

Thermodynamique des histoires et fluctuations hors d'équilibre

Vivien Lecomte



Laboratoire de Physique Théorique, Université d'Orsay
Laboratoire Matière et Systèmes Complexes, Université Paris 7



Soutenance de thèse – MSC – 30 Mars 2007

Motivations

Thermodynamique de Boltzmann-Gibbs

$$P(\mathcal{C}) = e^{-\beta H(\mathcal{C})}$$

Avant d'atteindre l'équilibre

- régime transitoire
- dynamiques “vitreuses”

Phénomènes hors d'équilibre

- systèmes parcourus par un courant
- systèmes dissipatifs (granulaires, ...)

Motivations

Thermodynamique de Boltzmann-Gibbs

$$P(\mathcal{C}) = e^{-\beta H(\mathcal{C})}$$

Ne s'applique pas toujours !

Avant d'atteindre l'équilibre

- régime transitoire
- dynamiques "vitreuses"

Phénomènes hors d'équilibre

- systèmes parcourus par un courant
- systèmes dissipatifs (granulaires, ...)

Motivations

Thermodynamique de Boltzmann-Gibbs

$$P(C) = e^{-\beta H(C)}$$

Ne s'applique pas toujours !

Avant d'atteindre l'équilibre

- régime transitoire
- dynamiques “vitreuses”

Phénomènes hors d'équilibre

- systèmes parcourus par un courant
- systèmes dissipatifs (granulaires, ...)

Motivations

Thermodynamique de Boltzmann-Gibbs

$$P(C) = e^{-\beta H(C)}$$

Ne s'applique pas toujours !

Avant d'atteindre l'équilibre

- régime transitoire
- dynamiques "vitreuses"

Phénomènes hors d'équilibre

- systèmes parcourus par un courant
- systèmes dissipatifs (granulaires, ...)

Motivations

Thermodynamique de Boltzmann-Gibbs

$$P(C) = e^{-\beta H(C)}$$

Ne s'applique pas toujours !

Avant d'atteindre l'équilibre

- régime transitoire
- dynamiques "vitreuses"

Phénomènes hors d'équilibre

- systèmes parcourus par un courant
- systèmes dissipatifs (granulaires, ...)

→ Besoin d'une description **dynamique**

Plan

- 1 Motivations
 - statique et dynamique

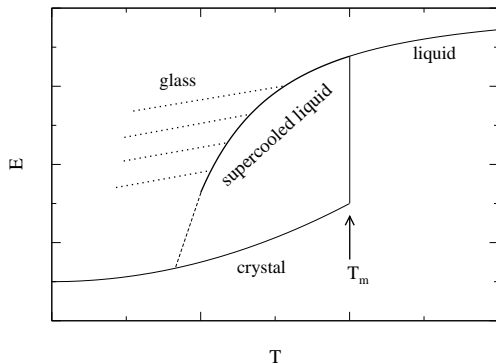
Plan

- 1 Motivations
 - statique et dynamique
- 2 Modèles de verre
 - thermodynamique des histoires
 - résultats

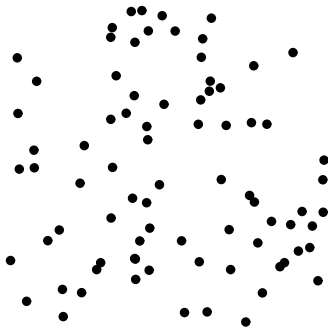
Plan

- 1 Motivations
 - statique et dynamique
- 2 Modèles de verre
 - thermodynamique des histoires
 - résultats
- 3 Phénomènes hors d'équilibre
 - grandes déviations de courant
 - un système très loin de l'équilibre

Verres

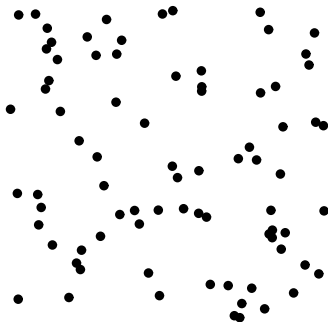
Fig.1 in Ritort and Sollich, *Adv. in Phys.* **52** 219 (2003)

