Polymères Dirigés
&
Réseaux Conducteurs de Chaleur

Systèmes de mécanique statistique à l'équilibre et hors équilibre

Alain Camanes

alain.camanes@univ-nantes.fr

Laboratoire Jean Leray - Université de Nantes

Soutenance de thèse
02 décembre 2008

Plan de l'exposé

Les polymères dirigés

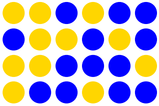
1. Modèle
2. Transitions de phase
3. Température critique
4. Temps continu

Les réseaux conducteurs de chaleur

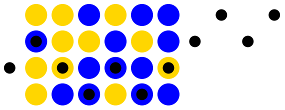
1. Modèle
2. Oscillateurs harmoniques
3. Régularité et support
4. Principe de Lasalle

Les polymères dirigés

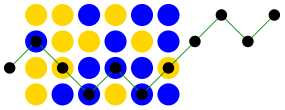
Les polymères dirigés en environnement aléatoire



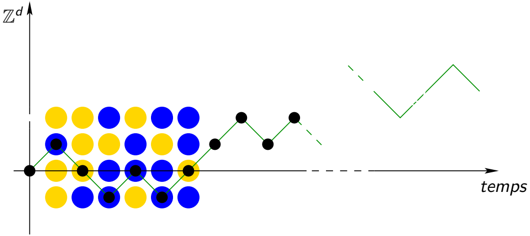
Les polymères dirigés en environnement aléatoire



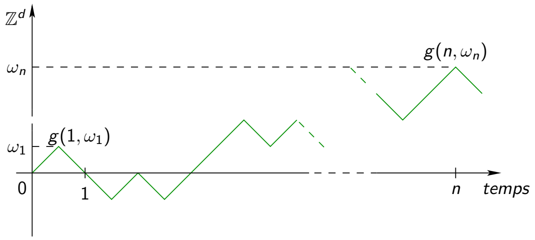
Les polymères dirigés en environnement aléatoire



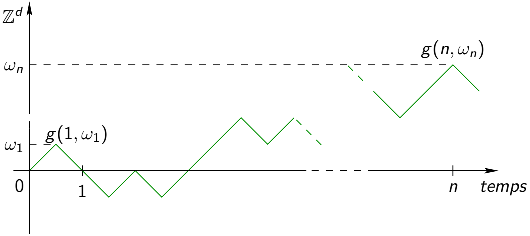
Les polymères dirigés en environnement aléatoire



Les polymères dirigés en environnement aléatoire



Les polymères dirigés en environnement aléatoire



Position du monomère i	: ω_i.
Énergie du polymère à l'instant n	: $H_n(\omega) = \sum_{i=1}^{n} g(i, \omega_i)$.
Température	: $T = 1/\beta$.
Fonction de partition	: $Z_n = \mathbf{P}\left[e^{\beta H_n(\omega)}\right]$.
Mesure polymère	: $\mu_n(\cdot) = \mathbf{P}[\cdot e^{\beta H_n}]/Z_n$.

Transitions de phase

Hypothèses :

$$(g(i,x))_{i,x} \text{ i.i.d. sous la loi } \mathbf{Q},$$
$$\lambda(\beta) = \ln \mathbf{Q}\left[e^{\beta g}\right] < +\infty.$$

- La fonction de partition et l'énergie libre

$$\begin{aligned} W_n &= e^{-n\lambda} Z_n \\ p_n &= \frac{1}{n} \ln W_n \end{aligned}$$

Transitions de phase

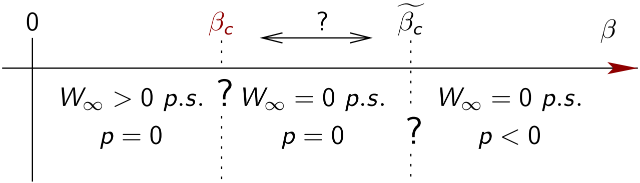
Hypothèses :

$(g(i,x))_{i,x}$ i.i.d. sous la loi $\mathbf{Q}$,
$\lambda(\beta) = \ln \mathbf{Q}\left[e^{\beta g}\right] < +\infty$.

