiées. La dynamique de population est en compétition avec MIPS et induit la sélection d’une taille caractéristique du “pattern” (courtoisie du Prof. Jian-Dong Huang).

1.2.2 Modèles de la dynamique individuelle d'une particule active

Contrairement à la thermodynamique (section 1.1.1) et à la physique statistique des systèmes d'équilibre (section 1.1.2), il n'existe pas de principe général permettant de décrire de manière générique l'état stationnaire d'un système actif. Pour espérer lier les comportements émergents des systèmes actifs aux caractéristiques microscopiques des particules actives, il faut commencer par modéliser la dynamique d'un agent actif individuel.

Dans cette section, on présente des modèles usuels de dynamiques microscopiques que nous avons étudiés au cours de cette thèse. Ceux-ci sont des modèles de matière active dite “sèche”, pour laquelle les particules actives acquièrent leur autopropulsion en poussant sur un substrat fixe. Celui-ci se comporte alors comme un réservoir d'impulsion, dont il n'est pas nécessaire de modéliser l'évolution. Ces modèles sont particulièrement adaptés à la description de systèmes actifs constitués, par exemple, de cellules évoluant sur un gel d'agar ou sur la matrice extracellulaire [94, 58]. Pour les systèmes constitués de particules actives se déplaçant généralement dans un solvant, telles que des bactéries ou des colloïdes Janus, il peut parfois être important de considérer les interactions hydrodynamiques entre ces particules [71]. Toutefois, quand ces interactions sont négligeables, les modèles de matière active sèche constituent de bonnes approximations. Dans ce cadre, on peut modéliser la dynamique d'un agent actif avec son environnement “passif” (solvant ou gel d'agar par exemple) comme on le fait dans l'équation de Langevin (section 1.1.3) :

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{f}^a - \gamma\dot{\mathbf{r}} - \nabla V(\mathbf{r}) + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta} \quad (1.15)$$

où m est la masse de la particule, γ le coefficient de friction, \mathbf{f}^a la force active d'autopropulsion, V un potentiel extérieur et $\boldsymbol{\eta}$ un bruit blanc gaussien centré de corrélations $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. Une bactérie telle que *Escherichia Coli*, ou un colloïde Janus sont généralement de taille micrométrique, et se déplacent dans un solvant aqueux à des vitesses de l'ordre de quelques micromètres par seconde. Le nombre de Reynolds de l'écoulement correspondant est ainsi de l'ordre de 10^{-5} . On peut donc supposer que, dans les conditions typiques que l'on cherche à décrire, l'inertie est négligeable devant les frottements visqueux. On supposera ainsi, dans toute la suite de cet exposé, que l'on peut se ramener à une équation de type Langevin sur-amortie :

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}^a - \gamma^{-1} \nabla V(\mathbf{r}) + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\eta} \quad (1.16)$$

où $\mathbf{v}^a \equiv \gamma^{-1} \mathbf{f}^a$ est appelée “vitesse d'autopropulsion” et $D_t \equiv k_B T / \gamma$ est le coefficient de diffusion translationnelle.

Il s'agit ensuite de modéliser la dynamique de la vitesse d'autopropulsion elle-même. Une première approche consiste à supposer que cette vitesse d'autopropulsion est de module constant v_0 , tandis que son orientation $\mathbf{u}(t)$ évolue de façon aléatoire [23, 97] :

$$\mathbf{v}^a(t) = v_0 \mathbf{u}(t), \quad (1.17)$$

le processus de réorientation de $\mathbf{u} \in \mathbb{S}^{d-1}$ (d est la dimension de l'espace dans lequel la particule se meut) étant généralement modélisé par un processus Markovien :

- soit discret, auquel cas la transition $\mathbf{u} \xrightarrow{\alpha} \mathbf{u}'$ constitue un processus de Poisson de taux α , la nouvelle orientation \mathbf{u}' étant tirée uniformément sur la sphère unité. De telles particules sont généralement appelées RTPs, de l'anglais “run and tumble particles”. L'équation maîtresse de la dynamique de réorientation est alors

$$\partial_t p(\mathbf{u}, t) = -\alpha p(\mathbf{u}, t) + \frac{\alpha}{\Omega} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} p(\mathbf{u}, t) d\mathbf{u} = -\alpha p(\mathbf{u}, t) + \frac{\alpha}{\Omega}, \quad (1.18)$$

où Ω est la surface totale de \mathbb{S}^{d-1} .

- soit continu ; dans ce cas on suppose que \mathbf{u} est un mouvement brownien sur \mathbb{S}^{d-1} . L'équation de Fokker-Planck de la dynamique est alors

$$\partial_t p(\mathbf{u}, t) = D_r \Delta_{\mathbf{u}} p(\mathbf{u}, t), \quad (1.19)$$

où D_r est le coefficient de diffusion angulaire, et $\Delta_{\mathbf{u}}$ est le laplacien sur la sphère. Ces particules sont baptisées ABPs, pour “active brownian particles”.

Le modèle RTP (Eq. 1.18) est particulièrement adapté pour décrire le mouvement de bactéries, telles que *Escherichia Coli*, nageant dans un fluide. En effet une telle bactérie nage de manière rectiligne sur un temps typique α^{-1} , ce mouvement étant entrecoupé de moments de culbute lors desquels la particule se réoriente. La durée caractéristique de ces culbutes (ou “tumble”) étant très petite devant α^{-1} , ceux-ci peuvent être correctement approximés par des événements instantanés. Le modèle ABP, quant à lui, est plus adapté à la description de colloïdes actifs (tels que les coilloïdes Janus) dont le processus de réorientation se produit de manière continue. La figure 1.3 donne une représentation schématique des trajectoires typiques d'une RTP et d'une ABP.

La seconde approche à laquelle on s'est intéressé lors de cette thèse consiste à modéliser l'autopropulsion par un processus d'Ornstein-Uhlenbeck :

$$\tau \dot{\mathbf{v}}^a = -\mathbf{v}^a + \sqrt{2D_{\mathbf{v}}} \boldsymbol{\xi} \quad (1.20)$$

où $\boldsymbol{\xi}$ est un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \xi_t^\alpha \xi_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. Le processus \mathbf{v}^a est un mouvement brownien corrélé sur une échelle de temps caractéristique τ :

$$\langle \mathbf{v}^a(t) \otimes \mathbf{v}^a(t') \rangle = \frac{D_{\mathbf{v}}}{\tau} e^{-|t-t'|/\tau} \mathbf{I} \quad (1.21)$$

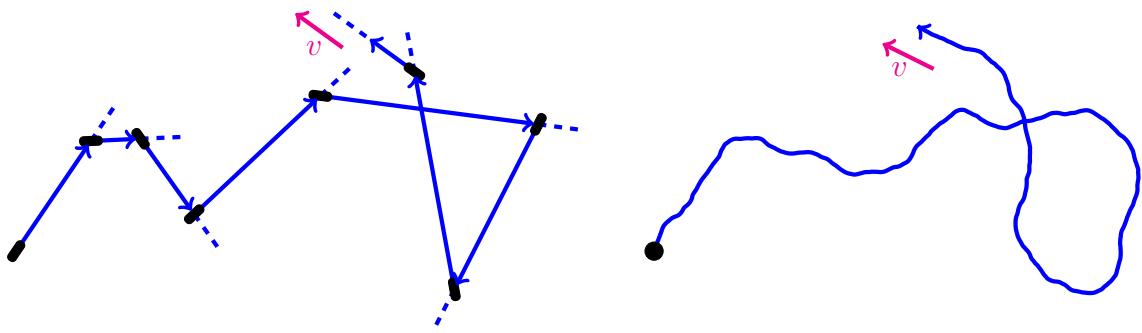


Figure 1.3 – Comparaison entre une trajectoire typique d'un RTP (à gauche) et d'une ABP (à droite). Reproduite de [22].

où \mathbf{I} est la matrice identité¹⁹, et de mesure stationnaire ayant pour densité

$$p(\mathbf{v}_p) = Z^{-1} \exp \left[\frac{\tau |\mathbf{v}_p|^2}{2D_v} \right], \quad (1.22)$$

la vitesse d'autopropulsion \mathbf{v}^a typique étant ainsi $\sqrt{d\tau^{-1}D_v}$. Une telle particule est appelée particule d'Ornstein-Uhlenbeck active, ou AOUP [105, 66].

Il existe des différences notables de comportement entre ces deux familles de modèles. Par exemple la mesure stationnaire de l'autopropulsion des ABPs et RTPs est la mesure uniforme sur \mathbb{S}^{d-1} tandis que celle des AOUP est une gaussiennes sur \mathbb{R}^d . Ou encore, lorsqu'on met de telles particules dans un piège harmonique, les AOUPs se répartissent toujours de façon gaussienne autour du centre du piège [105], tandis que les ABPs et RTPs s'accumulent sur ses bords lorsque la longueur de persistance est suffisamment grande [97]. Néanmoins les AOUPs et les ABPs/RTPs présentent d'importantes similarités à de grandes échelles, lorsqu'on coarse-graine la dynamique de particules actives en interaction, comme nous le verrons au chapitre 3 notamment.

Par ailleurs, la parité de tels modèles de particules vis à vis du renversement du temps peut être subtile. En effet, si on néglige le bruit translationnel dans l'équation (1.16), la dynamique d'une AOUP (1.16)&(1.20) ressemble trait pour trait à l'équation de Langevin sous-amortie (1.9) qui, elle, satisfait le bilan détaillé. Mais cette ressemblance est altérée dès que l'on considère l'inertie de la particule AOUP, ou qu'on la plonge dans un potentiel extérieur générique. Nous discuterons en détails le comportement de ces modèles microscopiques vis à vis du renversement du temps au chapitre 2. Plus généralement, les propriétés des modèles de systèmes actifs vis à vis du renversement du temps, aux échelles microscopiques comme

19. C'est la corrélation en temps long, i.e. quand $t + t' \gg \tau$.

macroscopiques, seront discutées tout au long de ce manuscrit puisqu'elles ont été au cœur des travaux effectués lors de cette thèse.

1.2.3 Particules actives en interaction

Dans cette section, on présente les deux types d'interaction entre particules actives auxquels on s'est particulièrement intéressé au cours de cette thèse : le quorum-sensing et la taxie. Notons qu'on présente aux chapitres 3 et 4 le coarse-graining explicite d'ABPs, de RTPs et d'AOUPs interagissant par quorum-sensing ou par taxie, mais qu'aux chapitre 4 et 5 on étudie des classes de dynamiques macroscopiques actives plus générales que les équations que l'on aura explicitement obtenues par coarse-graining. On peut donc s'attendre à ce que certains des résultats exposés aux chapitres 4 et 5 s'appliquent à d'autre formes d'interaction entre particules actives.

Quorum-sensing. Le premier type d'interaction est le quorum-sensing (QS), qui correspond à la capacité d'un agent à modifier son comportement en fonction de la densité des autres agents autour de lui²⁰. Un piéton ajustant sa vitesse de déplacement en fonction de la foule environnante est un exemple simple de quorum-sensing à l'échelle macroscopique. A l'échelle microscopique, le quorum-sensing est un type d'interaction que l'on observe fréquemment au sein de populations de micro-organismes. Chez les bactéries, telles que *Vibrio Fischeri*, *Vibrio Cholerae* ou *Escherichia Coli*, le quorum-sensing se fait *via* l'émission et la détection de molécules signalétiques, appelées "auto-inducteurs", qui sont généralement des acyl homosérine lactones, des oligopeptides ou du diester de furanosyl borate [68, 31, 51]. Cette mesure de la concentration locale de leurs congénères permet aux bactéries de coordonner des comportements collectifs — souvent *via* des mécanismes de régulation de l'expression génétique — tels que la formation de biofilms, l'expression de facteur de virulence, la bioluminescence, ou encore (dans le cas qui nous intéresse le plus dans le cadre de cette thèse) la motilité [13, 31].

Au chapitre 3, pour modéliser le quorum-sensing au sein d'un système de N particules actives, on supposera qu'un paramètre a de l'activité — qui décrit typiquement l'amplitude de la vitesse d'autopropulsion, tel que v_0 (voir équation (1.17)) chez les ABPs et les RTPs, ou D_v chez les AOUPs (confère équation (1.20)) — dépend fonctionnellement du champ de densité $\rho(\mathbf{r}, t)$ de particules actives ainsi que, pour chaque particule i , de sa position \mathbf{r}_i . Ce que l'on notera par $a(\mathbf{r}_i, [\rho])$, une variable encadrée par des crochets indiquant une dépendance fonctionnelle dans

20. Étymologiquement, le "quorum-sensing", qui peut être traduit par "détection du quorum" en français, fait référence au terme juridique "quorum" qui désigne le nombre minimal de membres d'une assemblée devant être présents pour qu'une délibération puisse être menée.

tout ce manuscrit²¹. Par la suite, on désignera les particules actives interagissant par quorum-sensing par l'acronyme QSAPs, de l'anglais “quorum-sensing active particules”, comme il est souvent d'usage en physique de la matière active.

Taxie. La taxie est définie comme le mouvement biaisé d'un agent en réponse à la variation spatiale (le gradient) d'un certain stimulus, ce stimulus pouvant être de diverse nature : chimique, lumineuse, ou mécanique par exemple. Les particules ont alors tendance à “remonter” ou à “descendre” le gradient du (champ correspondant au) stimulus, pour se diriger vers les zones où, par exemple, la concentration en nutriments ou en oxygène est la plus élevée. C'est un phénomène que l'on retrouve dans beaucoup de systèmes biologiques. On peut citer le chimiotactisme de certaines bactéries telles que *Escherichia Coli* [10], le phototactisme d'algues telles que *Chlamydomonas* [81], ou le durotactisme des cellules épithéliales [104]. La taxie n'est néanmoins pas limitée aux systèmes biologiques. L'autopropulsion de certains colloïdes actifs, par exemple, dépend de la concentration d'agents chimiques dans leur environnement, ces derniers ne constituant pas uniquement la source d'énergie de l'autopropulsion [47] mais pouvant également biaiser la dynamique des colloïdes actifs [101, 80].

De manière similaire à notre modélisation du quorum-sensing, on modélisera la taxie (au chapitre 4) par une dépendance de certains paramètres a d'activité en le gradient d'un champ c représentant le stimulus. Plus précisément, on supposera que, pour la i ème particule, $a(\mathbf{r}_i, \mathbf{u}_i, [c]) = a_0 + a_1 \mathbf{u}_i \cdot \nabla c(\mathbf{r}_i, t)$. Notons que le paramètre a pourra non seulement être un paramètre contrôlant l'amplitude de l'autopropulsion, tel que v_0 (voir équation (1.17)) ou D_v (voir équation (1.20)), mais également sa dynamique de réorientation, tel que α (voir équation (1.18)) ou D_r (cf. équation (1.19)). On désignera les particules actives tactiques par l'acronyme TAPs, de l'angle “tactic active particles”.

Par ailleurs, notons que le champ $c(\mathbf{r}, t)$ correspondant au stimulus peut être “imposé par l'environnement” des particules actives — comme dans le cas de la phototaxie de Chlamydomonas — ou peut être engendré par les particules actives elles-mêmes — auquel cas le champ c médie une interaction entre les particules actives. Dans le cas du chimiotactisme bactérien par exemple, le champ c peut correspondre à la concentration d'un agent chimique (appelé ligand chimiotactique) émis par chaque bactérie. Ce ligand est produit à un taux λ , puis se diffuse dans le milieu environnant avec un constante de diffusion ν , avant de se dégrader au taux ω , ce qui conduit à la dynamique :

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) = \nu \Delta c(\mathbf{r}, t) + \lambda \rho(\mathbf{r}, t) - \omega c(\mathbf{r}, t) \quad (1.23)$$

21. Cette notation a pour but de distinguer le cas où $a(\mathbf{r}_i, [\rho])$ dépend de la valeur de $\rho(\mathbf{r})$ en des points \mathbf{r} ne se limitant pas à \mathbf{r}_i , du cas où a dépend de ρ de manière purement locale, i.e. $a(\mathbf{r}_i, [\rho]) = a(\rho(\mathbf{r}_i))$, ce dernier cas étant souvent noté (de manière abrégée) $a(\rho)$ en physique.

Si le temps caractéristique de relaxation du champ c (ici donné par ω^{-1}), est petit devant le temps typique d'évolution du champ ρ de densité des agents actifs, on peut se placer dans la limite où c suit adiabatiquement ρ , auquel cas c satisfait l'équation de Poisson écrantée :

$$\left(\frac{\omega}{\nu} - \Delta\right)c = \frac{\lambda}{\nu}\rho , \quad (1.24)$$

dont la solution est donné par

$$c = \frac{\lambda}{\nu}G * \rho \quad (1.25)$$

où G est la fonction de Green de l'équation (1.24) et $*$ est le produit de convolution. Notons que l'on s'attend à ce que cette séparation d'échelle entre les temps typiques d'évolution des champs c et ρ ait bien lieu (sur des échelles de longueur suffisamment grandes) puisque, le champ ρ étant conservé, il relaxe sur une distance L pendant un temps typique L^z (où $z > 0$ est l'exposant dynamique) qui diverge donc avec L . Au chapitre 4, on étudiera de manière plus générale le cas où c est donné par la convolution de ρ avec un noyau G quelconque, *i.e.* qui ne se réduit pas nécessairement à la fonction de Green de l'équation (1.24). Au delà de considérations purement théoriques, l'analyse menée au chapitre 4 sur de tels systèmes pourrait fournir un outil supplémentaire de contrôle des systèmes actifs et de leur comportements collectifs, puisqu'il est expérimentalement possible de choisir arbitrairement le noyau G en utilisant un dispositif expérimental similaire à celui de [9, 56], où la motilité des particules actives est asservie à l'intensité d'émissions lumineuses. Une mesure instantanée du champ ρ , suivie de l'émission d'un champ de lumière adéquat (proportionnel à $\rho * G$ par exemple), pourrait permettre de réaliser expérimentalement des particules actives tactiques, interagissant *via* un noyau G quelconque.

1.2.4 Modèle macroscopique de systèmes actifs et (pseudo-)équilibre macroscopique

Les modèles de QSAPs et de TAPs que nous avons étudiés au cours de cette thèse constituent des instances de la “matière active scalaire”, qui peut être décrite à l'échelle macroscopique par un unique champ hydrodynamique, celui de la densité ρ de particules actives. Pour la plupart des modèles que nous avons considérés, l'hydrodynamique fluctuante du champ ρ est donnée (voir chapitres 3 et 4) par l'équation dynamique suivante :

$$\partial_t\rho = -\nabla \cdot \left[M\nabla\mu + \sqrt{2M}\boldsymbol{\Lambda} \right] \quad (1.26)$$

où $M(\mathbf{r}, [\rho])$ est une mobilité collective, où $\mu(\mathbf{r}, [\rho])$ joue le rôle d'un potentiel chimique, et où $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ est un champ de vecteurs aléatoire gaussien de moyenne nulle et satisfaisant $\langle \Lambda^\alpha(\mathbf{r}, t)\Lambda^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta^{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t')$. Notons que certains modèles phénoménologiques de particules actives interagissant par des potentiels de paires, comme le modèle B actif [118], sont également de la forme de l'équation (1.26). Ainsi l'étude d'équations de la forme (1.26) peut s'appliquer à des situations plus générales que la dynamique collective des QSAPs et des TAPs — comme nous l'avons mentionné à la section 1.2.3.

En générale l'équation (1.26) ne vérifie pas le bilan détaillé et on ne connaît par la mesure d'équilibre $\mathcal{P}[\rho]$. Néanmoins, il existe des cas particuliers où une connexion avec l'équilibre peut être faite. Notons tout d'abord que l'amplitude du bruit et la mobilité sont toutes deux données par $M(\mathbf{r}, [\rho])$ dans l'équation (1.26), celle-ci satisfaisant ainsi la relation d'Einstein. Ce n'est donc pas le bruit qui brise le bilan détaillé dans l'équation (1.26), mais plutôt le fait que μ ne dérive en général pas d'une énergie libre fonctionnelle (on discute cela en détails au chapitre 4).

Pour fixer les idées, plaçons-nous dans le cas de RTPs interagissant par quorum-sensing. Les dynamiques de chacune des particules satisfont les équations (1.16)–(1.18), où l'amplitude v_0 de l'autopropulsion dépend fonctionnellement de la densité ρ de particules actives : $v_0(\mathbf{r}, [\rho])$. Pour simplifier les notations, on néglige le bruit thermique, ce qui revient à prendre $D_t = 0$ dans l'équation (1.16). Un coarse-graining explicite permet alors de montrer (confère [97] et les chapitres 3 et 4) que l'hydrodynamique fluctuante est donnée par l'équation (1.26), où le potentiel chimique et la mobilité sont respectivement :

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \ln \left[\rho(\mathbf{r}) v_0(\mathbf{r}, [\rho]) \right] \quad \text{et} \quad M(\mathbf{r}, [\rho]) = \rho(\mathbf{r}) \frac{v_0^2(\mathbf{r}, [\rho])}{d\alpha} \quad (1.27)$$

Dans le cas d'*Escherichia Coli*, le quorum-sensing est médié par des agents chimiques. Si bien que l'on a plutôt $v_0(\mathbf{r}, [c])$ que $v_0(\mathbf{r}, [\rho])$ initialement²². Supposons d'une part que le quorum-sensing dépend seulement localement de la concentration en agents chimiques, *i.e.* $v_0(\mathbf{r}, [c]) = v_0(c(\mathbf{r}))$, et d'autre part que l'on peut approximer la répartition spatiale de c , comme dans le cas des ligands chimiотactiques (1.23)–(1.25), par la convolution de ρ avec un noyau G :

$$c(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' . \quad (1.28)$$

Si G est invariant par rotation (comme c'est le cas de la fonction de Green de toute équation isotrope telle que (1.24)) et que sa portée typique $\ell_G^2 \equiv \int r^2 G(r) dr$ est

22. En négligeant le temps de réponse de la bactérie au champ de ligand.

petite devant la distance typique de variation de ρ , on a

$$\begin{aligned} v_0(c(\mathbf{r})) &\simeq v_0 \left(\int G(\mathbf{r}') \left[\rho(\mathbf{r}) - \mathbf{r}' \cdot \nabla \rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} H(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}' \otimes \mathbf{r}' \right] d\mathbf{r}' \right) \\ &\simeq v_0(\rho(\mathbf{r})) + \frac{\ell_G^2}{2d} v'_0(\rho(\mathbf{r})) \Delta \rho(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

où $H(\mathbf{r})$ est la hessienne de ρ en \mathbf{r} et où on a supposé l'intégrale de G égale à 1 (ce que l'on peut toujours faire quitte à modifier v_0). Ainsi le potentiel chimique (1.27) est approximativement donné, au second ordre en gradients de ρ , par [99]

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) \simeq \ln [\rho(\mathbf{r}) v_0(\rho(\mathbf{r}))] - \kappa(\rho(\mathbf{r})) \Delta \rho(\mathbf{r}) , \quad \text{où} \quad \kappa(\rho(\mathbf{r})) \equiv -\frac{\ell_G^2 v'_0(\rho(\mathbf{r}))}{2d v_0(\rho(\mathbf{r}))} \quad (1.29)$$

Équilibre macroscopique. Si l'on approxime μ à l'ordre dominant en gradient de ρ , le potentiel chimique est purement local : $\mu(\mathbf{r}, [\rho]) \simeq \ln[\rho(\mathbf{r}) v_0(\rho(\mathbf{r}))]$. On peut alors définir une énergie libre $\mathcal{F}[\rho]$ dont dérive μ , et ce quelle que soit l'allure de la fonction $v_0(\rho)$:

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} , \quad \text{avec} \quad \mathcal{F}[\rho] \equiv \int f(\rho(\mathbf{r})) d\mathbf{r} , \quad (1.30)$$

où f est la densité d'énergie libre, donnée par

$$f(\rho) \equiv \rho \ln \rho + \int^\rho \ln [v_0(s)] ds \quad (1.31)$$

Puisqu'il existe $\mathcal{F}[\rho]$ telle que $\mu = \delta \mathcal{F} / \delta \rho$, le système actif est macroscopiquement à l'équilibre (approximativement, puisqu'on a fait une approximation locale sur $\mu(\mathbf{r}, [\rho])$) et l'équation de Fokker-Planck (fonctionnelle) associée à (1.26) admet une mesure stationnaire (sans courant) :

$$\mathcal{P}[\rho] = \frac{1}{Z} e^{-\mathcal{F}[\rho]} . \quad (1.32)$$

Pour connaître le profil le plus probable, il suffit donc de minimiser \mathcal{F} . En particulier, lorsque le système actif étudié peut subir une séparation de phase induite par la motilité, on peut construire le diagramme de phase grâce à l'énergie libre \mathcal{F} comme on l'aurait fait pour une séparation liquide-gaz d'équilibre. Pour cela on minimise (sous contrainte de conservation du nombre total de particules actives) l'énergie libre \mathcal{F} (qui est extensive) sur l'ensemble des profils séparés de phase, où la phase "liquide" (*i.e.* la plus dense) de densité ρ_ℓ occupe une certaine fraction du volume total du système, tandis que la phase "gazeuse" de densité ρ_g occupe le

reste du système. Ceci revient à déterminer un couple de densités (ρ_ℓ, ρ_g) en lesquels la densité d'énergie libre $f(\rho)$ admet une tangente commune (cf. figure 1.4).