Des configurations aux histoires



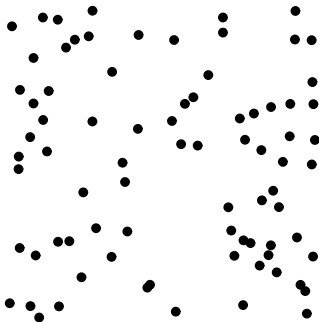
fluctuation des configurations

Des configurations aux histoires



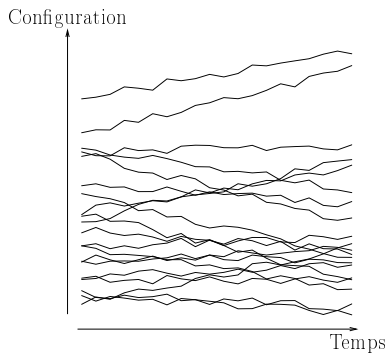
fluctuation des configurations

Des configurations aux histoires



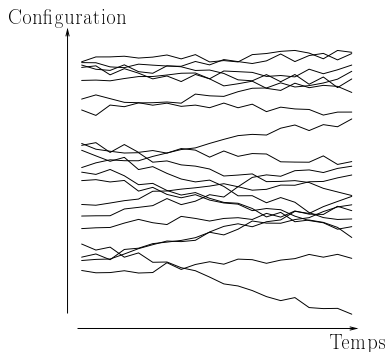
fluctuation des configurations

Des configurations aux histoires



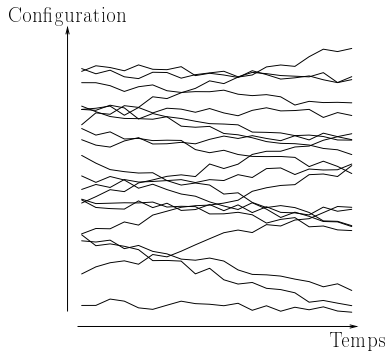
fluctuation des **histoires**

Des configurations aux histoires



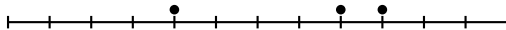
fluctuation des **histoires**

Des configurations aux histoires



fluctuation des **histoires**

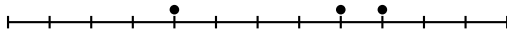
Un exemple



Particules indépendantes

- L sites $\mathbf{n} = \{n_i\}$ avec $\begin{cases} n_i = 0 & \text{site inactif} \\ n_i = 1 & \text{site actif} \end{cases}$

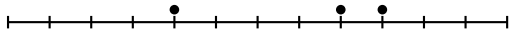
Un exemple



Particules indépendantes

- L sites $\mathbf{n} = \{n_i\}$ avec $\begin{cases} n_i = 0 & \text{site inactif} \\ n_i = 1 & \text{site actif} \end{cases}$
- Taux de transition en chaque site:
 - activation avec un taux $W(0_i \rightarrow 1_i) = c$
 - inactivation avec un taux $W(1_i \rightarrow 0_i) = 1 - c$

Un exemple

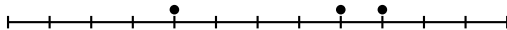


Particules indépendantes

- L sites $\mathbf{n} = \{n_i\}$ avec $\begin{cases} n_i = 0 & \text{site inactif} \\ n_i = 1 & \text{site actif} \end{cases}$
- Taux de transition en chaque site:
 - activation avec un taux $W(0_i \rightarrow 1_i) = c$
 - inactivation avec un taux $W(1_i \rightarrow 0_i) = 1 - c$

Distribution d'équilibre :
$$P_{\text{eq}}(\mathbf{n}) = \prod_i c^{n_i} (1 - c)^{1 - n_i}$$

Un exemple



Particules indépendantes

- L sites $\mathbf{n} = \{n_i\}$ avec $\begin{cases} n_i = 0 & \text{site inactif} \\ n_i = 1 & \text{site actif} \end{cases}$

- Taux de transition en chaque site:

- activation avec un taux $W(0_i \rightarrow 1_i) = c$
- inactivation avec un taux $W(1_i \rightarrow 0_i) = 1 - c$

Distribution d'équilibre :
$$P_{\text{eq}}(\mathbf{n}) = \prod_i c^{n_i} (1 - c)^{1 - n_i}$$

Densité moyenne de sites actifs :
$$\langle n \rangle = \frac{1}{L} \sum_i \langle n_i \rangle = c$$

Modèles Cinétiquement Contraints (KCM)

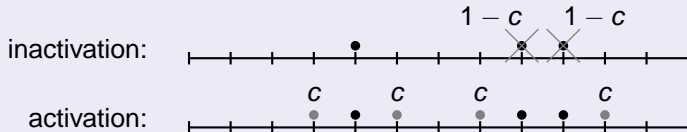
Contrainte : les sites actifs **facilitent** la dynamique.

