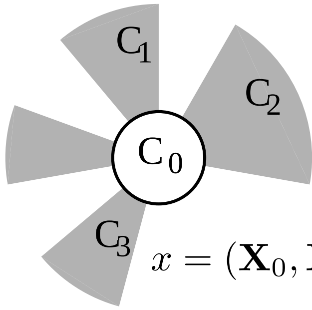
Modèles de Thermostats dans la Mécanique Statistique de non equilibre

Nonequilibre: Etats stationnaires de systèmes de particules assujetties à forces non conservatives dont le travail est dissipé dans des thermostats.

Problème: simulations $\rightarrow$ concernent systèmes finis qui **ne peuvent pas** étre Hamiltoniens.

"*Solution*": on introduit des forces artificielles qui travaillent en absorbant energie, et permettent ainsi de atteindre un état stationnaire

Question: correct ? altère-t-on les proprietés physiques ? est il possible que les systèmes artificiels non Hamiltoniens soient equivalents à des systèmes avec thermostats Hamiltoniens?



Example: $U_j,\ U_{0,j}$ int. pairs, courte portée

$$x = (\mathbf{X}_0, \dot{\mathbf{X}}_0, \mathbf{X}_1, \dot{\mathbf{X}}_1, \ldots, \mathbf{X}_n, \dot{\mathbf{X}}_n)$$

$$\begin{aligned}
\ddot{\mathbf{X}}_{0i} =& -\partial_i U_0(\mathbf{X}_0) - \sum_{j>0} \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) + \mathbf{F}_i(\mathbf{X}_0) \\
\ddot{\mathbf{X}}_{ji} =& -\partial_i U_j(\mathbf{X}_j) - \partial_i U_{0,j}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_j) - a\,\alpha_j \dot{\mathbf{X}}_{ji}, \qquad a = 0, 1
\end{aligned}$$

Particules sont dans des volumes autour d'une sphère Λ de rayon D et, pour $a = 1$, les α_j sont des *forces artificielles*, c'est à dire multiplicateurs pour imposer mouvements *Isokinétiques* or *Isoénergetiques*

$$\frac{\dot{\mathbf{X}}_j^2}{2} \equiv \frac{3N_j}{2} k_B T_j, \qquad \text{or} \qquad \frac{\dot{\mathbf{X}}_j^2}{2} + U_j(\mathbf{X}_j) \equiv E_j$$

et $a = 0$ corresponds à la dynamique Hamiltonienne.

Choix des données initiales (par ex.) par rapport à une distribution de Gibbs

$$\mu_0 = \lim_{\Lambda\to\infty} c\, e^{-H_0(x)} \prod_j \frac{d\mathbf{X}_j d\dot{\mathbf{X}}_j}{N_j!}, \qquad H_0(x) = \sum_{j=0}^n \beta_j \Big(\frac{\dot{\mathbf{X}}_j^2}{2} + U_j(\mathbf{X}_j) - \lambda_j N_j\Big)$$

Choix de x p.r. à μ_0 genère une configuration infinie à température , densité d'énergie et de particules bien definies T_j, e_j, δ_j dans chaque thermostat.
x evolue $x \to S_t^{(\Lambda,1)} x$ imaginant réflexion à la frontière de Λ et les particules externes "fixes". Limite thérmodynamique: $\Lambda \to \infty$.

Idée: Si Λ est grand une simulation avec un thermostat fini genère mouvements très proches de ceux des thermostats infinis **avec** μ_0**–prob.** 1. Ces derniers sont définis comme $x \to S_t^{(0)} x = \lim_\Lambda S_t^{(\Lambda,0)} x$

Les limites de la dynamiques à volume fini devraient exister en présence ou en absence des forces thermostatiques et *l'énergie par particule, la densité, et l'énergie kinétique par particule devraient être constantes du mouvement* avec probabilité 1.

H. Dynamique Locale: Dans $S_t^{(\Lambda,a)}x$ chaque particule a un nombre fini de collisions contre les parois pout $t' \le t$ ($\forall\,\Lambda, a = 0,1$). Et les limites $S_t^{(a)}x$ existent avec μ_0-probabilité 1 et la densité d'énergie et de particules dans une sphère $B(\xi,\rho)$ est bornée, si $\rho > \log_+ |\xi|$, alors que les quantites globales sont **constantes**, pour tout t,

$$\frac{N_j(x^{(\Lambda,a)}(t))}{|\Lambda\cap C_j|} \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} \delta_j, \frac{U_j(x^{(\Lambda,a)}(t))}{|\Lambda\cap C_j|} \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} u_j, \frac{K_j(x^{(\Lambda,a)}(t))}{|\Lambda\cap C_j|} \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} \frac{3k_B T_j\,\delta_j}{2},$$

Theorème Pout tout t fixé la *limite a–independente* existe

$$\lim_{\Lambda\to\infty} S_t^{(\Lambda,a)}x = S_t^{(0)}x, \qquad a = 0,1$$

Cela veut dire que, à Λ grand, les deux dynamiques deviennent identiques bien que une est dissipative et l'autre conservative.
MAIS: a-t-on perdu la production d'entropie???