- La fonction de partition et l'énergie libre

$$\begin{aligned} W_n &= e^{-n\lambda} Z_n \xrightarrow{p.s.} W_\infty, \\ p_n &= \frac{1}{n} \ln W_n \xrightarrow{p.s.} p. \end{aligned}$$

- Existence d'une transition de phase



Les conséquences de la transition de phase

- *Principe d'invariance* [Comets, Yoshida 06] : Si $\beta < \beta_c$ alors pour toute F continue bornée, B mouvement Brownien de matrice de covariance $d^{-1}Id$

$$\mu_n \left[F\left(\frac{1}{\sqrt{n}} \omega_{nt} \right) \right] \to \mathbf{E}[F(B)].$$

- *Localisation* [Carmona, Hu 02] : Si $\beta > \beta_c$ alors il existe $c_0 > 0$ t.q.

$$\limsup \mu_{n-1} \left(\omega_n^1 = \omega_n^2 \right) \geq c_0.$$

- *Températures critiques* :

$$\begin{array}{lll} \beta_c = 0 & d = 1, 2 & \text{[Carmona, Hu 02]} \\ \widetilde{\beta}_c = 0 & d = 1 & \text{[Comets, Vargas 06]} \end{array}$$

- *Moments d'ordre 2* [Bolthausen 89] : il existe une température β_2 telle que

$$\beta_2 \leq \beta_c.$$

Les moments fractionnaires

- *L'uniforme intégrabilité* [Carmona, Hu 02] : $\beta < \beta_c$ si et seulement si $(W_n)_n$ est uniformément intégrable.

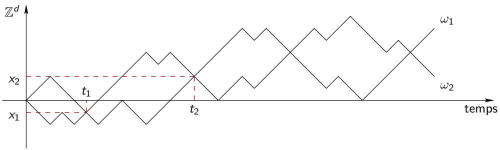
$$\left.\begin{array}{l}\text{Il existe } \alpha \in (1,2] \text{ t.q.} \\ \sup_n \mathbf{Q}\left[W_n(\beta)^\alpha\right] < +\infty\end{array}\right\} \Rightarrow \beta < \beta_c.$$

- *Méthode des moments fractionnaires* [Derrida, Evans 92] :

$$\begin{aligned} Z_n^\alpha &= \mathbf{P}\left[e^{\beta H_n}\right]^{2\alpha/2} \\ &= \mathbf{P}^{\otimes 2}\left[e^{\beta H_n(\omega^1)+\beta H_n(\omega^2)}\right]^{\alpha/2} \\ &= \mathbf{P}^{\otimes 2}\left[e^{\beta \sum_{i=1}^n g(i,\omega_i^1)+g(i,\omega_i^2)}\right]^{\alpha/2} \end{aligned}$$

La condition d'uniforme intégrabilité

- On s'intéresse alors aux instants de rencontre des marches aléatoires :



- On introduit les quantités

$$p_{t,x} = \mathbf{P}\left(\omega^1, \omega^2 \text{ se rencontrent pour la 1ère fois en } (t,x)\right),$$

$$\pi_d = \sum_{t,x} p_{t,x}.$$

- *Condition d'uniforme intégrabilité* [Derrida, Evans 92] :

S'il existe $\alpha \in (1,2]$ tel que $\lambda(\alpha\beta) - \alpha\lambda(\beta) < -\ln \sum_{t,x} p_{t,x}^{\alpha/2}$ alors

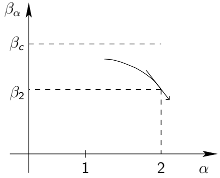
$$\beta \leq \beta_c.$$

La température critique

- Une borne inférieure sur la température inverse critique :

$$\beta_\alpha = \sup\left\{\beta;\ \lambda(\alpha\beta) - \alpha\lambda(\beta) < -\ln\sum_{t,x} p_{t,x}^{\alpha/2}\right\}.$$

- Graphe de la fonction $\alpha \mapsto \beta_\alpha$,



- La température β_2 n'est pas optimale dès que

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\beta_\alpha\Big|_{\alpha=2} < 0.$$

Remarque : Lorsque g suit une loi gaussienne, la fonction $\alpha \mapsto \beta_\alpha$ est strictement concave.