Modèles Cinétiquement Contraints (KCM)

Contrainte : les sites actifs **facilitent** la dynamique.

Modèle de Fredrickson Andersen en 1D

au moins un voisin doit être actif pour autoriser une transition

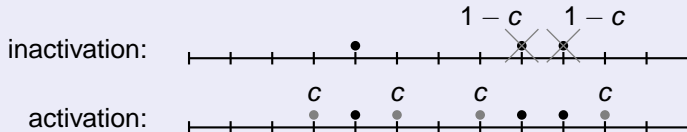


Modèles Cinétiquement Contraints (KCM)

Contrainte : les sites actifs **facilitent** la dynamique.

Modèle de Fredrickson Andersen en 1D

au moins un voisin doit être actif pour autoriser une transition



- même distribution d'équilibre $P_{\text{eq}}(n)$
- même densité moyenne $\langle n \rangle = c$

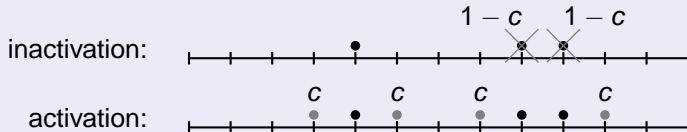
MAIS :

Modèles Cinétiquement Contraints (KCM)

Contrainte : les sites actifs **facilitent** la dynamique.

Modèle de Fredrickson Andersen en 1D

au moins un voisin doit être actif pour autoriser une transition



- même distribution d'équilibre $P_{\text{eq}}(n)$
- même densité moyenne $\langle n \rangle = c$

MAIS :

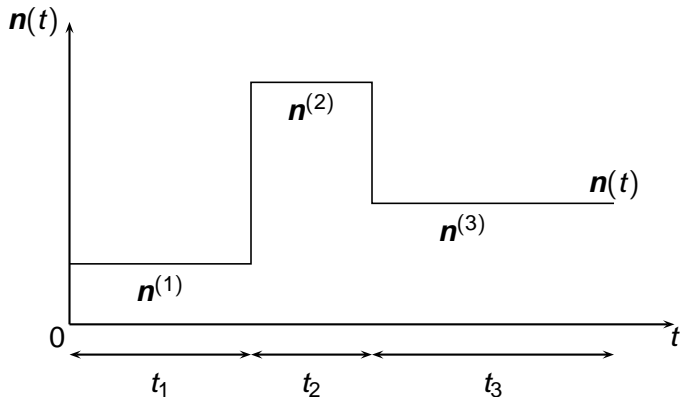
- **VIEILLISSEMENT**

Trajectoires

$P_{\text{eq}}(\mathbf{n})$ insuffisant \rightarrow étudier les **histoires**

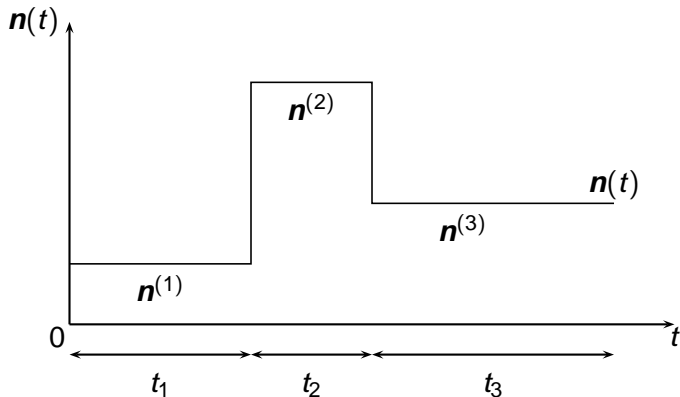
Trajectoires

$P_{\text{eq}}(n)$ insuffisant \rightarrow étudier les **histoires**



Trajectoires

$P_{\text{eq}}(\mathbf{n})$ insuffisant \rightarrow étudier les **histoires**



activité K = nombre de *changements de configuration*

Principe

Classification des histoires selon un paramètre **extensif en temps**

- activité K = nombre de *changements de configuration*
- en moyenne :

