ECOLE POLYTECHNIQUE

Programme International (X97)

RAPPORT DE STAGE D'OPTION SCIENTIFIQUE

Denis GREBENKOV

PROPRIETES DE L'OPERATEUR D'AUTO-TRANSPORT BROWNIEN

Option :

Champs, Particules et Matière
Département de PHYSIQUE

Directeur de l'option :

Bertrand DUPLANTIER

Organisme d'accueil :

Laboratoire de Physique de la Matière Condensée,
Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex (France)

Directeurs de stage :

Bernard SAPOVAL et Marcel FILOCHE

Paris
Avril-Juin, 2000

Résumé

Le problème de transport régi par l'équation de Laplace à travers une interface résistante irrégulière (une membrane ou une électrode) est étudié à l'aide de la méthode inventée par B.Sapoval et M.Filoche. La discrétisation du problème permet d'introduire *l'opérateur d'auto-transport brownien* qui régi le processus de transport et ne dépend que de la géométrie de la membrane. On a étudié de façon théorique les propriétés générales de cet opérateur et les propriétés particulières, pour les formes simples, par des simulations numériques. De plus, on a obtenu analytiquement toutes les caractéristiques intéressantes pour la membrane plate et cyclique. Le calcul numérique montre que ces résultats analytiques peuvent être considérés comme des bonnes approximations pour d'autres géométries.

Les études de *l'opérateur d'étalement* associé à l'opérateur d'auto-transport brownien conduisent à une bonne vérification de la méthode puissante du point de vue pratique, *la méthode de l'arpenteur*, inventée par B.Sapoval.

Abstract

The problem of a Laplacian transfer across resistive irregular interface (a membrane or an electrode) is investigated with the method proposed by B.Sapoval and M.Filoche. The discretisation of the problem allows to introduce a *first-passage interface-interface random walk operator* who drives the processes of the transport and it depends only on the geometry of the membrane. It was investigated theoretically the general properties of this operator and the particular ones, for the simple shapes, with numerical simulations. Moveover, it was obtained analytically all the interested characteristics for a plane cyclic membrane. The calculation shows that these analytical results can be regarded as good approximations for the other membranes.

The study of *a spreading operator* connected to the previous operator, allows to obtain a good verification of another powerful method, the *Land Surveyor Method*, invented by B.Sapoval.

Table des matières

1 Introduction

De nombreux processus physiques et chimiques ont leur siège à une interface entre deux milieux.

Considérons deux électrodes, l'une plate et l'autre irrégulière, qui se trouvent dans une électrolyte (fig.1). L'équation de transport est

$$\mathbf{J} = -\nabla V/\rho,$$

où $\mathbf{J}$ est le courant dans l'électrolyte, ρ est la résistivité de l'électrolyte et le potentiel électrique V dans l'électrolyte obéit à l'équation de Laplace

$$\Delta V = 0.$$

A cause de la conservation de la charge, les conditions aux limites s'obtiennent en disant que le courant normal $-\nabla_n V/\rho$ arrivant du volume d'électrolyte est égal au courant $-V/r$ traversant la surface d'électrode (r est la résistance de la surface). Nous obtenons donc les conditions aux limites qui s'appellent *les conditions mixtes* ou *les conditions de Fourier*

$$\frac{V}{\nabla_n V} = \frac{r}{\rho} = \Lambda, \qquad (1)$$

où Λ est la longueur de Wagner.

Sur une électrode plate on a

$$V = V_0.$$

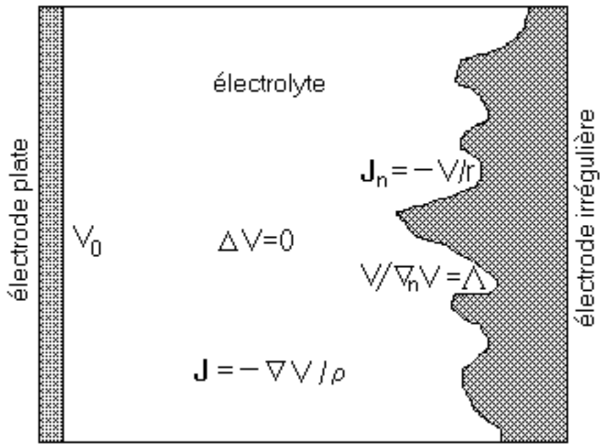

Figure 1. Le problème du transport de charge à travers une électrode irrégulière.

Un autre problème qui peut être décrit de la même manière est la diffusion.

On considére une boîte avec une source de particules et une membrane de forme irrégulière (fig.2). On suppose que cette membrane laisse passer une particule avec la probabilité $1-\varepsilon$ ou la réfléchit avec la probabilité ε. Soit $\mathbf{\Phi}$ un flux des particules qui obéit à la loi de Fick,

$$\mathbf{\Phi} = -D\nabla C, \tag{2}$$

où C est la concentration des particules et D est le coefficient de diffusion. Dans le cas stationnaire cette concentration obéit à l'équation de Laplace

$$\Delta C = 0.$$

Le flux traversant la membrane s'écrit comme

$$\Phi_n = -WC, \tag{3}$$

où W est la perméabilité de la membrane.[1] La conservation du flux normal sur l'interface de la membrane s'écrit

$$\frac{C}{\nabla_n C} = \frac{D}{W} = \Lambda. \tag{4}$$

Sur une source on a

$$C = C_0.$$

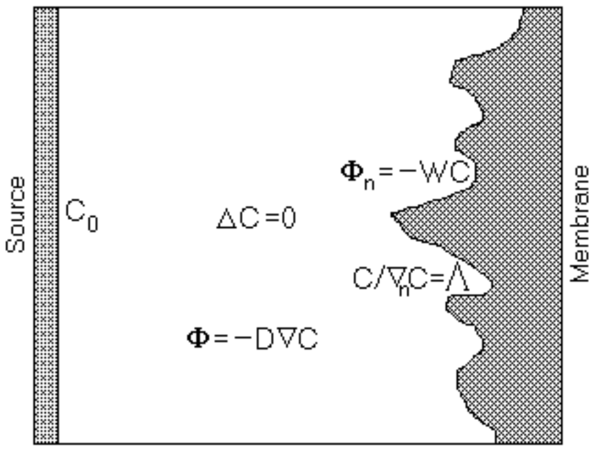

Figure 2. La diffusion des particules à travers une membrane irrégulière.

[1] C'est la probabilité par unité de temps, de surface et de concentration pour passer à travers une membrane en négligeant un flux de retour, autrement dit, en supposant que la concentration de l'autre côté de la membrane est égale à 0.

On peut aussi mentionner une catalyse hétérogène sur l'interface irrégulière. Les molecules de type A diffusent dans un solvant neutre depuis une source plate vers l'interface catalytique. Le flux des molecules obéit à la loi de Fick, $\mathbf{J} = -D\nabla C$, la concentration dans le dissolvant obéit à l'équation de Laplace $\Delta C = 0$ (cf.ci-dessus). Les molecules de type A se convertissent en molecules de type A* sur l'interface catalytique avec un taux de réaction fini, c'est-à-dire que le flux normal s'écrit $J_n = -KC$, où K est la réactivité de la surface. En raison de la conservation de masse, nous avons sur l'interface

$$\frac{C}{\nabla_n C} = \frac{D}{K} = \Lambda.$$

Nous avons donc trois problèmes différents pouvant être décrits de la même façon. Désormais nous étudierons le problème de la diffusion en utilisant en même temps la terminologie de la diffusion et de l'électricité.

On se pose des problèmes de deux types :

Problème I : Géométrie $\Rightarrow$ Flux .

> En connaissant la forme de la membrane il faut déterminer le flux des particules à travers la membrane en fonction de sa géométrie. Autrement dit, en résolvant l'équation de Laplace avec les conditions mixtes aux limites, il faut déterminer le comportement de la solution (ou bien la concentration ou bien le flux) en fonction de la forme d'interface.

Problème II : Flux $\Rightarrow$ Géométrie .

> En connaissant certaines propriétés du flux (qui peuvent être mesurées) il faut déterminer la géométrie (exacte ou approximative) de la membrane.

Bien sûr, pour le cas général les deux problèmes n'ont pas de solution explicite.

Le *problème I* peut être résolu de manière assez générale à l'aide de *la méthode de l'arpenteur* (*The Land Surveyor Method*) inventée par B.Sapoval (voir [1]).

L'idée fondamentale de la méthode de l'arpenteur consiste à remplacer le problème du transport de Laplace à travers une membrane partiellement absorbante (réelle) par un autre problème du transport à travers une membrane idéale, la géométrie de laquelle s'obtient par *agraindissement* de la membrane initiale avec l'échelle physique Λ. Autrement dit, nous remplaçons les conditions de Fourier aux limites ($C/\nabla_n C = \Lambda$) par les conditions de Dirichlet ($C = 0$), en changent aussi les limites elles-mêmes.

Le problème de Dirichlet-Laplace est beaucoup plus étudié surtout en deux dimensions. Par exemple, on peut utiliser le théorème de Makarov (voir [8]) dont le sens physique est simple : pour n'importe quelle forme de la membrane la taille de la région qui s'appelle *la section efficace* où la plupart des particules passe, est proportionnelle à la taille moyenne L de la membrane (pour les détails voir [2]).

Une autre méthode très utile que nous utiliserons dans ce travail est proposée par B.Sapoval et M.Filoche (voir [3]).

On peut exprimer le flux des particules à l'aide d'un opérateur décrivant la géométrie de la membrane. De plus, cette méthode permet de mieux comprendre les liens entre les propriétés du flux et la géométrie de la surface, c'est-à-dire qu'on peut l'utiliser pour aborder le *problème II*. En effet, on démontre dans [3] que le *problème II* est équivalent à un problème purement mathématique : "*Est-ce qu'on peut déterminer la forme d'un objet à partir de la décomposition spectrale de sa mesure harmonique ?*".

2 Modèle théorique

Nous commencerons par la présentation de la méthode décrite dans [3], puis nous décrirons les résultats généraux qui sont valables pour toutes les membranes.

2.1 Diffusion sur un réseau carré

Nous faisons la discrétisation de notre problème, c'est-à-dire que nous considérons la diffusion sur un réseau carré [2] de pas a. Le mouvement d'une particule est formé de marches aléatoires (browniennes) sur le réseau : à chaque fois une particule choisit l'une parmi quatre directions. Une marche prend le temps τ. Une source S se présente par les sites $i \in S$ $(i = 1..N_s)$, une membrane M se présente par les sites $j \in M$ $(j = 1..N)$. Le périmètre de la membrane L est

$$L = aN. \tag{5}$$

Nous introduisons aussi la distance δ entre la source et la membrane (pour la membrane irrégulière c'est la distance moyenne).

La membrane réelle doit être présentée par des sites de deux types : les sites de surface M et les sites absorbants E (fig.3). Le processus physique sur la surface est dirigé par deux dynamiques :

– une particule sur un site intérieur B peut sauter sur un site M avec la probabilité par unité de temps $1/4\tau$;

[2] Nous nous limitons au cas bidimentionnel parce que les résultats finals sont obtenus dans ce cas ; mais la description présentée dans [3] reste juste pour un réseau hypercubique de n'importe quelle dimension.

– une particule sur un site M peut revenir au site B avec la probabilité par unité de temps $1/\tau$, ou peut être annihilée sur le site E avec la probabilité par unité de temps $1/\tau_1$.

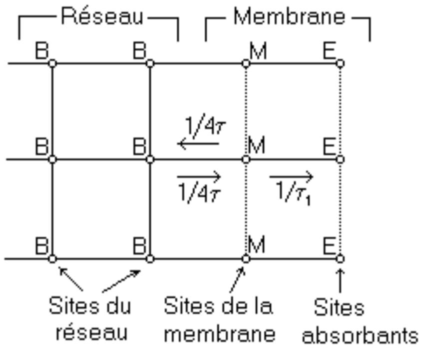

Figure 3. La membrane réelle se présente par les sites de surface (M) et les sites absorbants (E).

La perméabilité W de la membrane se définit comme le flux moyen par unité de temps à travers une membrane plate de longueur L

$$\Phi = C_M W L,$$

où C_M est la concentration des sites M. La distance entre les sites M est a, on écrit donc

$$\Phi = a^2 C_M \frac{1}{\tau_1} \frac{L}{a},$$

ce qui donne

$$W = a/\tau_1. \tag{6}$$

On définit la probabilité relative σ : si une particule arrive au site M, elle sera absorbée avec la probabilité

$$\sigma = \frac{\tau_1^{-1}}{\tau_1^{-1} + (4\tau)^{-1}}; \tag{7}$$

la probabilité de réflexion s'écrit

$$\varepsilon = 1 - \sigma. \tag{8}$$

En utilisant (7) et (8) on peut réécrire (6)

$$W = \frac{a}{4\tau} \frac{\sigma}{1-\sigma} \quad \text{ou} \quad W = \frac{a}{4\tau} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}. \tag{9}$$

On sait que le coefficient de diffusion D pour un réseau carré [3] s'écrit

[3]Pour un réseau hypercubique on a $D = a^2/(2d\tau)$, où d est la dimension de l'espace.

$$D = \frac{a^2}{4\tau}. \tag{10}$$

La substitution des formules (9) et (10) dans l'expression (4) conduit à

$$\Lambda = \frac{a\varepsilon}{1-\varepsilon}. \tag{11}$$

Pour le transport électrique la perméabilité W est remplacée par $1/r$ (un coefficient entre le courant J et le potentiel V), c'est-à-dire

$$r = \frac{\tau}{a}\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}. \tag{12}$$

Soit p_{ij} la probabilité d'arriver au site j sur M depuis le site i sur S (fig.4). Evidemment,

$$0 \leq p_{ij} \leq 1.$$

Grâce au principe de la réversibilité des marches aléatoires, on a aussi

$$p_{ij} = p_{ji}.$$

Il est commode d'introduire un vecteur $\mathbf{P_0}$ tel que $(\mathbf{P_0})_{j,j\in M}$ est la probabilité d'arriver à un site quelconque sur S depuis le site j sur M (ou, en vertu de la réversibilité, c'est la probabilité d'arriver au site j sur M depuis un site quelconque sur S),

$$(\mathbf{P_0})_j = \sum_{i\in S} p_{ij}.$$

Comme la membrane est partiellement absorbante, nous introduisons la matrice Q telle que q_{jk} est la probabilité d'arriver au site k sur M depuis le site j sur M. De même façon, on a pour la matrice Q

$$0 \leq q_{ij} \leq 1 \quad \text{et} \quad q_{ij} = q_{ji}.$$

La relation de normalisation exprime le fait que la particule doit finalement arriver au site quelconque

$$\forall j \in M, \quad (\mathbf{P_0})_j + \sum_{k\in M} q_{jk} = 1.$$

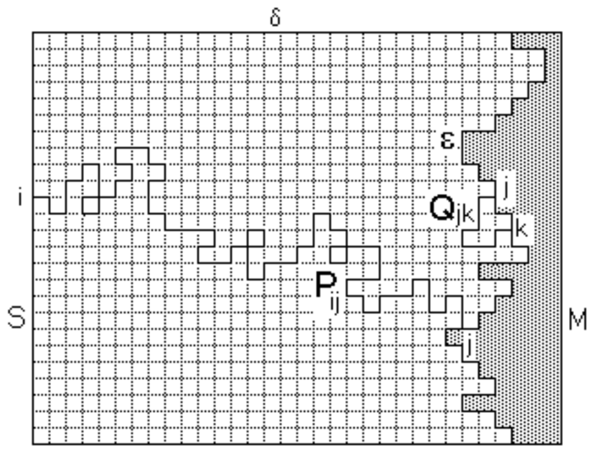

Figure 4. La diffusion sur le réseau carré avec une membrane partiellement absorbante.

La particule commence son mouvement d'un site quelconque sur S. Elle sera absorbée par le site j de M par le premier contact avec la probabilité

$$(\mathbf{P_0})_j(1-\varepsilon);$$

la probabilité d'être absorbée par le site j de M après une seule réflexion est

$$\sum_{k\in M}(\mathbf{P_0})_k\varepsilon q_{kj}(1-\varepsilon).$$

Généralement, la probabilité d'être absorbée par le site j après exactement n réflexion est

$$\sum_{k_1,\dots,k_n}(\mathbf{P_0})_{k_1}\varepsilon q_{k_1,k_2}\varepsilon \dots q_{k_{n-1}k_n}\varepsilon q_{k_n,j}(1-\varepsilon)$$

ou en termes du produit matriciel

$$(1-\varepsilon)\varepsilon^n\left(Q^n\mathbf{P_0}\right)_j.$$

Nous écrivons la probabilité totale d'être absorbée par le site j de M comme j-ième coordonnée d'un vecteur $\mathbf{P}_\varepsilon$. On a

$$\mathbf{P}_\varepsilon = \sum_{n=0}^{\infty}(1-\varepsilon)\varepsilon^n Q^n\mathbf{P_0}. \tag{13}$$

Comme la probabilité d'être absorbée par le site j est $(\mathbf{P}_\varepsilon)_j$ le flux élémentaire à travers ce site $\phi_{\varepsilon,j}$ est

$$\phi_{\varepsilon,j} = \frac{C_s a^2}{\tau}(\mathbf{P}_\varepsilon)_j,$$

où C_s est la concentration des particules sur la source.