En général, cet équilibre à l'échelle macroscopique est brisé si l'on considère le terme suivant du développement de μ en gradients de ρ (confère équation (1.29)). Il existe néanmoins une exception [97] : si $\kappa' = 0$, alors on peut de nouveau définir une énergie libre $\mathcal{F}[\rho]$ dont dérive μ . Dans ce cas la fonction $v_0(\rho)$ est nécessairement un exponentielle $v_0(\rho) \propto \exp(\lambda\rho)$ et l'énergie libre est donnée par :

$$\mathcal{F} = \int \left[\rho(\mathbf{r}) \log \rho(\mathbf{r}) + \frac{\lambda}{2} \rho(\mathbf{r})^2 - \frac{\lambda \ell_G^2}{4d} |\nabla \rho(\mathbf{r})|^2 \right] d\mathbf{r} \quad (1.33)$$

Là encore, minimiser la partie locale de \mathcal{F} permet d'obtenir le diagramme de phase de MIPS.

Pseudo-équilibre macroscopique. Si $\kappa' \neq 0$, le système n'est plus macroscopiquement à l'équilibre et il n'existe pas d'énergie libre \mathcal{F} telle que $\mu = \delta\mathcal{F}/\delta\rho$. Néanmoins, si $\kappa(\rho)$ ne s'annule pas, on peut définir [98, 99] le changement de variable $\mathcal{R} : \rho \mapsto R$, où \mathcal{R} est une solution quelconque de l'équation

$$\mathcal{R}'(\rho) = \frac{1}{\kappa(\rho)} . \quad (1.34)$$

On a alors

$$\mu(\mathbf{r}, [\mathcal{R}^{-1}(R)]) = \frac{\delta \mathcal{H}[R]}{\delta R(\mathbf{r})} \quad (1.35)$$

avec une pseudo-énergie libre

$$\mathcal{H}[R] \equiv \int \left[h(R(\mathbf{r})) + \frac{\kappa^2(\mathcal{R}^{-1}(R(\mathbf{r})))}{2} |\nabla R(\mathbf{r})|^2 \right] d\mathbf{r} . \quad (1.36)$$

dont la densité locale h satisfait

$$h'(R) = \ln \left[\mathcal{R}^{-1}(R) v_0(\mathcal{R}^{-1}(R)) \right] . \quad (1.37)$$

Dans le cas d'un système actif pouvant subir une séparation de phase induite par la motilité, on peut alors déterminer des pseudo-densités liquide R_ℓ et gazeuse R_g en appliquant la construction de la tangente commune à la densité locale $h(R)$ de la pseudo-énergie libre $\mathcal{H}[R]$, puis revenir aux véritables densités de liquide et de gaz en appliquant le changement de variable inverse : $\rho_\ell \equiv \mathcal{R}^{-1}(R_\ell)$ et $\rho_g \equiv \mathcal{R}^{-1}(R_g)$, les densités ρ_ℓ et ρ_g correspondant bien aux densités des phases dense et diluée de MIPS [98, 99] (voir figure 1.4). Notons que, dans le cas d'un interaction quorum-sensing qui n'est pas purement locale, le développement du potentiel chimique μ à l'ordre deux en gradients et l'application de la méthode de la tangente commune sur $h(R)$ fournit génériquement une meilleure approximation du diagramme des phases que l'approximation purement locale de μ suivie de la construction de la tangente commune sur $f(\rho)$ (cf. figure 1.4).

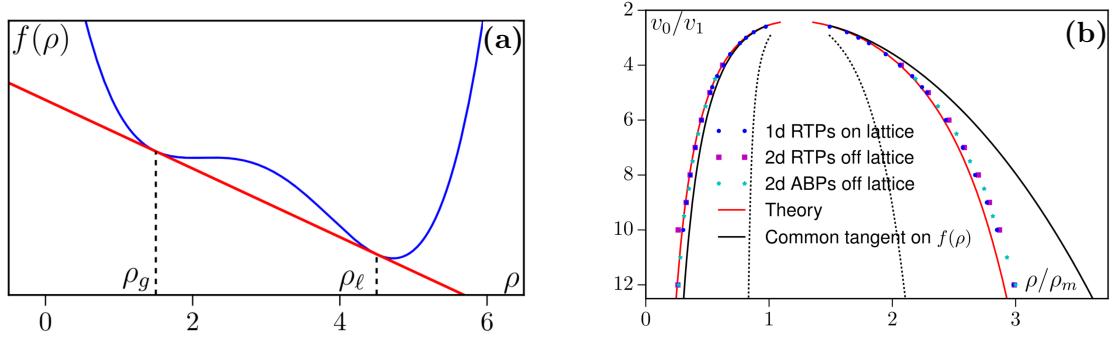


Figure 1.4 – Reproduite de [98]. (a) Représentation schématique de la construction de la tangente commune sur la densité d'énergie libre (locale) $f(\rho)$. Les densités ρ_g et ρ_ℓ ayant une tangente commune correspondent aux densités de coexistence gaz–liquide. Le schéma est similaire dans le cas du pseudo–équilibre : il suffit de remplacer $f(\rho)$ par $h(R)$ et (ρ_g, ρ_ℓ) par (R_g, R_ℓ) . (b) Diagramme liquide–gaz de QSAPs : les points de couleur correspondent à des simulations numériques d'ABPs ou de RTPs interagissant *via* quorum–sensing. L'amplitude de leur vitesse d'autopropulsion est donnée par $v(\tilde{\rho}) = v_0 + \frac{v_1 - v_0}{2} ([1 + \tanh(2\tilde{\rho}/\rho_m - 2)]$ où $\tilde{\rho} \equiv G * \rho$ avec le noyau de convolution $G(\mathbf{r}) \equiv \frac{\Theta(r_0 - r)}{Z} \exp\left(\frac{-r_0^2}{r_0^2 - r^2}\right)$. Θ est la fonction de Heaviside tandis que r_0 , Z , v_0 , v_1 , et ρ_m sont des constantes (voir [98] pour les détails). Les lignes pleines correspondent aux binodales obtenues *via* la construction de la tangente commune sur $f(\rho)$ et $h(R)$ en noir et rouge, respectivement. Les lignes en pointillés correspondent aux spinodales qui sont les solutions de $f''(\rho) = 0$ (qui sont identiques à celle de $h''(R) = 0$).

Ainsi, malgré le fait que la dynamique microscopique des particules actives soient irréversibles, la description du système à l'échelle macroscopique se trouve être réversibles dans certains cas — quand μ est (approximativement) purement locale ou quand $\kappa' = 0$ —, ou “quasiment réversible” dans d'autres cas — quand un changement de variable $\rho \mapsto R$ permet de se “ramener” à une théorie d'équilibre.

Enfin, notons que, lorsque les interactions entre les particules actives induisent un alignement (polaire ou nématische par exemple) de leur autopropulsion, il est nécessaire, pour décrire le système actif à l'échelle macroscopique, d'ajouter à la dynamique du champ de densité des équations décrivant l'évolution de champs hydrodynamiques supplémentaires (tels que ceux du vecteur polarisation ou du tenseur nématische). Une grande partie des travaux menés au cours de cette thèse sont généralisables à ces cas de figure. Ces éventuelles généralisations seront dis-

cutées au fil de ce manuscrit.

1.3 Organisation de la thèse

L'étude de la matière active porte de grands espoirs non seulement pour améliorer notre compréhension du vivant mais également pour élaborer de nouveau (méta-)matériaux.

Du fait de la dissipation énergétique que chaque agent actif produit en s'auto-propulsant, les systèmes actifs semblent être génériquement hors équilibre. Néanmoins, nous avons constaté, à la section 1.2.2, que la question de la parité des modèles usuels de dynamique active microscopique (ABP, RTP et AOUP) vis à vis du renversement du temps pouvait être subtile. C'est pourquoi nous commençons par exposer, au chapitre 2 du présent manuscrit, une étude détaillée du renversement du temps. Dans ce chapitre, nous proposons une formulation originale, basée sur la théorie des groupes, du renversement du temps dans les processus stochastiques (markoviens). D'une part, cette formulation permet une classification des différentes notions de "symétrie par renversement du temps" que l'on peut être amené à considérer lorsqu'on modélise un système physique par une équation différentielle stochastique. D'autre part, elle permet de démontrer aisément que l'une de ces classes de "symétrie par renversement du temps" est en fait "universelle", au sens où elle contient l'ensemble des processus décrits par des équations différentielles stochastiques. Dans ce même chapitre, on rappelle ensuite le lien entre irréversibilité et géométrie (la généralisation de ce lien aux théories des champs faisant l'objet du chapitre 5) et on montre que, dans certains cas, le rotationnel du champ de force imposé à une particule peut être vu comme la source directe de la production d'entropie du système. Enfin, la dernière section du chapitre 2 est consacrée à l'étude détaillé du renversement du temps dans les modèles usuels de dynamique active microscopique.

Pour pouvoir décrire les comportement émergents d'un système actif, il est souvent pratique d'être en mesure d'établir une théorie des champs décrivant la dynamique du système sur de grandes échelles d'espace et de temps. Le chapitre 3 de ce manuscrit est consacré à la description de deux méthodes de coarse-graining de dynamiques actives microscopiques que l'on utilise, aux chapitres 3 et 4, pour obtenir l'hydrodynamique (fluctuante) d'ensembles de particules actives (ABPs, RTPs ou AOUPs) interagissant par quorum-sensing ou par taxie.

A la section 1.2.4 de cette introduction, nous avons vu que certains systèmes actifs avaient déjà été décrits avec succès, à l'échelle macroscopique, par des modèles d'équilibre ou "quasiment d'équilibre", sans pour autant que des critères généraux pour déterminer l'existence de tels états de (pseudo-)équilibre aient été établis. Le chapitre 4 de ce manuscrit est consacré à l'étude d'un tel critère général.

On emploie notamment ce critère pour mettre en bijection, à l'échelle macroscopique, certains systèmes actifs, interagissant *via* quorum-sensing ou taxie, avec des systèmes de particules passives en interaction de paires. Nous exploitons ensuite ces bijections pour prédire le comportement des ces systèmes actifs à partir de la connaissance des systèmes passifs correspondants.

Lorsque le coarse-graining d'un système actif ne mène pas à une dynamique macroscopique d'équilibre, la mesure stationnaire est génériquement inconnue et s'accompagne de courants de probabilité — eux aussi inconnus en général. Dans le cas de systèmes dont l'irréversibilité provient de l'imposition de conditions aux bords ou de champs de forces, ces courants de probabilité se manifestent dans l'espace “réel” par des courants d'énergie ou de matière par exemple. Ce qui les rend immédiatement observables expérimentalement. Mais dans le cas de systèmes actifs (macroscopiquement hors équilibre) il est possible que les courants de probabilité ne se manifestent pas de manière évidente dans l'espace réel. C'est le cas de MIPS par exemple, qui ne s'accompagne souvent daucun courant dans l'espace réel. Dans de telles situations, les courants de probabilité associés à la dynamique irréversible d'un champ, qui vivent dans un espace fonctionnel abstrait, peuvent s'avérer difficile à caractériser ou à observer. Au chapitre 5, on introduit un nouvel opérateur différentiel généralisant aux espaces fonctionnels (de dimension infinie, dans lesquels vivent les champs hydrodynamiques) le rotationnel de l'analyse vectorielle en dimension 3, et la dérivée extérieure de la géométrie différentielle en dimension finie quelconque. On montre ensuite que cet opérateur peut être utilisé pour caractériser les courants de probabilités associés à la dynamique irréversible d'un champ. On illustre son utilisation sur le modèle actif B (qui peut subir MIPS), pour lequel on est alors capable de mesurer les courants de probabilité. On montre ensuite que, dans le cas d'un état stationnaire séparé de phases, ces courants se manifestent dans l'espace réel par des modes de vibration anisotropes localisés aux interfaces entre les phases.

Chapitre 2

Symétrie Temporelle et Réversibilité

Dans cette section on s'intéresse à la réversibilité de la dynamique d'une particule de taille mésoscopique, éventuellement active, plongée dans un bain thermique et soumise à une force extérieure. On se place systématiquement à l'état stationnaire, *i.e.* on suppose que la mesure de probabilité des degrés de liberté de la particule est la mesure stationnaire p_{ss} . De ce fait, on emploiera indistinctement les termes de “processus irréversible” et de “système hors équilibre”¹. Nous avons vu en introduction qu'il existe dans la littérature trois notions différentes permettant de caractériser, à l'état stationnaire, l'équilibre ou la réversibilité :

D1 – en thermodynamique, une transformation est dite réversible lorsque la production d'entropie S^c est nulle. Or, pour un système à l'état stationnaire $S^c = -Q/T$. Ainsi un système à l'état stationnaire qui dissipe continuellement de l'énergie sous forme de chaleur peut être vu comme subissant perpétuellement une transformation irréversible. Ce critère de dissipation d'énergie à l'état stationnaire est fréquemment étendu pour caractériser un système hors équilibre.

D2 – en physique statistique des ensembles, le système est d'équilibre si et seulement si la mesure stationnaire p_{ss} est une mesure de Gibbs

D3 – en physique statistique des processus stochastiques, un système est à l'équilibre ssi il vérifie “le” bilan détaillé, c'est à dire ssi la statistique \mathcal{P} des trajectoires du système est la même que la statistique $\bar{\mathcal{P}}$ des trajectoires du système “renversé en temps”, *i.e.* $\mathcal{P} = \bar{\mathcal{P}}$. Pour mesurer le degré d'irréver-

1. Un potentiel régime transitoire irréversible des systèmes ayant un état stationnaire d'équilibre n'étant jamais considéré.

sibilité du système, la théorie de la thermodynamique stochastique suggère d'utiliser une *production d'entropie informationnelle* [54, 57, 62] définie par $\Sigma = \langle \log(\mathcal{P}/\bar{\mathcal{P}}) \rangle_{\mathcal{P}}$, où $\langle \cdot \rangle_{\mathcal{P}}$ désigne la moyenne par rapport à \mathcal{P} . Le système est alors à l'équilibre si Σ est nulle.

La première définition ci-dessus caractérise entièrement l'irréversibilité par une dissipation d'énergie. La seconde, quant à elle, décrit l'équilibre par une propriété statique : celle de l'allure de la mesure stationnaire. Enfin, la troisième définition met en relation l'irréversibilité et la dynamique, ou “l’écoulement du temps”, de manière plus explicite.

L'objectif de ce chapitre est double : il s'agit, d'une part, d'analyser l'irréversibilité de la dynamique d'une particule active individuelle vis à vis des critères **(D1)**, **(D2)** et **(D3)** — analyse que l'on présente à la section 2.4 — et d'autre part de poser les bases sur lesquelles nous nous appuierons lors de l'étude de l'irréversibilité des ensembles de particules actives en interaction que l'on mènera aux chapitres 4 et 5.

Pour atteindre ce but, on commence par mettre en lumière à la section 2.1 certaines subtilités des définitions **(D1)**, **(D2)** et **(D3)** à travers l'étude de la réversibilité de systèmes passifs simples. On verra tout d'abord que l'usage de la première définition ne permet souvent pas de capturer entièrement la production d'entropie thermodynamique totale, les modèles de dynamique stochastique employés ne décrivant qu'un nombre réduit de l'ensemble des degrés de liberté réels des systèmes sous-jacents. Ensuite, on constatera que la seconde définition n'est généralement pas suffisante pour impliquer un équilibre aux sens de **(D1)** ou **(D3)**. Enfin, on mettra en évidence l'ambiguïté de la troisième définition vis à vis de la manière de “renverser le temps” dans la dynamique.

Pour mieux cerner les tenants et aboutissants de cette troisième définition, on propose à la section 2.2 une formalisation mathématique du renversement du temps permettant non seulement de “classifier” les manières de renverser le temps² mais également de démontrer aisément un résultat de “symétrie universelle”.

La section 2.3, quant à elle, rappelle les liens étroits entre réversibilité, courants de probabilité, et géométrie dans le cas des dynamiques sur-amorties, lien que l'on exploitera largement aux chapitres 4 et 5.

Par ailleurs, précisons d'emblée que toutes les intégrales stochastiques de ce chapitre seront considérées au sens de Stratonovich.

². La classification proposée à la section 2.2 ne cherche pas une complète exhaustivité. Elle tente seulement de capturer les renversements du temps les plus “physiques” ou “naturels”.

2.1 Renversement du temps de systèmes passifs simples

Il y a plusieurs manières, pour un processus stochastique donné, de définir un “renversement du temps”, i.e. d’associer à la statistique de chemins “forward” \mathcal{P} une statistique “backward” $\bar{\mathcal{P}}$. Parmi celles-ci, certaines peuvent ne pas avoir de sens physique (en tant que “renversement du temps”) où n’apporter (quasiment) aucune information sur le système que l’on étudie. Mais il est également possible que plusieurs “renversements du temps” apportent des informations complémentaires sur le système étudié. De plus, les liens entre ces notions de réversibilité — associées à la définition **(D3)** et à différents “renversement du temps” — et les définitions **(D1)** et **(D2)** présentent quelques subtilités. Cette section illustre ces subtilités à travers des exemples de systèmes passifs de complexité croissante.

2.1.1 Renversement du temps dans l’équation de Langevin sur-amortie.

On considère l’équation de Langevin sur-amortie suivante, qui décrit le mouvement d’une particule de position \mathbf{r} , immergée dans un bain thermique de température T , et soumise à un champ de force $\mathbf{F}(\mathbf{r})$:

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \zeta \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) + \sqrt{2\zeta k_B T} \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.1)$$

où ζ est la mobilité et $\boldsymbol{\eta}$ est un bruit blanc gaussien centré (i.e. de moyenne nulle) tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. La probabilité de parcours d’un chemin $(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, avec $\mathbb{T} \equiv [0, \mathcal{T}]$, est donnée par [75, 103] :

$$\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \frac{1}{Z} \exp \left[-\frac{1}{4\zeta k_B T} \int_0^{\mathcal{T}} (\dot{\mathbf{r}}_t - \zeta \mathbf{F}(\mathbf{r}_t))^2 + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) dt \right] p_{ss}(\mathbf{r}_0) \quad (2.2)$$

où l’on a supposé que le système est à l’état stationnaire, la probabilité stationnaire étant notée p_{ss} . Cet exemple étant censé être le plus simple, définissons la mesure de chemins renversée en temps par

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t)_{t \in \mathbb{T}}], \quad (2.3)$$

où

$$(\bar{\mathbf{r}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}} \quad (2.4)$$

correspond à la trajectoire initiale $(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathcal{T}}$ parcourue en sens inverse. $\bar{\mathcal{P}}$ est ainsi donnée en remplaçant dans la mesure de chemin (2.2) \mathbf{r}_t par $\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}$ et, par conséquent, $\dot{\mathbf{r}}_t$ par $-\dot{\mathbf{r}}_{\mathcal{T}-t}$.

Sur le plan “expérimental”, se demander si le système est irréversible au sens du bilan détaillé (**D3**) pour le renversement du temps (2.3)–(2.4) c’est faire plusieurs “films” de la particule, *i.e.* des enregistrements de sa trajectoire, sur un intervalle \mathbb{T} , et comparer la statistique de ces films avec celle des films joués en sens inverse.

Sur le plan théorique, pour mesurer cette irréversibilité, on peut calculer le taux de production d’entropie informationnelle :

$$\sigma \equiv \frac{1}{\mathcal{T}} \Sigma_{\mathbb{T}} = \frac{1}{\mathcal{T}} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle = \frac{1}{k_B T} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{F} \rangle . \quad (2.5)$$

On constate que, dans ce cas, l’entropie informationnelle coïncide bien (à k_B près) avec l’entropie thermodynamique puisque $k_B \sigma$ est égale au flux de chaleur allant du système au bain thermique divisé par la température :

$$\sigma = \frac{1}{k_B T} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{F} \rangle = \frac{1}{k_B T} \langle -\dot{\mathbf{r}}_t \cdot (-\zeta^{-1} \dot{\mathbf{r}}_t + \sqrt{2\zeta^{-1} k_B T} \boldsymbol{\eta}_t) \rangle . \quad (2.6)$$

Lorsque la force \mathbf{F} dérive d’un potentiel $V(\mathbf{r})$, le système est bien réversible à la fois au sens de la thermodynamique, au sens du bilan détaillé (correspondant à une simple inversion de la variable temporelle) ainsi qu’au sens des ensembles statistiques, puisque dans ce cas, d’une part, la force ne travaille pas en moyenne à l’état stationnaire

$$\langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) \rangle = -\langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \nabla V(\mathbf{r}_t) \rangle = -\frac{d}{dt} \langle V(\mathbf{r}_t) \rangle = 0 \quad (2.7)$$

et d’autre part la mesure stationnaire est bien donnée par une mesure de Gibbs :

$$p_{ss}(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z} e^{-V(\mathbf{r})/k_B T} . \quad (2.8)$$

Cependant, bien que les définitions de l’irréversibilité au sens du bilan détaillé (**D3**) et de la thermodynamique (**D1**) soient ici totalement équivalentes (car les entropies informationnelle et thermodynamique sont égales), elles ne sont pas équivalentes à l’irréversibilité au sens des ensembles statistiques (**D2**) : on a bien que l’équilibre au sens de (**D1**) \Leftrightarrow (**D3**) implique³ l’équilibre au sens de (**D2**) mais la réciproque est fausse. En effet si l’on considère, par exemple, une force $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ donnée par

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\alpha \mathbf{r} + \mathbf{r} \times \mathbf{A} \quad (2.9)$$

3. Notons que l’on a seulement montré que $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r})$ implique, d’une part, la réversibilité au sens de (**D3**) (qui est équivalente à celle (**D1**)), et d’autre part la réversibilité au sens de (**D2**). On montrera à la section 2.3 que la réversibilité au sens de (**D3**) (et (**D1**)) est bien équivalente à $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r})$, et donc qu’elle implique la réversibilité au sens de (**D2**).

alors la probabilité stationnaire est toujours donnée par l'équation (2.8) avec $V(\mathbf{r}) = \alpha|\mathbf{r}|^2/2$, mais le taux de production d'entropie est non nul puisque :

$$\sigma = \frac{1}{k_B T} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) \rangle = \frac{1}{k_B T} \left\langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \left(-\nabla_{\mathbf{r}} \left[\frac{\alpha|\mathbf{r}_t|^2}{2} \right] + \mathbf{r}_t \times \mathbf{A} \right) \right\rangle \quad (2.10)$$

où, bien que la contribution de la force gradient soit nulle (confère (2.7)), celle de la force rotationnelle ne l'est pas. En effet le travail $\langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{r}_t \times \mathbf{A} \rangle$, défini au sens de Stratonovich, est égale à la limite quand $\Delta t \rightarrow 0$ de l'expression suivante, où l'on a posé $\Delta \mathbf{r}_t \equiv \mathbf{r}_{t+\Delta t} - \mathbf{r}_t$:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\Delta \mathbf{r}_t}{\Delta t} \cdot \left[\left(\mathbf{r}_t + \frac{\Delta \mathbf{r}_t}{2} \right) \times \mathbf{A} \right] \right\rangle &= \left\langle \frac{\Delta \mathbf{r}_t}{\Delta t} \cdot [\mathbf{r}_t \times \mathbf{A}] \right\rangle \\ &= \zeta \langle [-\alpha \mathbf{r}_t + \mathbf{r}_t \times \mathbf{A}] \cdot [\mathbf{r}_t \times \mathbf{A}] \rangle + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &= \zeta \sum_{i,j,k,l,m} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} A^k A^m \langle r_t^j r_t^l \rangle + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &= \frac{\zeta k_B T}{\alpha} \sum_{i,j,k,m} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijm} A^k A^m + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &= \frac{2\zeta k_B T}{\alpha} |\mathbf{A}|^2 + \mathcal{O}(\Delta t) \end{aligned}$$

où l'on a simplement utilisé les propriétés du produit vectoriel et du symbole de Levi-Civita ainsi que la mesure stationnaire. Ainsi le taux de production d'entropie (informationnelle et thermodynamique) est

$$\sigma = \frac{2\zeta}{\alpha} |\mathbf{A}|^2 \quad (2.11)$$

et malgré le fait que la mesure stationnaire soit une mesure de Gibbs (réversibilité au sens (**D2**)), le système est irréversible (ou "hors-équilibre") au sens des définitions (**D1**) et (**D3**).