$$\langle K \rangle = 2c^2(1 - c) L t \quad (\text{grand } t)$$

Principe

Classification des histoires selon un paramètre **extensif en temps**

- activité K = nombre de *changements de configuration*
- en moyenne :

$$\langle K \rangle = 2c^2(1 - c) L t \quad (\text{grand } t)$$

- K fluctue

Principe

Classification des histoires selon un paramètre **extensif en temps**

- activité K = nombre de *changements de configuration*
- en moyenne :

$$\langle K \rangle = 2c^2(1 - c) L t \quad (\text{grand } t)$$

- K fluctue

$\rho(K)$ = | densité moyenne au cours du temps
pour les histoires d'activité K

Principe

Classification des histoires selon un paramètre **extensif en temps**

- activité K = nombre de *changements de configuration*
- en moyenne :

$$\langle K \rangle = 2c^2(1 - c) L t \quad (\text{grand } t)$$

- K fluctue

$\rho(K)$ = | densité moyenne au cours du temps
pour les histoires d'activité K

$\rho(K)$ donne une information sur les histoires atypiques

Fonction de partition dynamique

Étude des fluctuations (1): micro-canonique

- Thermodynamique des configurations

$$\Omega(E, L) = \left| \begin{array}{l} \text{nombre de configurations} \\ \text{d'énergie } E \end{array} \right. \quad (\text{grand } L)$$

Fonction de partition dynamique

Étude des fluctuations (1): micro-canonique

- Thermodynamique des configurations

$$\Omega(E, L) = \left| \begin{array}{l} \text{nombre de configurations} \\ \text{d'énergie } E \end{array} \right. \quad (\text{grand } L)$$

- Thermodynamique des histoires [à la Ruelle]

$$\Omega_{dyn}(K, t) = \left| \begin{array}{l} \text{nombre d'histoires} \\ \text{d'activité } K \text{ entre } 0 \text{ et } t \end{array} \right. \quad (\text{grand } t)$$

Fonction de partition dynamique

Étude des fluctuations (1): micro-canonique

- Thermodynamique des configurations

$$\Omega(E, L) = \left| \begin{array}{l} \text{nombre de configurations} \\ \text{d'énergie } E \end{array} \right. \quad (\text{grand } L)$$

- Thermodynamique des histoires [à la Ruelle]

$$\Omega_{dyn}(K, t) = \left| \begin{array}{l} \text{nombre d'histoires} \\ \text{d'activité } K \text{ entre } 0 \text{ et } t \end{array} \right. \quad (\text{grand } t)$$

ensemble **micro-canonique** : techniquement difficile

Fonction de partition dynamique

Étude des fluctuations (2): canonique

- Thermodynamique des configurations

$$Z(\beta, L) = \sum_E \Omega(E, L) e^{-\beta E(n)} = e^{-L f(\beta)} \quad (\text{grand } L)$$

- Thermodynamique des histoires [à la Ruelle]

$$Z_K(s, t) = \sum_K \Omega_{\text{dyn}}(K, L) e^{-s K[\text{hist}]} = e^{-t L f_K(s)} \quad \begin{matrix} (\text{grand } t) \\ (\text{grand } L) \end{matrix}$$

Fonction de partition dynamique

Étude des fluctuations (2): canonique

- Thermodynamique des configurations

$$Z(\beta, L) = \sum_E \Omega(E, L) e^{-\beta E(n)} = e^{-L f(\beta)} \quad (\text{grand } L)$$

- Thermodynamique des histoires [à la Ruelle]

$$Z_K(s, t) = \sum_K \Omega_{\text{dyn}}(K, L) e^{-s K[\text{hist}]} = e^{-t L f_K(s)} \quad \begin{matrix} (\text{grand } t) \\ (\text{grand } L) \end{matrix}$$

Ensemble (dynamique) canonique

- β conjugué à l'énergie
- s conjugué à l'activité K

Fonction de partition dynamique

Étude des fluctuations (2): canonique

- Thermodynamique des configurations

$$Z(\beta, L) = \sum_E \Omega(E, L) e^{-\beta E(n)} = e^{-L f(\beta)} \quad (\text{grand } L)$$