Le flux total à travers la membrane est donc la somme des flux élémentaires

$$\Phi_\varepsilon = \sum_{j\in M} \phi_{\varepsilon,j} \quad \text{ou}$$

$$\Phi_\varepsilon = \frac{C_s a^2}{\tau} \sum_{j\in M} (\mathbf{P}_\varepsilon)_j. \tag{14}$$

Le flux Φ_ε dépend des caractéristiques
1) de la source (C_s, $\mathbf{P_0}$) ;
2) de la membrane (ε, Q) ;
3) du réseau (a, τ).

La dernière dépendance ne joue aucun rôle et s'élimine quand $a \to 0$ (la limite continue). C'est très important que la dépendance de Φ_ε par rapport à la membrane se réduise à l'opérateur Q qui s'appelle *l'opérateur d'auto-transport brownien.* D'autre part, l'opérateur Q ne dépend que de la forme de la surface. On peut donc dire que cet opérateur représente toutes les propriétés géométriques de la surface qui jouent un rôle dans le transport des particules.

En se souvenant de l'analogie entre la diffusion et le transport électrique, il est commode d'introduire l'impédance de la cellule [4]

$$\Phi_\varepsilon = \frac{C_s}{Z_c(\varepsilon)}. \tag{15}$$

La différence $Z_c(\varepsilon) - Z_c(0)$ joue un grand rôle dans notre travail et s'appelle *l'impédance spectroscopique*,

$$Z_s(\varepsilon) = Z_c(\varepsilon) - Z_c(0). \tag{16}$$

C'est elle qui est accessible par les expériences de spectroscopie d'impédance en électrochimie.

2.2 Analyse matricielle

Le but de ce travail est l'investigation des propriétés de la matrice Q et des objets autour de celle-ci. Pour commencer ces études nous présenterons les propriétés générales de Q.

La matrice Q a des propriétés fondamentales
1. Symétrie : $q_{ij} = q_{ji}$;
2. Positivité : $q_{ij} \geq 0$;
3. Normalisation : $\forall i \in M \quad \sum_{j\in M} q_{ij} = 1 - (\mathbf{P_0})_i \leq 1$.

On obtient immédiatement à partir des propriétés 2 et 3 que $0 \leq q_{ij} \leq 1$ (ce qui est en bon accord avec le sens des q_{ij} comme probabilités). En effet, nous

[4] En électricité on avait $J = V/Z_c$.

ne considérons que les réseaux où chaque site est accessible, c'est pourquoi on peut imposer une condition plus forte

$$0 < q_{ij} < 1.$$

Cette restriction n'est pas trop forte : presque tous les résultats peuvent être généralisés pour le cas où $0 \leq q_{ij} \leq 1$.

La normalisation 3 s'écrit sous la forme matricielle

$$Q\mathbf{1} = \mathbf{1} - \mathbf{P_0} \quad \text{ou} \quad \mathbf{P_0} = (I - Q)\mathbf{1}. \tag{17}$$

Grâce à la symétrie 1, toutes les valeurs propres q_α $(\alpha = 1, ..., N)$ de la matrice Q sont réelles, tous les vecteurs propres $\mathbf{V}_\alpha$ sont orthogonaux, ils peuvent donc être normalisés

$$q_1 \leq ... \leq q_N, \qquad (\mathbf{V}_\alpha \cdot \mathbf{V}_\beta) = \delta_{\alpha,\beta}. \tag{18}$$

Théorème de Perron-Frobenius [5] : il existe une valeur propre positive q_N qui est supérieure au module de chacune des autres valeurs propres. De plus, cette valeur propre maximale correspond au vecteur propre dont les coordonnées sont positives, $(\mathbf{V_N})_i > 0$ (voir, par exemple, [6]).

Corollaire 1 : Soit

$$s_i = \sum_{j \in M} q_{ij}, \qquad s = \min_{i \in M} s_i, \qquad S = \max_{i \in M} s_i.$$

Alors,

$$s \leq q_N \leq S.$$

De plus, l'égalité n'est possible que pour $s = S$.

Dans notre cas,

$$s_i = 1 - (\mathbf{P_0})_i, \qquad s = 1 - p_{max}, \qquad S = 1 - p_{min},$$

$$\text{où } \; p_{max} = \max_{i \in M} (\mathbf{P_0})_i, \qquad p_{min} = \min_{i \in M} (\mathbf{P_0})_i,$$

et nous avons

$$1 - p_{max} \leq q_N \leq 1 - p_{min}.$$

L'égalité n'est possible que pour

$$p_{min} = (\mathbf{P_0})_i = p_{max} \quad \text{ou} \quad \mathbf{P_0} = p_0\mathbf{1}.$$

[5]Pour le cas $q_{ij} > 0$ il suffit d'utiliser le théorème de Perron ; le théorème de Perron-Frobenuis est nécessaire pour des généralisations.

Notons que p_{min} doit être positive parce que tous les sites sont accessibles. Nous concluons que

$$q_N < 1. \tag{19}$$

Corollaire 2 :

$$q_N = \max_{\mathbf{X} \geq 0} \min_{i \in M} \frac{(Q\mathbf{X})_i}{\mathbf{X}_i} = \min_{\mathbf{x} \geq 0} \max_{i \in M} \frac{(Q\mathbf{X})_i}{\mathbf{X}_i} \quad \text{ou}$$

$$\forall \mathbf{X} \geq 0, \quad \mathbf{X} \neq 0 \qquad \min_{i \in M} \frac{(Q\mathbf{X})_i}{\mathbf{X}_i} \leq q_N \leq \max_{i \in M} \frac{(Q\mathbf{X})_i}{\mathbf{X}_i}.$$

Cela signifie que la valeur propre maximale q_N peut être considérée comme la norme de la matrice Q. En raison de l'inégalité (19) nous avons

$$|Q| < 1. \tag{20}$$

On peut démontrer (voir les annexes) que toutes les valeurs propres sont bornées,

$$|q_\alpha| < 1.$$

Nous supposons qu'on peut démontrer que

$$q_\alpha \geq 0.$$

Bien sûr, pour cette démonstration il faut demander des propriétés additionnelles de la matrice Q. J'espére qu'il suffit de la décroissance assez rapide de q_{ij} avec $(i - j)$. En pratique, pour tous les cas nous avons cette propriété.

Nous démontrons que la condition $\det Q > 0$ est suffisante pour $q_\alpha > 0$. Soit $\det Q > 0$. On suppose qu'il existe une valeur propre q_i telle que $q_i < 0$. Considérons la matrice $\tilde{Q} = Q - q_i I$. Elle a la même structure que Q. De plus, la diagonale de $\tilde{Q}$ domine plus que celle de Q. Cela signifie que $\det \tilde{Q} > 0$, c'est-à-dire que q_i n'est pas la valeur propre de Q.

2.3 Analyse spectrale

L'inégalité (20) justifie que l'expression (13) est toujours convergeante, c'est-à-dire que le vecteur $\mathbf{P}_\varepsilon$ est défini rigoureusement. De plus, elle permet d'introduire *l'opérateur d'étalement*

$$T_\varepsilon = (1 - \varepsilon) \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n Q^n = (1 - \varepsilon)(I - \varepsilon Q)^{-1}. \tag{21}$$

Evidemment, $T_0 = I$ et $T_1 = 0$.

On peut réécrire l'expression (13)

$$\mathbf{P}_\varepsilon = T_\varepsilon \mathbf{P_0}. \tag{22}$$

Maintenant on va lier l'impédance spectroscopique $Z_s(\varepsilon)$ et le spectre de la matrice Q.

Premièrement, nous écrivons l'expression (14) sous la forme matricielle

$$\Phi_\varepsilon = \frac{C_s a^2}{\tau}(\mathbf{P}_\varepsilon \cdot \mathbf{1}). \tag{23}$$

En utilisant les définitions (15) de Z_c et (16) de Z_s on a

$$Z_s(\varepsilon) = \frac{\tau}{a^2}\left(\frac{1}{(\mathbf{P}_\varepsilon \cdot \mathbf{1})} - \frac{1}{(\mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{1})}\right).$$

Sachant l'identité

$$(\mathbf{P}_0 - \mathbf{P}_\varepsilon) \cdot \mathbf{1} = \varepsilon\left((I-Q)(I-\varepsilon Q)^{-1}\mathbf{P}_0\right) \cdot \mathbf{1} = \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}(\mathbf{P}_\varepsilon \cdot \mathbf{P}_0),$$

on a

$$Z_s(\varepsilon) = \frac{\tau}{a^2}\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}\frac{\mathbf{P}_\varepsilon \cdot \mathbf{P}_0}{(\mathbf{P}_\varepsilon \cdot \mathbf{1})(\mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{1})}.$$

Nous introduisons *la mesure harmonique*

$$\mathbf{P}^{\mathbf{h}}_\varepsilon = \frac{\mathbf{P}_\varepsilon}{a(\mathbf{P}_\varepsilon \cdot \mathbf{1})}, \tag{24}$$

pour qu'on ait

$$\sum_{j \in M} (\mathbf{P}^{\mathbf{h}}_\varepsilon)_j a = 1.$$

Dans les termes de la mesure harmonique l'impédance spectroscopique s'écrit

$$Z_s(\varepsilon) = ra(\mathbf{P}^{\mathbf{h}}_\varepsilon \cdot \mathbf{P}^{\mathbf{h}}_{\mathbf{0}}), \tag{25}$$

où nous avons utilisé l'expression (12) de r.

Pour tout le calcul la distance δ entre la source et la membrane est fixée. En principe, les opérateurs Q et T_ε ainsi que les mesures harmoniques $\mathbf{P}^{\mathbf{h}}_{\mathbf{0}}$, $\mathbf{P}^{\mathbf{h}}_\varepsilon$ dépendent de cette distance.

A la limite $\delta \to \infty$ l'opérateur Q tend vers l'opérateur Q^{int} qui s'appelle *l'opérateur intrinsèque d'auto-transport brownien*, et les mesures harmoniques $\mathbf{P}^{\mathbf{h}}_{\mathbf{0}}$ et $\mathbf{P}^{\mathbf{h}}_\varepsilon$ tendent vers les vecteurs $\mathbf{P}^{\mathbf{int}}_{\mathbf{0}}$ et $\mathbf{P}^{\mathbf{int}}_\varepsilon$ qui s'appellent *les distributions intrinsèques primaire et secondaire du courant.* Toutes ces quantités ne dépendent que de la géométrie de la membrane.

C'est très important qu'il existe un opérateur **linéaire** T_ε^{int} qui lie $\mathbf{P_0^{int}}$ et $\mathbf{P_\varepsilon^{int}}$

$$\mathbf{P}_\varepsilon^{\mathbf{int}} = T_\varepsilon^{int}\mathbf{P_0^{int}}.$$

En effet, en écrivant

$$T_\varepsilon = I - \varepsilon(I - \varepsilon Q)^{-1}(I - Q),$$

nous avons

$$\mathbf{P}_\varepsilon \cdot \mathbf{1} = \mathbf{P_0} \cdot \mathbf{1} - \mathbf{P_0} \cdot (\varepsilon(I - \varepsilon Q)^{-1}\mathbf{P_0}),$$

ce qui donne

$$\lim_{\delta\to\infty} \frac{(\mathbf{P}_\varepsilon \cdot \mathbf{1})}{(\mathbf{P_0} \cdot \mathbf{1})} = 1,$$

parce que le deuxième terme dans l'expression précédente varie comme $|\mathbf{P_0}|^2$ et tend vers 0 pour $\delta \to \infty$. Alors, nous avons le diagramme

$$\begin{array}{ccccc}
 & \text{normalisation} & & \delta \to \infty & \\
\mathbf{P_0} & \longrightarrow & \mathbf{P_0^h} & \longrightarrow & \mathbf{P_0^{int}} \\
\downarrow\ T_\varepsilon & & \downarrow \text{non-linéaire} & & \downarrow\ T_\varepsilon^{int} \\
\mathbf{P}_\varepsilon & \longrightarrow & \mathbf{P}_\varepsilon^{\mathbf{h}} & \longrightarrow & \mathbf{P}_\varepsilon^{\mathbf{int}} \\
 & \text{normalisation} & & \delta \to \infty &
\end{array}$$

En pratique, les simulations numériques montrent que la dépendance de Q, T_ε, $\mathbf{P_0^h}$ et $\mathbf{P}_\varepsilon^{\mathbf{h}}$ par rapport à δ est très faible quand la distance est plus grande que les détails de la géométrie de la membrane. C'est pourquoi nous utiliserons les notations précédentes (Q, T_ε, $\mathbf{P_0^h}$, $\mathbf{P}_\varepsilon^{\mathbf{h}}$) à la place des nouvelles (Q^{int}, T_ε^{int}, $\mathbf{P_0^{int}}$, $\mathbf{P}_\varepsilon^{\mathbf{int}}$) en prenant toujours δ assez grande.

On introduit les coefficients C_α de la décomposition $\mathbf{P_0^h}$ sur la base des vecteurs propres $\mathbf{V}_\alpha$

$$C_\alpha = (\mathbf{P_0^h} \cdot \mathbf{V}_\alpha). \tag{26}$$

Grâce à la définition (21), l'opérateur T_ε a les mêmes vecteurs propres que l'opérateur Q, c'est-à-dire $\mathbf{V}_\alpha$. Les valeurs propres sont

$$\frac{1-\varepsilon}{1-\varepsilon q_\alpha}.$$

En utilisant les formules (25), (22) et (26), on obtient

$$Z_s(\varepsilon) = ra(\mathbf{P_0^h} \cdot \mathbf{P}_\varepsilon^{\mathbf{h}}) = ra(\mathbf{P_0^h} \cdot T_\varepsilon \mathbf{P_0^h}) \quad \text{ou}$$

$$Z_s(\varepsilon) = ra \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{1-\varepsilon}{1-\varepsilon q_\alpha}\right) C_\alpha^2. \tag{27}$$

Si N est grand, l'expression discrete (27) se transforme en

$$Z_s(\varepsilon) = r \int_{-1}^{1} \frac{1-\varepsilon}{1-\varepsilon q} C^2(q) d\tilde{N}(q), \tag{28}$$

où $\tilde{N}(q)$ est *la densité d'état intégrale*; la dérivée de $\tilde{N}(q)$

$$\tilde{D}(q) = \tilde{N}'(q)$$

s'appelle *la densité d'état différentielle.* [6]

Notons que les fonctions $\tilde{N}(q)$ et $\tilde{D}(q)$ contiennent un facteur a (voir le passage entre la relation "discrete" (27) et sa version intégrale (28)). Il est commode d'introduire aussi les fonctions

$$N(q) = \tilde{N}(q)/a \qquad D(q) = \tilde{D}(q)/a. \tag{29}$$

En raison de la simplicité nous appellerons ces fonctions aussi les densités d'état intégrale et différentielle respectivement. La plupart des résultats sera exprimée en termes des fonctions $N(q)$ et $D(q)$ parce qu'elles sont plus commodes pour le calcul discret, tandis que les fonctions $\tilde{N}(q)$ et $\tilde{D}(q)$ sont plus utiles pour la limite continue ($a \to 0$), parce qu'elles sont finies dans cette limite.

Le problème est que la formule (28) dépend du pas a de réseau. Cette dépendance s'élimine si on remplace la variable q par λ

$$\lambda = (1-q)/a. \tag{30}$$

On a

$$Z_s(\varepsilon) = r \int_{0}^{\infty} \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon a}{1-\varepsilon}\lambda} F(\lambda) d\lambda,$$

où la fonction $F(\lambda)$ est

$$F(\lambda) = aC^2(1-a\lambda)\tilde{D}(1-a\lambda). \tag{31}$$

Notons que nous avons élargi l'intégration jusqu'à l'infini (en supposant que a est très petit). [7]

La substitution de la formule (11) de Λ dans l'expression précédente conduit à [8]

[6] Nous savons que $|q| \leq q_N < 1$. Néanmoins, nous écrirons les limites d'intégration comme -1 et 1, en sous-entendant toutes les restrictions dans $\tilde{D}(q)$.