2.1.2 Renversement du temps dans l'équation de Langevin sous-amortie.

On considère maintenant l'équation de Langevin sous-amortie :

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \mathbf{v}_t \quad (2.12)$$

$$m\dot{\mathbf{v}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) - \gamma \mathbf{v}_t + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.13)$$

où m est la masse de la particule et $\gamma = \zeta^{-1}$ est le coefficient d'amortissement.

Supposons que l'on définisse la mesure de chemin reversée en temps par

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.14)$$

où la trajectoire $(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ inverse de $(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est définie, comme dans la section précédente, en renversant seulement la variable temporelle :

$$(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, \mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}}. \quad (2.15)$$

Ce choix implique que, partant d'une trajectoire $(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ solution de (2.12)–(2.13), *i.e.* telle que $\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \neq 0$, la probabilité d'observer la trajectoire inverse $\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]$ est nulle puisque $(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ ne peut pas satisfaire l'équation (2.12) car $\dot{\bar{\mathbf{r}}}_t = -\bar{\mathbf{v}}_t$. Ainsi la production d'entropie informationnelle associée au renversement du temps (2.14)–(2.15) diverge :

$$\Sigma_{\mathbb{T}} = +\infty. \quad (2.16)$$

Notons, d'une part, que la variable $\bar{\mathbf{v}}$ des trajectoires renversées en temps définies par (2.15) n'a plus le sens physique d'une variable vitesse puisqu'elle satisfait $\dot{\bar{\mathbf{r}}}_t = -\bar{\mathbf{v}}_t$ (pour les trajectoires associées, *via* (2.15), à celles issues de (2.12)–(2.13)). D'autre part, l'étude du bilan détaillé (2.14)–(2.15) apporte une information presque triviale puisqu'elle nous enseigne simplement que le fait de ne pas “retourner la variable vitesse” lors de l'inversion du temps donne lieu à des trajectoires impossibles.

Ainsi, pour définir un renversement du temps plus utile et physiquement cohérent, il est nécessaire, en plus de renverser la variable temporelle, de renverser la variable de vitesse :

$$(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}} \quad (2.17)$$

On définit ensuite la mesure renversée en temps des trajectoires :

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}}]. \quad (2.18)$$

Le calcul du taux de production d'entropie informationnelle donne alors :

$$\sigma = \frac{1}{k_B T} \langle \mathbf{v}_t \cdot (\mathbf{F} - m\dot{\mathbf{v}}_t) \rangle. \quad (2.19)$$

A nouveau, σ est bien égale au flux de chaleur divisé par (k_B fois) la température, et coïncide ainsi avec le taux de production d'entropie thermodynamique. Ainsi la réversibilité au sens de la thermodynamique (**D1**) et la réversibilité au sens du bilan détaillé (**D3**) — pour le renversement du temps défini par (2.17)–(2.18) — sont à nouveau équivalentes et ont lieu si et seulement si $\sigma = 0$. On peut monter (confère appendice F) que l'irréversibilité au sens de (**D1**) et (**D3**) est à nouveau

équivalente au fait que le champ de force dérive d'un potentiel : $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}}V(\mathbf{r})$ et que cela implique une mesure stationnaire du type Boltzmann–Gibbs

$$p_{ss}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{Z} e^{-m|\mathbf{v}|^2/2k_B T} e^{-V(\mathbf{r})/k_B T} \quad (2.20)$$

donc la réversibilité au sens (**D2**).

Enfin, sur le plan de “l’interprétation expérimentale”, l’étude de la réversibilité au sens du bilan détaillé donné par les équations (2.17)–(2.18) revient à faire des “films” de l’espace des phases (\mathbf{r}, \mathbf{v}) de la particule sur un intervalle de temps T et à comparer la statistique de ces films avec ceux obtenus en renversant le temps et en inversant la variable de vitesse dans les films initiaux. Notons que, bien que l’accès “direct” à l’espace des phases soit impossible, l’équation (2.12) permet de réaliser indirectement ces “films de l’espace des phases” *via* le protocole suivant : on réalise des films dans l’espace “réel” (ou “espace des configurations”, *i.e.* l’espace dans lequel évolue la variable \mathbf{r}), puis on déduit la vitesse de la particule en différenciant sa variable de position, ce qui permet de “relever” la trajectoire depuis l’espace réel jusque dans l’espace des phases. Ensuite on joue les films dans l’espace réel simplement en inversant le temps. Enfin, on relève les trajectoires obtenues jusque dans l’espace des phases, ces derniers films étant ceux dont la statistique est à comparer avec celle des films initiaux de l’espace des phases.

2.1.3 Renversement du temps en présence d’une force qui ne travaille pas.

On suppose maintenant que notre particule possède une charge électrique q et que, mises à part les forces exercées par le bain thermique, la particule est uniquement soumise à un champ magnétique \mathbf{B} , constant et uniforme :

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \mathbf{v}_t \quad (2.21)$$

$$m\dot{\mathbf{v}}_t = q\mathbf{v}_t \times \mathbf{B} - \gamma\mathbf{v}_t + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.22)$$

Notons tout d’abord que, si l’on suppose par exemple des conditions au bords périodiques sur le domaine spatiale dans lequel évolue la particule, la mesure stationnaire associée au processus est

$$p_{ss}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{Z} e^{-m|\mathbf{v}|^2/k_B T} \quad (2.23)$$

qui est bien une mesure de Gibbs. Ainsi le processus défini par les équations (2.21)–(2.22) est bien à l’équilibre au sens (**D2**) des ensembles statistiques. De plus, un calcul direct permet de montrer que la force totale $-\gamma\mathbf{v}_t + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_t$ exercée par

le bain sur la particule ne travaille pas à l'état stationnaire. La chaleur échangée avec le bain est donc nulle. Le système est ainsi également réversible au sens (**D1**) de la thermodynamique, ce qui était attendu étant donné que la force exercée par le champ magnétique n'exerce aucun travail sur la particule.

Ensuite, sur le plan de la réversibilité au sens (**D3**) du bilan détaillé, étant dans un contexte sous-amortie, on pourrait vouloir définir, comme à la section précédente 2.1.2,

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.24)$$

avec

$$(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}} . \quad (2.25)$$

On peut montrer par un calcul direct que ce choix mène à un taux de production d'entropie informationnelle donnée par :

$$\sigma = \frac{2q^2}{m\gamma} |\mathbf{B}|^2 , \quad (2.26)$$

Cette production d'entropie informationnelle ne coïncide donc pas avec la production d'entropie thermodynamique qui, comme on l'a dit précédemment, est nulle puisque, le champ magnétique ne produisant aucun travail sur la particule, il ne peut en aucun cas maintenir un flux de chaleur en régime permanent.

En revanche, si dans notre manière de “renverser le temps”, en plus de renverser les variables de temps et de vitesse, on renverse également le champ magnétique $\mathbf{B} \mapsto -\mathbf{B}$, on peut montrer que le taux de production d'entropie informationnelle s'annule :

$$\sigma = 0 , \quad (2.27)$$

et coïncide ainsi avec le taux de production d'entropie thermodynamique. Formellement, cette dernière manière de “renverser le temps” revient à définir la probabilité de chemin

$$\bar{\mathcal{P}}_{\mathbf{B}}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}_{-\mathbf{B}}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.28)$$

avec

$$(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}} , \quad (2.29)$$

où on a noté $\mathcal{P}_{\mathbf{B}}$ la probabilité de chemin associée aux équations (2.21)-(2.22).

Notons que les bilans détaillés (2.24)–(2.25) et (2.28)–(2.29) apportent des informations complémentaires sur la dynamique (2.21)–(2.22). Le fait que le taux de production d'entropie (2.26) associé au bilan détaillé (2.24)–(2.25) ne s'annule pas met en lumière une forme d'irréversibilité des trajectoires du système : dans le plan orthogonal à \mathbf{B} , les particules ont davantage tendance à tourner dans un sens (déterminé par le sens de \mathbf{B} et le signe de la charge q) que dans l'autre —

asymétrie que l'on observerait dans la statistique des trajectoires si l'on mettait en œuvre, par exemple, le protocole expérimentale décrit à la fin de la section 2.1.2. Le fait que le taux de production d'entropie informationnelle (2.27) s'annule lorsqu'on inverse le champ magnétique — et coïncide ainsi avec le taux de production d'entropie thermodynamique — indique que l'irréversibilité de la statistique des trajectoires de (2.21)–(2.22), au sens thermodynamique, ne provient pas des degrés de liberté (\mathbf{r}, \mathbf{v}) des équations (2.21)–(2.22), mais des degrés de liberté sous-jacents au champ magnétique \mathbf{B} .

En effet, supposons que le champ \mathbf{B} soit engendré par la circulation d'électrons dans une bobine aux bornes de laquelle on impose une différence de potentiel ΔU fixée. On aurait alors pu “raffiner” le modèle (2.21)–(2.22) en ajoutant des équations modélisant l'évolution de l'ensemble $\mathbf{X}_t \equiv (\mathbf{r}_t^i, \mathbf{v}_t^i)_i$ des positions et vitesses des électrons au cours du temps, en fonction de ΔU , ainsi que l'expression du champ \mathbf{B} en fonction des vitesses des électrons — cette dernière expression étant impaire selon les équations de Maxwell. Si on note

$$(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv ((\mathbf{r}_{T-t}^i, -\mathbf{v}_{T-t}^i)_i)_{t \in \mathbb{T}} \quad (2.30)$$

la trajectoire renversée en temps des électrons (où on a pas modifié ΔU), alors on peut définir un taux de production d'entropie plus global (*i.e.* qui inclut la dynamique des électrons) :

$$\tilde{\sigma} \equiv \frac{1}{T} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t, \mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t, \bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.31)$$

Tout d'abord, si l'on intègre les degrés de liberté des électrons (*i.e.* on marginalise par rapport à \mathbf{X}) dans la dynamique totale, on retombe bien sur la dynamique initiale (2.21)–(2.22) avec un champ magnétique moyen $\langle \mathbf{B} \rangle$. Or, on peut montrer (voir appendice B) que la production d'entropie associé à la dynamique marginalisée minore la production d'entropie “totale”, *i.e.*

$$\tilde{\sigma} \geq \sigma \quad (2.32)$$

où

$$\sigma \equiv \frac{1}{T} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}_{\langle \mathbf{B} \rangle}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}_{\langle \mathbf{B} \rangle}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.33)$$

est donné par l'expression (2.26) en remplaçant \mathbf{B} par $\langle \mathbf{B} \rangle$. Par ailleurs, en conditionnant le numérateur et le dénominateur respectivement par $(\mathbf{X}_t)_t$ et $(\bar{\mathbf{X}}_t)_t$ on peut décomposer $\tilde{\sigma}$:

$$\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_2 \quad (2.34)$$

avec

$$\tilde{\sigma}_1 \equiv \frac{1}{T} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t | \mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t | \bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad \text{et} \quad \tilde{\sigma}_2 \equiv \frac{1}{T} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle . \quad (2.35)$$

Or l'entropie $\tilde{\sigma}_1$ se réécrit

$$\tilde{\sigma}_1 = \frac{1}{\mathcal{T}} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}_{\mathbf{B}_t}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}_{-\mathbf{B}_{\mathcal{T}-t}}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.36)$$

où $(\mathbf{B}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est le champ magnétique engendré par $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ et, par symétrie des équations de Maxwell, $(-\mathbf{B}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}}$ est celui engendré par $(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$. Si la vitesse des électrons fluctue faiblement autour de sa moyenne, on peut faire une approximation de type champ moyen :

$$\tilde{\sigma}_1 \simeq \frac{1}{\mathcal{T}} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}_{\langle \mathbf{B} \rangle}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}_{-\langle \mathbf{B} \rangle}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.37)$$

qui vaut zéro d'après l'équation (2.27). Ainsi l'entropie informationnelle du système total

$$\tilde{\sigma} \simeq \tilde{\sigma}_2 = \frac{1}{\mathcal{T}} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.38)$$

i.e. est approximativement due à la seule dynamique des électrons. Notons que la production d'entropie thermodynamique totale est, quant à elle, exactement due à la dynamique des seuls électrons, et doit être proportionnelle à la vitesse moyenne de l'ensemble des électrons multipliée par la différence de potentiel ΔU .

Ainsi on peut conclure que la dynamique de la particule mésoscopique, bien que réversible au sens thermodynamique puisque non-dissipative (ce qui est bien capturé par le bilan détaillé avec inversion du champ magnétique), présente une forme d'irréversibilité dans la statistique de ses trajectoires (capturée par le bilan détaillé sans inversion du champ \mathbf{B}). Cette dernière est en fait induite par la dynamique sous-jacente des électrons soumis à une différence de potentiel ΔU , qui, quant à elle, est bien irréversible non seulement au sens du bilan détaillé (sans inversion de ΔU) mais également au sens de la thermodynamique.

Irréversibilité, coarse-graining et production d'entropie(s) sont ainsi liés de manière subtile.

2.2 Formalisation mathématique de la symétrie temporelle des équations stochastiques

Dans cette section on re-définit la notion de renversement du temps — qu'on appellera aussi TRS, de l'anglais “Time Reversal Symmetry” — à l'aide de concepts simples issus de la théorie des actions de groupe. Cela nous permettra de clarifier la classification des différentes notions de TRS qui se dessinait déjà lors de l'examen de cas simples à la section 2.1. On qualifiera ainsi la transformation effectuée sur la mesure de chemin de :

- *T-symétrie*, lorsqu'elle consiste simplement en l'inversion de la variable temporelle, comme dans le cas de l'équation de Langevin sur-amortie (2.1) ;
- *PT-symétrie* — pour “Parité-Temps” — lorsqu'en plus de renverser la variable temporelle, on renverse également des degrés de liberté, comme dans le cas de l'équation de Langevin sous-amortie (2.12)–(2.13). Notons que l'emploi du terme “parité” sera employé dans ce manuscrit pour désigner n'importe quelle symétrie vectorielle, et pas seulement celle qui inverse les degrés de liberté spatiaux — comme c'est notamment l'usage en mécanique quantique. Par exemple, on qualifiera d'opération de parité l'application $(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \mapsto (\mathbf{r}, -\mathbf{v})$ qui inverse seulement la vitesse, sans modifier la variable \mathbf{r} de position.
- *E(P)T-symétrie* — pour “(Parité-)Temps Étendue” — lorsqu'on renverse aussi un terme dans l'ensemble des forces appliquées au système, comme le champ magnétique dans la dynamique (2.21)–(2.22).

En plus de clarifier la classification des différentes notions de TRS couramment employées, cette formalisation nous permettra de démontrer aisément que tout processus stochastique admet une E(P)T-symétrie.

2.2.1 Contexte général

Le cadre général dans lequel s'inscrit cette section 2.2 est celui de l'étude des symétries par renversement du temps des processus stochastiques markoviens solutions d'équations différentielles stochastiques (EDS) de la forme

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.39)$$

Dans cette équation une réalisation $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^d$ de \mathbf{X}_t représente *l'ensemble des degrés de liberté d'une particule* à un instant t . Ce n'est donc pas nécessairement une variable de position seulement. Elle peut éventuellement contenir des variables d'impulsion, d'autopropulsion, etc. De plus, dans l'équation (2.39), $\boldsymbol{\eta}$ est un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = 2D^{\alpha\beta}\delta(t - t')$, où \mathbf{D} est une matrice de diffusion *constante et uniforme*.

On étudie cette EDS sur un intervalle temporelle $\mathbb{T} = [0; \mathcal{T}]$, où $\mathcal{T} \in \mathbb{R}$. On définit également l'ensemble \mathfrak{X} des couples (\mathbf{F}, \mathbf{D}) tels que l'équation (2.39) associée possède une unique mesure stationnaire p_{ss} . Dans tout ce chapitre on note : en minuscule les trajectoires $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ (qui sont des applications de \mathbb{T} à valeurs dans \mathbb{R}^d) et en majuscules les processus stochastiques $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ (qui peuvent être vu comme des variables aléatoires à valeurs dans l'ensemble des trajectoires de \mathbb{T} dans \mathbb{R}^d). De plus, dans l'ensemble de ce chapitre, on n'étudie que des équations (2.39) telle que $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$, et on suppose que la condition initiale \mathbf{X}_0 du processus stochastique $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, solution de (2.39), est distribuée selon la probabilité stationnaire p_{ss} , de telle sorte que l'on soit toujours dans l'état stationnaire.

Dans ce cadre, une équation de la forme (2.39) est associée de manière univoque à :

- Un couple champ de force – matrice de diffusion : $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$.
- Une équation de Fokker-Planck de la forme :

$$\partial_t p = \mathcal{W}p \quad (2.40)$$

où l'opérateur d'évolution \mathcal{W} est donné par

$$\mathcal{W}p = -\nabla \cdot [p\mathbf{F} - \mathbf{D}\nabla p] \quad \text{avec} \quad \mathbf{D}\nabla p \equiv D^{\alpha\beta}\partial_{x^\beta}p. \quad (2.41)$$

On définit également le courant de probabilité $\mathcal{J}([p], \mathbf{x})$ (fonctionnelle de p) :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}, [p]) \equiv p(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{D}\nabla p(\mathbf{x}) \quad (2.42)$$

On note $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$ et $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$ les espaces auxquels \mathcal{W} et \mathcal{J} appartiennent respectivement lorsque $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$.

- Une mesure sur les trajectoires $\mathcal{P}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}]$, que l'on identifiera à (l'exponentielle de) la fonctionnelle d'Onsager-Machlup :

$$\mathcal{P}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \frac{1}{Z} \exp \left[-\frac{1}{4} \int_{\mathbb{T}} [\dot{\mathbf{x}}_t - \mathbf{F}(\mathbf{x}_t)]^t \mathbf{D}^{-1} [\dot{\mathbf{x}}_t - \mathbf{F}(\mathbf{x}_t)] + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}_t) dt \right] p_{ss}(\mathbf{x}_0) \quad (2.43)$$

On pensera toujours à \mathcal{P} comme à une densité de probabilité par rapport à une “mesure de Lebesgue” sur l'espace des trajectoires.⁴ On note $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ l'espace auquel \mathcal{P} appartient.

4. Lorsque \mathbf{D} a des valeurs propres nulles, associées à un sous-espace propre E_0 de \mathbb{R}^d , le terme associé à $|\dot{\mathbf{x}}_t^0 - \mathbf{F}^0(\mathbf{x}_t)|^2$ dans l'exponentielle vaut $-\infty$, sauf lorsque $\dot{\mathbf{x}}_t^0 = \mathbf{F}^0(\mathbf{x}_t)$. La probabilité de chemin sur la composante \mathbf{x}^0 de la trajectoire, sachant les autres composantes, est donc un dirac selon les lignes de flot de $\mathbf{F}(\mathbf{x}_t)$.

→ Une probabilité à deux points⁵ $p_2(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, \tau)$ dont on note l'espace $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$.

Ainsi un couple $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$, un opérateur d'évolution \mathcal{W} , une fonctionnelle de courant \mathcal{J} , une mesure de chemins \mathcal{P} , ou une mesure à deux point p_2 caractérisent entièrement un processus (stationnaire) $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ solution de l'équation (2.39). Autrement dit les espaces \mathfrak{X} , $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ et $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$ sont en bijection.

Notons au passage que la connaissance de la mesure stationnaire p_{ss} , du courant de probabilité stationnaire $\mathbf{J}_{ss} \equiv \mathcal{J}(\cdot, [p_{ss}])$ et de la matrice de diffusivité \mathbf{D} implique la connaissance de l'ensemble du processus stochastique, puisque

$$\mathbf{F} = p_{ss}^{-1} (\mathbf{J}_{ss} + \mathbf{D} \nabla p_{ss}) . \quad (2.44)$$

Si la caractérisation de la mesure stationnaire du système est une question centrale en physique statistique, celle du courant de probabilité stationnaire l'est également, puisqu'à eux deux (et avec \mathbf{D}) ils contiennent “toute l'information” sur le processus stochastique. Le chapitre 5 de ce manuscrit porte sur une méthode de caractérisation de ce courant de probabilité dans les théories des champs stochastiques.

Dans ce contexte, définir un “renversement du temps” (ou TRS) pour le processus $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, solution stationnaire (*i.e.* dont la mesure ponctuelle est constante) de la dynamique (2.39), c'est définir un processus “adjoint” (ou “dual”) $(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, solution stationnaire d'une dynamique “adjointe”, ayant une probabilité de chemin que l'on notera $\bar{\mathcal{P}}$. On exige par ailleurs que l'application $\mathcal{P} \mapsto \bar{\mathcal{P}}$ soit *involutive*, puisque “inverser le cours du temps” une seconde fois doit nous ramener dans la situation initiale⁶.

Le système est alors dit *réversible par rapport au renversement choisi* si et seulement si $\mathcal{P} = \bar{\mathcal{P}}$. C'est à dire ssi les processus adjoints $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ et $(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ ont la même probabilité de parcourir n'importe quelle trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}} : \mathcal{P}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}]$.

On rappelle que la donnée d'une involution \mathfrak{s} sur un ensemble A est identique à la donnée d'une action \bullet du groupe $\mathbb{Z}_2 = (\{0; 1\}, +)$ sur ce même ensemble, où l'action \bullet est définie par

$$\forall a \in A , \quad 0 \bullet a \equiv id_A(a) \quad \text{et} \quad 1 \bullet a \equiv \mathfrak{s}(a) \quad (2.45)$$

5. On peut obtenir la probabilité à deux points en intégrant la probabilité de chemins. Réciproquement, l'équation (2.39) étant markovienne, on peut établir la probabilité à n points à partir de la probabilité à 2 points pour n quelconque, puis la probabilité de chemins par “passage à la limite”.

6. Notons que certains auteurs [89] exigent de plus que la mesure stationnaire p_{ss} soit inchangée par un tel renversement du temps. On choisit de ne pas imposer cette contrainte dans la définition des “renversements du temps” étudiés dans ce chapitre.

où on a noté id_A l'application identité de A (cf. appendice C pour plus de détails). Dans ce chapitre, on choisira le point de vue de l'action de \mathbb{Z}_2 , puisque celui-ci donne accès à bon nombre d'opérations naturelles sur les actions de groupes que nous rappelons en détails dans l'appendice C. Précisons tout de même que les deux opérations dont nous ferons le plus usage dans la suite de cette section sont les opérations

- d'induction d'action : si G est un groupe qui agit sur deux ensembles A et B via des actions notées respectivement \bullet_A et \bullet_B , on peut définir une action \bullet_{B^A} de G sur l'ensemble B^A des applications f de A dans B par

$$[g \bullet_{B^A} f](a) \equiv g \bullet_B f(g^{-1} \bullet_A a) \quad (2.46)$$

pour tout élément a dans A . On dit que l'action \bullet_{B^A} est induite à partir des actions \bullet_A et \bullet_B .

- de transport d'action : si un groupe G agit sur un ensemble A et que f est une application bijective de A dans un ensemble B , on peut définir une action \bullet_B sur B par

$$\forall b \in B, \forall g \in G, g \bullet_B b \equiv f(g \bullet_A f^{-1}(b)). \quad (2.47)$$

On dit que \bullet_B est l'action transportée de \bullet_A par f .

2.2.2 (P)T-symétrie

Dans cette section, on se donne une symétrie vectorielle \mathbf{p} sur \mathbb{R}^d . Par exemple si $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \mathbf{v})$ décrit des variables de position et de vitesse seulement, on peut définir une simple “inversion des vitesses” $\mathbf{p} : (\mathbf{r}, \mathbf{v}) \mapsto (\mathbf{r}, -\mathbf{v})$. On définit également l'involution d'inversion de la variable temporelle $t : t \in \mathbb{T} \mapsto \mathcal{T} - t \in \mathbb{T}$.