De l'uniforme intégrabilité à l'entropie

- On introduit les entropies

$$h_{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q}\left[\frac{e^{\beta_2 g}}{e^{\lambda(\beta_2)}} \ln \frac{e^{\beta_2 g}}{e^{\lambda(\beta_2)}}\right],$$

$$h_{\nu} = -\sum_{t,x} \frac{p_{t,x}}{\pi_d} \ln \frac{p_{t,x}}{\pi_d}.$$

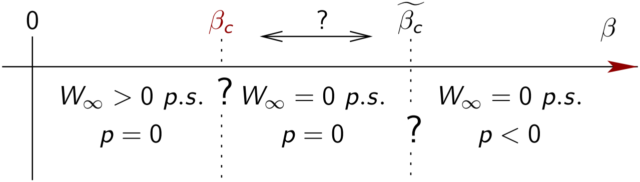
Théorème ([C., Carmona 08])

Si $h_{\mathbf{Q}} < h_{\nu}$ alors $\beta_2 < \beta_c$.

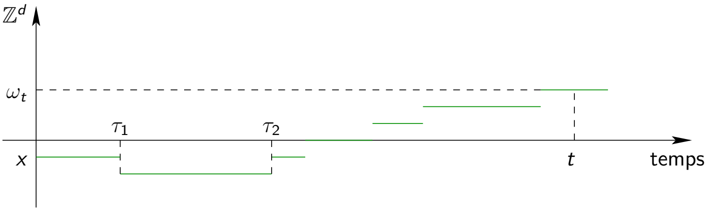
- Par exemple

d	h_{ν}	$h_{\mathbf{Q}}$		
		binomial	*poisson*	*gaussien*
3	5.18	4.96	6.42	2.16
4	4.08	7.59	10.30	3.29
5	3.52	9.17	12.73	4

Récapitulatif



Les polymères dirigés en temps continu



Marche aléatoire de taux de saut κ : ω.

Environnement au point x à l'instant t : $B_x(t)$.

Hamiltonien : $H_t(\omega) = \int_0^t dB_{\omega_s}(s)$.

Fonction de partition : $W_t(\beta) = \mathbf{P}\left[e^{\beta H_t - \frac{t\beta^2}{2}}\right]$.

Énergie libre : $p_t(\beta) = \frac{1}{t} \ln W_t$.

Fonction de partition et énergie libre

Théorème

Il existe une variable aléatoire W_∞ et une fonction $p(\beta)$ telles que

$$\begin{aligned} W_t(\beta) &\xrightarrow{p.s.} W_\infty(\beta), \\ p_t(\beta) &\xrightarrow{p.s.} p(\beta). \end{aligned}$$

Structure de la démonstration

- Propriété de Markov + Suradditivité ⇒ Convergence L^1 :

$$\mathbf{Q}[p_t] \to \mathbf{Q}[p].$$

- Calcul de Malliavin ⇒ Concentration :

$$\mathbf{Q}\left(|\ln W_t - \mathbf{Q}[\ln W_t]| \geq u\right) \leq 2e^{-\frac{u^2}{2\beta^2 t}}.$$

Polymères et équation d'Anderson parabolique

- *La fonction de partition point à point*

$$W_t(\beta; x, y) = \mathbf{P}_x \left[e^{\beta H_t(\omega) - t\beta^2/2} \mathbb{1}_{\omega_t = y} \right].$$