[7] Il peut arriver des problèmes avec la limite basse d'intégration. A première vue, $q \leq q_N < 1$, c'est-à-dire $1-q > 0$ et pour $a \to 0$ on obtient $(1-q_N)/a \to \infty$. En effet, $N = L/a$ (où L est la longueur de la membrane réelle), et pour $a \to 0$ on a $N \to \infty$. Il est clair que $q_N \to 1$. Mais il faut analyser plus en profondeur pour dire que $(1-q_N)/a \to 0$.

[8] On peut écrire $Z_s(r)$ à la place de $Z_s(\varepsilon)$ grâce à la relation (12).

$$Z_s(r) = r \int_0^\infty \frac{1}{1+\Lambda\lambda} F(\lambda) d\lambda. \tag{32}$$

Rappellons que Λ est proportionnelle à r (voir (12)), c'est-à-dire que $Z_s(r)$ s'obtient par la transformation intégrale (32).

La fonction $F(\lambda)$ ne dépend pas de a et définit toutes les propriétés résistantes de la membrane. La relation (32) est très importante parce qu'elle lie la fonction $Z_s(r)$, qui caractérise la résistance de la membrane et peut être mesurée dans les expériences, avec la fonction $F(\lambda)$ qui est purement théorique et représente la géométrie de la membrane. De plus, cette relation montre que toute l'information de la géométrie que nous pouvons tirer de l'expérience, est contenue dans la fonction $F(\lambda)$. En effet, on peut mesurer $Z_s(r)$ avec une grande précision ce qui permet d'inverser la relation (32) pour obtenir $F(\lambda)$. Alors, *le probème II* peut être résolu si nous pouvons tirer l'information sur la géométrie à partir de la fonction $F(\lambda)$.

3 Résultats analytiques et numériques

La méthode précédente est très utile du point de vue théorique. Effectivement, on peut obtenir les résultats analytiques aux limites $\varepsilon \to 0$ et $\varepsilon \to 1$ pour des formes assez irrégulières (voir [3]). De plus, cette méthode est la base des simulations numériques que nous présenterons ci-dessous.

Cependant, pour comprendre les liens profonds entre l'impédance spectroscopique $Z_s(r)$ et la géométrie de la membrane, il faut connaître les caractéristiques pour n'importe quelle valeur de ε (qui appartient à l'intervalle $(0,1)$, bien sûr). Malheureusement, ce n'est possible analytiquement que pour le cas le plus simple où la membrane est plate et cyclique.[9]

D'autre part, les simulations numériques sur ordinateur permettent d'obtenir des résultats pour presque n'importe quelle forme de la membrane. Cependant, ces résultats ne sont que des approximations. La précision joue donc le premier rôle. Théoriquement, on peut obtenir n'importe quelle précision, mais en pratique, elle est très limitée par le temps du calcul.

Nous utilisons les marches au hasard sur un réseau carré pour calculer la matrice Q et la mesure harmonique $\mathbf{P}_{\mathbf{0}}^{\mathbf{h}}$. Une particule imaginaire part d'un site de la membrane.[10] Sur chaque site elle peut choisir l'une parmi les quatre

[9] Le mot "cyclique" signifie que les conditions aux limites sont périodiques, c'est-à-dire qu'on considére un cylindre à la place d'un rectangle ouvert (voir fig.5).

[10] Bien sûr, la diffusion réelle commence par la source. Mais pour les simulations il est plus pratique de faire comme ci-dessus ; grâce à la réversibilité les deux voies sont identiques.

directions avec la probabilité [11] 1/4. Quand la particule atteint la source ou la membrane, le mouvement s'arrête.

L'épreuve se répéte N_e fois[12] pour chaque site j sur M. Cette réitération permet de calculer "les nombres d'occupation" des sites de la membrane $Q_i^{(j)}$ et de la source $P_i^{(j)}$. Comme nous n'avons pas besoin de la matrice p_{ij} elle-même, on ne garde que la somme $P^{(j)} = \sum_{i\in S} P_i^{(j)}$. Pour obtenir "les fréquences" [13], il suffit de diviser les nombres d'occupation par N_e, c'est-à-dire

$$\tilde{Q}_{ij} = Q_i^{(j)}/N_e, \qquad (\tilde{P}_0)_j = P^{(j)}/N_e.$$

Quand le nombre d'épreuve N_e tend vers l'infini, les fréquences tendent vers les probabilités

$$\tilde{Q}_{ij} \to q_{ij}, \qquad \tilde{P}_0 \to \mathbf{P_0}.$$

Pour obtenir les meilleurs résultats il faut prendre N_e le plus grand possible. Evidemment, la précision des simulations est bornée par $1/N_e$, c'est-à-dire que nous ne pouvons pas distinguer les probabilités qui sont moins que $1/N_e$. En pratique, la précision est moins bonne parce qu'il faut tenir compte du comportement probabiliste et de l'imperfection du générateur de nombres preudo-aléatoires.

Généralement, nous nous intéressons aux caractéristiques suivantes :

1) la densité d'état intégrale $N(q)$;

2) la densité d'état différentielle $D(q)$;

3) les distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_{0.9}$ et $\mathbf{P}_{0.99}$ (les valeurs $\varepsilon = 0.9$ et $\varepsilon = 0.99$, ou bien $\sigma = 0.1$ et $\sigma = 0.01$, sont assez représentatives) ;

4) les vecteurs propres $\mathbf{V}_\alpha$ et leurs transformées de Fourier $\mathbf{F_k}$. Evidemment, nous ne pouvons pas présenter tous les vecteurs propres (et ce n'est pas nécessaire). On choisit donc certaines valeurs α pour comprendre le comportement général ;

5) le comportement de la fonction $C(q)$ (c'est-à-dire des coefficients C_α en vertu d'une valeur propre q) ;

6) la dépendance d'une ligne des matrices Q, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ par rapport à l'indice i (c'est-à-dire la dépendance de $Q(j,i)$, $T_{0,9}(j,i)$ et $T_{0.99}(j,i)$ par rapport à l'indice i pour j fixé) ;

7) la fonction $F(\lambda)$ et l'impédance spectroscopique $Z_s(r)$.

Nous avons donc deux voies possibles pour aborder notre problème : l'étude analytique du cas le plus simple (ce qui permet, en principe, d'obtenir certaines approximations pour les autres cas) et les simulations numériques pour les membranes différentes.

[11] On s'utilise un générateur de nombres preudo-aléatoires pour faire ce choix.

[12] Habituellement, nous prenons $N_e = 10^6$.

[13] Nous utilisons les termes de la probabilité.

Nous commençons par la membrane plate et cyclique pour obtenir des résultats analytiques et les comparer avec ceux des simulations. Puis nous étudierons quelques membranes de base.

3.1 Membrane plate et cyclique

3.1.1 Valeurs propres d'une matrice cyclique

Pour une membrane plate et cyclique (fig 5.) on peut obtenir les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice Q explicitement.

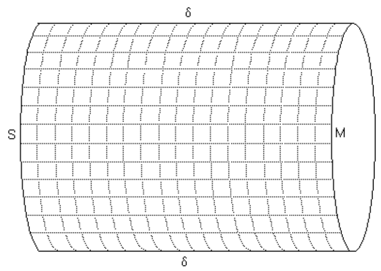

Figure 5. La membrane plate et cyclique (PC) peut être considérée comme une frontière du cylindre, c'est-à-dire un cercle.

Dans ce cas la matrice Q est cyclique, c'est-à-dire qu'elle s'écrit sous la forme ($q_{ij} = a_{i-j}$)

$$Q = \begin{pmatrix} a_0 & a_1 & \dots & a_{N-1} \\ a_{N-1} & a_0 & \dots & a_{N-2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_1 & a_2 & \dots & a_0 \end{pmatrix}.$$

La transformation de Fourier diagonalise la matrice Q

$$V^{-1}QV = \begin{pmatrix} q_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q_1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & q_{N-1} \end{pmatrix}, \text{ où } \ V = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 & e^{il} & \dots & e^{(N-1)il} \\ 1 & e^{2il} & \dots & e^{2(N-1)il} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

est la matrice des vecteurs propres ($l = 2\pi/N$). On a [14]

$$q_n = \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{-iknl}, \qquad V_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} e^{inl} \\ e^{2inl} \\ \dots \\ e^{Ninl} \end{pmatrix}. \tag{33}$$

[14] Pour l'instant nous utilisons l'indice n à la place de α parce que les valeurs propres ne sont pas croissantes.

3.1.2 Dégénérescence des valeurs propres

La matrice Q est symétrique, c'est-à-dire $a_1 = a_{N-1}$, $a_2 = a_{N-2}$, etc. Cela simplifie l'expression des valeurs propres (on suppose que N est pair)

$$q_n = a_0 + a_{N/2} e^{-in(N/2)(2\pi/N)} + 2 \sum_{k=1}^{N/2-1} a_k \cos(2\pi kn/N).$$

Si on définit $a_{-k} = a_k$, on obtient

$$q_n = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} a_k \cos(2\pi kn/N). \tag{34}$$

L'identité évidente

$$\cos(2\pi k(N-n)/N) = \cos(2\pi kn/N)$$

conduit à la propriété importante

$$q_{N-n} = q_n, \tag{35}$$

c'est-à-dire que presque toutes les valeurs propres sont dégénérées deux fois (sauf q_0 et $q_{N/2}$).

3.1.3 Vecteurs propres réels

Nous avons obtenu les vecteurs propres sous la forme complexe. Mais on sait qu'une matrice symétrique se réduit à la matrice diagonale par une transformation orthogonale, c'est-à-dire qu'on peut obtenir les vecteurs propres sous la forme réelle. Pour une matrice cyclique c'est facile à faire. En effet, on sait que les vecteurs $\mathbf{V_n}$ et $\mathbf{V_{N-n}}$ ($n \in \{1, 2, ..., N/2-1\}$) ont la même valeur propre $q_n = q_{N-n}$ (voir la relation (35)). Alors, la somme et la différence de $\mathbf{V_n}$ et $\mathbf{V_{N-n}}$ ont q_n comme valeur propre.

Soit

$$\tilde{V}_n = \frac{\mathbf{V_n} + \mathbf{V_{N-n}}}{2}, \qquad \tilde{V}_{N-n} = \frac{\mathbf{V_n} - \mathbf{V_{N-n}}}{2i},$$

ce qui donne

$$\tilde{V}_n = \begin{pmatrix} \cos(nl) \\ \cos(2nl) \\ ... \\ \cos(Nnl) \end{pmatrix}, \qquad \tilde{V}_{N-n} = \begin{pmatrix} \sin(nl) \\ \sin(2nl) \\ ... \\ \sin(Nnl) \end{pmatrix}.$$

Il reste à faire la normalisation. On a

$$(\tilde{V}_n \cdot \tilde{V}_n) = \sum_{k=0}^{N-1} \cos^2(knl) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1 + \cos(2knl)}{2} = N/2,$$

$$(\tilde{V}_{N-n} \cdot \tilde{V}_n) = \sum_{k=0}^{N-1} \sin^2(knl) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1-\cos(2knl)}{2} = N/2,$$

parce que la somme $\sum_{k=0}^{N-1} \cos(2knl)$ est égale à 0. De plus,

$$(\tilde{V}_n \cdot \tilde{V}_{N-n}) = \sum_{k=0}^{N-1} \cos(knl)\sin(knl) = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N-1} \sin(2knl) = 0.$$

Enfin, les vecteurs $\tilde{V}_n$ et $\tilde{V}_m$ sont orthogonaux pour $m \neq n$ en raison de la normalisation $(\mathbf{V_n} \cdot \mathbf{V_m}) = 0$.

Alors, on obtient pour $n \in \{1, 2, ..., N/2-1\}$

$$V_n = \sqrt{\frac{2}{N}} \begin{pmatrix} \cos(nl) \\ \cos(2nl) \\ ... \\ \cos(Nnl) \end{pmatrix}, \qquad V_{N-n} = \sqrt{\frac{2}{N}} \begin{pmatrix} \sin(nl) \\ \sin(2nl) \\ ... \\ \sin(Nnl) \end{pmatrix}. \tag{36}$$

De plus,

$$V_{N/2} = \sqrt{\frac{1}{N}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ ... \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad V_N = \sqrt{\frac{1}{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ ... \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Désormais nous utiliserons ces deux formes des vecteurs propres.

3.1.4 Transformation de Fourier

Les vecteurs propres que nous étudions sont des quantités oscillatoires. La méthode puissante de recherche est donc la transformation de Fourier. On considére un vecteur propre $(\mathbf{V_n})_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(\frac{2\pi i}{N} nj)$. On fait

$$F_k^{(n)} = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(\frac{2\pi i}{N} jn\right) \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} jk\right) = \delta_{k,n} + \delta_{n,N-n},$$

c'est-à-dire que nous obtenons deux pics.

3.1.5 Calcul de p_0

Grâce à l'invariance par la translation, $(\mathbf{P_0})_j$ sont les-mêmes pour n'importe quel j, c'est-à-dire

$$\mathbf{P_0} = p_0 \mathbf{1}. \tag{37}$$

A partir de la définition (22) nous obtenons immédiatement

$$\mathbf{P_0} = \frac{p_0}{1 + \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} p_0} \mathbf{1}. \tag{38}$$

On a aussi

$$Q\mathbf{1} = \mathbf{1} - \mathbf{P_0} = (1 - p_0)\mathbf{1},$$

et nous tirons la conclusion que $\mathbf{1}$ est un vecteur propre avec la valeur propre $1 - p_0$. A l'aide de l'expression (33) nous comprenons que cette valeur propre est maximale parce qu'elle correspond au vecteur propre $\mathbf{V}_N$ (ce qui est en bon accord avec le corollaire du théorème de Perron-Frobenuis). Alors,[15]

$$\mathbf{V}_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathbf{1}, \qquad q_N = 1 - p_0.$$

Maintenant on détermine la probabilité p_0.

Ce calcul sera plus simple si nous notons que les marches au hasard sur un cylindre (fig.5) se forment par deux processus "indépendants" [16] :

– la particule se déplace sur un cercle : elle change sa coordonnée y ("verticale" ou angulaire) ;

– la particule se déplace sur l'intervalle entre la source et la membrane : elle change sa coordonnée x (horizontale).

Le deuxième processus est connu comme les marches au hasard unidimensionnelles avec deux barrières absorbantes (la source et la membrane). Soit une barrière (par exemple, la source) à l'origine, l'autre se trouve au point N_δ. Pour une particule au point m la probabilité de tomber sur la membrane est

$$P_m = \frac{m}{N_\delta}$$

(voir [4]).

Dans notre cas le mouvement commence depuis une position $m = 1$ (la particule vient de quitter la source), c'est-à-dire que la probabilité p_0 est

$$p_0 = 1/N_\delta.$$

Comme la distance entre la source et la membrane est δ, on a

$$N_\delta = \delta/a. \tag{39}$$

En utilisant les expressions (5) et (39), nous obtenons

[15] Notons encore une fois que nous utilisons toujours une normalisation des vecteurs propres $(\mathbf{V}_\alpha \cdot \mathbf{V}_\alpha) = 1$ à la place de la normalisation $(\mathbf{V}_\alpha \cdot \mathbf{1}) = 1$. Par exemple, pour la membrane plate et cyclique on sait que $(\mathbf{V}_\alpha \cdot \mathbf{1}) = 0$ pour $\alpha \neq N$.

[16] Il faut préciser cette "indépendance". Du point de vue probabiliste ces deux processus sont corrélés parce que le changement de la coordonnée y implique une permanence de la coordonnée x. Néanmoins, c'est cette propriété qui permet de qualifier ces processus "d'indépendants" : les probabilités $P_{i\to i+1}$ et $P_{i\to i-1}$ (où $i-1$, i, $i+1$ désignent les cercles $x = i-1, i, i+1$) ne dépendent pas de la coordonnée y et elles sont égales à $1/2$.

$$p_0 = \frac{L}{N\delta}. \tag{40}$$

La valeur propre maximale q_N est

$$q_N = 1 - \frac{L}{N\delta}.$$

Nous voyons que q_N tend vers 1 quand $N \to \infty$ ou $\delta \to \infty$, comme il se doit.[17]

3.1.6 Mesure harmonique

Pour la mesure harmonique l'expression (37) s'écrit

$$\mathbf{P_0^h} = \frac{\mathbf{1}}{aN} \quad \text{ou} \quad \mathbf{P_0^h} = \frac{\mathbf{1}}{L}.$$

Nous avons obtenu que $\mathbf{P_0}$ est orthogonal aux vecteurs propres $\mathbf{V}_\alpha$ pour tous les indices $\alpha \neq N$. Par conséquent, la mesure harmonique $\mathbf{P_0^h}$ est orthogonale aux $\mathbf{V}_\alpha$

$$\forall \alpha \neq N \qquad C_\alpha = 0.$$

On a aussi

$$C_N = (\mathbf{P_0^h} \cdot \mathbf{V_N}) = \frac{1}{a\sqrt{N}}. \tag{41}$$

Cela veut dire qu'un seul mode contribue à l'expression de $Z_s(\varepsilon)$

$$Z_s(\varepsilon) = ra\frac{1-\varepsilon}{1-\varepsilon q_N}C_N^2 = ra\frac{1}{1+\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}p_0}\frac{1}{a^2N} \qquad \text{ou}$$

$$Z_s(\varepsilon) = \frac{r}{L}\frac{1}{1+\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}\frac{L}{N\delta}}. \tag{42}$$

En utilisant les expressions (12) de r et (10) de D, on s'élimine ε

$$Z_s(r) = \frac{r}{L}\frac{1}{1+rD/\delta}. \tag{43}$$

Il reste à prendre la limite $\delta \to \infty$ pour ontenir

$$Z_s(r) = \frac{r}{L}. \tag{44}$$

Ce résultat est clair : pour une électrode plate il n'existe plus la différence entre la résistance r et l'impédance spectroscopique $Z_s(r)$ (au facteur L^{-1} près).