On va voir que, malgré l'apparente complexité de la définition d'une TRS donnée en 2.2.1, qui consiste à définir une involution sur l'espace des mesures de trajectoires, on peut reconstruire une grande classe de tels renversement du temps à partir des simples applications \mathbf{p} et t . En plus d'éclairer le concept général de TRS, la simplicité de cette construction nous permettra également de déduire aisément bon nombre de propriétés des TRS qui consistent à inverser le temps et “retourner” des degrés de liberté.

Actions induites : espaces des trajectoires et des probabilités de chemins

L'involution \mathbf{p} (respectivement t) est naturellement associée à une action de \mathbb{Z}_2 dans \mathbb{R}^d (resp. \mathbb{T}), notée $*_{\mathbf{p}}$ (resp. $*_t$). Ainsi les espaces $(\mathbb{R}^d, *_{\mathbf{p}})$ et $(\mathbb{T}, *_t)$ sont tous deux des \mathbb{Z}_2 -ensembles. L'espace des trajectoires du problème considéré étant simplement (inclus dans) l'ensemble $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{T}}$ des applications de \mathbb{T} dans \mathbb{R}^d , on peut le

munir d'une action de \mathbb{Z}_2 naturellement induite (cf. appendice C) à partir de $*_{\mathfrak{p}}$ et $*_{\mathfrak{t}}$: on note $*_{\mathfrak{pt}}$ l'action ainsi obtenue. Pour toute trajectoire $\mathbf{x} : t \in \mathbb{T} \mapsto \mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^d$ (notée aussi \mathbf{x}_t), on a

$$(g *_{\mathfrak{pt}} \mathbf{x})(t) \equiv g *_{\mathfrak{p}} \mathbf{x}(g^{-1} *_{\mathfrak{t}} t). \quad (2.48)$$

Lorsque $g = g^{-1} = 0$, on a nécessairement une transformation triviale, i.e. qui ne fait rien : $(0 *_{\mathfrak{pt}} \mathbf{x})(t) = \mathbf{x}(t)$. Lorsque $g = g^{-1} = 1$: $(1 *_{\mathfrak{pt}} \mathbf{x})(t) = \mathfrak{p}[\mathbf{x}(\mathcal{T} - t)]$.

Par ailleurs, une "mesure" de chemin \mathcal{P} est, quant à elle, une application de l'espace des trajectoires $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{T}}$ dans \mathbb{R} . Puisque $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{T}}$ est maintenant muni d'une action de \mathbb{Z}_2 , et que l'on peut toujours définir une action triviale de \mathbb{Z}_2 sur \mathbb{R} (qui laisse inchangé tout élément de \mathbb{R}), on peut à nouveau définir une action induite sur l'espace des probabilités de chemin, notée $*_{\mathfrak{pt}}$:

$$[g *_{\mathfrak{pt}} \mathcal{P}][(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[g^{-1} *_{\mathfrak{pt}} (\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.49)$$

Ainsi, à partir d'une paire d'actions élémentaires $(*_{\mathfrak{t}}, *_{\mathfrak{p}})$ de \mathbb{Z}_2 opérant respectivement sur le temps \mathbb{T} et l'espace des états \mathbb{R}^d , on a pu induire une action $*_{\mathfrak{pt}}$ sur l'espace des probabilités de trajectoires.

Transport d'action et réversibilité

Pour une involution linéaire \mathfrak{p} donnée, la procédure précédente permet de définir, par restriction⁷ de $*_{\mathfrak{pt}}$ à $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}} \subset \mathbb{R}^{([\mathbb{R}^d]^{\mathbb{T}})}$, une action sur $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, toujours notée $*_{\mathfrak{pt}}$. Ainsi, pour tout processus stochastique (stationnaire) \mathbf{X}_t , solution de l'équation (2.39) pour un certain couple $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$, de mesure de chemin (stationnaire) $\mathcal{P} \in \mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, on peut définir un processus $\bar{\mathbf{X}}_t$, de mesure de chemin (stationnaire) $\bar{\mathcal{P}}$ définie par

$$\bar{\mathcal{P}} \equiv 1 *_{\mathfrak{pt}} \mathcal{P}, \quad (2.50)$$

c'est à dire

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv [1 *_{\mathfrak{pt}} \mathcal{P}][(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[1^{-1} *_{\mathfrak{pt}} (\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\mathfrak{p}(\mathbf{x}_{\mathcal{T}-t}))_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.51)$$

ou encore

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad \text{où} \quad (\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv 1 *_{\mathfrak{pt}} (\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}} \quad (2.52)$$

où $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est la trajectoire "inverse" de $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ (pour les involutions \mathfrak{p} et \mathfrak{t} considérées). Ce processus stochastique $\bar{\mathbf{X}}_t$, ayant $\bar{\mathcal{P}}$ pour mesure de chemins, sera appelé indifféremment processus \mathfrak{pt} -dual, \mathfrak{pt} -adjoint, ou \mathfrak{pt} -inverse (ou PT-dual, PT-adjoint, ou PT-inverse, lorsqu'on ne précisera pas les involutions \mathfrak{p} et \mathfrak{t}). C'est le "processus renversé en temps" associé au processus initial \mathbf{X}_t , pour l'involution \mathfrak{p} choisie (\mathfrak{t} est toujours la même pour un intervalle \mathbb{T} donné).

7. Le fait que $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ soit stable par $*_{\mathfrak{pt}}$ sera donné par l'équation (2.56).

Notons qu'on définit parfois le processus renversé en temps $(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ du processus $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ (solution stationnaire de (2.39)) comme le processus qui réalise toute trajectoire $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, “inverse” d'une trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, avec la même probabilité que le processus initiale $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ réalise $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$. Ce qui s'écrit mathématiquement

$$\bar{\mathcal{P}}[(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.53)$$

ce qui est bien équivalent à l'équation (2.52). Notons que cette dernière définition ne sera pas valable pour des renversement du temps impliquant, non seulement une inversion de la variable temporelle et (éventuellement) de certains degrés de liberté, mais également une transformation directe du champ de force \mathbf{F} (voire de la matrice \mathbf{D}), comme on le verra à la section 2.2.3. C'est pourquoi on a donné une définition plus générale d'un renversement du temps à la section 2.2.1, n'impliquant qu'une involution sur les probabilités de chemins $\mathcal{P} \mapsto \bar{\mathcal{P}}$.

On voudrait maintenant connaître plus en détails les propriétés de ce processus dual. En particulier on voudrait savoir pour quel couple $(\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{D}}) \in \mathfrak{X}$ ce processus dual est solution de l'équation (2.39). L'espace $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ étant en bijection avec $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$, et \mathfrak{X} , on peut transporter l'action $\star_{\mathfrak{pt}}$ à tous ces espaces, via des applications bijectives appropriées (cf. paragraphe “transport d'action” de l'appendice C). Les actions obtenues seront en général également notées $\star_{\mathfrak{pt}}$. Lorsqu'on aura besoin par la suite de préciser de quelle action on parle, on utilisera les notations $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathbb{P}}$, $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathbb{P}^2}$, $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathbb{W}}$, $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathbb{J}}$, et $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathfrak{X}}$. La construction formelle de ces actions à partir des involutions \mathfrak{p} et \mathfrak{t} est synthétisée dans la figure 2.1.

Étant donné que l'action de $0 \in \mathbb{Z}_2$ est toujours triviale, on va se contenter, à partir de maintenant, de décrire l'action de $1 \in \mathbb{Z}_2$. Pour tout élément e sur lequel \mathbb{Z}_2 opère via une action $\star_{\mathfrak{pt}}$, on pose

$$\bar{e} \equiv 1 \star_{\mathfrak{pt}} e . \quad (2.54)$$

On démontre ensuite (cf. Appendice D) que le processus \mathfrak{pt} -dual a les propriétés suivantes :

→ sa mesure à deux points est

$$\bar{p}_2(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) = p_2(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), \mathcal{T} - \tau, \mathfrak{p}(\mathbf{x}), \mathcal{T} - t) \quad (2.55)$$

→ sa mesure stationnaire est

$$\bar{p}_{ss} = p_{ss} \circ \mathfrak{p} . \quad (2.56)$$

En particulier, ceci implique que les deux processus adjoints ont la même mesure stationnaire si et seulement si p_{ss} est invariante sous \mathfrak{p} .

→ son opérateur d'évolution est

$$\bar{\mathcal{W}} = \mathfrak{P} p_{ss} \mathcal{W}^\dagger p_{ss}^{-1} \mathfrak{P} \quad (2.57)$$

où l'opérateur \mathfrak{P} agit sur les fonctions $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ via $\mathfrak{P}f : \mathbf{x} \mapsto f \circ \mathfrak{p}(\mathbf{x})$, et où \mathcal{W}^\dagger est l'opérateur dual de \mathcal{W} au sens \mathbb{L}^2 (pour la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d). L'expression explicite de l'opérateur d'évolution est donnée par

$$\bar{\mathcal{W}}\psi = -\nabla \cdot \left[\left(2J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{F} \circ \mathfrak{p} \right) \psi - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \psi \right] \quad (2.58)$$

où $J_{\mathfrak{p}}$ est la jacobienne de $\mathfrak{p} : [J_{\mathfrak{p}}]_{ij} = \partial_j \mathfrak{p}^i$, et où $J_{\mathfrak{p}}^t$ est sa transposée.

→ son champ de forces $\bar{\mathbf{F}}$, sa matrice de diffusion $\bar{\mathbf{D}}$, ainsi que sa fonctionnelle de courant $\bar{\mathcal{J}}$ sont respectivement donnés par :

$$\bar{\mathbf{F}} = 2J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{F} \circ \mathfrak{p} \quad (2.59)$$

$$\bar{\mathbf{D}} = J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \quad (2.60)$$

$$\bar{\mathcal{J}}[p] = p \bar{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{D}} \nabla p \quad (2.61)$$

→ sa mesure de chemin $\bar{\mathcal{P}}$ est, quant à elle, obtenue en remplaçant \mathbf{F} et \mathbf{D} respectivement par $\bar{\mathbf{F}}$ et $\bar{\mathbf{D}}$ dans l'expression (2.43) de \mathcal{P} — ou, de manière équivalente, en remplaçant $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ par $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ dans \mathcal{P} .

Le processus $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est alors dit **pt-réversible** — on dira simplement **t-réversible** lorsque \mathfrak{p} est l'identité — lorsque l'une des conditions équivalentes suivantes est vérifiée :

$$\mathcal{P} = \bar{\mathcal{P}}, \quad p_2 = \bar{p}_2, \quad \mathcal{W} = \bar{\mathcal{W}}, \quad (\mathbf{F}, \mathbf{D}) = (\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{D}}), \quad \text{ou encore } \mathcal{J} = \bar{\mathcal{J}}.$$

En terme d'action de \mathbb{Z}_2 , la *réversibilité* signifie que le processus stochastique $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est un *point fixe pour l'action $\star_{\mathfrak{pt}}$* . Les ensembles $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$, et \mathfrak{X} — décrivant tous $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ de manière univoque — étant “ \mathbb{Z}_2 -équivalents” (i.e. il existe des bijections équivariantes entre eux), un élément de l'un de ces ensembles est un point fixe pour l'action de \mathbb{Z}_2 ssi ses images (par les bijections équivariantes) dans les autres ensembles sont également des points fixes (cf. appendice C). D'où l'équivalence des définitions de réversibilité dans tous ces ensembles.

Par ailleurs, si l'on note $E^{\mathfrak{X}}$ l'un des ensembles $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$, ou \mathfrak{X} , et e un élément de $E^{\mathfrak{X}}$, alors on peut décomposer e en parties symétrique et anti-symétrique sous l'action $\star_{\mathfrak{pt}}$:

$$e = e^S + e^A \quad \text{avec} \quad e^S = \frac{1}{2} (e + 1 \star_{\mathfrak{pt}} e) \quad \text{et} \quad e^A = \frac{1}{2} (e - 1 \star_{\mathfrak{pt}} e) \quad (2.62)$$

La \mathbb{pt} -réversibilité est alors équivalente à $e^S = e$ ou encore à $e^A = 0$. Notons que ceci reste vrai pour les espaces $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ et $\mathbb{p}_2^{\mathfrak{X}}$ mais les parties symétrique et anti-symétrique d'un élément ne sont alors en général plus des probabilités.

Enfin, signalons que l'on donne dans l'appendice H l'expression de $\bar{\mathcal{W}}$ (ainsi que celles de $\bar{\mathbf{F}}$, $\bar{\mathbf{D}}$ et $\bar{\mathcal{J}}$) dans le cas, plus général, d'une équation différentielle stochastique avec bruit multiplicatif.

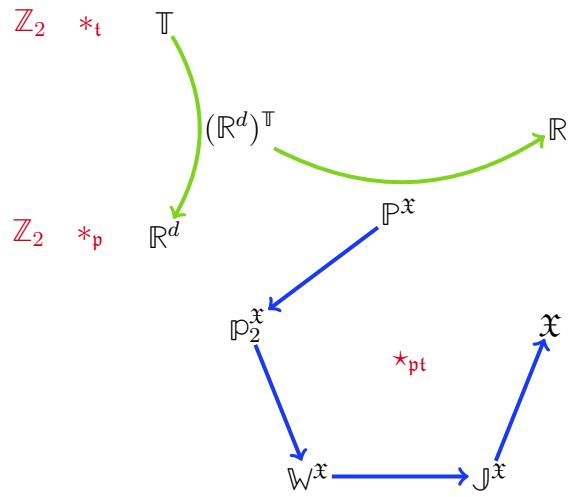


Figure 2.1 – Construction de l'action $*_{\mathbb{pt}}$ de \mathbb{Z}_2 , formalisant le “renversement du temps”, sur tous les espaces d’intérêt (décrivant la dynamique stochastique (2.39)) à partir de deux actions élémentaires de \mathbb{Z}_2 : $*_t$ et $*_p$ (notées en rose en haut à gauche de la figure), agissant respectivement sur le temps \mathbb{T} et l'espace \mathbb{R}^d . Chaque flèche verte désigne l'espace des fonctions entre les ensembles de départ et d'arrivée. Leur courbure symbolise l'*induction* d'une action sur l'espace des fonctions depuis les actions sur les espaces de départ et d'arrivée. Les flèches bleues symbolisent l'existence d'une bijection entre les espaces, permettant, lorsque décrétée équivariante, le *transport* d'une action depuis la source de la flèche jusqu'à son but. Les espaces $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{p}_2^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$ et \mathfrak{X} sont tous des \mathbb{Z}_2 -ensembles qui sont ainsi \mathbb{Z}_2 -équivalents par construction. On note donc, pour simplifier, chacune des actions de \mathbb{Z}_2 sur ces espaces par la même notation $*_{\mathbb{pt}}$ (schématisée en rose au centre du pentagone délimité par les flèches bleues). Enfin, notons que l'on aurait tout à fait pu transporter l'action $*_{\mathbb{pt}}$ dans l'autre sens du pentagone depuis $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ (i.e. de $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ à \mathfrak{X} et ainsi de suite), en identifiant $\bar{\mathbf{F}}$ et $\bar{\mathbf{D}}$ dans l'expression de $\bar{\mathcal{P}}$.

2.2.3 EPT-symétrie : PT-symétrie étendue

On a vu, à travers l'exemple de la particule chargée en champ magnétique (cf. équations (2.21)-(2.22)), qu'il peut être utile de pouvoir exprimer une forme plus générale de réversibilité (toujours au sens (**D3**) d'un bilan détaillé) que celle décrite par les (P)T-symétries. Cette forme plus générale consiste à modifier directement le champ de force \mathbf{F} appliqué au système — et éventuellement la matrice de diffusion \mathbf{D} — en plus de renverser le temps ainsi qu'éventuellement certains degrés de liberté.

Pour formaliser cela, on suppose disposer d'une nouvelle involution ϵ définie directement sur l'espace \mathfrak{X} des couples (champs de force, diffusivité). On peut penser à l'inversion d'un éventuel champ magnétique par exemple. Comme pour les applications t et p , cette involution peut être vu comme une action $*_\epsilon$ du groupe \mathbb{Z}_2 sur \mathfrak{X} . On peut, comme dans la section précédente, transporter cette action à tous les espaces en bijection avec \mathfrak{X} , notamment à $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, où l'action obtenue est notée $*_\epsilon$. Ensuite, si une condition de compatibilité est respectée (il faut que les actions $*_\epsilon$ et $*_{pt}$ commutent – cf. paragraphe “composition d’actions” de l’appendice C pour plus de détails), on peut composer cette action avec $*_{pt}$, pour obtenir une action $*_{\epsilon pt}$, définie par :

$$1 *_{\epsilon pt} \mathcal{P} \equiv 1 *_{pt} (1 *_\epsilon \mathcal{P}) = 1 *_\epsilon (1 *_{pt} \mathcal{P}) \quad (2.63)$$

A nouveau, on peut transporter l'action obtenue à tous les espaces $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$ et \mathfrak{X} . Ces espaces étant ainsi \mathbb{Z}_2 -équivalents, on note par le même symbole $*_{\epsilon pt}$ les actions obtenues. Si $E^{\mathfrak{X}}$ est l'un de ces espaces et e un élément de $E^{\mathfrak{X}}$, on renote

$$\bar{e} \equiv 1 *_{\epsilon pt} e \quad (2.64)$$

Pour obtenir l'expression explicite de \bar{e} (notamment celles de $\bar{\mathcal{W}}$, $\bar{\mathbf{F}}$, $\bar{\mathbf{D}}$ et $\bar{\mathcal{J}}$), il suffit de remplacer le couple (\mathbf{F}, \mathbf{D}) par $1 *_\epsilon (\mathbf{F}, \mathbf{D}) \equiv \epsilon(\mathbf{F}, \mathbf{D})$ dans l'expression de \bar{e} donnée à la section 2.2.2.

La construction générale d'une ϵpt -symétrie ainsi réalisée est résumé dans la figure 2.2.

Cette formulation coïncide bien avec ce que nous avions fait dans le cas d'une particule chargée plongée dans un champ magnétique (cf. équations (2.21)–(2.22)) puisque dans ce cas, en choisissant pour ϵ l'application qui inverse le sens du champ magnétique, et en notant \mathcal{P}_B la probabilité “forward” (i.e. du système avant renversement du temps), on trouve que la probabilité de chemins renversée en temps est bien :

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{P}_B}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] &\equiv [1 *_{\epsilon pt} \mathcal{P}_B][(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= [1 *_{pt} (1 *_\epsilon \mathcal{P}_B)][(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= [1 *_{pt} \mathcal{P}_{-B}][(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= \mathcal{P}_{-B}[(\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}}] \end{aligned}$$

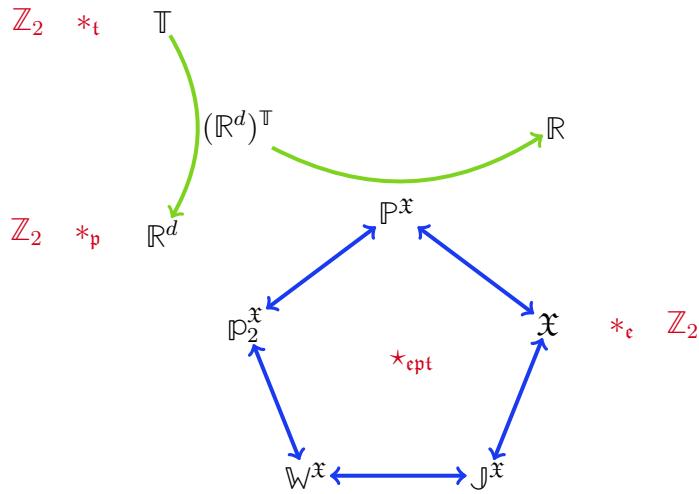


Figure 2.2 – Résumé de la construction d’un “renversement du temps” (étendu), formalisé par une action \star_{ept} de \mathbb{Z}_2 sur les espaces \mathbb{Z}_2 -équivalents \mathbb{P}^x , \mathbb{P}_2^x , \mathbb{W}^x , \mathbb{J}^x et \mathfrak{X} , décrivant la dynamique (2.39). Cette action \star_{ept} est construite à partir d’actions élémentaires $*_t$, $*_p$ et $*_e$ agissant respectivement sur le temps \mathbb{T} , l’espace des états \mathbb{R}^d et l’espace \mathfrak{X} des champs de force et des matrices de corrélation du bruit. Le code couleur est le même que celui de la figure 2.1.

L’intérêt d’une telle formulation est notamment de voir immédiatement que, pour n’importe quelle involution linéaire \mathfrak{p} sur \mathbb{R}^d (donc notamment $\mathfrak{p} = id_{\mathbb{R}^d}$) et tout processus stochastique $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ solution de (2.39) pour un couple $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$ quelconque, on peut trouver une modification du champ de force \mathbf{F} (et éventuellement de \mathbf{D}) qui “compense” le renversement du temps (*i.e.* la PT-symétrie définie par \mathfrak{p} et t). Cette modification de (\mathbf{F}, \mathbf{D}) étant donnée par l’action de $1 \in \mathbb{Z}_2$ via $*_e \equiv \star_{\mathfrak{p}t}^{\mathfrak{X}}$. En effet, on voit immédiatement que prendre $*_e \equiv \star_{\mathfrak{p}t}^{\mathfrak{X}}$ conduit à une action \star_{ept} sur \mathbb{P}^x égale à l’identité :

$$1 \star_{\text{ept}} \mathcal{P} = 1 \star_{\mathfrak{p}t} (1 \star_e \mathcal{P}) = 1 \star_{\mathfrak{p}t} (1 \star_{\mathfrak{p}t} \mathcal{P}) = (1 + 1) \star_{\mathfrak{p}t} \mathcal{P} = 0 \star_{\mathfrak{p}t} \mathcal{P} = \mathcal{P}. \quad (2.65)$$

Ainsi, n’importe quelle équation stochastique est invariante sous une telle ept -symétrie (puisque celle-ci est l’identité), *i.e.* *n’importe quelle équation stochastique possède une EPT-symétrie*⁸.

Plus concrètement, ces EPT-symétries “universelles” consistent à : appliquer une PT-symétrie dans la probabilité de chemin \mathcal{P} ; cette symétrie transforme le couple $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \mapsto 1 \star_{\mathfrak{p}t}^{\mathfrak{X}} (\mathbf{F}, \mathbf{D})$; l’action $*_e = \star_{\mathfrak{p}t}^{\mathfrak{X}}$ consiste alors à ré-inverser le champ

8. Même une infinité, puisque \mathfrak{p} est quelconque dans cette construction.

de force (et éventuellement la matrice de diffusion si nécessaire) : $1 \star_{\text{pt}}^{\mathfrak{X}} (\mathbf{F}, \mathbf{D}) \rightarrow (\mathbf{F}, \mathbf{D})$, ce qui re-donne la mesure initiale.

Notons que la transformation (2.28)–(2.29) appliquée au système magnétique décrit par les équations (2.21)–(2.22), qui permet de retrouver l'entropie thermodynamique à partir d'une entropie informationnelle, est exactement de cette nature, *i.e.* elle coïncide avec \star_{cpt} pour $*_{\epsilon} \equiv \star_{\text{pt}}^{\mathfrak{X}}$ et $\mathbf{p}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv (\mathbf{r}, -\mathbf{v})$. Mieux, toute EPT-symétrie qui laisse invariante un système donné (*i.e.* pour laquelle le système est réversible au sens (**D3**)) coïncide, pour ce système, avec une action “universelle” \star_{cpt} , où $*_{\epsilon} = \star_{\text{pt}}^{\mathfrak{X}}$ (pour un certain \mathfrak{p}) ! Ceci n'est peut-être pas évident quand on regarde l'action \star_{cpt} au niveau de l'espace $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, car une part de la transformation réalisée dans la probabilité de chemin provient d'un renversement du temps (et éventuellement de certains degrés de liberté), tandis qu'une autre consiste à modifier directement la force (et éventuellement la matrice de diffusion). Mais c'est clair quand on examine l'action \star_{cpt} dans l'espace \mathfrak{X} : pour que le système soit cpt -réversible, il faut précisément que l'involution ϵ fasse la transformation inverse de celle induite par la pt -symétrie.

Enfin, ce résultat “d'EPT-symétrie universelle” suggère fortement qu'*il n'est pas possible de dégager de propriété générale des systèmes EPT-symétriques* — comme nous le faisons notamment à la prochaine section 2.3 pour les systèmes (P)T-symétriques — puisqu'ils le sont finalement tous. Néanmoins, la notion de PT-symétrie Étendue a son importance, notamment parce qu'elle permet de faire coïncider l'entropie informationnelle et l'entropie thermodynamique dans certains systèmes tels que celui de la particule chargée en champ magnétique (cf. (2.21)–(2.22)).