- *L'équation d'Anderson parabolique*

$$dW_t(\beta; 0, x) = \kappa \, \Delta W_t(\beta; 0, \cdot)(x) \, dt + \beta \, W_t(\beta; 0, x) \, dB_x(t).$$

- *Fonction de Lyapunov* [Cranston, Mountford, Shiga 02] : il existe une fonction γ et une constante $\alpha > 0$ telles que

$$\frac{1}{t} \ln \mathbf{P} \left[e^{\int_0^t dB_{\omega_s}(s)} \right] \to \gamma(\kappa),$$

avec $\gamma(\kappa) \ln(\kappa) \sim_0 -\frac{\alpha^2}{4}$.

Asymptotique de l'énergie libre

Théorème

Il existe une constante $\alpha > 0$ telle que pour tout $\kappa > 0$,

$$p(\beta) + \frac{\beta^2}{2} \sim_{\beta\to\infty} \frac{\alpha^2}{8} \frac{\beta^2}{\ln \beta}.$$

- *Changement d'échelle* du mouvement brownien :

$$B^{(c)} = \left(\frac{1}{\sqrt{c}} B_{ct} \right)_{t \geq 0} \overset{loi}{=} B.$$

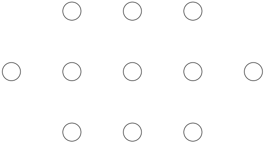
- Application du changement d'échelle :

$$\begin{aligned} p(\kappa, \beta) &= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \mathbf{Q} \ln \mathbf{P} \left[e^{\beta H_t(\omega, B^{(c)})} \right] - \beta^2/2 \\ &= c \lim_t \frac{1}{ct} \mathbf{Q} \ln \mathbf{P} \left[e^{\frac{\beta}{\sqrt{c}} H_{ct}(\widetilde{\omega}, B)} \right] - \beta^2/2 \\ &= \beta^2 \gamma(\kappa/\beta^2) - \beta^2/2. \end{aligned}$$

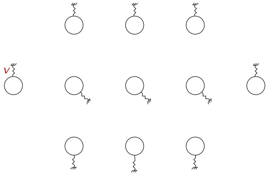
Les réseaux conducteurs de chaleur

Le réseau d'oscillateurs

Atomes : ○



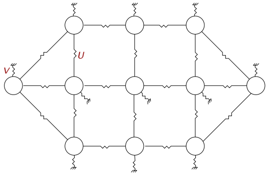
Le réseau d'oscillateurs



Atomes : $\circ$

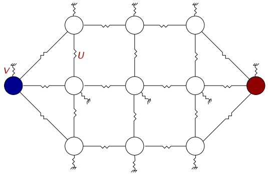
Potentiel d'accrochage : V

Le réseau d'oscillateurs



Atomes : ○
Potentiel d'accrochage : V
Potentiel d'interaction : U

Le réseau d'oscillateurs



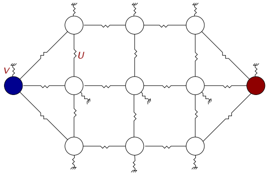
Atomes : ○

Potentiel d'accrochage : V

Potentiel d'interaction : U

Atomes du bord : ●, ●

Le réseau d'oscillateurs



Atomes	: ○
Potentiel d'accrochage	: V
Potentiel d'interaction	: U
Atomes du bord	: ●, ●
Position	: q_i
Quantité de mouvement	: p_i

- L'hamiltonien :

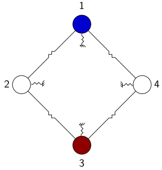
$$H(q,p) = \sum_{i\in\mathcal{V}} \frac{p_i^2}{2} + \sum_{i\in\mathcal{V}} \left(V(q_i) + \frac{1}{2}\sum_{j\sim i} U(q_i - q_j) \right)$$

- *Hypothèse :* U, V polynômes pairs, U symétrique.