[17] Néanmoins, $(1-q_N)/a = 1/\delta$, c'est-à-dire que la formule (32) est exactement juste seulement pour $\delta \to \infty$ (pour δ finie la limite basse d'intégration est égale à $1/\delta$). Vour une remarque 7 sur p.14.

3.1.7 Hypothèse à propos de la distribution de Cauchy

Dans l'expression (33) l'indice n prend les valeurs $0, 1, ..., N-1$. Nous démontrerons que la suite $\{q_n\}$ decroît de 0 à $N/2$, et après elle croît de $N/2$ à $N-1$. Nous changeons l'indice pour uniformiser cette suite

$$\beta = 1/2 - n/N. \tag{45}$$

L'indice nouveau appartient à l'intervalle $(-1/2, 1/2)$. Mais grâce à la propriété (35) on peut étudier la variation de β sur $[0, 1/2)$ ce que nous ferons ci-dessous. L'expression (34) s'écrit

$$q_\beta = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} a_k \cos(\pi k - 2\pi\beta k) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} a_k (-1)^k \cos(2\pi\beta k). \tag{46}$$

Maintenant nous faisons une hypothèse sur les valeurs a_k.

On sait que pour le mouvement brownien bidimensionnel les points de première intersection avec une ligne verticale ou horizontale (fig.6) sont distribués selon la loi de Cauchy (voir les annexes).

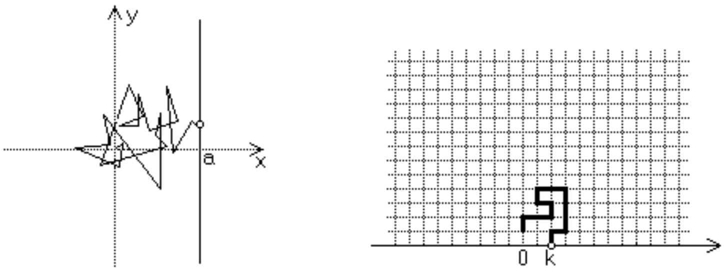

Figure 6. Le mouvement brownien bidimensionnel (à gauche) et sa version discrete (à droite).

Nous supposons que cette distribution peut être appliquée pour le cas discret[18], c'est-à-dire que pour une membrane plate et infinie la matrice Q est

$$q_{ij} = \frac{A}{1 + (i-j)^2}, \tag{47}$$

où A est la constante de normalisation,

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty} \frac{A}{1 + k^2} = 1. \tag{48}$$

Cette série est calculée explicitement (voir [5]) ce qui donne

[18] En effet, il existe la solution exacte pour le cas discret, mais elle est assez complexe pour l'utiliser dans notre calcul. On peut démontrer que la distribution de Cauchy est une bonne approximation (voir les annexes).

$$A = \frac{\tanh(\pi)}{\pi}. \tag{49}$$

En se souvenant de la normalisation (17) et de l'expression (37) de $\mathbf{P_0}$, il faut remplacer (48) par

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{A'}{1+k^2} = 1 - p_0,$$

ce qui donne

$$A' = (1-p_0)\frac{\tanh(\pi)}{\pi}. \tag{50}$$

Pour N grand la probabilité p_0 est petite (voir (40)), c'est pourquoi nous utiliserons ci-dessous la constante plus simple A. Evidemment, tous les résultats peuvent être obtenus avec la constante A'.

De plus, on fait une approximation : pour N grand la membrane plate et cyclique peut être considérée comme une membrane plate et infinie [19] (avec une erreur de l'ordre $1/N$).

3.1.8 Approximation analytique de la densité d'état

En utilisant cette hypothèse, nous pouvons réécrire l'expression (46) explicitement

$$q_\beta = A \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \frac{(-1)^k \cos(2\pi k\beta)}{1+k^2},$$

où A est donnée par la formule (49). [20]

Maintenant le cosinus ne dépend pas de N, et pour N grand on peut élargir la sommation jusqu'à l'infini. L'erreur de cet élargissement Δ (voir les annexes) dont la valeur absolue

$$|\Delta| \leq \frac{4\sin(\pi\beta)}{N} + \frac{4}{N^2} \tag{51}$$

peut être négligée.

Alors, on obtient

$$q_\beta = A \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^k \cos(2\pi k\beta)}{1+k^2}. \tag{52}$$

[19] Tandis que pour une membrane plate et non-cyclique il existe des problèmes avec les “frontières” ; le grand avantage de la membrane plate et cyclique est l'invariance par une translation.

[20] En effet, il faut prendre $A_N^{-1} = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} 1/(1+k^2)$, parce que l'expression (47) n'est juste que pour une membrane infinie ; mais pour N grand nous avons $A_N \approx A$ avec l'erreur $\sim 1/N$ (voir l'expression (51) et les annexes).

Cette série est calculée explicitement (voir [5])

$$q_\beta = A\pi \frac{\cosh(2\pi\beta)}{\sinh(\pi)}.$$

La substitution de l'expression de A dans cette formule conduit à

$$q_\beta = \frac{\cosh(2\pi\beta)}{\cosh(\pi)}. \tag{53}$$

On voit que q_β croît [21] quand l'indice β varie de 0 à 1/2. Par conséquent,

$$q_\beta \geq \tilde{q}_0 = \frac{1}{\cosh(\pi)}, \tag{54}$$

c'est-à-dire que les valeurs propres sont bornées par [22] $\tilde{q}_0 \approx 0.086$.

En effet, $\alpha = 2N\beta + 1$ est l'indice habituel des valeurs propres croissantes. Nous réécrivons les expressions (33) comme

$$q_\alpha = \frac{\cosh(2[\alpha/2]\pi/N)}{\cosh(\pi)}, \qquad \mathbf{V}_\alpha = \begin{pmatrix} e^{\pi i(1-2[\alpha/2]/N)} \\ e^{2\pi i(1-2[\alpha/2]/N)} \\ \dots \\ e^{N\pi i(1-2[\alpha/2]/N)} \end{pmatrix}.$$

(dans cette expression les crochets $[x]$ désignent la partie entière de x).

Nous nous intéressons à la densité d'état $N(q)$, c'est-à-dire à la dépendance de β par rapport à q. On inverse la relation (53)

$$\beta(q) = \frac{1}{2\pi}\ln\left(q\cosh(\pi) + \sqrt{q^2\cosh^2\pi - 1}\right) = \frac{1}{2\pi}\left(\ln\left[q + \sqrt{q^2 - \tilde{q}_0^2}\right] - \ln\tilde{q}_0\right).$$

Evidemment, nous avons $\beta(\tilde{q}_0) = 0$ et $\beta(1) = 1/2$, c'est pourquoi $N(q)$ s'écrit comme $N(q) = 2N\beta(q)$ ou [23]

$$N_a(q) = \frac{N}{\pi}\left(\ln\left[q + \sqrt{q^2 - \tilde{q}_0^2}\right] - \ln\tilde{q}_0\right). \tag{55}$$

En prenant la dérivée, on a

$$D_a(q) = \frac{N}{\pi}\frac{1}{\sqrt{q^2 - \tilde{q}_0^2}}. \tag{56}$$

[21] On a $q'_\beta = 2\pi\sinh(2\pi\beta)/\cosh(\pi) > 0$ pour $\beta > 0$.

[22] Pour la constante A' (voir (50)) on a $\tilde{q}'_0 = (1 - p_0)/\cosh(\pi)$.

[23] L'indice 'a' désigne que c'est la distribution analytique (ou bien approchée) des valeurs propres pour la membrane plate et cyclique.

3.1.9 Solution exacte pour la densité d'état

Nous avons utilisé une hypothèse que la distribution de Cauchy peut être appliquée pour le cas discret. Notre raison est simple : quand un pas a du réseau est petit, des résultats du cas discret doivent être proches de ceux du cas continu.

Heureusement, il existe la solution exacte de notre problème discret.[24] Nous utiliserons ici des résultats finals en ommettant de calcul (voir les idées générales dans les annexes).

Notons X la variable aléatoire qui donne l'abscisse du premier contact avec l'axe. Alors $P(k) = P\{X = k\}$ est la probabilité que le premier contact d'une particule, partant de $(0,1)$, avec la droite ait lieu en $(k,0)$. On sait la fonction caractéristique de X (voir les annexes)

$$\chi(s) = 2 - \cos s - \sqrt{(1-\cos s)(3-\cos s)}, \tag{57}$$

où s appartient à l'invervalle $(0, 2\pi)$.

Pour obtenir la distribution $P(k)$ il suffit de faire la transformation inverse de Fourier de $\chi(s)$,

$$P(k) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi} \chi(s) e^{-iks} ds. \tag{58}$$

On peut la faire explicitement mais ce n'est pas nécessaire. En effet, en se souvenant de l'expression (52) (ou bien (34)), nous voyons que pour obtenir q_β il suffit de savoir la fonction $\chi(s)$. Autrement dit, en prenant

$$s = 2\pi\beta + \pi,$$

nous avons

$$q_\beta = \chi(2\pi\beta + \pi) = 2 + \cos(2\pi\beta) - \sqrt{(1+\cos(2\pi\beta))(3+\cos(2\pi\beta))}. \tag{59}$$

On peut résoudre cette relation pour exprimer β

$$\beta(q) = \frac{1}{2\pi}\arccos\left(\frac{q^2 - 4q + 1}{2q}\right). \tag{60}$$

Evidemment, $\beta(1) = 1/2$, c'est-à-dire que la solution exacte pour la densité d'état intégrale est [25]

$$N_e(q) = \frac{N}{\pi}\arccos\left(\frac{q^2 - 4q + 1}{2q}\right). \tag{61}$$

La solution de l'équation

[24] Nous remercions Madame Bousquet-Mélou et Monsieur Duplantier qui ont indiqué sur cette solution.

[25] Nous utilisons l'indice 'e' pour cette solution exacte et l'indice 'a' pour la solution approximative du paragraphe précédent.

$$N_e(q) = 0 \qquad \text{ou} \qquad \frac{q^2 - 4q + 1}{2q} = 1 \tag{62}$$

donne la valeur propre minimale

$$q_0 = 3 - \sqrt{8}. \tag{63}$$

Cela signifie que toutes les valeurs propres sont bornées par $q_0 \approx 0.1716$,

$$q \geq q_0.$$

En prenant la dérivée de (61), nous trouvons

$$D_e(q) = \frac{N}{\pi} \frac{1+q}{q\sqrt{q_m - q}} \frac{1}{\sqrt{q - q_0}}, \tag{64}$$

où q_m est la deuxième solution de l'équation (62),

$$q_m = 3 + \sqrt{8}.$$

Notons que les densités $N_e(q)$ et $D_e(q)$ sont exactes tandis que les expressions (55) et (56) sont approximatives. Néanmoins, $N_a(q)$ et $D_a(q)$ sont des bonnes approximations qui peuvent être utilisées dans certains cas.

3.1.10 Fonction $F(\lambda)$

Dans le cas d'une membrane plate et cyclique la fonction $F(\lambda)$ est triviale. Nous présenterons deux voies pour l'obtenir.

Voie 1.
La substitution de q qui est exprimée à l'aide de la relation (30), dans la définition de $F(\lambda)$ (voir les expressions (28) et (32)) conduit à

$$F(\lambda) = aC^2(1 - \lambda a)\tilde{D}(1 - \lambda a).$$

En utilisant la relation (41), on obtient

$$C(q) = \begin{cases} 1/(a\sqrt{N}), & q = q_N; \\ 0, & q \neq q_N. \end{cases}$$

Le changement de variable donne

$$F(\lambda) = \begin{cases} \tilde{D}(q_N)/L, & \lambda = (1 - q_N)/a; \\ 0, & \lambda \neq (1 - q_N)/a. \end{cases}$$

ou avec l'expression (40)

$$F(\lambda) = \begin{cases} \tilde{D}(1 - a/\delta)/L, & \lambda = 1/\delta; \\ 0, & \lambda \neq 1/\delta. \end{cases}$$

La fonction $\tilde{D}(1-a/\delta)$ est continue au voisinage de 1. De plus, elle est y bornée, c'est-à-dire que nous pouvons espérer qu'il existe une limite finie pour $a \to 0$ (voir la formule (56) [26]).

Alors, pour $a \to 0$ (la limite continue) nous avons

$$F(\lambda) = \frac{\tilde{D}(1)}{L}\delta(\lambda - 1/\delta).$$

Si la distance δ est très grande, on pourra réécrire

$$F(\lambda) = \frac{\tilde{D}(1)}{L}\delta(\lambda). \tag{65}$$

Remarquons que la fonction $F(\lambda)$ est sans dimension. L'utilisation de l'expression (56) de $D_a(q)$ conduit à

$$F(\lambda) = \frac{\coth(\pi)}{\pi}\delta(\lambda).$$

Voie 2.

A l'aide de l'expression (44) la relation (32) s'écrit

$$\frac{Z_s(r)}{r} = \frac{1}{L} = \int\limits_0^\infty \frac{F(\lambda)d\lambda}{1+\alpha r\lambda}, \tag{66}$$

où α désigne la constante positive $4/\rho$. Nous voyons que la partie à gauche ne dépend pas de r. De plus, la fonction $F(\lambda)$ est positive (nous supposons que la fonction $D_a(q)$ étant toujours strictement positive, est une bonne approximation de $D(q)$, c'est-à-dire $D(q) \geq 0$). En prenant la dérivée de l'expression (66) par rapport à r, nous obtenons l'équation fonctionnelle pour $F(\lambda)$

$$\int\limits_0^\infty \frac{\lambda d\lambda}{(1+\alpha r\lambda)^2}F(\lambda) = 0.$$

Evidemment, une seule solution positive est $F(\lambda) = 0$ pour presque toutes les valeurs λ (la mesure de Lebesgue d'un ensemble des valeurs λ où $F(\lambda) > 0$, est égale à 0). La solution convenable est $F(\lambda) \sim \delta(\lambda)$.

3.1.11 Membrane plate et non-cyclique

Nous pouvons appliquer la même technique des transformées de Fourier pour la membrane plate et non-cyclique. Bien sûr, la transformée de la matrice Q ne sera plus diagonale. Néanmoins, on peut démontrer que les éléments non-diagonaux peuvent être considérés comme des perturbations. Qualitativement

[26] En effet, la fonction $aD_a(q)$ n'a des problèmes qu'au point q_0 et elle ne dépend pas de a ou N, c'est-à-dire que la limite pour $a \to 0$ existe. Néanmoins, bien que $N_a(q)$ soit une bonne approximation de $Na(q)$, pour l'instant nous ne savons rien à propos de l'approximation $D_a(q)$ de $D(q)$. Une discussion plus profonde se trouve dans la partie des résultats numériques.

c'est clair : les membranes plates cyclique et non-cyclique ne se distinguent qu'aux frontières. Pour N grand l'influance des frontières est faible, c'est pourquoi les résultats précédents sont valables approximativement (par exemple, la formule (47)).

Soit $a_{i-j} = q_{ij}$ où les valeurs q_{ij} sont données par la formule (47). En utilisant la symétrie de la matrice Q, on a $a_{-k} = a_k$ ce qui conduit à

$$Q = \begin{pmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & \dots & a_{N-1} \\ a_1 & a_0 & a_1 & \dots & a_{N-2} \\ a_2 & a_1 & a_0 & \dots & a_{N-3} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{N-1} & a_{N-2} & a_{N-3} & \dots & a_0 \end{pmatrix}. \tag{67}$$

Un élément b_{mn} de la transformée de Fourier de la matrice Q s'écrit (nous utilisons la notation précédente $l = 2\pi/N$)

$$b_{mn} = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} a_k \left(e^{iklm} + e^{-ikln}\right) \sum_{j=0}^{N-1-k} e^{ijl(m-n)} \quad \text{ou}$$

$$b_{mn} = \sum_{k=0}^{N-1} a_k \left(e^{iklm} + e^{-ikln}\right) \left[\delta_{mn} - \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{k} e^{ijl(m-n)}\right]. \tag{68}$$

Les éléments diagonaux sont

$$b_{nn} = 2\sum_{k=0}^{N-1} a_k \cos(kln) \left[1 - \frac{k}{N}\right],$$

ce qui peut être présenté sous la forme

$$b_{nn} = q_n - \Delta q_n, \quad \text{où} \quad \Delta q_n = \frac{2A}{N}\sum_{k=0}^{N-1} \frac{k\cos(kln)}{1+k^2} \tag{69}$$

(dans cette expression q_n sont les valeurs propres pour la membrane plate et cyclique, la constante A est donnée par (49)).