2.3 Réversibilité et courants de probabilité

2.3.1 T-symétrie des systèmes sur-amortis & courants de probabilité

On s'intéresse dans cette section à des systèmes ne comprenant pas de variable “naturellement” impaire sous renversement du temps. Ces systèmes doivent donc, en particulier, être sur-amortis, i.e. évoluer dans des conditions telles que les effets inertiels soient négligeables devant les frottements visqueux. De plus, on s'intéresse seulement aux propriétés de tels systèmes vis à vis de la “symétrie temporelle” consistant simplement à renverser la variable de temps. Autrement dit, on s'intéresse seulement au système dont l'étude de l'irréversibilité se ramène à l'étude de leur comportement sous T-symétrie.

On reprend les notations de l'équation (2.39) :

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.66)$$

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$. On suppose néanmoins ici que la matrice de corrélation du bruit est l'identité, i.e. $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = 2\delta^{\alpha\beta}\delta(t-t')$. Bien que cette hypothèse semble restreindre la généralité des résultats qui sont présentés dans cette section, on peut montrer qu'il est toujours possible de se ramener à une configuration similaire — de mouvement brownien biaisé — en définissant une métrique courbe et en ajoutant un terme supplémentaire de force effective(voir appendice I et [49]), ce qui ne modifie pas “moralement” les conclusions de cette section.

On veut maintenant étudier les propriétés de réversibilité de l'équation (2.66) vis à vis de la T-symétrie. On peut montrer que le système est irréversible si et seulement s'il existe une trajectoire $C_{A \rightarrow B}$, allant d'un point A à un point B , qui a plus de chance d'être parcourue que sa trajectoire inverse $C_{B \rightarrow A}$ (cf. appendice E). Une première intuition, naïve, serait de dire que, le terme stochastique du bain étant isotrope, la particule a toujours plus de chance de “descendre les lignes de flot de \mathbf{F} ” que de les “remonter”, donc que le système est irréversible dès qu'il est soumis à un champ de force \mathbf{F} non nul. En fait, cette intuition s'applique non pas aux probabilités “totales” de parcourt $\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B}]$ vs. $\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A}]$, mais aux probabilités de parcourt *conditionnées aux points de départ* : $\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A]$ vs. $\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B]$. En effet

$$\frac{\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A]}{\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B]} = e^{W_{A \rightarrow B}}, \quad \text{avec} \quad W_{A \rightarrow B} \equiv \int_{\mathbb{T}} \mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{X}}_t dt \quad (2.67)$$

où $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est (une paramétrisation de) la trajectoire $C_{A \rightarrow B}$. Si cette trajectoire “descend les lignes de flot de \mathbf{F} ”, c'est à dire si $W_{A \rightarrow B}$ est positif, alors on a bien

que $\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A] > \mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B]$. Néanmoins l'examen de la formule des probabilités conditionnelles :

$$\frac{\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B}]}{\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A}]} = \frac{\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A] p_{ss}(A)}{\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B] p_{ss}(B)} \quad (2.68)$$

montre que le travail $W_{A \rightarrow B}$ peut être “compensé” par le fait que la probabilité d’être en B soit plus importante que celle d’être en A . Une autre manière de formuler cela est de prendre le log de l’équation (2.68), qui donne une version trajectorielle [93] de la décomposition que fait le second principe de la thermodynamique de la variation d’entropie, entre chaleur et entropie produite :

$$\hat{\Sigma}_{A \rightarrow B} = \hat{Q}_{A \rightarrow B} + \Delta \hat{S}_{A \rightarrow B} \quad (2.69)$$

où $\Sigma_{A \rightarrow B} \equiv \log(\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B}] / \mathcal{P}[C_{B \rightarrow A}])$ est l’entropie produite en parcourant la trajectoire $C_{A \rightarrow B}$ (qui peut être négative), $\hat{Q}_{A \rightarrow B} \equiv \log(\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A] / \mathcal{P}[B \rightarrow A | \mathbf{x}_0 = B]) = W_{A \rightarrow B}$ est la chaleur transmise au bain⁹, et $\Delta \hat{S}_{A \rightarrow B} \equiv -\log p_{ss}(B) + \log p_{ss}(A)$ est la variation de l’entropie de Shannon “trajectorielle” $\hat{S}(\mathbf{x}) \equiv -\log p_{ss}(\mathbf{x})$ entre les points A et B . La “compensation” mentionnée plus haut correspond alors à celle de $\hat{Q}_{A \rightarrow B}$ par $\Delta \hat{S}_{A \rightarrow B}$ qui conduit bien à une production trajectorielle d’entropie nulle $\hat{\Sigma}_{A \rightarrow B} = 0$. Lorsque cette compensation a lieu pour toutes les trajectoires, on a bien la propriété de bilan détaillé

$$\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A] p_{ss}(A) = \mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B] p_{ss}(B) , \quad (2.70)$$

i.e. le processus étudié est bien réversible. On sait que cette compensation systématique (i.e. pour toutes les trajectoires) est notamment réalisée lorsque le champ de force dérive d’un potentiel $\mathbf{F} = -\nabla V$, auquel cas la mesure d’équilibre est une mesure de Gibbs–Boltzmann : $p_{ss}(\mathbf{x}) = e^{-V(\mathbf{x})}/Z$. On peut alors se demander s’il existe des champs de force qui ne dérivent pas d’un potentiel, mais pour lesquels la “compensation” est néanmoins possible. Comme on l’a vu à la section 2.2.2, la réponse est négative, puisque la réversibilité du processus implique d’après l’équation (2.59) :

$$\mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}} = 2\mathbf{D}\nabla \log p_{ss} - \mathbf{F} \quad i.e. \quad \mathbf{F} = \nabla \log p_{ss} . \quad (2.71)$$

9. $W_{A \rightarrow B}$ ne correspond pas au “travail de l’opérateur” apparaissant dans le premier principe de la thermodynamique (stochastique). En effet, un tel travail (infinitésimal) d’un opérateur serait donné par $\partial_\lambda V(\mathbf{r})d\lambda$, où le système serait soumis à une force $-\nabla_{\mathbf{r}} V_\lambda(\mathbf{r})$, paramétrée par un paramètre λ que l’opérateur ferait varier au cours d’une transformation. $W_{A \rightarrow B}$ est le travail du champ de force (fixe) sur la particule. Celui-ci correspond à une variation d’énergie potentielle du système. Le système étant sur-amorti, l’énergie de la particule est réduite à cette énergie potentielle. Le travail de l’opérateur étant nul, on a bien égalité entre flux de chaleur et variation du potentiel.

Pour comprendre ce résultat, il suffit de regarder le problème de création d'entropie trajectorielle en ne considérant que des trajectoires fermées, i.e. des boucles. Pour de telles trajectoires, le travail de \mathbf{F} ne peut pas être compensé par la variation de l'entropie de Shannon trajectorielle. S'il existe une boucle orientée C^+ qu'il est plus probable de parcourir que la boucle d'orientation inverse C^- , alors la production d'entropie de C^+ est

$$\Sigma_{C^+} \equiv \log \frac{\mathcal{P}[C^+]}{\mathcal{P}[C^-]} = \oint_{C^+} \mathbf{F} \cdot d\vec{\ell} = \int_{\Omega} \nabla \times \mathbf{F} \cdot d\vec{S} \quad (2.72)$$

où Ω est une surface orientée dont le bord est C^+ . Ainsi dès que \mathbf{F} possède une composante rotationnelle, l'entropie produite est strictement positive, et le système est donc hors équilibre.

On peut par ailleurs démontrer [93] que le taux de production d'entropie σ est donnée par

$$\sigma = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{J}_{ss}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} . \quad (2.73)$$

où

$$\mathbf{J}_{ss}(\mathbf{x}) \equiv \mathcal{J}([p_{ss}], \mathbf{x}) \quad (2.74)$$

est le courant de probabilité à l'état stationnaire. Or, le courant stationnaire étant de divergence nulle, il existe un champ de vecteurs \mathbf{W} sur \mathbb{R}^d tel que

$$\mathbf{J}_{ss}(\mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{W}(\mathbf{x}) . \quad (2.75)$$

On peut donc réécrire la production d'entropie¹⁰ :

$$\sigma = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{W}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.76)$$

Ainsi, *le rotationnel de \mathbf{F}* peut être vu comme *la source de la production d'entropie*, et le vecteur $\mathbf{W}(\mathbf{x})$ comme un poids sur les boucles infinitésimales aux voisinage de \mathbf{x} .

Notons que les formules (2.72) et (2.76) ont été exprimées à l'aide de l'opérateur rotationnel, qui n'existe qu'en dimension $d = 3$. En dimensions quelconque (finie), cet opérateur est simplement remplacé par la dérivée extérieure de la 1-forme associée à \mathbf{F} . De plus, la dernière égalité de l'équation (2.72) a été obtenue en utilisant le théorème de Stokes. L'application de ce théorème est conditionnée au fait que l'espace d'évolution de la particule soit simplement connexe. Lorsque ce n'est pas le cas, et que la particule évolue sur un tore par exemple, il existe des boucles qui font le tour de "trous". Il existe alors une source supplémentaire d'entropie (i.e. autre que $\nabla \times \mathbf{F}$), c'est la composante harmonique de la décomposition de Hodge

10. En utilisant la formule d'analyse vectoriel $\nabla \cdot A \times B = -A \cdot \nabla \times B + B \cdot \nabla \times A$.

de \mathbf{F} , qui quantifie justement la propension de \mathbf{F} à tourner autour des “trous” de la variété.

Enfin, on conclut que l’irréversibilité *vis à vis de la T-symétrie* est — entre autres — équivalente à $\mathbf{J}_{ss} = 0$, ce qui, dans un espace simplement connexe tel que \mathbb{R}^d , est également équivalent à $\nabla \times \mathbf{F} = 0$ (ou sa généralisation à l’aide de la dérivée extérieure en dimension supérieure à 3). La généralisation de ce résultat aux théories des champs — cadre adapté à l’étude des comportements collectifs — fait l’objet du chapitre 5.

2.3.2 PT-symétrie : bilan détaillé & courants projetés dans l'espace réel

Dans cette section on montre que certains résultats de la section précédente 2.3.1 se généralisent aux symétries temporelles nécessitant un “renversement” de certains degrés de liberté, i.e. aux PT-symétries.

Puisqu’on a supposé (cf. section 2.2.2) que l’application \mathfrak{p} qui renverse certains degrés de liberté est une symétrie vectorielle, on peut décomposer l’espace des états du système en la somme directe $\mathbb{R}^d = \mathbb{V}^1 \oplus \mathbb{V}^2$, telle que les restrictions de \mathfrak{p} à ces sous-espaces soient $\mathfrak{p}|_{\mathbb{V}^1} = id_{\mathbb{V}^1}$ et $\mathfrak{p}|_{\mathbb{V}^2} = -id_{\mathbb{V}^2}$ respectivement. On appellera \mathbb{V}^1 le *facteur invariant* (sous renversement du temps) de l’espace des états.

Si $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, on note \mathbf{x}^1 et \mathbf{x}^2 ses composantes selon \mathbb{V}^1 et \mathbb{V}^2 , respectivement. Pour toute fonction f qui contient une variable de \mathbb{R}^d , de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \dots \times \mathbb{R}^d$, voir de $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{T}}$, on note f^{pr} sa projection (ou marginale) sur le facteur invariant :

$$f^{\text{pr}} \equiv \int f d\mathbf{x}^2, \quad f^{\text{pr}} \equiv \int f d\mathbf{x}_1^2 \dots d\mathbf{x}_n^2 \quad \text{ou} \quad f^{\text{pr}} \equiv \int f \mathcal{D}[\mathbf{x}^2(t)].$$

La fonction obtenue est alors seulement définie sur \mathbb{V}^1 , $\mathbb{V}^1 \times \dots \times \mathbb{V}^1$, ou $(\mathbb{V}^1)^{\mathbb{T}}$.

On peut alors montrer que la projection sur le facteur invariant du courant de probabilité stationnaire est nulle pour un système PT-symétrique :

$$\mathbf{J}_{ss}^{1,\text{pr}} = 0. \quad (2.77)$$

En effet la projection de l’équation de Fokker-Planck sur \mathbb{V}^1 s’écrit

$$\partial_t p^{\text{pr}} = -\nabla \cdot \mathcal{J}^{1,\text{pr}}[p], \quad \text{où} \quad \mathcal{J}^{1,\text{pr}}[p] \equiv \int_{\mathbb{V}^2} (p \mathbf{F}^1 - [\mathbf{D} \nabla p]^1) d\mathbf{x}^2 \quad (2.78)$$

En effet, puisque le système est à l’équilibre, $p_{ss}^- = p_{ss} \circ \mathfrak{p} = p_{ss}$ d’une part, et $\bar{\mathbf{D}} = \mathbf{D}$ et $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}$ d’autre part. Donc en particulier $\mathbf{F}^1 = \bar{\mathbf{F}}^1 = [2\mathbf{D} \nabla \log p_{ss} - \mathbf{F} \circ \mathfrak{p}]^1$, ce qui implique que

$$\int_{\mathbb{V}^2} p_{ss} \mathbf{F}^1 d\mathbf{x}^2 = \int ([2\mathbf{D} \nabla p_{ss}]^1 - p_{ss} \mathbf{F}^1 \circ \mathfrak{p}) d\mathbf{x}^2 = \int ([2\mathbf{D} \nabla p_{ss}]^1 - p_{ss} \mathbf{F}^1) d\mathbf{x}^2, \quad (2.79)$$

où la seconde égalité est obtenue par le changement de variable $\mathbf{x}^2 \mapsto -\mathbf{x}^2$ dans l'intégrale $\int p_{ss}(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2) \mathbf{F}(\mathbf{x}^1, -\mathbf{x}^2) d\mathbf{x}^2$, sachant que $p_{ss}(\mathbf{x}^1, -\mathbf{x}^2) = p_{ss}(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2)$. L'équation (2.79) permet ensuite de déduire directement que $\mathbf{J}_{ss}^{1,pr} \equiv \mathcal{J}^{1,pr}[p_{ss}] = 0$.

Par ailleurs le PT-bilan détaillé s'écrit au niveau de la probabilité à deux points (dans l'état stationnaire)

$$p(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) = p(\mathbf{p}(\mathbf{y}), T - \tau, \mathbf{p}(\mathbf{x}), T - t) . \quad (2.80)$$

Ou encore

$$p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, \tau) p_{ss}(\mathbf{y}) = p(\mathbf{p}(\mathbf{y}), T - \tau | \mathbf{p}(\mathbf{x}), T - t) p_{ss}(\mathbf{x}) . \quad (2.81)$$

L'intégration de l'équation (2.80) par rapport à \mathbf{x}^2 et \mathbf{y}^2 donne, après changement de variables ($\mathbf{x}^2, \mathbf{y}^2 \mapsto (-\mathbf{x}^2, -\mathbf{y}^2)$) :

$$p(\mathbf{x}^1, t, \mathbf{y}^1, \tau) = p(\mathbf{y}^1, T - \tau, \mathbf{x}^1, T - t) , \quad (2.82)$$

c'est à dire

$$p(\mathbf{x}^1, t | \mathbf{y}^1, \tau) p_{ss}^{pr}(\mathbf{y}^1) = p(\mathbf{y}^1, T - \tau | \mathbf{x}^1, T - t) p_{ss}^{pr}(\mathbf{x}^1) . \quad (2.83)$$

qui est la version usuelle du bilan détaillé pour un système t -symétrique, i.e. où on ne renverse que le temps (on dira aussi un "T-bilan détaillé"). Ainsi pour un système PT-symétrique, on a non seulement un PT-bilan détaillé global (i.e. sur l'espace des états \mathbb{R}^d tout entier) mais également un T-bilan détaillé sur le facteur invariant \mathbb{V}^1 de l'espace des états.

2.4 Irréversibilité et matière active

Le travail détaillé dans les sections précédentes m'a notamment servi à comprendre l'irréversibilité (au sens “du” bilan détaillé (**D3**)) des systèmes passifs et comment elle peut être reliée à l'irréversibilité au sens de la thermodynamique (**D1**) (et au sens des ensembles statistiques (**D2**)). Cette section est le prolongement de mes réflexions, appliquées à une particule active individuelle. Elle comprend une partie important de la publication [P3] de ma liste de publications. Le prolongement de ces réflexions au cas d'ensembles de particules actives en interaction sera présenté aux chapitres 4 et 5.

Considérons une particule active dans un bain thermique, obéissant à la dynamique (sur-amortie) suivante

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \mathbf{v}_t^a - \zeta \nabla V(\mathbf{r}_t) + \sqrt{2D} \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.84)$$

où $\boldsymbol{\eta}_t$ est un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t-t')$, et où $\mathbf{v}^a \equiv \zeta \mathbf{f}^a$, avec ζ la mobilité de la particule et \mathbf{f}^a la force active, i.e. la force d'autopropulsion de la particule.

Chaleur dissipée. Pour étudier l'irréversibilité thermodynamique du système, on calcul la chaleur dissipée dans le bain lors du parcours d'une trajectoire $(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}$ sur un intervalle de temps $\mathbb{T} = [0; \mathcal{T}]$. Celle-ci est donnée par

$$\hat{Q} = - \int_0^{\mathcal{T}} (-\zeta^{-1} \dot{\mathbf{r}}_t + \sqrt{2\zeta^{-2} D} \boldsymbol{\eta}_t) \cdot \dot{\mathbf{r}}_t dt = \int_0^{\mathcal{T}} (\mathbf{f}_t^a - \nabla V(\mathbf{r}_t)) \cdot \dot{\mathbf{r}}_t dt . \quad (2.85)$$

Dans l'état stationnaire, la chaleur moyenne dissipée dans le bain par unité de temps est donc :

$$\frac{\langle \hat{Q} \rangle}{\mathcal{T}} = \langle \mathbf{f}^a \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle , \quad (2.86)$$

où $\langle \cdot \rangle$ désigne, comme toujours dans ce chapitre, la moyenne contre la mesure stationnaire p_{ss} . De manière générique, le travail moyen de la force active étant non nul (voir appendice G pour l'exemple d'une AOUP), un système actif est génériquement hors d'équilibre au sens thermodynamique (**D1**).

PT-symétrie de la dynamique. Intéressons nous maintenant à l'irréversibilité au sens du bilan détaillé (**D3**). La probabilité de chemin associée à la dyna-

mique (2.84) est

$$\begin{aligned}\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}] &= \mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}} | (\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}, \mathbf{r}_0] \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}, \mathbf{r}_0] \\ &= \mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}} | (\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}, \mathbf{r}_0] \mathcal{P}[\mathbf{r}_0 | (\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}] \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= \mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}} | (\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}, \mathbf{r}_0] p_{ss}(\mathbf{r}_0 | \mathbf{v}_0^a) \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= \mathcal{Z}^{-1} \exp \left[\frac{-1}{4D} \int_{\mathbb{T}} \left([\dot{\mathbf{r}}_t - \mathbf{v}_t^a + \zeta \nabla V(\mathbf{r}_t)]^2 - \zeta \Delta V(\mathbf{r}_t) \right) dt \right] p_{ss}(\mathbf{r}_0 | \mathbf{v}_0^a) \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}]\end{aligned}$$

où on a seulement utilisé l'indépendance de \mathbf{r}_0 par rapport aux \mathbf{v}_t^a pour $t > 0$. On considère la transformation linéaire $\mathbf{p}_\varepsilon(\mathbf{v}^a) = \varepsilon \mathbf{v}^a$, où ε peut valoir 0 ou 1. On suppose que la dynamique de l'autopropulsion \mathbf{v}^a est (P)T-symétrique pour l'involution \mathbf{p}_ε , que ε soit égale à 0 ou 1, i.e. on suppose que la mesure de chemin de l'autopropulsion présente les symétries $\mathcal{P}[(\varepsilon \mathbf{v}_{T-t}^a)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}]$, pour $\varepsilon = 0$ et 1. Notons que c'est le cas des modèles stochastiques de particule active les plus employés : RTP, ABP et AOUP¹¹. On a ainsi la probabilité du chemin renversé $(\mathbf{r}_{T-t}, \varepsilon \mathbf{v}_{T-t}^a)_{t \in \mathbb{T}}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}[(\mathbf{r}_{T-t}, \varepsilon \mathbf{v}_{T-t}^a)_{t \in \mathbb{T}}] &= \mathcal{Z}^{-1} \exp \left[\frac{-1}{4D} \int_{\mathbb{T}} \left([-\dot{\mathbf{r}}_t - \varepsilon \mathbf{v}_t^a + \zeta \nabla V(\mathbf{r}_t)]^2 + \zeta \Delta V(\mathbf{r}_t) \right) dt \right] \\ &\quad \times p_{ss}(\mathbf{r}_T | \mathbf{v}_T^a) \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}]\end{aligned}\tag{2.87}$$

Puis la production d'entropie informationnelle

$$\sigma_\varepsilon = \frac{\zeta}{2D} \left[(1 + \varepsilon) \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{f}_t^a \rangle + (1 - \varepsilon) \zeta \langle \mathbf{f}_t^a \cdot \nabla V(\mathbf{r}_t) \rangle \right]\tag{2.88}$$

Tout d'abord, on constate que la production d'entropie informationnelle σ_1 , correspondant à un renversement de la variable temporelle seulement, coïncide bien avec la production d'entropie thermodynamique puisque σ_1 est égale aux flux instantané de chaleur (2.86) divisé par k_B fois la température — en supposant vérifiée la relation d'Einstein $D = \zeta k_B T$.

Par ailleurs, il est difficile d'interpréter σ_{-1} , mais une première observation saute aux yeux : lorsque $\nabla V = 0$, i.e. en l'absence de force extérieur, σ_{-1} s'annule ! Ce résultat met en lumière une symétrie de la dynamique d'une particule active libre (une PT-symétrie au sens défini à la section 2.2). D'après les résultats de la partie 2.3.2, cette symétrie implique en particulier un T-bilan détaillé pour la dynamique projetée sur l'espace réel (cf. équation (2.83)) — i.e. après intégration de l'autopropulsion \mathbf{v}^a — ainsi que l'absence de tout courant de probabilité projeté dans ce même espace (cf. équation (2.77)). Physiquement, cela signifie que, pour une particule active libre¹², il est impossible de distinguer une trajectoire

11. Ceux-ci étant T-symétriques et isotropes.

12. Cette particule active peut, par exemple, évoluer dans un espace avec conditions aux bords périodiques, où dans un contenant très grand devant la taille typique de la particule, que l'on observerait loin des bords.

“forward” d’une trajectoire “backward” en observant seulement la position \mathbf{r}_t de la particule (voir figure 2.3). De plus, on constate que la positivité de σ_{-1} implique qu’à l’état stationnaire, “il est plus probable que la force active s’oppose à la force $-\nabla V$, plutôt qu’elle n’aille dans le même sens”. Intuitivement, on sent bien qu’il est d’autant plus probable qu’une particule active “remonte” le potentiel si son autopropulsion l’y aide. Ainsi, bien que ne correspondant pas à la production d’entropie thermodynamique, σ_{-1} fournit des informations importantes sur la dynamique active.

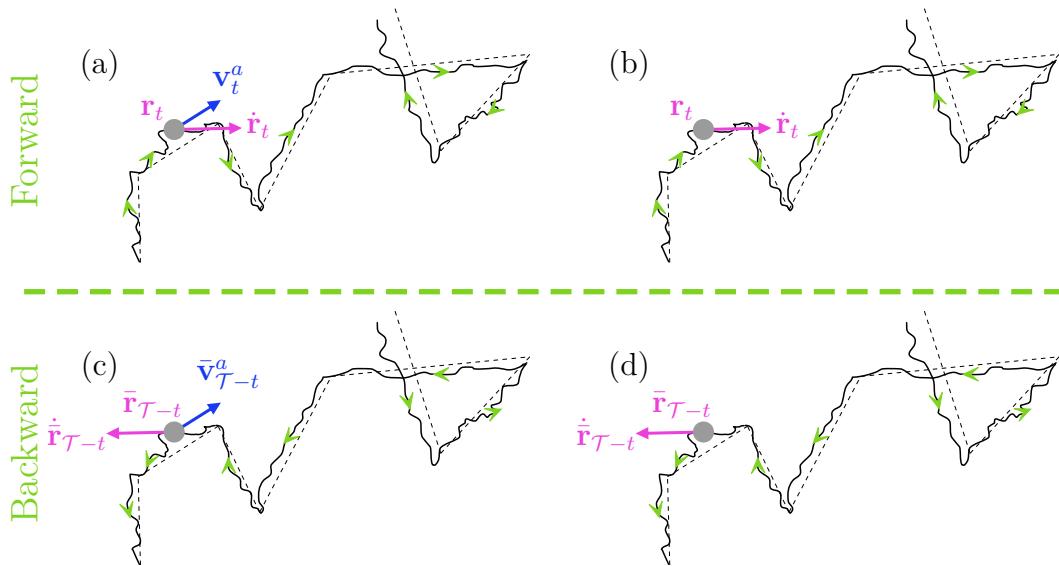


Figure 2.3 – Trajectoires d’une RTP soumise à un bruit thermique (translationnel). La particule est représentée par un disque, sa vitesse est représentée par un vecteur rose, et la direction de son autopropulsion par un vecteur bleu (lorsque celle-ci est mesurée). La trajectoire sans bruit thermique est tracée en pointillés, et la direction du temps est symbolisée par des flèches vertes. On peut enregistrer la position et l’orientation de la particule (a), ou seulement sa position (b). Les trajectoires renversées en temps (T-symétriques) de (a) et (b) sont représentées en (c) et (d) respectivement. Elles n’ont clairement pas la même probabilité d’être observées puisque la réalisation du bruit doit s’opposer à l’autopropulsion dans (c), mais pas nécessairement dans (d). (Figure adaptée de [72].)

