Températures effectives dans un modèle hors-équilibre de dynamique non-Markovienne

Thomas Perruchot

8 juin 2007

Résumé

L'article étudié ici, écrit par Patrick Ilg et Jean-Louis Barrat, porte sur le concept de température effective. Les auteurs donnent plusieurs définitions de la température effective pour un modèle hors-équilibre particulier à partir de plusieurs relations connues. A partir de leurs résultats, les auteurs pointent les différences entre les possibles définitions de la température effective et discutent leurs pertinences.

Introduction

La physique des systèmes hors-équilibre est, de nos jours, encore mal comprise. Malgré les nombreux modèles qui existent et des définitions de plus en plus élaborées (comme les fonctions de corrélations ou les fonctions de réponse), développées dans le but de mieux capter la physique des systèmes hors-équilibre, la dynamique de ces systèmes reste floue pour les physiciens. Une des façon de vaincre cette incompréhension serait peut-être d'étudier le concept de température effective. Ce concept permettrait d'étendre celui de la température (qui n'a a priori de sens que pour des systèmes à l'équilibre) à des systèmes hors-équilibre. On pourrait alors donner des explications plus intuitives de phénomènes physiques hors-équilibre et surtout permettre une étude expérimentale plus poussée de ces systèmes hors-équilibre. Le fait que l'on s'intéresse aux températures effectives signifie évidemment que l'on cherche une description macroscopique des systèmes hors-équilibre.

1 Le modèle étudié

Afin d'étudier les températures effectives, les auteurs construisent un modèle qui a l'avantage d'être analytiquement soluble. Alors, les différentes températures effectives obtenues pourront être comparées et discutées. Le modèle développé est la mise en équation d'un système hors équilibre dont la dynamique est non-Markovienne c'est-à-dire que le système a une certaine mémoire de ce qu'il a vécu.

On considère une particule de masse m et de vitesse v à la position x (modèle à une dimension d'espace) soumis à un potentiel $V(x)$. Cette particule est mise en contact avec deux bains thermiques. L'un des bains est à la température T_{fast} et conduit la dynamique rapide du système. Le coefficient de friction du à ce bain sera instantané et un bruit blanc gaussien sera rajouté afin de modéliser le choc de notre particule avec les particules du bain (comme dans le cas des équations de Langevin). L'autre bain, régissant la dynamique lente du système, aura une température T_{slow}. Ce dernier bain donne le caractère non-Markovien à la dynamique de ce système car le coefficient de friction n'est pas instantané (memory kernel) et le bruit du aux chocs des particules de ce bain sur notre particule n'est pas un bruit blanc gaussien mais dépendra de la façon dont le système se rappelle de ce qu'il a vécu. Les équations que l'on obtient sont difficiles à étudier en raison de leur caractère non-Markovien mais il est possible de se ramener à un système Markovien pour une forme particulière du coefficient de friction du bain T_{slow} (cette forme est une exponentielle en $-\frac{t}{\alpha\gamma}$). Ensuite, comme pour les équations de Langevin, on néglige l'inertie de notre particule : $m\dot{v} \to 0$ (overdamped limit). Enfin, une dernière approximation est faite : un terme des équations reflétant une période de transition (du à la mémoire du bain T_{slow}) est négligé. Ceci peut être justifié soit par le fait que nous nous plaçons à des temps suffisamment longs ou bien que l'on prend une condition initiale $x(t_0)$ adéquate. Ainsi, les différentes échelles de temps dans ce modèle sont séparés.

Nous avons alors le modèle final servant à étudier les températures effectives. Ce modèle peut être vu comme la prise en compte d'un degré de liberté interne dans un système régi par une dynamique lente.

2 Cas spécifiques étudiés pour ce modèle

Le premier cas pris en compte pour ce modèle est le cas $T_{fast} = T_{slow}$. Les deux bains sont à la même température. Alors, le système est décrit grâce à sa dynamique rapide dont le couplage à sa dynamique lente mène à une distribution d'états d'équilibres décalée. Ce décalage peut être décrit par un potentiel harmonique répulsif (dont la force est reliée aux paramètres décrivant la dynamique lente du système). Si le potentiel (auquel est soumis notre particule) est harmonique alors tout se passe comme si le système était régi par une dynamique rapide 'renormalisée'. Il est possible de définir une température effective qui, dans le cas d'un potentiel harmonique, redonne la température des bains et qui, dans le cas général, montre l'effet du couplage des deux dynamiques (lente et rapide) du système.

Ensuite, en conservant un potentiel général, une température effective est obtenue en employant l'approximation de quasi-équilibre (QEA). Alors la température est définie, comme pour un système à l'équilibre, à l'aide de l'entropie. Dans ce cas, une température T_{QEA} est obtenue et montre le couplage entre les dynamiques lente et rapide du système. S'il n'y pas de couplage, le théorème d'équipartition est retrouvé et $T_{QEA} = T_{fast}$ et le système est régi par sa dynamique rapide.

A partir de ce point, on considère que la particule est soumise à un potentiel harmonique. Ceci permet une résolution analytique complète et ainsi d'arriver à des relations connues comme par exemple le théorème fluctuation-dissipation.

Le premier cas est celui de la limite aux temps longs. On obtient une température effective T_{static}. Alors, on découvre que, pour un choix quelconque de paramètres, tout se passe comme si les dynamiques rapides et lentes du système étaient découplées.

Ensuite, différentes définitions de température effective sont obtenues à partir de la relation dynamique de fluctuation-dissipation. Tout d'abord, on définit une température effective par analogie avec ce que l'on connait dans un système à l'équilibre. Pour un tel système, le théorème statique de fluctuation-dissipation donne la température égale à la dérivée de la fonction de réponse intégrée par rapport à la fonction de corrélation temporelle (cette dérivée est en fait égale à l'opposé de l'inverse de la température). Ici, en utilisant le théorème de fluctuation-dissipation dynamique, on définit une température T_{eff} à partir de la dérivée de la fonction de réponse intégrée par rapport à la fonction de corrélation temporelle. Alors, pour des temps courts, on retrouve la température T_{fast} du bain qui régit la dynamique rapide du système. Aussi, est défini une température effective à partir du même principe mais pour les temps longs notée T_{eff}^{long}. Enfin, une température effective T_∞ est définie pour les temps infiniment longs. Pour ce modèle, on a $T_\infty = T_{static}$.

A partir de ces différentes définitions, des simulations numériques sont faites afin d'étudier les différences entre ces définitions.

Conclusion

Tout d'abord, on observe un régime limite en-deçà duquel (temps courts) on a la température effective T_{eff} et au-delà duquel (temps longs) on obtient T_{eff}^{long}. Ceci a été observé dans des systèmes de verres de spins. Aussi, on remarque que, en étudiant l'évolution de T_{eff} dans le temps, T_{eff} est proche de T_{fast} pour les temps courts puis atteint sa valeur asymptotique comprise entre T_{fast} et T_{slow} (dépendante des paramètres choisis pour le modèle). Enfin, on remarque que, quelques soient les paramètres choisis pour le modèle, $T_{static} = T_{fast}$ alors que $T_{eff}^{long} = T_{slow}$ pour des paramètres donnant lieu à une séparation des échelles de temps courtes et longues. Ce résultat donne alors une définition pertinente de température effective et définit mieux le comportement des systèmes hors-équilibre.