Les éléments non-diagonaux sont

$$b_{mn} = -\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} a_k \left(e^{iklm} + e^{-ikln}\right) e^{-il(m-n)} \frac{1 - e^{-ikl(m-n)}}{1 - e^{-il(m-n)}} \quad \text{ou}$$

$$b_{mn} = -\frac{A}{N}\sum_{k=0}^{N-1} \frac{e^{-il(m-n)/2}}{1+k^2} \frac{\sin(klm) - \sin(kln)}{\sin((m-n)l/2)}. \tag{70}$$

Maintenant il faut évaluer b_{mn} pour tous les $m \neq n$, c'est-à-dire qu'il faut démontrer que $|b_{mn}| \leq C/N$ pour tous les $m \neq n$ (ici C est une constante)[27]. Si

[27] En effet, il suffit de démontrer $|b_{mn}| \leq C/N^{\alpha}$, où $\alpha > 0$.

on obtient cette démonstation, nous pourrons négligér ces termes par rapport aux Δq_n (en utilisant les formules (80) et (82) de la théorie des perturbations). Pour l'instant ce n'est pas fini. Néanmoins, les simulations numériques montrent que cela doit être vrai.

3.1.12 Simulations numériques

Nous avons fait le calcul pour un réseau carré 250×100 sites : la membrane et la source sont représentées par $N = 250$ sites et le nombre des sites entre elles $N_\delta = 100$. Pour la simplicité nous prenons toujours $L = 1$, c'est-à-dire que $\delta = 0.4$, $a = 0.004$ (voir les formules (5) et (39)). On a obtenu la matrice Q de 250×250 éléments et le vecteur $\mathbf{P_0}$ de 250 éléments (coordonnées).

Nous présentons dans les annexes :

1) la densité d'état intégrale $N(q)$, fig.13 ;

2) la densité d'état différentielle $D(q)$, fig.14 ;

3) la densité d'état différentielle $D(q)$, fig.15 ;

4) les distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_{0.9}$ et $\mathbf{P}_{0.99}$, fig.16 ;

5) certains vecteurs propres ($\alpha \in \{10, 150, 240, 250\}$) et leurs transformées de Fourier, fig.17 ;

6) la 125-ème ligne des matrices Q, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$, fig.18 ;

7) la dépendance des éléments d'une ligne de la matrice Q par rapport à l'indice i, fig.19 ;

8) la première ligne des matrices Q, $T_{0.2}$, $T_{0.5}$, $T_{0.8}$ et $T_{0.99}$ en échelle logarithmique, fig.20a ;

9) la fonction $f_\varepsilon(i) = \sum\limits_{k=-i}^{i} T_\varepsilon(1,i)$ (par définition, $f_0(i) = \sum\limits_{k=-i}^{i} Q(1,i)$), fig.20b ;

10) les densités d'état intégrale $N(q)$ (fig.21a) et différentielle (fig.21b) pour la membrane plate non-cyclique ;

On compare ces résultats avec ceux de la partie analytique.

1. Les vecteurs propres $\mathbf{V}_\alpha$ pour $\alpha > N/2$ (il est clair que $N/2$ n'est pas une "frontière" exacte) sont en bon accord avec les prédictions de la théorie. Peut-être, ce fait signifie que les valeurs propres q_α pour $\alpha > N/2$ doivent être aussi en bon accord avec la théorie (voir 2). Cependent, les vecteurs propres $\mathbf{V}_\alpha$ pour $\alpha < N/2$ se distinguent de ceux analytiques (voir le vecteur $\mathbf{V_{10}}$ sur la fig.17 qui est assez différent du sinus de l'expression (36)). Cela veut dire que la matrice Q n'est pas parfaitement cyclique (on rappelle que les expressions (33) des vecteurs propres sont obtenues à partir de la symétrie et du caractère cyclique de la matrice ; ajoutons que la symétrisation de la matrice Q se fait automatiquement). Il faut noter que cette différence ne se définit pas par les éléments q_{ij} : les vecteurs $\mathbf{V}_\alpha$ ne dépendent que de la structure de la matrice.

Cette conclusion peut aussi être justifiée par les transformations de Fourier de ces vecteurs : pour α grand nous avons deux pics très étroites tandis que pour α petit il y a un ou deux pics assez larges (voir les transformées de Fourier sur la fig.17).

2. Il existe une différence entre la courbe approximative $N_a(q)$ et la numérique pour la densité d'état intégrale $N(q)$. Nous voyons qu'elles sont presque les mêmes pour $q > 0.5$. De plus, les formes des courbes se ressemblent pour deux cas.

D'autre part, la courbe exacte $N_e(q)$ est identique avec la numérique. C'est une bonne vérification que nos simulations numériques marchent bien. De plus, cela veut dire que pour les valeurs propres petites nous ne pouvons pas utiliser l'expression approximative (55). Autrement dit, il faut être très attentif en utilisant l'expression (47) à la place de la solution exacte (58), surtout pour les valeurs propres petites. Notons que ce comportement est assez logique : pour α petit les vecteurs propres oscillent très rapidement, il y a donc beaucoup de termes qui influent sur le résultat.

3. Nous avons aussi obtenu une approximation par une puissance pour $N(q)$,

$$N_p(q) \sim (q - q_0')^{\alpha},$$

où $q_0' = 0.1678$ est la valeur propre minimale (numérique), α est une puissance variable. La valeur optimale de α est 0.28, c'est-à-dire

$$N_p(q) \sim (q - 0.1678)^{0.28}.$$

Comme cette approximation est assez grossière, nous ne la présentons pas.

4. Il y a des problèmes avec la densité d'état différentielle $D(q)$, parce qu'il n'existe pas de méthode pour l'obtenir sauf la dérivation de $N(q)$. Nous utilisons donc la formule approximative

$$D(q_i) = \frac{N(q_{i+k}) - N(q_i)}{q_{i+k} - q_i}.$$

En prenant $k = 1$ (c'est-à-dire deux valeurs propres les plus proches), nous devons obtenir le résultat le plus exact. Malheureusement, cette idée naîve ne marche pas. En effet, pour la membrane plate et cyclique on a obtenu (voir (35)) que les valeurs propres sont dégénérées deux fois (sauf $q_{N/2}$ et q_N). Evidemment, il n'y a pas de dégénérescence exacte pour les simulations numériques : les valeurs de chaque paires de valeurs propres sont très proches (mais pas strictement égales !), tandis que la distance entre ces paires est plus longue (cette distance est supérieure à deux ordres de grandeur par rapport à l'écart au sein d'une paire, voir la fig.14). Nous obtenons donc beaucoup des sauts.

Bien sûr, on peut prendre $k = 2$ ce qui donne la courbe lente (la courbe 'sans dégénérescence' sur la fig.14). Bien plus, c'est la courbe qui doit être utilisée pour le calcul suivant. Mais le problème général reste ouvert parce que pour les autres membranes nous ne savons rien à propos de la dégénérescence des valeurs propres, c'est pourquoi nous ne pouvons pas choisir une bonne valeur pour k. Sans aucune information supplémentaire nous utiliserons $k = 1$ pour obtenir $D(q)$.

Nous voyons sur la fig.15 que les fonctions exacte $D_e(q)$ (64) et numérique $D(q)$ sont presque identiques.

5. Les distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_{0.9}$ et $\mathbf{P}_{0.99}$ (fig.16) sont égales à $p_0\mathbf{1}$, $p_{0.9}\mathbf{1}$ et $p_{0.99}\mathbf{1}$, où p_ε est donnée par (38). Des petites perturbations ne sont qu'un bruit blanc.

6. La fig.18 présente la décroissance des éléments des matrices Q, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ avec l'indice i. Nous voyons que les courbes deviennent de plus en plus étales quand ε augmente (ce qui en bon accord avec le nom de l'opérateur T_ε comme l'opérateur d'étalement). De plus, les courbes de $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ sont plus régulières que celle de Q. Ce comportement est une bonne vérification de la méthode de l'arpenteur mentionnée dans l'introduction.

7. L'opérateur d'étalement T_ε est important pour une vérification de la méthode de l'arpenteur. La dépendance d'une ligne de cet opérateur (ou bien de cette matrice $T_\varepsilon(j,i)$) par rapport à l'indice i pour j fixé est présentée sur la fig.20a. En se souvenant que la valeur $\varepsilon = 0.5$ correspond à la longueur $\Lambda = a$ (voir l'expression (11)), ce n'est pas trop étonnant que la courbe pour $\varepsilon = 0.5$ s'approche à celle de la matrice Q. Néanmoins, cette propriété peut être utile pour analyser l'opérateur d'étalement. Notons que les courbes sont séparées par la courbe correspondant à la matrice Q : pour $\varepsilon < 0.5$ (ou bien $\Lambda < a$) les courbes se trouvent au-dessous de cette “frontière” tandis que pour $\varepsilon > 0.5$ (ou bien $\Lambda > a$) elles se trouvent au-dessus.

Nous pouvons donc tirer une conclusion à propos de l'opérateur d'étalement. Généralement, il a la même structure que la matrice Q, sauf la région d'une longueur Λ autour de 0.

Sur la fig.20b nous présentons la fonction $f_\varepsilon(i)$

$$f_\varepsilon(i) = \begin{cases} \sum\limits_{k=-i}^{i} T_\varepsilon(1,i), & \varepsilon \neq 0 \\ \sum\limits_{k=-i}^{i} Q(1,i), & \varepsilon = 0, \end{cases}$$

qui a un sens de la distribution intégrale de probabilité. Evidemment, cette fonction tend vers 1 quand $i \to \infty$. L'étude de $f(i)$ permet de trouver *une longueur efficace* de la région où la moitié des particules est absorbée. Cette longueur est donnée par l'équation $f(\Lambda') = 1/2$. Notre calcul montre qu'elle est presque égale à Λ. Nous voyons que la longueur de Wagner joue un rôle de la médiane de la distribution.

Remarquons que c'est une autre justification de la méthode de l'arpenteur.

Le cas de la membrane plate et non-cyclique n'est pas intéressant. En effet, ce cas est aussi trivial, mais à la différence de la membrane cyclique, il n'y a pas de solution explicite. On peut appliquer la même technique, mais nous obtiendrons des résultats approximatifs. C'est pourquoi nous ne la prendrons pas en compte. Néanmoins, il y a une figure (fig.21) qui représente les densités d'état intégrale et différentielle pour cette membrane. Nous voyons qu'il existe une petite différence entre $N(q)$ et $N_e(q)$ quand $q < 0.5$. Cela vérifie l'approximation ci-dessus.

3.2 Membranes concave et convexe

Les premières formes vraiment intéressantes sont les membranes concave et convexe (fig.7). Premièrement, ce sont des formes non-triviales et, en même temps, les plus simples. Elles forment la base pour construire les surfaces plus irrégulières (voir la membrane "fractale" ci-dessous). Deuxièmement, ces formes sont identiques du point de vue géométrique, c'est pourquoi on essayera de les comparer. Peut-être, est-ce la clé d'un problème de reconstruction de la géométrie des membranes. Enfin, pour elles on peut obtenir certaines approximations très utiles.

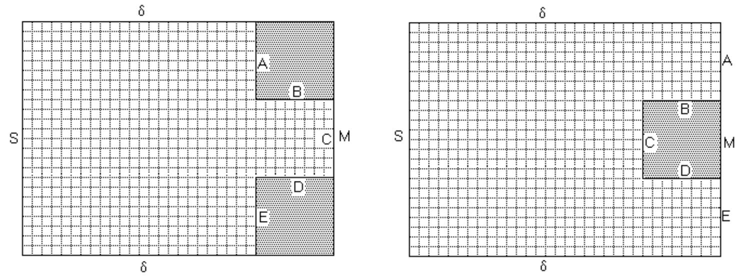

Figure 7. Les membranes concave (à gauche) et convexe (à droite).

3.2.1 Simplification de la matrice Q

Considérons la matrice Q. Comme la membrane concave (ou convexe) consiste en 5 côtés que nous désignons A, B, C, D, E (fig.7), il est commode de représenter la matrice Q comme ci-dessous

$$Q = \begin{pmatrix} Q_{AA} & Q_{AB} & Q_{AC} & Q_{AD} & Q_{AE} \\ Q_{BA} & Q_{BB} & Q_{BC} & Q_{BD} & Q_{BE} \\ Q_{CA} & Q_{BC} & Q_{CC} & Q_{CD} & Q_{CE} \\ Q_{DA} & Q_{BD} & Q_{DC} & Q_{DD} & Q_{DE} \\ Q_{EA} & Q_{BE} & Q_{EC} & Q_{ED} & Q_{EE} \end{pmatrix}. \tag{71}$$

Maintenant nous faisons une approximation pour l'expression (71).

On suppose que N est assez grand, c'est-à-dire que chaque côté de la forme peut être considéré comme une petite membrane plate. [28] Cela signifie que toutes les matrices en diagonale sont égales à la matrice Q_0 que nous avons étudié ci-dessus.

Evidemment, il existe une "interaction" entre ces "membranes élémentaires" que nous représentons par des matrices V_i. Dans cette approximation la matrice Q pour ces deux formes s'écrit [29]

[28] Notons qu'une membrane cyclique est plus naturelle qu'une membrane non-cyclique. En effet, pour la membrane cyclique les particules peuvent aller hors des frontières tandis que pour la membrane non-cyclique les particules sont bornées par les "murs" réfléchissants.

[29] Nous négligeons l'interaction entre les côtés qui se trouvent assez loin l'un de l'autre.

$$Q_u = \begin{pmatrix} Q_0 & V_1 & 0 & 0 & 0 \\ V_1 & Q_0 & V_2 & V_3 & 0 \\ 0 & V_2 & Q_0 & V_2 & 0 \\ 0 & V_3 & V_2 & Q_0 & V_1 \\ 0 & 0 & 0 & V_1 & Q_0 \end{pmatrix}, \quad Q_d = \begin{pmatrix} Q_0 & V_1 & 0 & 0 & 0 \\ V_1 & Q_0 & V_2 & 0 & 0 \\ 0 & V_2 & Q_0 & V_2 & 0 \\ 0 & 0 & V_2 & Q_0 & V_1 \\ 0 & 0 & 0 & V_1 & Q_0 \end{pmatrix}. \tag{72}$$

Notons que cette approximation est assez grossière. Néanmoins, elle permet d'expliquer le fait que les valeurs propres sont distribuées approximativement selon la loi (55). En effet, nous pouvons considérer les matrices d'interaction V_i comme des perturbations de la matrice Q_0. De plus, ces perturbations sont non-diagonales, c'est-à-dire qu'une correction des valeurs propres de (53) qui est donnée par la formule (82), est de deuxième ordre (voir les annexes).

3.2.2 Simulations numériques

Au contraire de la membrane plate, nos formes actuelles sont anguleuses ce qui cause certaines difficultés pour la discrétisation. En effet, les coins rentrant (de 90°, on regarde depuis centre du réseau) ne sont pas accessibles tandis que les coins saillant (de 270°) sont accessibles par deux voies d'arrivées (fig.8a, 8c). Nous ne pouvons pas ajouter ou enlever une arête du réseau : cette opération détruit la réversibilité du mouvement.

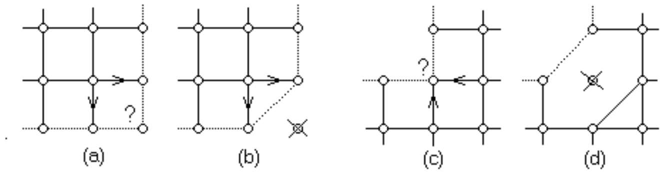

Figure 8. Les problèmes avec les coins : le coin de 90° n'est pas accessible (a), le coin de 270° est accessible par deux voies (c). Les problèmes seront résolus si on enlève tous les coins (b), et pour les coins de 270° on remplace deux arêtes par une (d).

Nous proposons la solution suivante :

1) pour chaque coin saillant on remplace les deux arêtes le formant par une arête unique en diagonale ;

2) on enlève tous les coins (fig.8b, 8d).

Le résultat de cette opération pour la membrane concave est présenté sur la fig.9.