Mesure stationnaire. Qu’en est-il de l’irréversibilité de la dynamique active (2.84) au sens (**D2**) des “ensembles statistiques”? *i.e.* la mesure stationnaire associée à l’équation (2.84) est-elle une mesure de type Gibbs–Boltzmann? On va supposer à partir de maintenant que le bruit translationnel de l’équation (2.84) est négligeable, *i.e.* $D = 0$, de telle sorte que \mathbf{v}^a est la seule source de stochasticité de la dynamique (2.84). De plus on va s’intéresser seulement à la marginale en espace $p_{ss}(\mathbf{r})$ associée (2.84). Cette question a été examinée en dimension quelconque, et dans les cas où le processus d’autopropulsion \mathbf{v}^a évolue via : des culbutes (ou “tumbles”) [4, 91, 106]; une diffusion angulaire [97, 115]; ou un processus d’Ornstein–Uhlenbeck [39, 105]. Dans chacun de ces cas, on peut définir un temps de persistance τ , une vitesse typique d’autopropulsion v_0 , une longueur de persistance $\ell_p = v_0\tau$, et un coefficient de diffusion à grande échelle $D_{\text{eff}} \propto \ell_p^2/\tau$. Dans la limite $\tau \rightarrow 0$, à D_{eff} fixé, la dynamique active devient équivalente à une dynamique passive réversible (au sens de chacune des trois définitions de l’introduction de ce chapitre), et p_{ss} devient une mesure de Gibbs–Boltzmann, où la température effective est donnée par $T_{\text{eff}} = D_{\text{eff}}/\zeta$.

Cependant lorsque le temps de persistance augmente, le système actif n’est plus réversible, sa mesure stationnaire n’est plus une mesure de Gibbs, et des propriétés impossibles à l’équilibre émergent. Pour s’en rendre compte, il suffit d’examiner les développements de p_{ss} en série de τ obtenus par exemple pour AOUP [12, 39, 64, 66] et RTP [100, 16] en une dimension :

$$p_{ss}(x) = \frac{1}{Z} e^{-V_{\text{eff}}/T_{\text{eff}}} \quad (2.89)$$

où le potentiel effectif est, pour une AOUP :

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(x) &= V(x) - \tau \left[T_{\text{eff}} V''(x) - \frac{1}{2} V'(x)^2 \right] - \tau^2 \left[\frac{T_{\text{eff}}}{2} V^{(4)}(x) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \int^x V'(y)^2 V^{(3)}(y) dy - T_{\text{eff}} V'(x) V^{(3)}(x) - \frac{T_{\text{eff}}}{4} V''(x) \right] + \mathcal{O}(\tau^3) \end{aligned} \quad (2.90)$$

tandis que pour une RTP :

$$V_{\text{eff}}(x) = V(x) - \frac{\zeta \tau}{T_{\text{eff}}} \left[V'(x)^2 + \frac{1}{T_{\text{eff}}} \int^x V'(y)^3 dy \right] + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (2.91)$$

Ainsi, au delà de la limite d’équilibre obtenue pour $\tau \rightarrow 0$, on constate deux effets intéressants à τ fini. D’une part, un potentiel V purement répulsif peut conduire à un potentiel effectif V_{eff} comportant des parties attractives, et ce grâce au terme $-\tau T_{\text{eff}} V''$ chez une AOUP (2.90) et au terme $-\zeta \tau V'^2/T_{\text{eff}}$ chez une RTP (2.91). Bien que dérivé perturbativement, ce résultat fournit une explication heuristique à un trait caractéristique des particules actives : leur accumulation au voisinage

de murs [35, 36, 37, 120]. D'autre part, on observe *l'apparition de termes non locaux dans V_{eff}* , ce qui, une fois encore, donne une explication heuristique aux expériences remarquables menées sur des bactéries qui ont montré qu'un ensemble d'obstacles asymétriques se comporte comme une pompe quand placé au milieu d'une cavité microfluidique [41] (cf. Figure 2.4). Ce phénomène est interdit à l'équilibre, puisqu'une mesure de Gibbs–Boltzmann n'est perturbé que localement (à une constante de renormalisation près) lorsque le potentiel est perturbé localement.

Par ailleurs, il existe des différences notables entre AOUP et RTP, malgré leur limite d'équilibre commune pour $\tau \rightarrow 0$. Chez AOUP, les effets non locaux apparaissent à l'ordre τ^2 , tandis qu'ils surviennent à l'ordre τ pour des RTP. De plus, une AOUP dans un piège harmonique $V(\mathbf{r}) = k|\mathbf{r}|^2/2$ conduit à une distribution stationnaire gaussienne [39, 105], tandis que les ABP et les RTP s'accumulent sur une “ligne d’horizon” $|\mathbf{r}| = v_0/(\zeta k)$ dans la limite de grand τ [7, 25, 29, 97, 107, 108].

Une autre caractéristique notable des systèmes actifs est *l'émergence de courants permanents* de masse lorsque le mouvement isotropique des particules est “rectifié” par la présence d'un potentiel asymétrique [2, 42, 52, 67, 83, 88, 102, 121] (cf. Figure 2.4). La présence de tels courants indique qu'une force moyenne non nulle est exercée par un obstacle asymétrique sur des particules actives. D'après la troisième loi de Newton, ce courant implique l'application d'une force opposée, des particules actives sur l'obstacle. Ceci explique, par exemple, pourquoi une roue asymétrique plongée dans un bain de bactéries fait montrer d'un mouvement moyen de rotation permanent à l'état stationnaire [30, 63, 96].

Il existe encore d'autres propriétés des systèmes actifs qui les distinguent de systèmes passifs à l'équilibre. Certaines d'entre elles, telles que la loi d'Arrhénius modifiée ou encore la brisure de la symétrie d'Onsager-Machlup, sont discutées plus en détail dans la publication [P3].

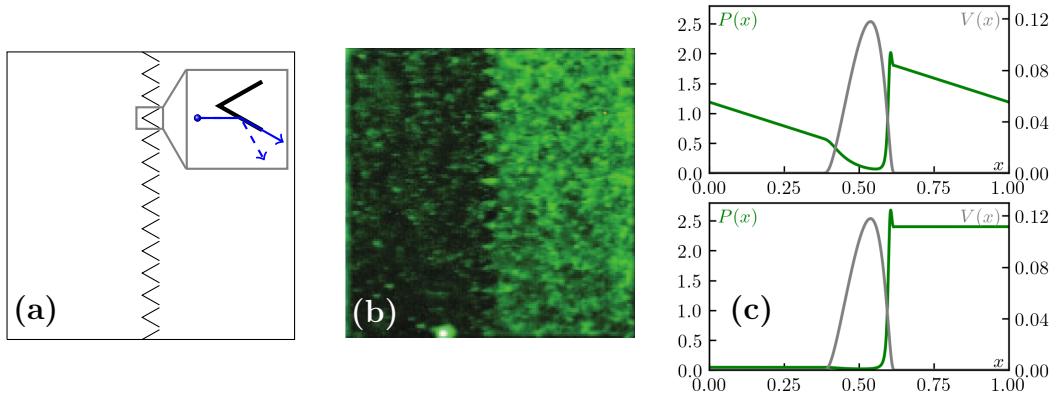


Figure 2.4 – (a) & (b) Chambre microfluidique dans laquelle des bactéries RTP ou des particules colloïdales (passives) peuvent être insérées. Un ensemble d’obstacles asymétriques sépare la cavité en deux parties **(a)**. Tandis que des particules colloïdales mèneraient à une densité uniforme en dehors des obstacles, les bactéries s’accumulent d’un côté du dispositif **(b)**, comme l’indique leurs signaux fluorescents. Extrait de Ref [41]. **L’encart du schéma (a)** : la distribution stationnaire (qui n’est pas du type Gibbs-Boltzmann) peut être vue comme résultant d’un effet de “ratchet” [116]. Celui-ci est induit par l’interaction entre particules et obstacles [107] : remplacer le couple d’alignement ressenti par la bactérie à son contact avec un obstacle (ligne bleue pleine) par une réflexion spéculaire (ligne pointillée bleue) de leur orientation mène à une dynamique T-symétrique et à une densité uniforme. **(c)** Densités stationnaires (courbes vertes) engendrées par un obstacle asymétrique (courbe grise) placé au centre du système. Des conditions aux bords fermées (en bas) mènent à des densités différentes dans les deux compartiments tandis que des conditions aux bords périodiques (en haut) conduisent à un profil linéaire loin de l’obstacle et à un courant permanent non nul.

Appendices

Annexe A

Approche de Jaynes, multiplicateurs de Lagrange et variables thermodynamiques

Les λ_i ne coïncident pas avec les grandeurs intensives thermodynamiques “usuelles” T, μ , etc. En effet, ces dernières ont été définies à partir de la *formulation énergétique* de l’équation fondamentale : $U(S, N, \dots)$, qui donne bien par dérivation $T = \frac{\partial U}{\partial S}$, $\mu = \frac{\partial U}{\partial N}$, etc. Un choix plus naturel [5] (au moins vis à vis de la structure des mesures de Gibbs) aurait été de partir de la *formulation entropique* de l’équation fondamentale $S(U, N, \dots)$ pour définir des grandeurs thermodynamiques intensives telles que $\frac{\partial S}{\partial U}$ ou $\frac{\partial S}{\partial N}$. Celles-ci coïncident bien avec les λ_i mais sont liées aux variables thermodynamiques intensives usuelles via $\frac{\partial S}{\partial U} = 1/T$ et $\frac{\partial S}{\partial N} = -\mu/T$ par exemple.

Pour coller au choix historique des variables thermodynamiques usuelles, il faut en fait définir, en supposant que l’observable A_1 est l’énergie du système :

$$\begin{cases} \alpha_i \equiv -\beta^{-1}\lambda_i , \quad \forall i = 1 \dots n , \quad \text{où } \beta \equiv \lambda_1 \\ \bar{\psi}(\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \equiv \beta^{-1}\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \\ \bar{\Psi}_{\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n}[p] \equiv \beta^{-1}\Psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}[p] \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Les mesures de Gibbs se ré-écrivent alors :

$$p_{\text{Gibbs}}(x) = e^{-\beta \left[-\sum_i \alpha_i A_i(x) - \bar{\psi}(\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \right]} \quad (\text{A.2})$$

Ainsi, au prix du sacrifice de la symétrie entre les variables λ_i , remplacées par $\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, on retrouve bien que, lorsque p est une mesure de Gibbs p_{Gibbs} ,

$\bar{\Psi}_{\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n}[p_{\text{Gibbs}}] = \bar{\psi}(\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$, où $\bar{\psi}$ est le potentiel thermodynamique associé à l'ensemble statistique considéré. Notons que les fonctions $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \Psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}[p_{\text{Gibbs}}]$ sont appelées “potentiels de Massieu”. Ce sont les transformées de Legendre de l'entropie, plutôt que de l'énergie. Ces potentiels sont également extrémalisés à l'équilibre thermodynamique.

Annexe B

Décroissance de la production d'entropie sous coarse-graining

On illustre ici la décroissance de l'entropie (informationnelle) sous coarse-graining, ou plus précisément sous *marginalisation* :

$$\Sigma \geq \Sigma^{\text{pr}} \quad (\text{B.1})$$

où Σ est la divergence de Kullback-Leibler (ou D_{KL}) entre deux mesures \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2 définies sur un même espace : $\Sigma = D_{KL}(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2)$ et Σ^{pr} est la D_{KL} entre deux marginales $\mathcal{P}_1^{\text{pr}}$ et $\mathcal{P}_2^{\text{pr}}$ de \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2 respectivement (ou l'on a opéré la même marginalisation sur les deux mesures). En effet, si on suppose par exemple que ces deux mesures sont des probabilités de chemins sur un espace de phase, on peut intégrer la vitesse pour obtenir :

$$\begin{aligned} \Sigma &= D_{KL}(\mathcal{P}_1 | \mathcal{P}_2) \\ &= \int D[\mathbf{r}_t] D[\mathbf{v}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t] \log \frac{\mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t]}{\mathcal{P}_2[\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t]} \\ &= \int D[\mathbf{r}_t] D[\mathbf{v}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t] \log \frac{\mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t]}{\mathcal{P}_2[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] \mathcal{P}_2[\mathbf{r}_t]} \\ &= \int D[\mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t] \int D[\mathbf{v}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] \log \frac{\mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t]}{\mathcal{P}_2[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t]} + \int D[\mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t] \log \frac{\mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t]}{\mathcal{P}_2[\mathbf{r}_t]} \underbrace{\int D[\mathbf{v}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t]}_{=1} \\ &= \underbrace{\int D[\mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t] \underbrace{D_{KL}(\mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] | \mathcal{P}_2[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t])}_{\geq 0}}_{\geq 0} + \underbrace{D_{KL}(\underbrace{\mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t]}_{\equiv \mathcal{P}_1^{\text{pr}}} | \underbrace{\mathcal{P}_2[\mathbf{r}_t]}_{\equiv \mathcal{P}_2^{\text{pr}}})}_{D_{KL}(\mathcal{P}_1^{\text{pr}} | \mathcal{P}_2^{\text{pr}})} \\ &\geq \Sigma^{\text{pr}} \equiv D_{KL}(\mathcal{P}_1^{\text{pr}} | \mathcal{P}_2^{\text{pr}}) \end{aligned}$$

Annexe C

Action de groupe

Deux définitions équivalentes. Soit G un groupe et X un ensemble. On dit que G agit, ou opère sur X s'il existe une application

$$\begin{aligned} G \times X &\longrightarrow X \\ (g, x) &\longmapsto g \cdot x \end{aligned}$$

telle que

- (i) $\forall x \in X, e \cdot x = x$ où e est le neutre de G .
- (ii) $\forall x \in X, \forall g, g' \in G, g \cdot (g' \cdot x) = (gg') \cdot x$

où on a noté multiplicativement la loi de G . Une telle opération \cdot est appelée *action* de G sur X . On dit encore que X est un *G-ensemble*.

Un définition équivalente consiste à dire que G agit sur X s'il existe un morphisme de groupe

$$\begin{aligned} \phi : G &\longrightarrow S(X) \\ g &\longmapsto \phi_g \end{aligned}$$

où $S(X)$ est l'ensemble des bijection de X dans X . On rappelle que ceci suppose simplement que $\forall g, g' \in G, \phi_{gg'} = \phi_g \circ \phi_{g'}$.

L'équivalence entre les deux définitions est obtenu par la relation $\phi_g(x) = g \cdot x$.

Par ailleurs, notons qu'on vient en fait de définir la notion *d'action à gauche*, et qu'il existe une notion similaire *d'action à droite*.

Involution et action de \mathbb{Z}_2 . Soit s une involution sur un ensemble X , i.e. une application de X dans X telle que $sos = id_X$, où id_X est l'application identité de X .

On définit alors l'application $\phi : \mathbb{Z}_2 \rightarrow S(X)$ telle que $\phi(0) = id_X$ et $\phi(1) = s$. On vérifie aisément que ϕ est bien un morphisme de groupe de $(\mathbb{Z}_2, +)$ dans $(S(X), \circ)$. On peut ainsi associer – de manière naturelle et bijective – à toute involution sur un ensemble une action de \mathbb{Z}_2 sur ce même ensemble, et réciproquement.

Composition d'actions. Soit X un ensemble muni de deux actions d'un même groupe G . On désigne dans ce paragraphe ces actions par les morphismes de groupe associés $\phi : G \rightarrow S(X)$ et $\psi : G \rightarrow S(X)$. On aimerait savoir s'il est possible de construire de nouvelles actions sur X en composant ϕ et ψ , dans un ordre ou dans l'autre :

$$\begin{aligned}\Omega^{(1)} &: G \longrightarrow S(X) \\ g &\longmapsto \Omega_g^{(1)} \equiv \phi_g \circ \psi_g\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\Omega^{(2)} &: G \longrightarrow S(X) \\ g &\longmapsto \Omega_g^{(2)} \equiv \psi_g \circ \phi_g\end{aligned}$$

Puisque $\phi_e = \psi_e = id_X$ (où e est le neutre de G et id_X l'application identité de X), on a bien $\Omega_e^{(i)} = id_X$. Pour que, par exemple, $\Omega^{(1)}$ soit une véritable action de G sur X , il faut de plus que $\Omega_{gg'}^{(1)} = \Omega_g^{(1)} \circ \Omega_{g'}^{(1)}$. Or on a d'une part

$$\Omega_{gg'}^{(1)} = \phi_{gg'} \circ \psi_{gg'} = \phi_g \circ \phi_{g'} \circ \psi_g \circ \psi_{g'}$$

et d'autre part

$$\Omega_g^{(1)} \circ \Omega_{g'}^{(1)} = \phi_g \circ \psi_g \circ \phi_{g'} \circ \psi_{g'}$$

En composant les deux dernières égalités à gauche par $\phi_{g^{-1}}$ et à droite par $\psi_{g'^{-1}}$, on obtient finalement la condition pour que $\Omega^{(1)}$ corresponde bien à une action de groupe : *on doit avoir la commutativité des actions initiales* $\forall g, g' \in G, \phi_{g'} \circ \psi_g = \psi_g \circ \phi_{g'}$. Dans ce cas, $\Omega^{(1)} = \Omega^{(2)}$ correspondent à une même action bien définie, obtenue par composition des deux actions initiales.

Action induite. Si X et Y sont deux G -ensembles, il existe une manière naturelle de définir une action sur l'ensemble Y^X des applications de X dans Y . Si les action de G sur X et Y sont respectivement notées $*$ et \star , on définit l'action \cdot de G sur Y^X par :

$$\forall g \in G, \forall f \in Y^X, \forall x \in X, (g \cdot f)(x) = g \star f(g^{-1} * x)$$

Ceci définit bien une action puisque le neutre de G laisse f inchangée et que

$$\begin{aligned}[(gg') \cdot f](x) &= (gg') \star f[(gg')^{-1} * x] \\ &= g \star [g' \star f[g'^{-1} * (g * x)]] \\ &= [g \cdot (g' \cdot f)](x)\end{aligned}$$

Application équivariante. En reprenant les notations du paragraphe, si $f : X \rightarrow Y$ est une application entre deux G -ensembles, on dit que f est *équivariante* si

$$\forall g \in G, \forall x \in X, f(g * x) = g \star f(x)$$

Notons que ceci est équivalent au fait que f soit *invariante sous l'action induite*. définit au paragraphe précédent.

Transport d'action. La classe des G -ensembles constitue une *catégorie* dont les *morphismes* sont justement les applications équivariantes. Autrement dit, de même que les applications linéaires sont exactement les applications qui préserment la structure d'espace vectoriel, les applications équivariantes sont exactement celles qui préserment la structure de G -ensemble. Cette situation permet de *transporter la structure* d'un ensemble à un autre. L'idée générale est de partir d'un ensemble munie de la structure d'intérêt, de considérer une application de cet ensemble dans un autre (non structuré) et de définir la structure en question sur l'ensemble d'arrivée en décrétant que l'application est un morphisme pour cette structure. Il y a bien évidemment des conditions, spécifiques à chaque structure, à vérifier pour s'assurer que la structure ainsi transportée est définie de manière univoque. Voyons ce que cela donne pour la structure de G -ensemble.

Soit X un ensemble muni d'une action $*$ d'un groupe G . Soit Y un ensemble. Soit $f : X \rightarrow Y$. On voudrait alors définir sur Y une action \star de G en "transportant" celle de X via f . Pour cela, on voudrait définir $\forall y \in Y$,

$$g \star y = f(g * x), \text{ où } x \in f^{-1}(y).$$

On constate d'emblée qu'une première condition nécessaire est la *surjectivité* de f . Ensuite, il faut pour que cette action soit correctement définie, que

$$\forall y \in Y, \forall x, x' \in f^{-1}(y), f(g * x) = f(g * x').$$

Autrement dit, il faut que *l'action de G sur X préserve les pré-images d'éléments de Y par f* . Cette condition permet de définir de manière *univoque* une action sur Y . Cette condition, ajoutée à la surjectivité de f , permet de définir correctement et sans ambiguïté une action sur Y , puisqu'on a bien $(gg') \star y = f[(gg') * x] = f[g * (g' * x)] = g \star (g' \star x)$, ainsi que $e \star y = f(e * x) = f(x) = y$. Notons que, dans les cas où l'action \star peut bien être définie, f est équivariante par construction de \star .

Enfin, on constate que la bijectivité de f est une condition suffisante au transport de l'action de X à Y .

G-ensembles équivalents et points fixes. Soit X et Y deux G -ensembles. On dit qu'ils sont G -équivalents s'il existe une bijection équivariante entre X et Y .

En particulier, si on note f une telle bijection, *tout point fixe* x_0 dans X — i.e. un élément de X tel que $g \cdot x_0 = x_0$ pour tout $g \in G$ — a pour image un élément $y_0 = f(x_0)$ dans Y qui est *également un point fixe* pour l'action de G sur Y . En effet si $g \in G$, $g \cdot y_0 = g \cdot f(x_0) = f(g \cdot x_0) = f(x_0) = y_0$, où on a utilisé l'équivariance de f .

Annexe D

PT-symétrie

D.1 Mesure à deux points et mesure stationnaire

On se donne deux point \mathbf{x} et $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$, ainsi que deux temps $\tau, t \in \mathbb{T}$ avec $\tau \leq t$. En intégrant la relation $\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\mathbf{p}(\mathbf{x}_{\tau-t}))_{t \in \mathbb{T}}]$ sur : toutes les trajectoires atteignant \mathbf{y} au temps τ ; puis sur toutes les trajectoire partant de \mathbf{y} à τ et arrivant en \mathbf{x} à t ; et enfin sur toutes les trajectoire partant de \mathbf{x} à t et arrivant n'importe où à \mathcal{T} , on obtient la mesure à deux points du processus pt-dual :

$$\bar{p}(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) = p(\mathbf{p}(\mathbf{y}), \mathcal{T} - \tau, \mathbf{p}(\mathbf{x}), \mathcal{T} - t) \quad (\text{D.1})$$

Notons que les processus duals \mathbf{X}_t et $\bar{\mathbf{X}}_t$ étant dans leur état stationnaire par hypothèse, si on fait tendre $t \mapsto \tau$ dans l'équation précédente (D.1), on obtient :

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\bar{p}_{ss}(\mathbf{y}) = \delta(\mathbf{p}(\mathbf{x}) - \mathbf{p}(\mathbf{y}))p_{ss}(\mathbf{p}(\mathbf{x})) = \frac{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{|\det J_{\mathbf{p}}|}p_{ss} \circ \mathbf{p}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})p_{ss} \circ \mathbf{p}(\mathbf{x})$$

où la dernière égalité vient du fait que le jacobien $J_{\mathbf{p}}$ de \mathbf{p} est tel que $\det(J_{\mathbf{p}}) = \pm 1$, \mathbf{p} étant une involution. Ainsi, on obtient le lien entre les mesures stationnaires (à un point) de nos deux processus adjoints :

$$\bar{p}_{ss} = p_{ss} \circ \mathbf{p} \quad (\text{D.2})$$

D.2 Opérateur adjoint – expression formelle

On démontre ici que l'opérateur d'évolution $\bar{\mathcal{W}}$ du processus adjoint a pour expression formelle :

$$\bar{\mathcal{W}} = \mathfrak{P}p_{ss}\mathcal{W}^\dagger p_{ss}^{-1}\mathfrak{P} \quad (\text{D.3})$$

où l'opérateur \mathfrak{P} agit sur les fonctions $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ via $\mathfrak{P}f : \mathbf{x} \mapsto f \circ \mathfrak{p}(\mathbf{x})$, et où \mathcal{W}^\dagger est l'opérateur dual de \mathcal{W} au sens \mathbb{L}^2 (pour la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d).