La dynamique

- Les équations différentielles stochastiques

$$\begin{cases} dq_i = \partial_{p_i} H \ dt \\ dp_i = -\partial_{q_i} H \ dt + \dots \\ \qquad + \left(-p_i \ dt + \sqrt{2T_i} \ dB_i\right) \mathbb{1}_{i \in \partial \mathcal{V}} \end{cases}$$



- Le générateur du semigroupe (P_t)

$$\mathcal{L} = \sum_{i \in \mathcal{V}} \partial_{p_i} H \, \partial_{q_i} - \partial_{q_i} H \, \partial_{p_i} - \sum_{i \in \partial \mathcal{V}} p_i \partial_{p_i} + \sum_{i \in \partial \mathcal{V}} T_i \partial^2_{p_i}.$$

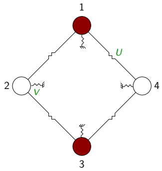
- Les mesures invariantes

$$\mathcal{L}^\star \mu = 0.$$

Un cas particulier

Lorsque les températures sont égales,

$$T_i = T > 0, \forall i \in \partial\mathcal{V}.$$



- L'adjoint du générateur

$$\mathcal{L}^\star = -\nabla_p H \cdot \nabla_q + \nabla_q H \cdot \nabla_p + \sum_{i \in \partial\mathcal{V}} p_i \partial_{p_i} + |\partial\mathcal{V}| + T \sum_{i \in \partial\mathcal{V}} \partial^2_{p_i}.$$

- La mesure de Gibbs ($\beta = 1/T$)

$$\mu(dz) = \frac{e^{-\beta H}}{Z} dz,$$

est invariante

$$\mathcal{L}^\star \mu = 0.$$

Les résultats précédents

- Les chaînes d'oscillateurs [Eckmann, Pillet, Rey-Bellet 99] : dans le cadre d'une chaîne d'oscillateurs, lorsque l'interaction est plus forte que l'accrochage, il existe une unique mesure invariante.

- Les réseaux d'oscillateurs [Maes, Netočnỳ, Vershuere 03] : sous des conditions reliant le potentiel d'interaction à l'ordre du réseau, il existe au plus une mesure invariante.

La condition d'asymétrie

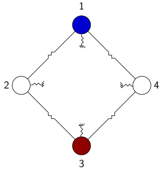
- La matrice d'adjacence $\Lambda = (\Lambda_{ij})_{i,j}$:

$$\Lambda_{ij} = \delta_{i \sim j}.$$

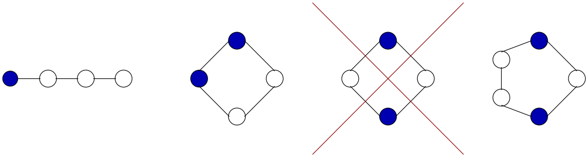
$$\Lambda = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- La condition d'asymétrie :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\Lambda,\partial\mathcal{V}} &= \mathrm{Vect}\left\{\Lambda^k e_i,\ i \in \partial\mathcal{V}, k \in \mathbb{N}\right\} \\ &= \mathbb{R}^N. \end{aligned}$$



- Exemples :



Asymétrie et unicité

On suppose ici que les potentiels sont harmoniques, c'est-à-dire que

$$U(x) = V(x) = \frac{x^2}{2}.$$

Théorème

Si le graphe $(G, \sim, \partial\mathcal{V})$ est asymétrique alors la diffusion admet une unique mesure invariante.

Théorème

Si le graphe n'est pas asymétrique alors la diffusion admet soit aucune, soit une infinité de mesures invariantes.

Valeurs propres et complétude : Idée de la preuve

Théorème

Si le graphe $(G, \sim, \partial\mathcal{V})$ est asymétrique alors la diffusion admet une unique mesure invariante.