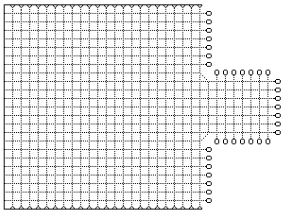

Figure 9. Le réseau transformé avec la membrane concave.

Notons que cette technique sera utilisée pour toutes les autres formes avec des coins.

Les résultats obtenus sont présentés dans les annexes :

1) la densité d'état intégrale $N(q)$ pour les membranes concave (fig.22) et convexe (fig.24) ;

2) la densité d'état différentielle $D(q)$ pour les membranes concave (fig.23) et convexe (fig.25) ;

3) la comparaison du comportement des densités d'état différentielles $D(q)$ pour les membranes concave et convexe, fig.26 ;

4) la distribution $\mathbf{P_0}$ pour les membranes concave, convexe et plate-cyclique, fig.27 ;

5) les distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_{0.9}$ et $\mathbf{P}_{0.99}$ pour les membranes concave (fig.28) et convexe (fig.29) ;

6) certains vecteurs propres ($\alpha \in \{10, 150, 240, 250\}$) et leurs transformées de Fourier pour les membranes concave (fig.30) et convexe (fig.32) ;

7) les vecteurs propres les plus lents ($\alpha \in \{242...249\}$) pour la membrane concave, fig.31 ;

8) la dépendance des lignes 1, 50, 100 des matrices Q, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ par rapport à l'indice i pour la membrane concave, fig.33 ;

9) les lignes 50, 125, 200 des matrices $T_{0.1}$, $T_{0.5}$, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ pour la membrane concave, fig.34 ;

10) les fonction $C(q)$ et $log(C^2(q))$ pour les membranes concave et convexe, fig.35 ;

11) les vecteurs propres "bizarres" pour les membranes concave et convexe, fig.36 ;

12) la fonction $F(\lambda)$ pour les membranes concave et convexe en deux échelles (linéaire et logarithmique), fig.37(a,b) ;

13) l'impédance spectroscopique $Z_s(\sigma)$ pour les membranes concave, convexe et plate-cyclique, fig.38 ;

14) l'erreur relative $(Z_s(\varepsilon) - Z_s^a(\varepsilon))/Z_s(\varepsilon)$ pour les membranes concave et convexe, fig.39 ;

15) l'impédance spectroscopique $Z_s(r)$ pour les membranes concave, convexe et plate-cyclique, fig.40 ;

16) la fraction $Z_s(r)/r$ pour les membranes concave, convexe et plate-cyclique, fig.41 ;

Commentaires :

1. Les courbes de la densité d'état intégrale $N(q)$ pour les membranes concave (fig.22) et convexe (fig.24) sont très proches de celle de la membrane plate et cyclique, $N_e(q)$. Néanmoins, nous ne pouvons pas obtenir la même approximation pour la fonction $D(q)$. En effet, nous voyons sur les fig.23 et fig.25 où on présente la densité d'état différentielle, que l'expression (64) de $D_e(q)$ ne marche pas. Peut-être, c'est le problème de la dérivation numérique (nous l'avons déjà mentionné ci-dessus) : les valeurs propres peuvent être dégénérées, ce qui conduit au comportement irrégulier de $D(q)$.

On peut aussi comparer les densités d'état différentielles pour les membranes concave et convexe (fig.26). Il est remarquable que les pics de deux courbes sont en opposition. Cependant, cela peut être provoqué par des erreurs de calcul.

2. Les distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_{0.9}$ et $\mathbf{P}_{0.99}$ (voir les fig.27, 28, 29) répétent (en général) les formes des membranes. Malheureusement, cette propriété ne permet pas d'obtenir la forme elle-même. En effet, on ne peut mesurer les caractéristiques locales que dans le cas où la forme est connue. Au contraire, pour une forme inconnue nous ne pouvons que mesurer les caractéristiques totales (un flux total, une impédance spectroscopique, etc.).

3. Un des buts généraux de notre travail est létude des propriétés de transport, c'est-à-dire des objets comme C_α, $D(q)$, $F(\lambda)$, $Z_s(r)$. Il est clair que les vecteurs propres jouent un rôle principal. En effet, nous avons déjà vu que la densité d'état intégrale ne dépend presque pas de la forme. De plus, les vecteurs propres dépendent plus de la structure matricielle que des éléments de la matrice.

Pour les membranes concave et convexe nous présentons certains vecteurs propres (fig.30, 32) qui montrent les tendances générales. De plus, pour la membrane concave on présente les vecteurs propres les plus lents (fig.31), l'influence desquels est principale. En effet, nous montrerons (voir fig.35) que dans la somme (27) les termes prepondérants correspondent aux quelques [30] valeurs propres les plus proches de 1. C'est très important parce que cela nous permet de diminuer considérablement le nombre des vecteurs à étudier (par exemple, pour $N = 250$ nous avons 250 vecteurs propres, tandis qu'il y a 10 vecteurs parmi les autres qui définissent la contribution de $95 - 98\%$).

En voyant les fig.30, 31, 32, nous pouvons tirer certaines conclusions :

– les vecteurs propres $\mathbf{V}_\alpha$ sont plus lents quand α est plus phoche de N ; cela justifie que ces vecteurs sont les plus importants. En effet, si un vecteur oscille rapidement, son produit scalaire avec un vecteur lent (la mesure harmonique $\mathbf{P_0^h}$) doit être presque égal à 0.

– les vecteurs "rapides" (par exemple, $\alpha < N/2$, bien que la "frontière" $N/2$ ne soit pas exacte) se "divisent" en 5 domaines (voir $\mathbf{V}_{150}$ sur la fig.30, par exemple) ce qui justifie la présentation générale (71) de la matrice Q et son approximation (72). Peut-être, on peut "composer" ces vecteurs propres à partir

[30] Une dizaine, par exemple ; nous avons vu que pour la membrane plate et cyclique il existe un seul terme C_N qui contribue à la somme (27).

des "composantes élémentaires". La justification de cette hypothèse exige une analyse plus profonde.

– nous voyons aussi qu'il existe deux "fréquences" dominantes (deux pics de la transformée de Fourier) comme pour la membrane plate et cyclique. De plus, d'autres fréquences apparaissent. Cela signifie que la fonction $C(q)$ doit être assez molle. [31]

4. Pour vérifier la méthode de l'arpenteur nous étudions les propriétés de l'opérateur d'étalement T_ε. La fig.33 représente la décroissance des éléments d'une ligne (nous avons choisi les lignes 1, 50, 100 qui sont assez représentatives) des matrices Q, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ avec l'indice i. On voit que l'opérateur T_ε régularise la courbe initiale (de Q) d'autant plus que ε est plus grande.

Sur la fig.34 nous voyons comment l'épaisseur du pic dépend de ε : pour ε petite ($\varepsilon = 0.1$, $\varepsilon = 0.5$) les pics sont très étroits tandis que les pics pour ε autour de 1 (les valeurs que nous utilisons habituellement, $\varepsilon = 0.9$ et $\varepsilon = 0.99$) sont larges. Qualitativement cela signifie que pour ε petite (autour de 0) la distribution $\mathbf{P_0}$ ne se change presque pas en traversant la membrane. Autrement dit, la probabilité $(\mathbf{P}_\varepsilon)_j$ se définit par quelques sites au voisinage du site j. Au contraire, pour ε grande (autour de 1) la distribution $\mathbf{P_0}$ s'étale (voir fig.28,29), c'est-à-dire que la probabilité $(\mathbf{P}_\varepsilon)_j$ se définit par plusieurs sites autour du site j.

5. Nous avons déjà mentionné la dépendance de $C(q)$ par rapport à q (fig.35). Notons que le maximum de la courbe $C(q)$ ne correspond pas à la valeur propre maximale q_N (en comparant les figures 27 et 30,32, nous voyons que la distribution $\mathbf{P_0}$ et le vecteur $\mathbf{V_N}$ sont en opposition.

Cette propriété n'est pas trop importante : dans tous les cas il faut tenir compte de quelques vecteurs propres avec α autour de N.

6. Nous avons obtenu deux valeurs propres qui sont presque égales à 0. De plus, les vecteurs propres correspondants sont assez remarquables (fig.36). Malheureusement, ce n'est qu'une "duperie" du programme qui calcule ces vecteurs propres. On va expliquer.

Les sauts que nous voyons correspondent aux coins de 90°, qui "se trouvent" [32] entre sites k et $k+1$. On écrit une définition d'un vecteur propre de ce type ($\mathbf{V_1}$, par exemple) $Q\mathbf{V_1} = q_1\mathbf{V_1}$ ou

[31] Cette fonction peut être considérer comme la transformée de Fourier du produit $\mathbf{P_0^h}$ et $\mathbf{F_k}$ (une convolution dans l'espace réel correspond à un produit dans l'espace réciproque). Comme $\mathbf{F_k}$ a deux pics, ce produit a aussi deux pics ce qui implique que la transformée de Fourier doit être molle.

[32] Les coins ils-mêmes sont enlevés.

$$\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} & q_{14} & \cdots & q_{1N} \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} & q_{24} & \cdots & q_{2N} \\ q_{31} & q_{32} & q_{33} & q_{34} & \cdots & q_{3N} \\ q_{41} & q_{42} & q_{43} & q_{44} & \cdots & q_{4N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ q_{N1} & q_{N2} & q_{N3} & q_{N4} & \cdots & q_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ .. \\ 1 \\ -1 \\ .. \\ 0 \end{pmatrix} = q_1 \begin{pmatrix} 0 \\ .. \\ 1 \\ -1 \\ .. \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Cette équation matricielle est équivalent au système des équations

$$\begin{cases} q_{1,k} - q_{1,k+1} = 0 \\ \cdots \\ q_{k,k} - q_{k,k+1} = q_1 \\ q_{k+1,k} - q_{k+1,k+1} = -q_1 \\ \cdots \\ q_{N,k} - q_{N,k+1} = 0 \end{cases}.$$

Mais toutes ces équations doivent être les mêmes parce qu'elles expriment un fait simple : les probabilités d'aller de n'importe quel site j aux sites k et $k+1$ sont égales (fig.8a). En pratique, il existe une erreur [33] des simulations qui conduit aux "vecteurs propres" de ce type. En effet, le vecteur $\mathbf{V_1}$ (comme pour le vecteur $\mathbf{V_2}$ correspondant au deuxieme coin) doit être remplacé par $\mathbf{0}$, mais le vecteur nul n'est pas un vecteur propre !

Nous concluons ici que

1) les vecteurs $\mathbf{V_1}$ et $\mathbf{V_2}$ ne sont pas corrects (nous avons donc perdu deux vecteurs propres) ;

2) les valeurs propres q_1 et q_2 sont égales à 0.

Pour corriger cette erreur il faut faire $q_{k,k} = q_{k,k+1} = q_{k+1,k} = q_{k+1,k+1}$ explicitement.

Evidemment, ces raisonnements restent justes pour n'importe quelle forme avec les coin de 90°. Alors, on obtient le résultat important que nous avons mentionné et un peu étudié dans une partie précédente :

Chaque coin de 90° donne une valeur propre nulle.

7. La fonction $F(\lambda)$ est concentrée autour de 0 comme il se doit (fig.37a,b). Le comportement irrégulier de $F(\lambda)$ est lié à celui de la fonction $C(q)$ (voir fig.35) et à la dérivation numérique de $N(q)$ (pour obtenir $D(q)$) que nous avons discuté ci-dessus. Remarquons une propriété intéressante : les courbes de $F(\lambda)$ pour les membranes concave et convexe sont en opposition (voir fig.37b). Nous ne pouvons pas dire exactement si c'est l'imperfection du calcul numérique ou la propriété intrinsèque de la membrane.

8. A l'aide de l'expression (27) on peut obtenir l'impédance spectroscopique $Z_s(\varepsilon)$, une seule caractérisque de la membrane qui peut être mesurée. La fig.38 représente la dépendance de $Z_s(\sigma)$ ($\sigma = 1 - \varepsilon$, voir (7) par rapport à σ pour les membranes concave, convexe et plate-cyclique (la dernière impédance se donne

[33] En effet, elle est petite parce que q_1 est de l'ordre 10^{-5}.

par la formule explicite (42)). Nous voyons que l'impédance spectroscopique est presque la même pour les membranes concave et convexe, et les deux sont supérieure à celle de la mambrane plate et cyclique.

La fig.40 montre la dépendance de l'impédance spectroscopique par rapport à la résistance r qui est liée à ε par la relation (12).[34]

Remarquons que la dépendance de $Z_s(r)$ par rapport à r pour la membrane plate et cyclique doit être linéaire (voir (44)) tandis qu'on voit une petite courbure. Il est clair que cette différence est liée au fait que nous ne prenons pas la limite $\delta \to \infty$. Il est mieux de garder cette courbure puisqu'elle reste pour les autres membranes (pour elles nous ne pouvons pas prendre la limite $\delta \to \infty$ explicitement).

La fraction $Z_s(r)/r$ est constante pour la membrane plate et cyclique tandis que nous obtenons une décroissance lente (fig.41). La cause est ancienne : la distance δ est finie. Les autres courbes décroissent aussi.

9. Nous avons déjà indiqué le fait que les propriétés de transport (l'impédance, par exemple) se définissent par les vecteurs propres les plus lents. Pour montrer ce fait explicitement, nous avons calculé l'impédance spectroscopique exacte $Z_s(\varepsilon)$ et celle approximative $Z_s^a(\varepsilon)$, en utilisant les 10 vecteurs propres les plus lents. L'erreur relative $(Z_s(\varepsilon) - Z_s^a(\varepsilon))/Z_s(\varepsilon)$ est inférieure à 9% pour la membrane concave et à 15% pour la membrane convexe (fig.39). Elle diminue quand ε augmente : pour $\varepsilon \in (0.9, 1)$ elle est inférieure à 3% et à 7% respectivement. Ce comportement est assez logique. En effet, nous avons la somme des termes $\frac{C^2(q_\alpha)}{1-\varepsilon q_\alpha}$. Le dénominateur $1 - \varepsilon q_\alpha$ est borné par $1 - \varepsilon$, c'est-à-dire que

$$\frac{1}{1 - \varepsilon q_\alpha} < \frac{1}{1 - \varepsilon}.$$

Pour ε petite on peut ne pas garder le dénominateur, et la somme ne se définit que par le facteur $C^2(q_\alpha)$. Dans ce cas la croissance de $C(q)$ permet d'utiliser seulement quelques termes pour lesquels $C(q)$ est la plus grande, mais cette approximation n'est pas très précise (l'erreur relative est $9-15\%$). Au contraire, pour ε grande (au voisinage de 1) le facteur $\frac{1}{1-\varepsilon q_\alpha}$ peut être dominant : un petit changement de q_α conduit à un grand changement de $\frac{1}{1-\varepsilon q_\alpha}$. En se souvenant de la courbe $N(q)$, nous comprenons qu'il existe quelques (10, par exemple) valeurs propres q_α qui se trouvent au voisinage de 1 (la plupart des valeurs propres est concentrée autour de q_0', voir fig.22). Alors, pour ε grande la contribution des vecteurs propres les plus lents est considérablement dominante (et l'erreur relative est $2-3\%$).

10. Pour justifier la présentation (72) de la matrice Q pour les membranes concave et convexe nous avons étudié chaque bloc séparement. Nous présentons ici les éléments maximals de chaque bloc. Bien sûr, cette "évaluation" est très grossière, parce qu'un seul élément ne détermine pas les propriétés d'une matrice.

[34] Notons que la relation (12) contient aussi le facteur τ/a qui dépend de la discrétisation ; nous introduisons la variable $r' = \varepsilon/(1-\varepsilon)$ qui est proportionnelle à r. La dépendance de $Z_s(r)$ sera présentée par rapport à r'.

Néanmoins, elle est suffisante pour vérifier notre présentation (72). En raison de la simplicité pour des éléments petits nous ne gardons que leurs ordres de grandeur

$$Q_u = \begin{pmatrix} 0.49 & 0.06 & 10^{-4} & 10^{-3} & 10^{-3} \\ 0.06 & 0.39 & 0.30 & 10^{-3} & 10^{-3} \\ 10^{-4} & 0.30 & 0.36 & 0.31 & 10^{-4} \\ 10^{-3} & 10^{-3} & 0.31 & 0.40 & 0.05 \\ 10^{-3} & 10^{-3} & 10^{-4} & 0.05 & 0.51 \end{pmatrix},$$

$$Q_d = \begin{pmatrix} 0.49 & 0.31 & 10^{-4} & 10^{-5} & 10^{-5} \\ 0.31 & 0.40 & 0.05 & 10^{-4} & 10^{-5} \\ 10^{-4} & 0.05 & 0.40 & 0.06 & 10^{-3} \\ 10^{-5} & 10^{-4} & 0.06 & 0.39 & 0.30 \\ 10^{-5} & 10^{-5} & 10^{-3} & 0.30 & 0.51 \end{pmatrix}.$$

Ces deux matrices (l'indice 'u' désigne la membrane concave, l'indice 'd' désigne la membrane convexe) montrent quels côtés "interagissent" le plus fortement. Notons encore une fois que ces nombres expriment une situation de façon très qualitative. [35]

3.2.3 Membrane fractale

Un exemple de la forme assez irrégulière est présenté sur la fig.10. Cette forme est la deuxième itération dans le processus de construction d'une courbe fractale qui s'appelle *la courbe de Koch*. Néanmoins, nous l'appellons "membrane fractale" en raison de la simplificité.