- Thermodynamique des histoires [à la Ruelle]

$$Z_K(s, t) = \sum_K \Omega_{\text{dyn}}(K, L) e^{-s K[\text{hist}]} = e^{-t L f_K(s)} \quad \left(\begin{array}{l} \text{grand } t \\ \text{grand } L \end{array} \right)$$

Fluctuations de K

$$\langle e^{-sK} \rangle \sim e^{-t L f_K(s)} \quad \left| \begin{array}{l} \text{Énergie libre dynamique } f_K(s) \leftrightarrow \\ \text{fonction génératrice des cumulants de } K. \end{array} \right.$$

État-s

s sonde la dynamique

- moyenne dans l'état-s d'une observable \mathcal{O} :

$$\mathcal{O}(s) = \frac{\langle \mathcal{O}[\text{hist}] e^{-sK} \rangle}{\langle e^{-sK} \rangle}$$

$\mathcal{O}[\text{hist}]$ est une observable qui dépend de l'histoire

État-s

s sonde la dynamique

- moyenne dans l'état-s d'une observable \mathcal{O} :

$$\mathcal{O}(s) = \frac{\langle \mathcal{O}[\text{hist}] e^{-sK} \rangle}{\langle e^{-sK} \rangle}$$

$\mathcal{O}[\text{hist}]$ est une observable qui dépend de l'histoire

- interprétation

$s < 0$: histoires plus actives ("grands" K)

$s = 0$: état d'équilibre

$s > 0$: histoires moins actives ("faibles" K)

État-s

s sonde la dynamique

- moyenne dans l'état-s d'une observable \mathcal{O} :

$$\mathcal{O}(s) = \frac{\langle \mathcal{O}[\text{hist}] e^{-sK} \rangle}{\langle e^{-sK} \rangle}$$

$\mathcal{O}[\text{hist}]$ est une observable qui dépend de l'histoire

- interprétation

$s < 0$: histoires plus actives ("grands" K)

$s = 0$: état d'équilibre

$s > 0$: histoires moins actives ("faibles" K)

Ex : densité moyenne au cours du temps $\rho[\text{hist}] = \frac{1}{Lt} \int_0^t d\tau \sum_i n_i(\tau)$

État-s

s sonde la dynamique

- moyenne dans l'état-s d'une observable \mathcal{O} :

$$\mathcal{O}(s) = \frac{\langle \mathcal{O}[\text{hist}] e^{-sK} \rangle}{\langle e^{-sK} \rangle}$$

$\mathcal{O}[\text{hist}]$ est une observable qui dépend de l'histoire

- interprétation

$s < 0$: histoires plus actives ("grands" K)

$s = 0$: état d'équilibre

$s > 0$: histoires moins actives ("faibles" K)

Ex : densité moyenne au cours du temps $\rho[\text{hist}] = \frac{1}{Lt} \int_0^t d\tau \sum_i n_i(\tau)$

$$\rho_K(s) = \frac{\langle \rho[\text{hist}] e^{-sK} \rangle}{\langle e^{-sK} \rangle}$$

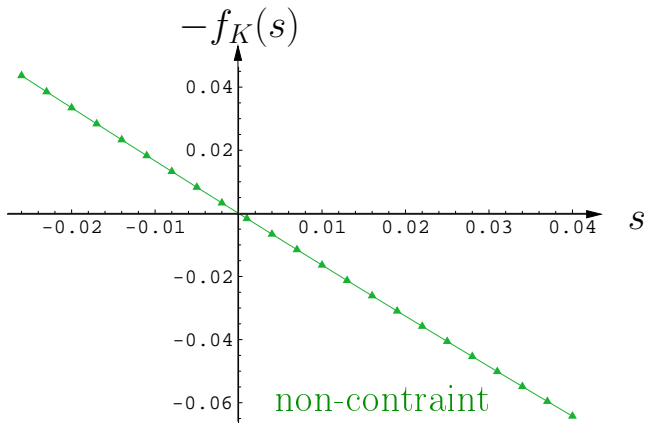
Plan

- 1 Motivations
 - statique et dynamique
- 2 Modèles de verre
 - thermodynamique des histoires