Pour ce faire, on utilise le fait que le “propagateur” $p(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau)$ satisfait l'équation “backward” de Kolmogorov : $\partial_\tau p(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau) = -\mathcal{W}_\mathbf{y}^\dagger p(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau)$ — où l'indice de \mathcal{W}^\dagger indique la variable à laquelle l'opérateur s'applique — tandis que le propagateur du processus dual satisfait l'équation de Kolmogorov forward (Fokker-Planck) $\partial_t \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau) = \bar{\mathcal{W}}_\mathbf{x} \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau)$. On obtient :

$$\begin{aligned}
\partial_t \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau) &= \partial_t \bar{p}(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) \\
&= \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) \partial_t p(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), T - \tau, \mathfrak{p}(\mathbf{x}), T - t) \\
&= -\bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial(T-t)} p(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), T - \tau | \mathfrak{p}(\mathbf{x}), T - t) p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \\
&= \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \mathcal{W}_{\mathfrak{p}(\mathbf{x})}^\dagger p(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), T - \tau | \mathfrak{p}(\mathbf{x}), T - t) \\
&= \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \mathcal{W}_{\mathfrak{p}(\mathbf{x})}^\dagger p(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), T - \tau, \mathfrak{p}(\mathbf{x}), T - t) p_{ss}^{-1}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \\
&= \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \mathcal{W}_{\mathfrak{p}(\mathbf{x})}^\dagger p_{ss}^{-1}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \bar{p}(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) \\
&= p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \mathcal{W}_{\mathfrak{p}(\mathbf{x})}^\dagger p_{ss}^{-1}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau) \\
&= \mathfrak{P} p_{ss}(\mathbf{x}) \mathcal{W}_\mathbf{x}^\dagger p_{ss}^{-1}(\mathbf{x}) \mathfrak{P} \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau)
\end{aligned}$$

D.3 Opérateur adjoint – expression explicite

On démontre ici que l'opérateur d'évolution adjoint $\bar{\mathcal{W}}$ a pour expression explicite

$$\bar{\mathcal{W}}\psi = -\nabla \cdot \left[\left(2J_\mathfrak{p} \mathbf{D} J_\mathfrak{p}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_\mathfrak{p} F \circ \mathfrak{p} \right) \psi - J_\mathfrak{p} \mathbf{D} J_\mathfrak{p}^t \nabla \psi \right] \quad (\text{D.4})$$

Pour cela, on prend $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction lisse.

$$\begin{aligned}
\bar{\mathcal{W}}^\dagger f &= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \mathcal{W} p_{ss} \mathfrak{P} f \\
&= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left(-\nabla \cdot p_{ss} F \mathfrak{P} f + \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla p_{ss} \mathfrak{P} f \right) \\
&= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left(-p_{ss} F \cdot \nabla f \circ \mathfrak{p} \underbrace{-f \circ \mathfrak{p} \nabla \cdot p_{ss} F + f \circ \mathfrak{p} \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla p_{ss}}_{=0 \text{ car } p_{ss} \text{ est stationnaire}} \right. \\
&\quad \left. + 2 \nabla p_{ss} \cdot \mathbf{D} \nabla f \circ \mathfrak{p} + p_{ss} \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla f \circ \mathfrak{p} \right) \\
&= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left(-p_{ss} F \cdot \mathfrak{P} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f + 2 \nabla p_{ss} \cdot \mathbf{D} \mathfrak{P} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f + p_{ss} \nabla \cdot \mathbf{D} \mathfrak{P} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f \right) \\
&= -F \circ \mathfrak{p} \cdot J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f + 2 \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f \cdot \mathfrak{P} \nabla \log p_{ss} + \nabla \cdot J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f \\
&= -F \circ \mathfrak{p} \cdot J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f + 2 \nabla f \cdot J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} + \nabla \cdot J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f \\
&= \left[2 J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} F \circ \mathfrak{p} \right] \cdot \nabla f + \nabla \cdot J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f
\end{aligned}$$

Dans le calcul ci-dessus, on a essentiellement utilisé le fait que $\nabla f \circ \mathfrak{p} = \mathfrak{P} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f$. Il suffit enfin de transposer l'opérateur $\bar{\mathcal{W}}^\dagger$ (au sens \mathbb{L}^2) pour obtenir l'opérateur $\bar{\mathcal{W}}$.

Annexe E

Irréversibilité globale et existence d'une trajectoire irréversible

On démontre que l'irréversibilité au sens de la T-symétrie est équivalente à l'existence d'un chemin $C_{A \rightarrow B}$ entre deux points A et B tel que $\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B}] \neq \mathcal{P}[C_{B \rightarrow A}]$.

Pour toute trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathcal{T}}$, on pose $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathcal{T}} \equiv (\mathbf{x}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathcal{T}}$. On calcule la production d'entropie sur l'intervalle $\mathbb{T} = [0; \mathcal{T}]$:

$$\begin{aligned}\Sigma &= \int D[\mathbf{x}_t] \mathcal{P}[\mathbf{x}_t] \log \frac{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]}{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]} \\ &= \frac{1}{2} \left(\int D[\mathbf{x}_t] \mathcal{P}[\mathbf{x}_t] \log \frac{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]}{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]} + \int D[\bar{\mathbf{x}}_t] \mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t] \log \frac{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]}{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]} \right) \\ &= \frac{1}{2} \int D[\mathbf{x}_t] \left(\mathcal{P}[\mathbf{x}_t] - \mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t] \right) \log \frac{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]}{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]}\end{aligned}$$

où on a simplement groupé les trajectoires $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathcal{T}}$ et leur T-symétrique $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathcal{T}}$. Or la fonction $(x, y) \in (\mathbb{R}_+^*)^2 \mapsto (x - y) \log(x/y)$ étant partout positive ou nulle, on a $(\mathcal{P}[\mathbf{x}_t] - \mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]) \log \frac{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]}{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]} \geq 0$ pour toute trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathcal{T}}$. Ainsi il suffit qu'il existe une unique trajectoire pour laquelle cette dernière quantité soit strictement positive (en supposant continue pour un topologie adéquate) pour que $\Sigma > 0$. Réciproquement, la stricte positivité de Σ implique l'existence d'une telle trajectoire, qu'il est plus probable de parcourir dans un sens que dans l'autre.

Annexe F

Réversibilité de l'équation de Langevin sous-amortie et force gradient

On considère l'équation de Langevin sous-amortie sur \mathbb{R}^d :

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} \quad (\text{F.1})$$

$$m\dot{\mathbf{v}} = -\gamma\mathbf{v} + \mathbf{f}(\mathbf{r}) + \sqrt{2\gamma k_B T}\eta \quad (\text{F.2})$$

où $\eta(t)$ est un bruit blanc gaussien de moyenne nulle et de variance unité. On peut réécrire cette dynamique comme suit :

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{F}(\mathbf{X}) + \Lambda \quad (\text{F.3})$$

avec

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -\gamma\mathbf{v}/m + \mathbf{f}/m \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \gamma k_B T/m^2 \end{pmatrix} \quad (\text{F.4})$$

Si on considère l'involution $\mathfrak{p}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \mapsto (\mathbf{r}, -\mathbf{v})$ alors sa matrice jacobienne est

$$J_{\mathfrak{p}} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (\text{F.5})$$

où \mathbf{I} est la matrice identité de taille $d \times d$. On peut ensuite écrire la force et la matrice de diffusion associé au processus \mathfrak{pt} -inverse

$$\bar{\mathbf{D}} = J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t = \mathbf{D} \quad (\text{F.6})$$

et

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{F}} &= 2\bar{\mathbf{D}}\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{ss} \circ \mathbf{p} - J_{\mathbf{p}}\mathbf{F} \circ \mathbf{p} \\ &= \frac{2\gamma k_B T}{m^2} \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla_{\mathbf{v}} \log p_{ss} \circ \mathbf{p} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\mathbf{v} \\ -\gamma \mathbf{v}/m - \mathbf{f}/m \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Supposons maintenant que le processus considéré soit pt-réversible. Ceci implique d'une part que $p_{ss} \circ \mathbf{p} = p_{ss}$, et d'autre part (ayant déjà $b\bar{D} = \mathbf{D}$) que $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}$. On a ainsi

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ -\gamma \mathbf{v}/m + \mathbf{f}/m \end{pmatrix} = \frac{2\gamma k_B T}{m^2} \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla_{\mathbf{v}} \log p_{ss} \circ \mathbf{p} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\mathbf{v} \\ -\gamma \mathbf{v}/m - \mathbf{f}/m \end{pmatrix} \quad (\text{F.7})$$

c'est à dire

$$\nabla_{\mathbf{v}} \log p_{ss}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = -\frac{m}{k_B T} \mathbf{v} \quad (\text{F.8})$$

Ce qui implique qu'il existe une fonction $\psi(\mathbf{r})$ de la seule variable de position, à valeurs dans \mathbb{R} , telle que la mesure stationnaire s'écrive :

$$p_{ss}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{m|\mathbf{v}|^2}{2k_B T}} e^{-\psi(\mathbf{r})}. \quad (\text{F.9})$$

Mais il existe une condition supplémentaire reliant la force $\mathbf{f}(\mathbf{r})$ et la fonction $\psi(\mathbf{r})$, imposé par la condition de stationnarité de p_{ss} , que l'on trouve en injectant (F.9) dans l'équation de Fokker–Planck associée à la dynamique :

$$\partial_t p_{ss} = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot (p_{ss} \mathbf{v}) - \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left(p_{ss} \left[-\frac{\gamma}{m} \mathbf{v} + \frac{1}{m} \mathbf{f} - \frac{\gamma k_B T}{m^2} \nabla_{\mathbf{v}} \log p_{ss} \right] \right) \quad (\text{F.10})$$

c'est à dire

$$0 = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} p_{ss} - \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (p_{ss} \mathbf{f}(\mathbf{r})) \quad (\text{F.11})$$

ce qui se réécrit, après quelques simplifications :

$$\frac{p_{ss}}{k_B T} \mathbf{v} \cdot [\mathbf{f}(\mathbf{r}) + k_B T \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})]. \quad (\text{F.12})$$

Ceci devant être vrai pour tout \mathbf{r} et tout \mathbf{v} , on a nécessairement que

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = -k_B T \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{F.13})$$

Ainsi la réversibilité au sens du pt-bilan détaillé (qui est équivalente à la réversibilité thermodynamique) a lieu si et seulement si le champ de force $\mathbf{f}(\mathbf{r})$ est un champ gradient, auquel cas la mesure stationnaire est de type Boltzmann–Gibbs ce qui implique que le système est également réversible au sens des ensembles statistiques.

Annexe G

Matière active et chaleur dissipée

Dans cette section, on montre qu'à l'état stationnaire, une AOUP dissipe une énergie strictement positive sous forme de chaleur. On considère la dynamique

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \mathbf{v}_t^a - \zeta \nabla V(\mathbf{r})_t + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\eta}_t \quad (\text{G.1})$$

$$\dot{\mathbf{v}}_t^a = -\frac{1}{\tau} \mathbf{v}_t^a + \sqrt{\frac{2D_a}{\tau^2}} \boldsymbol{\xi}_t \quad (\text{G.2})$$

où ζ est la mobilité de la particule, D_t l'amplitude du bruit translationnel, τ le temps de corrélation de l'autopropulsion et D_a un paramètre de contrôle du bruit actif. $\boldsymbol{\eta}$ et $\boldsymbol{\xi}$ sont quant à eux des bruits blancs gaussiens centrés, de variance unité, et indépendants entre eux. On pose alors

$$\mathbf{X} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{v}^a \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{X}) \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{v}^a - \zeta \nabla V(\mathbf{r}) \\ -\mathbf{v}^a / \tau \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{D} \equiv \begin{pmatrix} D_t & 0 \\ 0 & D_a / \tau^2 \end{pmatrix} \quad (\text{G.3})$$

Ce qui permet de réécrire la dynamique ci-dessus comme suit :

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \sqrt{2} \mathbf{D}^{1/2} \Lambda_t \quad (\text{G.4})$$

où

$$\Lambda_t \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{\eta}_t \\ \boldsymbol{\xi}_t \end{pmatrix}. \quad (\text{G.5})$$

Une légère généralisation du calcul (2.5) effectué à la section 2.1 dans la cas de l'équation de Langevin sur-amortie permet de conclure que la production d'entropie informationnelle associée à la T-symétrie de notre particule d'Ornstein-Uhlenbeck est donnée par

$$\sigma = \langle \dot{\mathbf{X}}_t \cdot \mathbf{D}^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) \rangle \quad (\text{G.6})$$

où les crochets indiquent la moyenne contre la mesure stationnaire. On peut développer un peu plus l'expression de σ :

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{1}{D_t} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{v}_t^a - \zeta \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}_t) \rangle - \frac{\tau}{D_a} \langle \dot{\mathbf{v}}_t^a \cdot \mathbf{v}^a \rangle \\ &= \frac{1}{D_t} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{v}_t^a \rangle - \frac{\zeta}{D_t} \frac{d}{dt} \zeta \langle V(\mathbf{r}_t) \rangle - \frac{\tau}{2D_a} \frac{d}{dt} \langle |\mathbf{v}^a|^2 \rangle\end{aligned}$$

Mais puisque l'on est dans l'état stationnaire :

$$\sigma = \frac{1}{D_t} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{v}_t^a \rangle \quad (\text{G.7})$$

Or, on a vu dans la section 2.3.1 que le taux de production d'entropie d'une dynamique de la forme (G.4) s'annulessi il existe un potentiel scalaire $\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a)$ tel que

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a) = -D \nabla \Omega = - \left(\frac{D_t \nabla_{\mathbf{r}} \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a)}{\frac{D_a}{\tau^2} \nabla_{\mathbf{v}^a} \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a)} \right). \quad (\text{G.8})$$

mais l'expression (G.3) de \mathbf{F} donne d'une part

$$\frac{D_a}{\tau^2} \nabla_{\mathbf{v}^a} \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a) = \frac{1}{\tau} \mathbf{v}^a \quad (\text{G.9})$$

i.e.

$$\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a) = \frac{\tau}{2D_a} |\mathbf{v}^a|^2 + \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{G.10})$$

(où $\psi(\mathbf{r})$ est une fonction de la seule variable \mathbf{r} à valeur dans \mathbb{R}), et d'autre part :

$$\nabla_{\mathbf{r}} \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a) = \frac{\zeta}{D_t} \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) - \frac{1}{D_t} \mathbf{v}^a. \quad (\text{G.11})$$

Ce qui implique donc que

$$\frac{1}{D_t} \mathbf{v}^a = \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) - \frac{\zeta}{D_t} \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (\text{G.12})$$

Ce qui est impossible puisque le membre de gauche est une fonction (non constante) de la variable \mathbf{v}^a tandis que le membre de droite est une fonction de la seule variable \mathbf{r} . Ainsi un tel potentiel Ω pas dans le cas de la dynamique considéré dans cette section.

On peut ainsi conclure que $\sigma > 0$ et donc, à partir de l'équation (G.7), que la force active $\mathbf{f}^a = \zeta^{-1} \mathbf{v}^a$ dissipe bien une quantité strictement positive d'énergie sous forme de chaleur, à l'état stationnaire.

Annexe H

Opérateur d'évolution PT–dual : généralisation aux bruits multiplicatifs

On considère l'EDS suivante, définie sur \mathbb{R}^d au sens de Stratonovich :

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \sqrt{2}\mathbf{A}(\mathbf{X}_t)\boldsymbol{\eta}_t \quad (\text{H.1})$$

où \mathbf{A} est une matrice de taille $d \times d$ et $\boldsymbol{\eta}_t$ est un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. L'opérateur d'évolution associé à l'équation de Fokker–Planck est :

$$\mathcal{W}p = -\nabla \cdot [p\mathbf{F} - \mathbf{A} \cdot \nabla \cdot (\mathbf{A}p)] \quad (\text{H.2})$$

se qui s'écrit, dans une base orthonormale quelconque :

$$\mathcal{W}p = -\partial_i [pF^i - A^{ij}\partial_k (A^{kj}p)] \quad (\text{H.3})$$

Pour une involution linéaire \mathfrak{p} quelconque, l'opérateur \mathfrak{pt} –dual est encore donné par :

$$\bar{\mathcal{W}}^\dagger = \mathfrak{P}p_{ss}^{-1}\mathcal{W}p_{ss}\mathfrak{P} \quad (\text{H.4})$$

On peut alors monter que la forme explicite de $\bar{\mathcal{W}}$ est :

$$\bar{\mathcal{W}}p = -\nabla \cdot [p\bar{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{A}} \cdot \nabla \cdot (\bar{\mathbf{A}}p)] \quad (\text{H.5})$$

avec

$$\bar{\mathbf{A}} = J_{\mathfrak{p}}\mathbf{A} \circ \mathfrak{p} \quad (\text{H.6})$$

et

$$\bar{\mathbf{F}} = 2\bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{A}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{F} \circ \mathfrak{p} + 2\bar{\mathbf{A}} \cdot \nabla \cdot \bar{\mathbf{A}} \quad (\text{H.7})$$

En effet, si f est une fonction suffisamment régulière :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{W}}^\dagger f &= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \mathcal{W} p_{ss} \mathfrak{P} f \\ &= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left\{ -\partial_i [F^i p_{ss} f \circ \mathfrak{p} - A^{ij} \partial_k (A^{kj} p_{ss} f \circ \mathfrak{p})] \right\} \\ &= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left\{ -F^i p_{ss} \partial_i f \circ \mathfrak{p} - f \circ \mathfrak{p} \partial_i F^i p_{ss} + f \circ \mathfrak{p} (\partial_i A^{ij} \partial_k A^{kj} p_{ss}) \right. \\ &\quad \left. + (\partial_i f \circ \mathfrak{p}) (A^{ij} \partial_k A^{kj} p_{ss}) + (\partial_i A^{kj} p_{ss} A^{ij}) (\partial_k f \circ \mathfrak{p}) + A^{kj} p_{ss} A^{ij} (\partial_i \partial_k f \circ \mathfrak{p}) \right\} \\ &= -F^i \circ \mathfrak{p} J_{\mathfrak{p}}^{ji} \partial_j f + (J_{\mathfrak{p}}^{li} \partial_l f) \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} (A^{ij} \partial_k A^{kj} p_{ss} + \partial_k A^{ij} A^{kj} p_{ss}) \\ &\quad + (J_{\mathfrak{p}}^{ni} J_{\mathfrak{p}}^{lk} \partial_n \partial_l f) \mathfrak{P} (A^{ij} A^{kj}) \end{aligned}$$

où on a développé les dérivées partielles, puis simplifié les termes correspondant à la divergence du courant stationnaire, et enfin on a utilisé le fait que $\partial_i f \circ \mathfrak{p} = J_{\mathfrak{p}}^{ji} \mathfrak{P} \partial_j f$. Il suffit maintenant de calculer l'adjoint au sens \mathbb{L}^2 de $\bar{\mathcal{W}}^\dagger$:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{W}} \psi &= \partial_j (\psi J_{\mathfrak{p}}^{ji} F^i \circ \mathfrak{p}) + \partial_n \partial_l (\psi J_{\mathfrak{p}}^{ni} J_{\mathfrak{p}}^{lk} \mathfrak{P} A^{kj} A^{ij}) \\ &\quad - \partial_l \left\{ \psi J_{\mathfrak{p}}^{li} \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} (A^{ij} \partial_k A^{kj} p_{ss} + \partial_k A^{ij} A^{kj} p_{ss}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{H.8})$$

Ce qui, après quelques simplifications, donne :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{W}} \psi &= -\partial_l \left\{ -J_{\mathfrak{p}}^{lk} A^{kj} \circ \mathfrak{p} \partial_n J_{\mathfrak{p}}^{ni} A^{ij} \psi + \left[-J_{\mathfrak{p}}^{li} F^i \circ \mathfrak{p} + 2J_{\mathfrak{p}}^{lk} A^{kj} \circ \mathfrak{p} \partial_n J_{\mathfrak{p}}^{ni} A^{ij} \circ \mathfrak{p} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2J_{\mathfrak{p}}^{li} J_{\mathfrak{p}}^{nk} A^{ij} \circ \mathfrak{p} A^{kj} \circ \mathfrak{p} \partial_n \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} \right] \psi \right\} \end{aligned} \quad (\text{H.9})$$

En posant

$$\bar{A}^{ij} \equiv J_{\mathfrak{p}}^{ik} A^{kj} \circ \mathfrak{p} \quad (\text{H.10})$$

et

$$\bar{F}^l \equiv \bar{A}^{lj} \bar{A}^{nj} \partial_n \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}}^{li} F^i \circ \mathfrak{p} - 2\bar{A}^{lj} \partial_n \bar{A}^{nj} \quad (\text{H.11})$$

on obtient bien le résultat annoncé.

Annexe I

Mouvement brownien biaisé en espace courbe, T-réversibilité et descente de gradient

On considère la même EDS (au sens de Stratonovich) que celle de l'appendice H :

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \sqrt{2}\mathbf{A}(\mathbf{X}_t)\boldsymbol{\eta}_t \quad (\text{I.1})$$

On pose alors $\mathbf{G}(\mathbf{x}) = (\mathbf{A}\mathbf{A}^t)^{-1}(\mathbf{x})$, que l'on suppose définie positive et que l'on va considéré comme un tenseur métrique. Dans un base quelconque $(\mathbf{e}_i)_{i=1,\dots,d}$, on note g^{ij} les coordonnées de \mathbf{G}^{-1} et g_{ij} celle de \mathbf{G} (dans la base duale). Ensuite, on définit la mesure de volume riemannienne

$$\mu(d\mathbf{x}) \equiv \omega(\mathbf{x})d\mathbf{x} \quad (\text{I.2})$$

où $d\mathbf{x}$ est la mesure de Lebesgue de \mathbb{R}^d et où

$$\omega(\mathbf{x}) \equiv \sqrt{\det[\mathbf{G}(\mathbf{x})]} . \quad (\text{I.3})$$

Une mesure de probabilité $p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$ se réécrit alors $\tilde{p}(\mathbf{x})\mu(d\mathbf{x})$, et la relation entre les densités de probabilité est donc

$$\tilde{p}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{\omega(\mathbf{x})}p(\mathbf{x}) \quad (\text{I.4})$$

On définit ensuite les opérateurs gradient et divergence en espace courbe :

$$\tilde{\nabla}\phi \equiv \mathbf{G}^{-1}\nabla\phi \quad (\text{I.5})$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \Phi \equiv \frac{1}{\omega}\nabla \cdot (\omega\Phi) \quad (\text{I.6})$$

c'est à dire, en coordonnées :

$$[\tilde{\nabla}\phi]^i \equiv g^{ij}\partial_j\phi \quad (\text{I.7})$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \Phi \equiv \frac{1}{\omega}\partial_i(\omega\Phi^i) \quad (\text{I.8})$$

où ϕ et Φ sont des applications quelconques à valeurs scalaires et vectorielles, respectivement. L'équation de Fokker–Planck associée à l'équation (I.1) est

$$\partial_t p = -\nabla \cdot [p\mathbf{F} - \mathbf{A} \cdot \nabla \cdot (\mathbf{A}p)] \quad (\text{I.9})$$

c'est à dire, en coordonnées :

$$\partial_t p = -\partial_i [pF^i - A^{ij}\partial_k(A^{kj}p)] \quad (\text{I.10})$$

tout d'abord, on remarque que

$$\begin{aligned} A^{ij}\partial_k A^{kj}p &= A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega\tilde{p} \\ &= \omega A^{ij}A^{kj}\partial_k\tilde{p} + \tilde{p}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega \\ &= \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p} + \tilde{p}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega. \end{aligned}$$

L'équation de Fokker–Planck se réécrit alors

$$\partial_t p = -\partial_i [pF^i - \tilde{p}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega - \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p}] \quad (\text{I.11})$$

$$= -\partial_i [\omega\tilde{p}F^i - \tilde{p}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega - \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p}] \quad (\text{I.12})$$

$$= -\partial_i [\omega\tilde{p}\left(F^i - \frac{1}{\omega}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega\right) - \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p}] \quad (\text{I.13})$$

en divisant l'équation par ω , on obtient

$$\partial_t \tilde{p} = -\frac{1}{\omega}\partial_i \left[\omega\tilde{p}\left(F^i - \frac{1}{\omega}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega\right) - \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p}\right] \quad (\text{I.14})$$

c'est à dire

$$\partial_t \tilde{p} = -\tilde{\nabla} \cdot [\tilde{p}\tilde{\mathbf{F}} - \tilde{\nabla}\tilde{p}] \quad (\text{I.15})$$

avec

$$\tilde{F}^i \equiv F^i - \frac{1}{\omega}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega \quad (\text{I.16})$$

qui peut également s'écrire

$$\tilde{F}^i \equiv F^i - A^{ij}\partial_k A^{kj} - g^{ik}\partial_k \log \omega \quad (\text{I.17})$$

Par ailleurs, le couple $(\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{A}})$ du processus T-symétrique de (I.1) s'écrit (cf. appendice H) :

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} \quad (\text{I.18})$$

et

$$\bar{\mathbf{F}} = 2\mathbf{A}\mathbf{A}^t \nabla \log p_{ss} - \mathbf{F} + 2\mathbf{A} \cdot \nabla \cdot \mathbf{A} \quad (\text{I.19})$$

c'est à dire :

$$\bar{F}^i = 2g^{ij}\partial_j \log \tilde{p}_{ss} + 2g^{ij}\partial_j \log \omega - F^i + 2A^{ij}\partial_k A^{kj} \quad (\text{I.20})$$

La condition de réversibilité $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}$ s'écrit ainsi :

$$F^i - A^{ij}\partial_k A^{kj} - g^{ij}\partial_j \log \omega = g^{ij}\partial_j \log \tilde{p}_{ss} \quad (\text{I.21})$$

c'est à dire

$$\tilde{\mathbf{F}} = \tilde{\nabla} \log \tilde{p}_{ss} \quad (\text{I.22})$$

Autrement dit, comme dans le cas additif, un processus avec bruit multiplicatif est T-réversible ssi c'est une descente de gradient. Mais c'est descente de gradient est définie dans un géométrie courbe, dont la métrique est imposée par les corrélations du bruit, et le champ de force effectif est donné par (I.16).