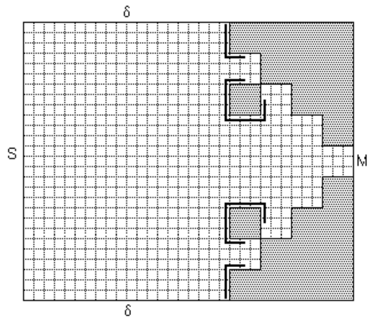

Figure 10. La membrane "fractale" (plus précisement, sa deuxième itération).

Evidemment, il n'existe pas de résultats analytiques dans ce cas. Il y a une idée intéressante à propos de la présentation de la matrice Q. On voit que chaque "grand" côté de cette membrane est aussi une petite membrane que nous avons

[35] Par exemple, la plupart des éléments de la matrice V (on utilise des notations précédentes, voir (72)) est de l'ordre $10^{-4} - 10^{-3}$ tandis qu'un élément maximal est 0.30.

étudié ci-dessus. On peut donc essayer de présenter la matrice Q de la manière précédente (voir (71)). Cette idée peut être très utile pour la membrane vraiment fractale parce que chaque matrice en diagonale ressemble à la matrice initiale après une dilatation. Malheureusement, cette analyse sort du carde de notre travail.

Nous présenterons ici certains résultats numériques pour comparer la membrane fractale avec la membrane concave.

Dans les annexes :
1) la densité d'état intégrale $N(q)$, fig.42 ;
2) la densité d'état différentielle $D(q)$, fig.43 ;
3) les distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_{0.9}$ et $\mathbf{P}_{0.99}$, fig.44 ;
4) les fonctions $C(q)$ et $log(C^2(q))$, fig.45 ;
5) certains vecteurs propres ($\alpha \in \{20, 150, 240, 250\}$) et leurs transformées de Fourier, fig.46 ;
6) la dépendance des lignes 1, 50, 100 des matrices Q, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ par rapport à l'indice i, fig.47 ;
7) la fonction $F(\lambda)$ pour les membranes fractale et concave en deux échelles (linéaire et logarithmique), fig.48(a,b) ;
8) l'impédance spectroscopique $Z_s(\sigma)$ pour les membranes fractale, concave et plate-cyclique en deux échelles (linéaire et logarithmique), fig.49(a,b) ;
9) l'impédance spectroscopique $Z_s(r)$ et la fraction $Z_s(r)/r$ pour les membranes fractale, concave et plate-cyclique, fig.50(a,b) ;

Commentaires :
1. Evidemment, nous avons obtenu 12 valeurs propres nulles parce que notre forme avait 12 coins de 90°. Ce fait est exprimé par un plateau sur la courbe de la densité d'état intégrale $N(q)$ (voir fig.42). De plus, nous voyons que cette courbe répéte le comportement général de $N_e(q)$, mais avec des perturbations plus grandes que dans le cas de la membrane concave. C'est pourquoi la densité d'état différentielle $D(q)$ est plus irrégulière (fig.43).

2. La distribution $\mathbf{P_0}$ est plus irrégulière que celle de la membrane concave (fig.44). Notons que cette courbe justifie l'idée de la surface efficace (voir l'introduction ; les détails sont exprimés dans [1] et [2]) : il existe une surface efficace à travers laquelle la plupart des particules se passe. Nous voyons que quatre grands pics correspondent aux quatre parties de cette surface (voir aussi fig.10). C'est une vérfication explicite de la méthode de l'arpenteur.

3. Les vecteurs propres (fig.46) se présentent par des "composantes" (par exemple, $\mathbf{V}_{150}$) correspondant aux différents côtés. De plus, il y a déjà presque toutes les fréquences pour les vecteurs les plus lents (voir F_{240}). Evidemment, nous ne pouvons pas obtenir les expressions explicites pour ces vecteurs, néanmoins on peut espèrer "construire" des vecteurs approximatifs à partir des composantes élémentaires.

4. Les oscillations des vecteurs propres et la forme assez irrégulière de la distribution $\mathbf{P_0}$ conduisent au comportement irrégulier de la fonction $C(q)$ (fig.45).

Notons qu'il existe quelques grands pics, de plus, le pic le plus grand ne correspond pas à la valeur propre maximale ce que nous avons déjà remarqué pour les membranes concave et convexe. Ce comportement implique la même propriété pour la fonction $F(\lambda)$. Il y a deux pics dominants, bien plus, deuxième pic ressemble à un pic unique de la fonction $F(\lambda)$ pour la membrane concave. La comparaison de deux courbes (pour les membranes fractale et concave) est plus claire en échelle logarithmique (fig.48b).

5. On a présenté les dépendances de l'impédance spectroscopique $Z_s(\varepsilon)$ et $Z_s(r)$ par rapport à ε et r pour les membranes fractale, concave et plate-cyclique. Nous voyons une propriété remarquable : la courbe $Z_s(r)$ (et, bien sûr, $Z_s(\varepsilon)$) pour la membrane fractale se croise avec celle pour la membrane concave pour $r' \approx 60$, c'est-à-dire que pour ε grande l'impédance spectroscopique de la membrane fractale est inférieure à celle de la membrane concave. Pour l'instant nous n'avons pas d'explication raisonnable de ce résultat.

3.3 Membrane pointe

Une autre forme importante est l'aiguille (fig.11). Elle représente des détails très étroits d'une membrane réelle. De plus, il existe des résultats analytiques pour cette forme (voir, par exemple, [9]) qui sont hors de notre travail. C'est pourquoi nous nous limiterons aux résultats numériques.

Il faut dire que cette forme est entièrement théorique parce que l'épaisseur de l'aiguille est ègale à 0, c'est-à-dire que les particules doivent être annihilées sur l'aiguille. Néanmoins les études de cette forme permettent de comprendre les propriétés générales des géométries avec des détails étroits.

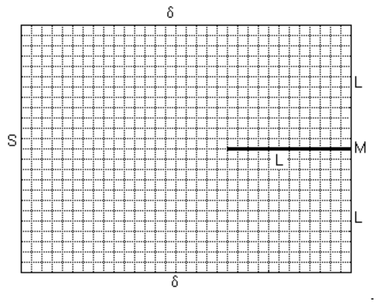

Figure 11. La membrane pointe.

Dans les annexes :

1) la densité d'état intégrale $N(q)$, fig.51 ;

2) la densité d'état différentielle $D(q)$, fig.52 ;

3) les distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_{0.9}$ et $\mathbf{P}_{0.99}$, fig.53 ;

4) la dépendance de $\mathbf{P}_\varepsilon(100)$ par rapport à $1-\varepsilon$, fig.54 ;

5) certains vecteurs propres ($\alpha \in \{10, 100, 190, 200\}$) et leurs transformées de Fourier, fig.55 ;

6) la dépendance des lignes 1, 50, 100 des matrices Q, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ par rapport à l'indice i, fig.56 ;

7) les fonctions $C(q)$ (fig.57) et $log(C^2(q))$ (fig.58) ;

8) la fonction $F(\lambda)$ en deux échelles (linéaire et logarithmique), fig.59(a,b) ;

9) l'impédance spectroscopique $Z_s(\sigma)$ pour les membranes pointe, concave et plate-cyclique, fig.60 ;

10) l'impédance spectroscopique $Z_s(r)$ pour les membranes pointe, concave et plate-cyclique, fig.61 ;

Commentaires :

1. La densité d'état différentielle $D(q)$ (fig.52) a un comportement en un certain sens régulier, la cause des sauts est plutôt la dégénérescence des valeurs propres (et par conséquent, une mauvaise dérivation numérique) qu'une propriété intrinsèque de la forme.

2. La distribution $\mathbf{P_0}$ est concentrée autour de la pointe de l'aiguille (fig.53). Nous présentons aussi la dépendance de la probabilité $\mathbf{P}_\varepsilon(100)$ sur la pointe de l'aiguille par rapport à ε (plus précisement, par rapport à $\log(1-\varepsilon)$). Cette courbe est intéressante pour la comparaison avec les résultats analytiques.

3. Les vecteurs propres (fig.55) se comportent comme d'habitude : on peut les diviser en 4 domaines (l'aiguille se présente par deux côtés), chaque partie oscille avec des amplitudes différentes. Il existe deux pics assez larges dans les transformées de Fourier.

4. A la différence de la membrane plate (pour laquelle un seul vecteur propre contribue), pour la membrane pointe il y a beaucoup de termes C_α^2 qui sont considérables. Nous voyons sur la fig.57 (ou bien fig.58) que le module de la fonction $C(q)$ augmente assez rapide. C'est pourquoi nous obtenons deux pics pour la fonction $F(\lambda)$ (fig.59), qui sont aussi éloignés (le deuxieme pic correspond à la valeur $\lambda = 80$). De plus, il existe quelques pics plus petits entre ces deux principaux.

Nous avons donc une forme dont les propriétés sont différentes des précédentes (membranes concave et convexe). Cela peut impliquer que la méthode de l'arpenteur ne marche pas pour les membranes de ce type.

5. Les fig.60, 61 montrent la dépendance de l'impédance spectroscopique par rapport à σ et r. Pour la comparaison nous avons aussi présenté les courbes pour les membranes concave et plate-cyclique. On voit que $Z_s(\sigma)$ pour la membrane pointe est supérieure à celle pour les autres membranes.

3.4 Pore profond

La forme inverse de l'aiguille est un pore profond (évidemment, nous ne pouvons pas annuler son épaisseur, mais ce n'est pas nécessaire). La fig.12 donne sa configuration.

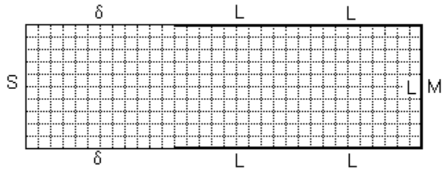

Figure 12. Le pore profond.

Notons que pour le pore profond chaque côté se trouve assez proche des autres, c'est-à-dire qu'il interagit avec tous les autres. Par conséquent, il n'y a pas les simplifications pour la matrice Q que nous avons faites ci-dessus.

Dans les annexes :

1) la densité d'état intégrale $N(q)$, fig.62 ;

2) la densité d'état différentielle $D(q)$, fig.63 ;

3) les distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_{0.9}$ et $\mathbf{P}_{0.99}$ en deux échelles (linéaire et logarithmique), fig.64(a,b) ;

4) certains vecteurs propres ($\alpha \in \{10, 150, 240, 250\}$) et leurs transformées de Fourier, fig.65 ;

6) la dépendance des lignes 1, 50, 100 des matrices Q, $T_{0.9}$ et $T_{0.99}$ par rapport à l'indice i, fig.66 ;

7) les fonctions $C(q)$ (fig.67) et $log(C^2(q))$ (fig.68) ;

8) la fonction $F(\lambda)$ en deux échelles (linéaire et logarithmique), fig.69(a,b) ;

9) l'impédance spectroscopique $Z_s(\sigma)$ pour le pore profond, les membranes concave et plate-cyclique, fig.70 ;

10) l'impédance spectroscopique $Z_s(r)$ pour le pore profond, les membranes concave et plate-cyclique, fig.71 ;

Commentaires[36] :

1. Comme pour la membrane pointe, nous obtenons (fig.67) une rapide croissance de la fonction $C(q)$, c'est-à-dire qu'il y a beaucoup de vecteurs propres qui contribuent à l'impédance spectroscopique. Cela implique que la fonction $F(\lambda)$ (fig.69) a un pic principal correspondant à $\lambda \approx 70$, tandis que toutes les autres pics correspondant aux valeurs $\lambda \in (0, 80)$ sont assez grands. Ce comportement justifie qu'il existe beaucoup de vecteurs propres "dominants" c'est-à-dire que les approximations de $Z_s(r)$ ne marchent plus. Nous avons donc un deuxième exemple où la méthode de l'arpenteur ne marche pas. Et ce n'est pas étonnant : la méthode de l'arpenteur exige que la longueur de Wagner Λ (voir (11)) soit inférieure aux détails de la membrane. Pour ce cas (et comme pour la membrane pointe) cette inégalité est détruite.

2. L'impédance spectroscopique du pore profond est assez supérieure à celles des membranes concave et plate-cyclique (fig.70, 71). Physiquement cela signifie que le flux des paticules à travers le pore profond est inférieure à ceux pour les autres membranes.

[36]Pour ne pas faire des répétitions, nous ne commentons que des résultats vraiment nouveaux. Les autres résultats peuvent être considérés de la même façon que les précédents.

Notons que cette particularité peut être utilisée pour détecter les pores profonds dans les échantillons.

4 Conclusion

Nous avons étudié les problèmes du transport à travers une interface régi par l'équation de Laplace avec les conditions mixtes aux limites. En faisant la discrétisation du problème, nous avons introduit l'opérateur d'auto-transport brownien Q qui représente les propriétés géométriques de la surface. Les études des propriétés de cet opérateur pour des membranes différentes conduisent aux conclusion suivantes :

Les distributions des valeurs propres $N(q)$ pour toutes les membranes étudiées sont presque les-mêmes ; chaque courbe $N(q)$ répéte la courbe $N_e(q)$ (de la membrane plate et cyclique) avec de petites perturbations. Cela signifie que la densité d'état n'influe presque pas sur le transport à travers une membrane. Autrement dit, le comportement de la fonction $F(\lambda)$ (voir (31)) ne se définit que par le facteur $C^2(q)$, c'est-à-dire par une projection de la mesure harmonique sur les vecteurs propres.

De plus, la densité d'état différentielle $D(q)$ est lente ; elle peut avoir de singularités (par exemple, le point q_0), mais elles ne jouent aucun rôle. Notons que l'expression (64) de $D_e(q)$ donne un comportement général de la fonction $D(q)$. Cela veut dire que la forme de la membrane ne change presque pas la densité d'état différentielle $D(q)$ autour de 1.

La mesure harmonique est toujours assez molle. C'est pourquoi sa projection sur les vecteurs propres n'est pas trop petite seulement pour les vecteurs propres lents. Nous nous intéressons donc au vecteurs propres qui oscillent lentement. Il est commode de faire une transformation de Fourier parce qu'elle montre explicitement de fréquences.

Dans la plupart des cas ne contribuent que quelques vecteurs propres les plus lents $\mathbf{V}_\alpha$ avec α autour de N, c'est-à-dire qu'il suffit de tenir compte de quelques coefficients C_α. Notons que ces indices α correspondent aux valeurs propres q_α autour de 1 (plus précisement, autour de q_N), ou aux valeurs λ autour de 0. De plus, les résultats approximatifs (qui s'obtiennent à l'aide de quelques vecteurs propres) sont de plus en plus précis quand ε augmente.

Les conclusions précédentes aussi que la forme des distributions $\mathbf{P_0}$, $\mathbf{P}_\varepsilon$ montrent que la méthode de l'arpenteur marche bien si les conditions suffisantes sont réalisées. Autrement dit, notre travail est une bonne vérification de cette méthode approximative à l'aide de la discrétisation et de l'analyse spectale.

L'analyse de l'opérateur d'étalement T_ε conduit au résultat important : la décroissance des éléments d'une ligne de cet opérateur est presque lorentzienne à partir d'une valeur de l'indice de l'ordre Λ de grandeur.

Nous avons obtenu que pour les membranes concave et convexe la matrice Q a une structure de bloc. Cette propriété peut être utilisée pour l'analyse des membranes beaucoup plus complexes. De plus, les vecteurs propres se divisent en quelque "domaines" correspondants à la structure de bloc de la matrice Q.