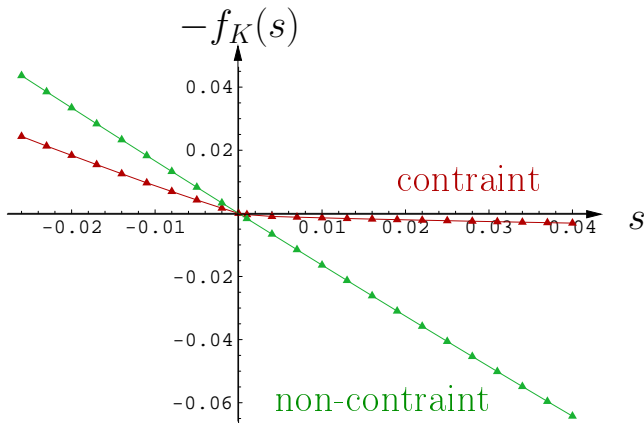
Plan

- 1 Motivations
 - statique et dynamique
- 2 Modèles de verre
 - thermodynamique des histoires
 - résultats

Transition de phase dynamique : modèle FA (d=1)

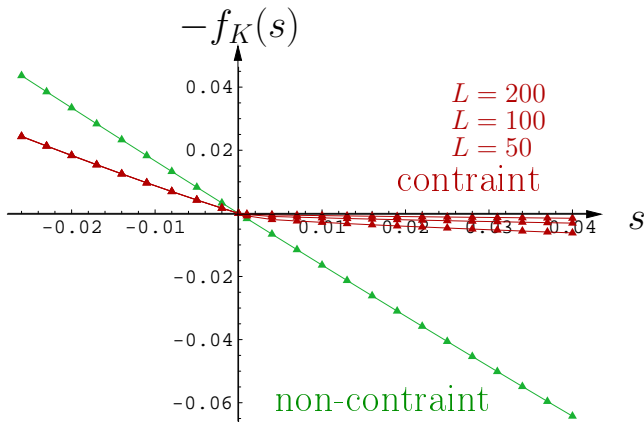


Transition de phase dynamique : modèle FA (d=1)



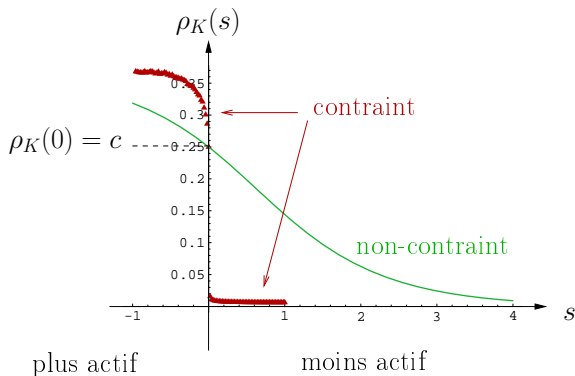
Comparaison entre les dynamiques contrainte et non-contrainte

Transition de phase dynamique : modèle FA (d=1)



Comparaison entre les dynamiques contrainte et non-contrainte

Transition de phase dynamique : modèle FA (d=1)



Comparaison entre les dynamiques contrainte et non-contrainte

Énergie libre dynamique à la Landau $\mathcal{F}(\rho, s)$

Probabilité, dans l'état- s , d'observer
une densité moyenne ρ entre 0 et t $\left| \sim e^{-tL\mathcal{F}(\rho,s)} \right.$

Énergie libre dynamique à la Landau $\mathcal{F}(\rho, s)$

Probabilité, dans l'état- s , d'observer
une densité moyenne ρ entre 0 et t $\left| \sim e^{-tL\mathcal{F}(\rho,s)} \right.$

“Principe d'extrémalisation”

$$f_K(s) = \min_{\rho} \mathcal{F}(\rho, s)$$

Énergie libre dynamique à la Landau $\mathcal{F}(\rho, s)$

Probabilité, dans l'état- s , d'observer
une densité moyenne ρ entre 0 et t $\left| \sim e^{-tL\mathcal{F}(\rho,s)} \right.$

“Principe d'extrémalisation”

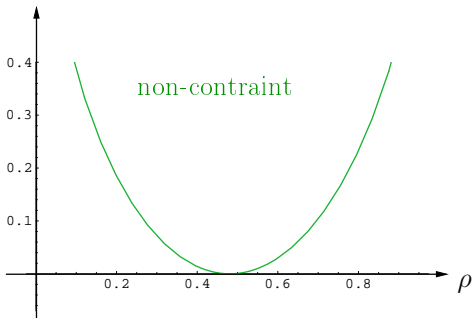
$$f_K(s) = \min_{\rho} \mathcal{F}(\rho, s)$$