Enfin, notons que la T-réversibilité, comme dans le cas avec bruit additif, est également équivalente à l'annulation du courant de probabilité.

Liste des publications

- P1** Jérémie O'Byrne, Alexandre Solon, Julien Tailleur, YongFeng Zhao. “An introduction to motility induced phase separation”.
In : *arXiv preprint arXiv :2112.03979* (2021).
Chapitre à paraître dans le livre “Out-of-Equilibrium Soft Matter : Active Fluid”, publié par *The Royal Society of Chemistry*.
- P2** Jérémie O'Byrne. “Non-Equilibrium Currents in Stochastic Field Theories : a Geometric Insight”.
In : *arXiv preprint arXiv :2108.13535* (2021).
- P3** Jérémie O'Byrne, Julien Tailleur. “Time-(ir) reversibility in active matter : from micro to macro”.
In : *arXiv preprint arXiv :2104.03030* (2021).
- P4** David Martin, Jérémie O'Byrne, Mike Cates, Étienne Fodor, Cesare Nardini, Julien Tailleur, Frédéric van Wijland. “Statistical mechanics of active Ornstein-Uhlenbeck particles”.
In : *Physical Review E* 103.3 (2021), p. 032607.
- P5** Jérémie O'Byrne, Julien Tailleur. “Lamellar to micellar phases and beyond : When tactic active systems admit free energy functionals”.
In : *Physical Review Letters* 125.20 (2020), p. 208003.

Bibliographie

- [1] Bilge ACUN et al. « Scalable molecular dynamics with NAMD on the summit system ». *IBM journal of research and development* 62.6 (2018), p. 4-1.
- [2] Bao-quan AI et al. « Rectification and diffusion of self-propelled particles in a two-dimensional corrugated channel ». *Physical Review E* 88.6 (2013), p. 062129.
- [3] Joshua ALPER et al. « Reconstitution of flagellar sliding ». *Methods in enzymology* 524 (2013), p. 343-369.
- [4] L ANGELANI, A COSTANZO et R DI LEONARDO. « Active ratchets ». *EPL (Europhysics Letters)* 96.6 (2011), p. 68002.
- [5] Roger BALIAN. « François Massieu et les potentiels thermodynamiques ». *Evolution des disciplines et histoire des découvertes, Académie des Sciences* (2015).
- [6] Michele BALLERINI et al. « Interaction ruling animal collective behavior depends on topological rather than metric distance: Evidence from a field study ». *Proceedings of the national academy of sciences* 105.4 (2008), p. 1232-1237.
- [7] Urna BASU et al. « Exact stationary state of a run-and-tumble particle with three internal states in a harmonic trap ». *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 53.9 (2020), 09LT01.
- [8] Christopher BATTLE et al. « Broken detailed balance at mesoscopic scales in active biological systems ». *Science* 352.6285 (2016), p. 604-607.
- [9] Tobias BÄUERLE et al. « Self-organization of active particles by quorum sensing rules ». *Nature communications* 9.1 (2018), p. 1-8.
- [10] Howard C BERG. *E. coli in Motion*. Springer Science & Business Media, 2008.

- [11] William BIALEK et al. « Statistical mechanics for natural flocks of birds ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109.13 (2012), p. 4786-4791.
- [12] Luis L BONILLA. « Active ornstein-uhlenbeck particles ». *Physical Review E* 100.2 (2019), p. 022601.
- [13] Pallaval Veera BRAMHACHARI et al. « Quorum sensing regulated swarming motility and migratory behavior in bacteria ». *Implication of Quorum Sensing System in Biofilm Formation and Virulence*. Springer, 2018, p. 49-66.
- [14] Antoine BRICARD et al. « Emergence of macroscopic directed motion in populations of motile colloids ». *Nature* 503.7474 (2013), p. 95-98.
- [15] Antoine BRICARD et al. « Emergent vortices in populations of colloidal rollers ». *Nature communications* 6.1 (2015), p. 1-8.
- [16] Christian Van den BROECK et Peter HÄNGGI. « Activation rates for non-linear stochastic flows driven by non-Gaussian noise ». *Physical Review A* 30.5 (1984), p. 2730.
- [17] Robert BROWN. *A brief account of microscopical observations made... on the particles contained in the pollen of plants, and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies*. 1828.
- [18] Jerome BUHL et al. « From disorder to order in marching locusts ». *Science* 312.5778 (2006), p. 1402-1406.
- [19] Ivo BUTTINONI et al. « Dynamical clustering and phase separation in suspensions of self-propelled colloidal particles ». *Physical review letters* 110.23 (2013), p. 238301.
- [20] Herbert B CALLEN. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. 1998.
- [21] Daniel S CALOVI et al. « Swarming, schooling, milling: phase diagram of a data-driven fish school model ». *New journal of Physics* 16.1 (2014), p. 015026.
- [22] Michael E CATES et Julien TAILLEUR. « Motility-induced phase separation ». *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 6.1 (2015), p. 219-244.
- [23] Michael E CATES et Julien TAILLEUR. « When are active Brownian particles and run-and-tumble particles equivalent? Consequences for motility-induced phase separation ». *EPL (Europhysics Letters)* 101.2 (2013), p. 20010.
- [24] Andrea CAVAGNA et al. « Scale-free correlations in starling flocks ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 107.26 (2010), p. 11865-11870.

- [25] Debasish CHAUDHURI et Abhishek DHAR. « Active Brownian particle in harmonic trap: exact computation of moments, and re-entrant transition ». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2021.1 (2021), p. 013207.
- [26] David S DEAN. « Langevin equation for the density of a system of interacting Langevin processes ». *Journal of Physics A: Mathematical and General* 29.24 (1996), p. L613.
- [27] Julien DESEIGNE, Olivier DAUCHOT et Hugues CHATÉ. « Collective motion of vibrated polar disks ». *Physical review letters* 105.9 (2010), p. 098001.
- [28] Julien DESEIGNE et al. « Vibrated polar disks: spontaneous motion, binary collisions, and collective dynamics ». *Soft Matter* 8.20 (2012), p. 5629-5639.
- [29] Abhishek DHAR et al. « Run-and-tumble particle in one-dimensional confining potentials: Steady-state, relaxation, and first-passage properties ». *Physical Review E* 99.3 (2019), p. 032132.
- [30] Roberto DI LEONARDO et al. « Bacterial ratchet motors ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 107.21 (2010), p. 9541-9545.
- [31] Stephen P DIGGLE et al. « Cooperation and conflict in quorum-sensing bacterial populations ». *Nature* 450.7168 (2007), p. 411-414.
- [32] B. DIU et C. GUTHMANN. *Eléments de physique statistique*. Collection enseignement des sciences. Hermann, 1989. ISBN : 9782705660659. URL : <https://books.google.fr/books?id=I67gAAAAMAAJ>.
- [33] Marco DORIGO, Guy THERAULAZ et Vito TRIANNI. « Reflections on the future of swarm robotics ». *Science Robotics* 5.49 (2020).
- [34] Jörn DUNKEL et al. « Fluid dynamics of bacterial turbulence ». *Physical review letters* 110.22 (2013), p. 228102.
- [35] Jens ELGETI et Gerhard GOMPPER. « Self-propelled rods near surfaces ». *EPL (Europhysics Letters)* 85.3 (2009), p. 38002.
- [36] Jens ELGETI et Gerhard GOMPPER. « Wall accumulation of self-propelled spheres ». *EPL (Europhysics Letters)* 101.4 (2013), p. 48003.
- [37] Barath EZHILAN, Roberto ALONSO-MATILLA et David SAINTILLAN. « On the distribution and swim pressure of run-and-tumble particles in confinement ». *Journal of Fluid Mechanics* 781 (2015).
- [38] Yaouen FILY et M Cristina MARCHETTI. « Athermal phase separation of self-propelled particles with no alignment ». *Physical review letters* 108.23 (2012), p. 235702.

- [39] Étienne FODOR et al. « How far from equilibrium is active matter? ». *Physical review letters* 117.3 (2016), p. 038103.
- [40] Dieter FORSTER. *Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry, and correlation functions*. CRC Press, 2018.
- [41] Peter GALAJDA et al. « A wall of funnels concentrates swimming bacteria ». *Journal of bacteriology* 189.23 (2007), p. 8704-8707.
- [42] Pulak K GHOSH et al. « Self-propelled Janus particles in a ratchet: Numerical simulations ». *Physical review letters* 110.26 (2013), p. 268301.
- [43] Josiah Willard GIBBS. *Elementary principles in statistical mechanics: developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics*. Yale University Press, 1914.
- [44] Eric A GILLIES et al. « Hydrodynamic propulsion of human sperm ». *Journal of Fluid Mechanics* 625 (2009), p. 445-474.
- [45] Timothy GOWERS, June BARROW-GREEN et Imre LEADER. *The Princeton companion to mathematics*. Princeton University Press, 2008.
- [46] Guillaume GRÉGOIRE et Hugues CHATÉ. « Onset of collective and cohesive motion ». *Physical review letters* 92.2 (2004), p. 025702.
- [47] Jonathan R HOWSE et al. « Self-motile colloidal particles: from directed propulsion to random walk ». *Physical review letters* 99.4 (2007), p. 048102.
- [48] Edwin T JAYNES. « Information theory and statistical mechanics ». *Physical review* 106.4 (1957), p. 620.
- [49] Da-Quan JIANG et Donghua JIANG. *Mathematical theory of nonequilibrium steady states: on the frontier of probability and dynamical systems*. Springer Science & Business Media, 2004.
- [50] Yael KATZ et al. « Inferring the structure and dynamics of interactions in schooling fish ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108.46 (2011), p. 18720-18725.
- [51] Laurent KELLER et Michael G SURETTE. « Communication in bacteria: an ecological and evolutionary perspective ». *Nature Reviews Microbiology* 4.4 (2006), p. 249-258.
- [52] Nn KOUMAKIS, C MAGGI et R DI LEONARDO. « Directed transport of active particles over asymmetric energy barriers ». *Soft matter* 10.31 (2014), p. 5695-5701.
- [53] C Ronald KUBE et Hong ZHANG. « Collective robotic intelligence ». *Second International Conference on Simulation of Adaptive Behavior*. 1992, p. 460-468.

- [54] Jorge KURCHAN. « Fluctuation theorem for stochastic dynamics ». *Journal of Physics A: Mathematical and General* 31.16 (1998), p. 3719.
- [55] Paul LANGEVIN. « Sur la théorie du mouvement brownien ». *Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences* 146 (1908), p. 530-532.
- [56] François A LAVERGNE et al. « Group formation and cohesion of active particles with visual perception-dependent motility ». *Science* 364.6435 (2019), p. 70-74.
- [57] Joel L LEBOWITZ et Herbert SPOHN. « A Gallavotti–Cohen-type symmetry in the large deviation functional for stochastic dynamics ». *Journal of Statistical Physics* 95.1 (1999), p. 333-365.
- [58] Chenli LIU et al. « Sequential establishment of stripe patterns in an expanding cell population ». *Science* 334.6053 (2011), p. 238-241.
- [59] Guannan LIU et al. « Self-driven phase transitions drive *Myxococcus xanthus* fruiting body formation ». *Physical review letters* 122.24 (2019), p. 248102.
- [60] Zeng Tao LIU et al. « Activity waves and freestanding vortices in populations of subcritical Quincke rollers ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 118.40 (2021).
- [61] Joël MABILLARD et Pierre GASPARD. « Microscopic approach to the macrodynamics of matter with broken symmetries ». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2020.10 (2020), p. 103203.
- [62] Christian MAES. « The fluctuation theorem as a Gibbs property ». *Journal of statistical physics* 95.1 (1999), p. 367-392.
- [63] Claudio MAGGI et al. « Micromotors with asymmetric shape that efficiently convert light into work by thermocapillary effects ». *Nature communications* 6.1 (2015), p. 1-5.
- [64] David MARTIN et Thibaut Arnoulx de PIREY. « AOUP in the presence of Brownian noise: a perturbative approach ». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2021.4 (2021), p. 043205.
- [65] David MARTIN et al. « Fluctuation-induced phase separation in metric and topological models of collective motion ». *Physical Review Letters* 126.14 (2021), p. 148001.
- [66] David MARTIN et al. « Statistical mechanics of active Ornstein-Uhlenbeck particles ». *Physical Review E* 103.3 (2021), p. 032607.
- [67] Danielle McDERMOTT, Cynthia J Olson REICHHARDT et Charles REICHHARDT. « Collective ratchet effects and reversals for active matter particles on quasi-one-dimensional asymmetric substrates ». *Soft Matter* 12.41 (2016), p. 8606-8615.

- [68] Melissa B MILLER et Bonnie L BASSLER. « Quorum sensing in bacteria ». *Annual Reviews in Microbiology* 55.1 (2001), p. 165-199.
- [69] Akankshi MUNJAL et Thomas LECUIT. « Actomyosin networks and tissue morphogenesis ». *Development* 141.9 (2014), p. 1789-1793.
- [70] Vijay NARAYAN, Sriram RAMASWAMY et Narayanan MENON. « Long-lived giant number fluctuations in a swarming granular nematic ». *Science* 317.5834 (2007), p. 105-108.
- [71] RW NASH et al. « Run-and-tumble particles with hydrodynamics: Sedimentation, trapping, and upstream swimming ». *Physical review letters* 104.25 (2010), p. 258101.
- [72] Jérémie O'BYRNE et al. « Time-(ir) reversibility in active matter: from micro to macro ». *arXiv preprint arXiv:2104.03030* (2021).
- [73] Garrett M ODELL et al. « The mechanical basis of morphogenesis: I. Epithelial folding and invagination ». *Developmental biology* 85.2 (1981), p. 446-462.
- [74] Peter J OLVER. *Applications of Lie groups to differential equations*. T. 107. Springer Science & Business Media, 2000.
- [75] Lars ONSAGER et Stefan MACHLUP. « Fluctuations and irreversible processes ». *Physical Review* 91.6 (1953), p. 1505.
- [76] Jérémie PALACCI et al. « Sedimentation and effective temperature of active colloidal suspensions ». *Physical Review Letters* 105.8 (2010), p. 088304.
- [77] Jean PERRIN. « Mouvement brownien et réalité moléculaire » (1909).
- [78] Fernando PERUANI et al. « Collective motion and nonequilibrium cluster formation in colonies of gliding bacteria ». *Physical review letters* 108.9 (2012), p. 098102.
- [79] James C PHILLIPS et al. « Mapping to irregular torus topologies and other techniques for petascale biomolecular simulation ». *SC'14: Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. IEEE. 2014, p. 81-91.
- [80] Oliver POHL et Holger STARK. « Dynamic clustering and chemotactic collapse of self-phoretic active particles ». *Physical review letters* 112.23 (2014), p. 238303.
- [81] Marco POLIN et al. « Chlamydomonas swims with two “gears” in a eukaryotic version of run-and-tumble locomotion ». *Science* 325.5939 (2009), p. 487-490.

- [82] Thomas D POLLARD et Robert D GOLDMAN. « Overview of the cytoskeleton from an evolutionary perspective ». *Cold Spring Harbor perspectives in biology* 10.7 (2018), a030288.
- [83] Andrey POTOTSKY, Aljoscha M HAHN et Holger STARK. « Rectification of self-propelled particles by symmetric barriers ». *Physical Review E* 87.4 (2013), p. 042124.
- [84] Mathieu POUJADE et al. « Collective migration of an epithelial monolayer in response to a model wound ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 104.41 (2007), p. 15988-15993.
- [85] M. PULLICINO. *Thermodynamique - PCSI MPSI PTSI: ouvrage numérique PDF - 3,8 Mo*. Classe Prépa. NATHAN. ISBN : 9782098121522. URL : <https://books.google.fr/books?id=dgCmpU3LSUQC>.
- [86] RC RAINY. « Weather and the movements of locust swarms: a new hypothesis ». *Nature* 168.4286 (1951), p. 1057-1060.
- [87] Gabriel S REDNER, Michael F HAGAN et Aparna BASKARAN. « Structure and dynamics of a phase-separating active colloidal fluid ». *Physical review letters* 110.5 (2013), p. 055701.
- [88] CJ Olson REICHHARDT et Charles REICHHARDT. « Ratchet effects in active matter systems ». *Annual Review of Condensed Matter Physics* 8 (2017), p. 51-75.
- [89] Hannes RISKEN. « Fokker-planck equation ». *The Fokker-Planck Equation*. Springer, 1996, p. 63-95.
- [90] Thomas RISLER. « Cytoskeleton and Cell Motility ». *Encyclopedia of Complexity and Systems Science*. 2009.
- [91] Mark J SCHNITZER. « Theory of continuum random walks and application to chemotaxis ». *Physical Review E* 48.4 (1993), p. 2553.
- [92] Ada SEDOVA et al. « High-performance molecular dynamics simulation for biological and materials sciences: challenges of performance portability ». *2018 IEEE/ACM International Workshop on Performance, Portability and Productivity in HPC (P3HPC)*. IEEE. 2018, p. 1-13.
- [93] Udo SEIFERT. « Entropy production along a stochastic trajectory and an integral fluctuation theorem ». *Physical review letters* 95.4 (2005), p. 040602.
- [94] Néstor SEPÚLVEDA et al. « Collective cell motion in an epithelial sheet can be quantitatively described by a stochastic interacting particle model ». *PLoS computational biology* 9.3 (2013), e1002944.

- [95] Jesse L SILVERBERG et al. « Collective motion of humans in mosh and circle pits at heavy metal concerts ». *Physical review letters* 110.22 (2013), p. 228701.
- [96] Andrey SOKOLOV et al. « Swimming bacteria power microscopic gears ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 107.3 (2010), p. 969-974.
- [97] Alexandre P SOLON, Michael E CATES et Julien TAILLEUR. « Active brownian particles and run-and-tumble particles: A comparative study ». *The European Physical Journal Special Topics* 224.7 (2015), p. 1231-1262.
- [98] Alexandre P SOLON et al. « Generalized thermodynamics of motility-induced phase separation: phase equilibria, Laplace pressure, and change of ensembles ». *New Journal of Physics* 20.7 (2018), p. 075001.
- [99] Alexandre P SOLON et al. « Generalized thermodynamics of phase equilibria in scalar active matter ». *Physical Review E* 97.2 (2018), p. 020602.
- [100] Rodrigo SOTO et Ramin GOLESTANIAN. « Run-and-tumble dynamics in a crowded environment: Persistent exclusion process for swimmers ». *Physical Review E* 89.1 (2014), p. 012706.
- [101] Rodrigo SOTO et Ramin GOLESTANIAN. « Self-assembly of catalytically active colloidal molecules: Tailoring activity through surface chemistry ». *Physical review letters* 112.6 (2014), p. 068301.
- [102] Joakim STENHAMMAR et al. « Light-induced self-assembly of active rectification devices ». *Science advances* 2.4 (2016), e1501850.
- [103] Ruslan Leontievich STRATONOVICH. « On the probability functional of diffusion processes ». *Selected Trans. in Math. Stat. Prob* 10 (1971), p. 273-286.
- [104] Raimon SUNYER et al. « Collective cell durotaxis emerges from long-range intercellular force transmission ». *Science* 353.6304 (2016), p. 1157-1161.
- [105] Grzegorz SZAMEL. « Self-propelled particle in an external potential: Existence of an effective temperature ». *Physical Review E* 90.1 (2014), p. 012111.
- [106] J TAILLEUR et ME CATES. « Statistical mechanics of interacting run-and-tumble bacteria ». *Physical review letters* 100.21 (2008), p. 218103.
- [107] Julien TAILLEUR et ME CATES. « Sedimentation, trapping, and rectification of dilute bacteria ». *EPL (Europhysics Letters)* 86.6 (2009), p. 60002.
- [108] Sho C TAKATORI et al. « Acoustic trapping of active matter ». *Nature communications* 7.1 (2016), p. 1-7.
- [109] Isaac THEURKAUFF et al. « Dynamic clustering in active colloidal suspensions with chemical signaling ». *Physical review letters* 108.26 (2012), p. 268303.

- [110] John TONER et Yuhai TU. « Long-range order in a two-dimensional dynamical XY model: how birds fly together ». *Physical review letters* 75.23 (1995), p. 4326.
- [111] Marjolein N VAN DER LINDEN et al. « Interrupted motility induced phase separation in aligning active colloids ». *Physical review letters* 123.9 (2019), p. 098001.
- [112] Gábor VÁSÁRHELYI et al. « Optimized flocking of autonomous drones in confined environments ». *Science Robotics* 3.20 (2018).
- [113] Ganesh K VENAYAGAMOORTHY, Lisa L GRANT et Sheetal DOCTOR. « Collective robotic search using hybrid techniques: Fuzzy logic and swarm intelligence inspired by nature ». *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 22.3 (2009), p. 431-441.
- [114] Tamás VICSEK et al. « Novel type of phase transition in a system of self-driven particles ». *Physical review letters* 75.6 (1995), p. 1226.
- [115] Caleb G WAGNER, Michael F HAGAN et Aparna BASKARAN. « Steady-state distributions of ideal active Brownian particles under confinement and forcing ». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2017.4 (2017), p. 043203.
- [116] MB WAN et al. « Rectification of swimming bacteria and self-driven particle systems by arrays of asymmetric barriers ». *Physical review letters* 101.1 (2008), p. 018102.
- [117] Xianhui WANG et al. « The locust genome provides insight into swarm formation and long-distance flight ». *Nature communications* 5.1 (2014), p. 1-9.
- [118] Raphael WITTKOWSKI et al. « Scalar φ 4 field theory for active-particle phase separation ». *Nature communications* 5.1 (2014), p. 1-9.
- [119] Hideki YAMAGUCHI, Jeffrey WYCKOFF et John CONDEELIS. « Cell migration in tumors ». *Current opinion in cell biology* 17.5 (2005), p. 559-564.
- [120] Xingbo YANG, M Lisa MANNING et M Cristina MARCETTI. « Aggregation and segregation of confined active particles ». *Soft matter* 10.34 (2014), p. 6477-6484.
- [121] Ehud YARIV et Ory SCHNITZER. « Ratcheting of Brownian swimmers in periodically corrugated channels: A reduced Fokker-Planck approach ». *Physical Review E* 90.3 (2014), p. 032115.
- [122] Robert ZWANZIG. *Nonequilibrium statistical mechanics*. Oxford university press, 2001.