5 Annexes

5.1 Démonstration $|q_\alpha| < 1$

On fixe n'importe quel indice α et on réécrit la définition des vecteurs propres sous la forme explicite : $\forall i \sum\limits_{i \in M} q_{ij} v_{\alpha,j} = q_\alpha v_{\alpha,i}$. On a

$$\forall i \;\; |q_\alpha v_{\alpha,i}| = |\sum_{j\in M} q_{ij} v_{\alpha,j}| \leq \sum_{j\in M} |q_{ij}||v_{\alpha,j}| \leq \max_{j\in M}\{|v_{\alpha,j}|\} \sum_{j\in M} q_{ij},$$

et la normalisation de Q conduit à

$$\forall i \;\; |q_\alpha||v_{\alpha,i}| \leq \max_{j\in M}\{|v_{\alpha,j}|\}(1 - (\mathbf{P_0})_i).$$

Soit $|v_{\alpha,i_\alpha}| = \max\limits_{j\in M}\{|v_{\alpha,j}|\}$. Evidemment, $|v_{\alpha,i_\alpha}| > 0$. En écrivant la dernière inégalité pour i_α et en réduisant de $|v_{\alpha,i_\alpha}|$, on obtient

$$|q_\alpha| \leq 1 - (\mathbf{P_0})_{i_\alpha}.$$

Nous supposons que tous les sites sont accessibles, c'est-à-dire

$$(\mathbf{P_0})_i > 0 \;\; \forall i,$$

et nous obtenons finalement

$$|q_\alpha| < 1.$$

5.2 La distribution de Cauchy

Considérons le mouvement brownien en deux dimensions. Il se forme de la paire $(X(t), Y(t))$, où $X(t)$ et $Y(t)$ sont deux mouvements browniens indépendants unidimensionnels. Nous nous intéressons au point (a, Z_a) dans lequel le trajet traverse la ligne $x = a > 0$ la première fois. On suppose que $X(t)$ et $Y(t)$ sont continues. Par conséquent, la ligne $x = a + b > a$ peut être traversée seulement après l'intersection avec la ligne $x = a$. En prenant (a, Z_a) comme nouvelle origine, nous concluons que Z_{a+b} a la même distribution que la somme de deux variables indépendantes avec les distributions Z_a et Z_b. Cela donne que Z_a a la même distribution que aZ_1. Il existe une seule distribution, la distribution de Cauchy, qui a cette propriété. Alors, Z_a a la densité

$$\frac{a}{\pi(a^2+x^2)}. \tag{73}$$

Pour les détails voir [4], page 175.

5.3 La solution exacte pour le cas discret

Pour des raisonemments physiques il est commode d'utiliser une hypothèse que la distribution de Cauchy (73) peut être appliquée pour le cas discret. En effet, quand un pas a du réseau est petit, des résultats du cas discret doivent être proche de ceux du cas continu. Cependant, il existe la solution exacte de ce problème discret. Nous présenterons ici les idées générales[37] en ommettant des détails (voir [10], [11]).

On note $a(k,n)$ le nombre de marches qui, partant de $(0,1)$, rencontrent l'axe des abscisses pour la première fois en $(k,0)$, au terme de n pas. Alors

$$P(k)=\sum_n \frac{a(k,n)}{4^n}$$

est la probabilité que le premier contact avec la droite ait lieu en $(k,0)$.

Il existe quelques voies de calculer $a(k,n)$ explicitement. La méthode la plus utile est la série génératrice obtenue en sommant sur n et k

$$M(x,t)=\sum_{n,k} a(k,n)t^n x^k.$$

On sait que c'est une série algèbrique de degre 2,

$$M(x,t)=\frac{1}{2t}\left(1-t(x+1/x)-\sqrt{(1-t(x+1/x+2))(1-t(x+1/x-2))}\right).$$

Notons X la variable aléatoire qui donne l'abscisse du premier contact avec l'axe. Alors la fonction caractéristique de X s'exprime en fonction de $M(x,t)$:

$$\chi(s)=E(e^{isX})=\sum_{n,k}\frac{a(k,n)}{4^n}e^{isk}=M(e^{is},1/4).$$

En utilisant l'identité

$$\frac{e^{is}+e^{-is}}{2}=\cos s,$$

nous obtenons une fonction trigonométrique de s

[37] Nous remercions Madame Bousquet-Mélou qui nous a informé.

$$\chi(s) = 2 - \cos s - \sqrt{(1-\cos s)(3-\cos s)}.$$

La probabilité cherchée $P(k)$ est la transformée inverse de Fourier de la fonction caractéristique

$$P(k) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \chi(s)e^{-iks}ds.$$

Comme les fonctions $\chi(s)$ et $P(k)$ sont réelles, il suffit de prendre une partie réelle de cette expression c'est-à-dire

$$P(k) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \chi(s)\cos(ks)ds.$$

Notons que l'expression précédente peut être calculée explicitement pour les valeurs k entières. Nous ne présentons pas ce calcul ici. On peut aussi démontrer que cette solution est très proche de la distribution de Cauchy.

5.4 Evaluation de l'erreur de l'élargissement

On suppose que $N/2$ est pair. L'erreur résultant de 'élargissement est

$$\Delta = 2\sum_{k=N/2}^{\infty} \frac{(-1)^k\cos(2\pi k\beta)}{1+k^2}$$

Considérons deux termes successifs

$$\Delta_k = \frac{\cos(2\pi k\beta)}{1+k^2} - \frac{\cos(2\pi(k+1)\beta)}{1+(k+1)^2} =$$

$$\frac{\cos(2\pi k\beta)(1+(k+1)^2) - \cos(2\pi(k+1)\beta)(1+k^2)}{(1+k^2)(1+(k+1)^2)} =$$

$$\frac{(1+k^2)\left(\cos(2\pi k\beta) - \cos(2\pi(k+1)\beta)\right) + (2k+1)\cos(2\pi k\beta)}{(1+k^2)(1+(k+1)^2)} =$$

$$\frac{2\sin(\pi\beta)\sin(2\pi k\beta+\pi\beta)}{(1+(k+1)^2)} + \frac{(2k+1)\cos(2\pi k\beta)}{(1+k^2)(1+(k+1)^2)}.$$

On a

$$|\Delta_k| \le \left|\frac{2\sin(\pi\beta)\sin(2\pi k\beta+\pi\beta)}{(1+(k+1)^2)}\right| + \left|\frac{(2k+1)\cos(2\pi k\beta)}{(1+k^2)(1+(k+1)^2)}\right| \le$$

$$\frac{2\sin(\pi\beta)}{(1+(k+1)^2)} + \frac{2k+1}{(1+k^2)(1+(k+1)^2)}.$$

Pour la somme initiale on a

$$|\Delta| = 2\sum_{k=N/4}^{\infty}\left[\frac{2\sin(\pi\beta)}{1+(2k+1)^2} + \frac{4k+1}{(1+(2k)^2)(1+(2k+1)^2)}\right]$$

(nous avons déjà changé l'indice de sommation $k \to 2k$ parce qu'on groupe les terme par deux).

Considérons

$$S_1 = \sum_{k=N/4}^{\infty}\frac{1}{1+(2k+1)^2}.$$

En utilisant l'inégalité simple

$$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{1+k^2} + \frac{1}{1+(k+1)^2}\right) \leq \int\limits_{k}^{k+1}\frac{dx}{x^2}$$

nous avons

$$S_1 \leq \int\limits_{N/4}^{\infty}\frac{dx}{(2x+1)^2} = \frac{1}{2}\frac{1}{N/2+1} \leq \frac{1}{N}.$$

De même manière,

$$S_2 = \sum_{k=N/4}^{\infty}\frac{4k+1}{(1+(2k)^2)(1+(2k+1)^2)} \leq$$

$$\int\limits_{N/4-1}^{\infty}\frac{4x+1}{(1+(2x)^2)(1+(2x+1)^2)}dx \leq$$

$$4\int\limits_{N}^{\infty}\frac{t}{(t^2-1)^2}dt = \frac{2}{N^2-1} \approx \frac{2}{N^2}.$$

Alors, nous obtenons

$$|\Delta| \leq \frac{4\sin(\pi\beta)}{N} + \frac{4}{N^2}.$$

5.5 Méthodes de la théorie des perturbations

Nous utilisons les méthodes de la théorie des perturbations pour justifier la possibilité d'utiliser la formule (61) dans de nombreux cas.

Nous nous intéressons aux valeurs propres d'une matrice A qui se présente sous la forme

$$A = Q + \epsilon M, \tag{74}$$

où ϵ est un petit paramètre et Q est une matrice diagonale [38], les valeurs propres de celle-ce sont $q_n^{(0)}$ et les vecteurs propres $V_n^{(0)}$ sont les plus simples

$$Q = \begin{pmatrix} q_1^{(0)} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q_2^{(0)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q_3^{(0)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q_N^{(0)} \end{pmatrix}, \qquad V_n^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \text{ (n-ième coordonnée).}$$

On suppose que les valeurs propres q_n et les vecteurs propres V_n de la matrice A se représentent par les séries perturbatives

$$\begin{aligned} q_n &= q_n^{(0)} + \epsilon q_n^{(1)} + \epsilon^2 q^{(2)} + .., && (75) \\ V_n &= V_n^{(0)} + \epsilon V_n^{(1)} + \epsilon^2 V^{(2)} + ... && (76) \end{aligned}$$

La substitution des expressions (74), (75) et (76) dans la définition

$$AV_n = q_n V_n$$

conduit au système des équations pour $q_n^{(0)}$, $q_n^{(1)}$, $V_n^{(0)}$, $V_n^{(1)}$, etc. qui se regroupent pour chaque puissance de ϵ :

$$\begin{aligned} QV_n^{(0)} &= q_n^{(0)} V_n^{(0)}, && (77) \\ QV_n^{(1)} + MV_n^{(0)} &= q_n^{(0)} V_n^{(1)} + q_n^{(1)} V_n^{(0)}, && (78) \\ QV_n^{(2)} + MV_n^{(1)} &= q_n^{(0)} V_n^{(2)} + q_n^{(1)} V_n^{(1)} + q_n^{(2)} V_n^{(0)}, \text{ etc.} && (79) \end{aligned}$$

La première équation est triviale : ce n'est que la définition des vecteurs propres de la matrice Q.

En multipliant la deuxième équation par $V_m^{(0)}$, on a

$$q_m^{(0)}(V_m^{(0)} \cdot V_n^{(1)}) + (V_m^{(0)} \cdot MV_n^{(0)}) = q_n^{(0)}(V_m^{(0)} \cdot V_n^{(1)}) + q_n^{(1)} \delta_{mn}.$$

Pour $m = n$ cette égalité donne

[38] Bien sûr, on peut considérer le cas général pour n'importe quelle matrice Q, mais ce n'est pas nécessaire.

$$q_n^{(1)} = (V_n^{(0)} \cdot M V_n^{(0)}) = M_{nn}, \tag{80}$$

c'est-à-dire que la première perturbation de q_n se donne par les éléments diagonaux de la matrice perturbative M.

Pour $m \neq n$ on obtient

$$(V_n^{(1)} \cdot V_m^{(0)}) = \frac{M_{mn}}{q_n^{(0)} - q_m^{(0)}}.$$

La côté gauche de cette relation est m-ième coordonnée du vecteur $V_n^{(1)}$. Pour obtenir n-ième coordonnée, il faut demander une propriété additionnelle, par example, la normalisation des vecteurs $V_n : (V_n, V_n) = 1$. Cela conduit immédiatement à

$$(V_n^{(1)})_n = 0,$$

et finalement

$$(V_n^{(1)})_j = \begin{cases} \frac{M_{nj}}{q_n^{(0)} - q_j^{(0)}}, & j \neq n \\ 0, & j = n. \end{cases} \tag{81}$$

Maintenant on considére la troisième équation (79). En utilisant la même technique et les expressions (80) et (81), nous obtenons au deuxième ordre en ϵ :

$$q_n^{(2)} = \sum_{j \neq n} \frac{M_{nj} M_{jn}}{q_n^{(0)} - q_j^{(0)}}. \tag{82}$$

5.6 Valeurs propres nulles

Nous présenterons de façon qualitative des idées à propos des valeurs propres nulles pour les membranes anguleuses. Notons que ce n'est qu'une hypothèse.

Comme nous avons vu par des simulations numériques, chaque coin de 90° donne une valeur propre nulle, tandis que les autres valeurs propres sont bornées par q_0.[39] La courbe de la densité d'état intégrale consiste donc en deux "partie" : un plateau entre 0 et q_0' (une valeur propre minimale non-nulle), et une courbe "normale" pour $q \geq q_0'$ (voir, par exemple, fig.22 ou fig.42).

En prenant la dérivée, on obtient

$$D(q) = D_0 \delta(q) + D_{normale}(q).$$

Il est commode d'analyser ces deux termes séparement. La substitution de cette formule à l'expression (28) conduit à

[39] Nous ne pouvons pas dire si ce n'est qu'une particularité de la discrétisation, ou bien une propriété des membranes réelles avec des coins. C'est une question ouverte.

$$Z_s(\varepsilon) = Z_s^1(\varepsilon) + Z_s^2(\varepsilon), \qquad \text{où}$$

$$Z_s^1(\varepsilon) = r(1-\varepsilon)C^2(0)D_0, \qquad Z_s^2(\varepsilon) = r\int_{-1}^{1} \frac{1-\varepsilon}{1-\varepsilon q} C^2(q) D_{normale}(q) dq.$$

Pour l'instant nous nous intéressons au premier terme (le deuxième terme sera étudié beaucoup plus en profondeur ci-dessous). On le réécrit

$$Z_s^1(\varepsilon) = \frac{\varepsilon\tau}{a^2} aC^2(0)D_0 \sim aC^2(0)D_0.$$

On a noté

$$C^2(0) = \sum_{\alpha=1}^{k} C_\alpha^2,$$

où k est le nombre des valeurs propres nulles (ou bien, en utilisant notre hypothèse, le nombre des coins de 90°). Evidemment, les coefficients C_α^2 $(\alpha \leq k)$ dépendent de la géométrie de la membrane. En supposant $C_\alpha^2 \sim N^\alpha$ (par exemple, nous avons vu que pour la membrane plate et cyclique $C_N^2 \sim N$; il est facile de démontrer que $\alpha \leq 2$ pour n'importe quelle membrane[40]), on obtient

$$Z_s^1(\varepsilon) \sim akN^\alpha D_0.$$

Il est clair que $D_0 \sim k$, c'est pourquoi

$$Z_s^1(\varepsilon) \sim k^2 N^{\alpha-1}.$$

Pour les formes assez régulières le nombre des coins est fixé, c'est-à-dire $Z_s^1(\varepsilon) \sim N^{\alpha-1}$. Pour $\alpha < 1$ ce terme s'élimine à la limite $N \to \infty$. Au contraire, pour $\alpha \geq 1$ il faut tenir compte de ce terme (il peut être plus grand que le deuxième terme $Z_s^2(\varepsilon)$).

La situation sera plus intéressante pour les membranes très irrégulières, par exemple, pour les membranes fractales. Dans ce cas le nombre des coins k augmente avec N. En supposant la dépendance la plus simple $k \sim N$, on obtient

$$Z_s^1(\varepsilon) \sim N^{\alpha+1},$$

c'est-à-dire que le terme $Z_s^1(\varepsilon)$ est le plus grand, si $\alpha \geq -1$. Dans ce cas il faut utiliser l'autre technique d'analyse. Cette influence des coins ressemble à la condensation de Bose-Einstein où des particules d'énergie nulle dominent.

Notons que cette "démonstration" empirique n'est qu'une présentation des idées, sans aucune prétention à la rigueur.

[40]En effet, $C_\alpha^2 = (\mathbf{P_0^h} \cdot \mathbf{V}_\alpha)^2 \leq |\mathbf{P_0^h}|^2 |\mathbf{V}_\alpha|^2 = |\mathbf{P_0}|^2/[a^2(\mathbf{P_0} \cdot \mathbf{1})^2] \leq 1/a^2 \sim N^2$.

Références

[1] B.Sapoval, *General Formulation of Laplacian Transfer Across Irregular Surfaces*, Phys.Rev.Lett.73, 3314 (1994).

[2] B.Sapoval, M.Filoche, K.Karamanos, R.Brizzi *Can one hear the shape of an electrode ? I. Numerical study of the active zone in Laplacian tranfer*, Eur. Phys. J. B 9, 739-753 (1999)

[3] M.Filoche, B.Sapoval *Can one hear the shape of an electrode ? II. Theoretical study of the Laplacian tranfer*, Eur. Phys. J. B 9, 755-763 (1999)

[4] W.Feller, *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*, Vol.II, Second Edition, 1971

[5] I.S.Gradshteyn, I.M.Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, 1980

[6] F.R.Gantmacher, *Matrix Theory*, Volumes I and II, 1959.

[7] F.Spitzer, *Principles of Random Walk*, 1964.

[8] N.G.Makarov, Proc.Lond.Math.Soc. 51, 369 (1985).

[9] V.G.Maz'ya, B.A.Plamenevskii, N.F.Morozov, L.Stupyalis, *Elliptic boundary value problems*, 1984.

[10] Mohanty, *Lattice path counting and applications*, Academic Press, 1979.

[11] M.-P.Delest and G.Viennot, *Algebraic languages and polyominoes enumeration*, Theoret.Comput.Sci. 34, pp.169-206, 1984.