Minimum atteint pour $\rho = \rho_K(s)$:

$$f_K(s) = \mathcal{F}(\rho_K(s), s)$$

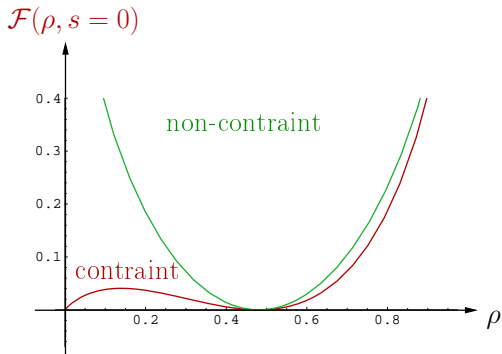
Paysage d'énergie libre (dynamique) à la Landau

$$\mathcal{F}(\rho, s = 0)$$



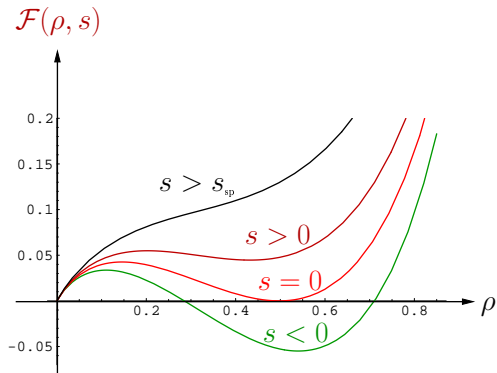
$$\text{Prob}_{[0,t]}(\rho) \sim e^{-tL\mathcal{F}(\rho,s)}$$

Paysage d'énergie libre (dynamique) à la Landau



$$\text{Prob}_{[0,t]}(\rho) \sim e^{-tL\mathcal{F}(\rho,s)}$$

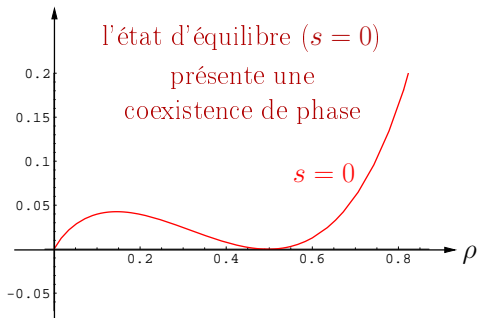
Paysage d'énergie libre (dynamique) à la Landau



$$f_K(s) = \min_{\rho} \mathcal{F}(\rho, s) = \mathcal{F}(\rho_K(s), s)$$

Paysage d'énergie libre (dynamique) à la Landau

$$\mathcal{F}(\rho, s = 0)$$



$$\text{Prob}_{[0,t]}(\rho) \sim e^{-tL\mathcal{F}(\rho,s)}$$

Thermodynamique des histoires : résumé

Résultats

- **États-s** \equiv outil pour explorer les histoires atypiques
- Description quantitative de la coexistence de phase dynamique
→ Énergie libre dynamique à la Landau $\mathcal{F}(\rho, s)$ ←

Transition de phase dynamique

- Criticalité dans une dimension **dynamique** “cachée”
- Hétérogénéité dynamique

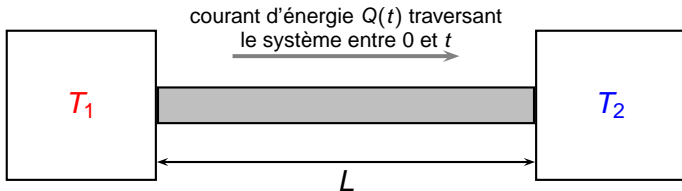
Plan

- 1 Motivations
 - statique et dynamique
- 2 Modèles de verre
 - thermodynamique des histoires
 - résultats