Si $Q_j \stackrel{def}{=} \dot{\mathbf{X}}_j \cdot \partial_{\mathbf{X}_j} U_{j.0}(\mathbf{X}_j, \mathbf{X}_0)$ alors Q_j est la *chaleur* cedé

$$\alpha_j = \frac{Q_j - \dot{U}_j}{3k_B T_j N_j},\ (isok.) \qquad \alpha_j = \frac{Q_j}{3k_B T_j N_j},\ \text{(isoé.)}$$

La production d'entopie dans la dynamique Hamiltonienne est definie par

$$\varepsilon = \sum_{j>0} \frac{Q_j}{k_B T_j}.$$

Definition differente dans la dynamique thermostattée; *entropie produite = taux* σ *des contractions du volume de phase*: calcul simple donne

$$\sigma(x) = \sum_{j>0} \frac{Q_j - \dot{U}_j}{k_B T_j}, (isok.) \qquad \sigma(x) = \sum_{j>0} \frac{Q_j}{k_B T_j}, \text{(isoé.)}$$

Donc σ and ε sont identiques (si une derivèe temporelle ne conte pas).
Comment l'équivalence est-elle possible? $\alpha_j \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} 0$ *mais pas* $\sigma \simeq \sum 3N_j\alpha_j$: comme l'énergie dans les modèls de champ moyen.

À noter que

$$\alpha_j = \frac{Q_j}{3k_B T_j N_j}$$

et $N_j = O(\Lambda)$ tandis que Q_j est $O(|\partial C_0|)$, ordre de la surface de C_0; donce $\alpha_j \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} 0$ au contraire de $\sigma_j = N_j \alpha_j$

Preuve euristique:

$$x_i^{(\Lambda,a)}(t) = x_i(0) + e^{-\int_0^t a\alpha_j(t')dt'}\dot{x}_i(0) + \int_0^t dt'' e^{-\int_{t''}^t a\alpha_j(t')dt'} F_i(t'')dt''$$

et $\alpha_j \xrightarrow[\Lambda\to\infty]{} 0$ pour tout $j \Rightarrow$ les limites $x_i^{(a)}(t)$ verifient *les mêmes equations*

$$x_i(t) = x_i(0) + \dot{x}_i(0)t + \int_0^t dt'' F_i(t'')dt''$$

La difficulté (**cas isoénergetique**) est de prouver que la dynamique est locale.

Cas ou on peut prouver cela

1) Thermostats constitués par des gas *libres*

2) Systèmes 1-dimensionnels avec interactions répulsives decroissantes et à courte portée

3) Même à 2 dimensions: “peut être”
4) Même à 3 dimensions: “peut être”

Si on examine la question on comprend que la grande difficultè est de prouver que l’énergie kinétique totale moyenne est une constante du mouvement.
Illustration de la difficulté (example).

La borne a la signification physique que la température du thermostat ne peut devenir nulle. En effet elle devrait même être *constante* (car il est infini).

$$\alpha_j(x) = \frac{Q_j}{2K_j(x)} \equiv \frac{Q_j}{3k_B T_j(x) N_j}, \qquad Q_j = \sum_i \dot{q}_i \cdot \sum_{i' \in C_0} \partial\varphi(q_i - q_{i'})$$

donc on s'attend que $N_j T_j = K_j(x(t)) = O(\Lambda)$. **SI correct** il faut encore que

$$|Q_j| \le N_0 F \sum_i |\dot{q}_i| = F N_0 \sqrt{K_j^*} \sqrt{N_j} \qquad \text{(Schwartz)}$$

Puisque $\frac{\sqrt{K_j^*}}{2K_j} \le \frac{1}{\sqrt{K_j}}$ et $\sqrt{\frac{\overline{N}}{2K_j}} \le \frac{1}{\sqrt{k_B T_j}}$

$$|\alpha_j| \le N_0 F \sqrt{\frac{\overline{N}}{K_j}} \le \frac{N_0 F}{\sqrt{k_B T_j}} \stackrel{def}{=} \ell$$

Les particules initialment dans la couronne Λ_n/Λ_{n-1} maintiennent la vitesse initiale à un facteur près de $\lambda^{\pm 1} = e^{\pm \ell\Theta}$. Mais la vitesse initiales est bornée par ("grandes deviations")

$$V_n = c\, n^{\frac{1}{2}}$$

Donc V_n croit avec le logarithm de la distance à l'origine.

Si $n(\Theta)$ est la plus petite n pour laquelle

$$2^n r_\varphi - V_n \; > \; \Theta < D_0 + r_\varphi$$

aucune particule distante $> \lambda 2^{n(\Theta)+1} r_\varphi$ peut interagir avec le système.
Donc $\overline{N} \le \mathcal{E}(2^{n(\Theta)+1} r_\varphi)^d$ et la dynamique $x^{(n,a)}(t)$ devient à un nombre fin de particules, $\le N_0 + \overline{N}$ au plus.

Des equations du mouvement des $N_0 + \overline{N}$ particules on voit que leur vitesse n'est pas $> V_\Theta$

$$V_\Theta = (\overline{V} + F\, N_0\, \overline{N}\, \Theta)\, \lambda$$

si $\overline{V}$ = maximum initial. Alors

$$|\alpha_j \dot{q}_i| \le const\, \frac{N_0 \overline{N} V_\Theta^2}{2^{dn} T\, \delta} \xrightarrow[n\to\infty]{} 0$$

References:

`arxiv.org: 0810.1510`

CHAOS **19**, 013101, 2009 `doi: 10.1063/1.3054710`