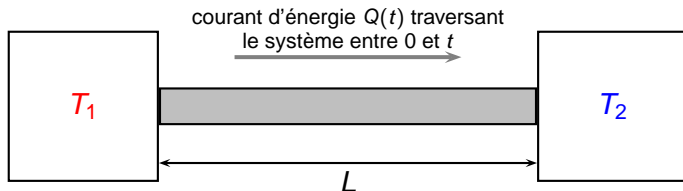
Plan

- 1 Motivations
 - statique et dynamique
- 2 Modèles de verre
 - thermodynamique des histoires
 - résultats
- 3 Phénomènes hors d'équilibre
 - grandes déviations de courant
 - un système très loin de l'équilibre

Fluctuations de courant



Fluctuations de courant

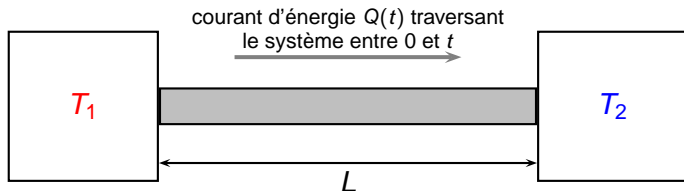


- En moyenne :

$$\langle Q(t) \rangle > 0$$

(pour $T_1 > T_2$)

Fluctuations de courant



- En moyenne :

$$\langle Q(t) \rangle > 0$$

(pour $T_1 > T_2$)

- Relation de fluctuation :

$$\frac{\text{Prob}[Q]}{\text{Prob}[-Q]} \sim e^{EQ}$$

(E : champ)

Fluctuations de courant

- Classification des histoires suivant le courant $Q(t)$.

Fluctuations de courant

- Classification des histoires suivant le courant $Q(t)$.
- Énergie libre $f_Q(s)$ associée au courant :

$$\langle e^{-sQ} \rangle \sim e^{-t f_Q(s)}$$

- Décrit les fluctuations de $Q(t)$.

Fluctuations de courant

- Classification des histoires suivant le courant $Q(t)$.
- Énergie libre $f_Q(s)$ associée au courant :

$$\langle e^{-sQ} \rangle \sim e^{-t f_Q(s)}$$

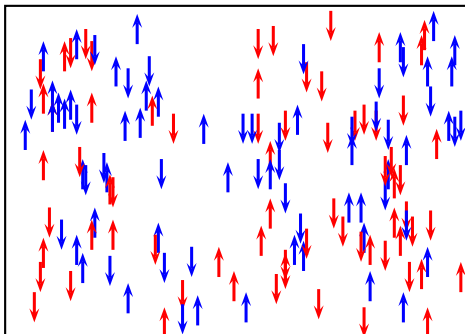
- Décrit les fluctuations de $Q(t)$.

Relation de fluctuation

$$f_Q(s) = f_Q(E - s)$$

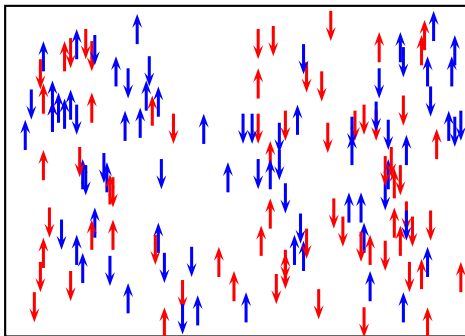
Au delà du théorème de fluctuation

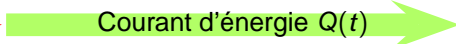
Un système très loin de l'équilibre



Au delà du théorème de fluctuation

Un système très loin de l'équilibre



{↑}  {↓}

Courant d'énergie $Q(t)$

Résumé des travaux

1 Thermodynamique des histoires

- construction (à la Ruelle)
- champ moyen dynamique
- application systèmes vitreux
- méthode numérique pour les grandes déviations

2 Fluctuations hors d'équilibre

- système de spins très loin de l'équilibre
- superdiffusion et grandes déviations du courant
- fluctuations dans le processus d'exclusion symétrique

Conclusions

Résumé

- Thermodynamique des histoires = outil pour la **dynamique**.
- Grandes déviations \leftrightarrow universalité.

Perspectives

- Prédictions quantitatives sur les relaxations anormales.
- Application à verres réalistes (fluide de Lennard-Jones).
- Réalisation expérimentale des **états-s**.

Remerciements

Frédéric van Wijland

Cécile Appert-Rolland

Estelle Pitard

JuanP Garrahan

Bernard Derrida

Zoltán Rácz

Uwe Täuber

Julien Tailleur

Robert Jack

Kristina van Duijvendijk