On remarque que pour $x, y \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned} \|P_t^\star \delta_x - P_t^\star \delta_y\| &\leq \|Z_t^x - Z_t^y\| \\ &\leq \|e^{Mt}(x-y)\|, \end{aligned}$$

où

$$M = \begin{pmatrix} 0 & I \\ \Lambda - D - I & -I_{\partial\mathcal{V}} \end{pmatrix}.$$

Lorsque la condition d'asymétrie est satisfaite, la partie réelle des valeurs propres de M est négative et on a donc la majoration

$$\|P_t^\star \delta_x - P_t^\star \delta_y\| \leq Ce^{-\mu_0 t}\|x-y\|.$$

On conclut en utilisant la complétude des espaces de Wasserstein.

Symétrie et non-unicité : Idée de la preuve

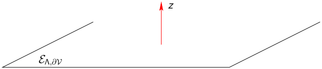
Théorème

Si le graphe n'est pas asymétrique et s'il existe une mesure invariante μ alors la diffusion admet une infinité de mesures invariantes.

On exhibe une quantité invariante par le flot hamiltonien qui ne dépend pas des atomes du bord.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^\star f &= -\{H,f\} + \sum_{i\in\partial\mathcal{V}} p_i \partial_{p_i} f + |\partial\mathcal{V}| f + \sum_{i\in\partial\mathcal{V}} T_i \partial^2_{p_i} f \\ &= -\{H,f\} + \mathcal{L}^\star_{\partial\mathcal{V}} f. \end{aligned}$$

Quantité conservée :
$K(q,p) = \langle z, p\rangle^2 + \alpha \langle z, q\rangle^2,$
$\Lambda z = \alpha z,\ z \in \mathcal{E}^\perp_{\Lambda,\partial\mathcal{V}}$



Alors, pour toute constante $\gamma > 0$, la mesure suivante est une mesure invariante :

$$\frac{e^{-\gamma K}}{Z}\,\mu(dz).$$

Condition de Hörmander et régularité

- L'algèbre de Lie associée à la diffusion :

$$\mathfrak{L} = \Big\{ \partial_{p_i},\ i \in \partial\mathcal{V} + \text{stabilité par crochet interne et par } \sum_j \partial_{p_j} H \partial_{q_j} - \partial_{q_j} H\, \partial_{p_j}, \Big\}.$$

- *La condition de Hörmander* : Si pour tout $z \in \mathbb{R}^n$, $\dim\, \mathfrak{L}(z) = n$ alors le semigroupe est fortement fellerien et la mesure invariante admet une densité $\mathcal{C}^\infty$ par rapport à la mesure de Lebesgue.

- *Remarque :* Lorsque $U,\ V$ sont harmoniques la condition d'asymétrie est équivalente à la condition de Hörmander.

Contrôle et support

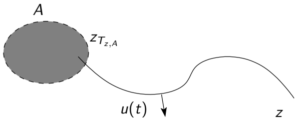
Système stochastique	Système déterministe
$dZ_t = f(Z_t)\ dt + \sigma \circ dB_t$	$\dot{z}_t = f(z_t) + \sigma\ u(t),\ \ u \in \mathcal{C}^{morc}$

- *Théorème du support* [Stroock-Varadhan 1972] : Pour tout $t_0 > 0,\ \ x \in \mathbb{R}^n$,

$$Supp\ P_{t_0}(x, \cdot) = \mathcal{C}\ell\{z_{t_0};\exists\, u \in \mathcal{C}^{morc},\ z_0 = x,\ \ \dot{z}_t = f(z_t) + \sigma\ u(t)\}$$

- *Contrôlabilité faible* : Pour tout $z \in \mathbb{R}^n$, $A \subset \mathbb{R}^n$, il existe $T_{z,A} > 0$, u t.q.

$$z_0 = z,\ z_{T_{z,A}} \in A.$$



Support et récurrence

Théorème

Supposons que la condition de Hörmander soit satisfaite et qu'il existe une mesure μ t.q.

- $\mathrm{Supp}\,\mu = \mathbb{R}^n$,
- μ *est invariante.*

Alors, la diffusion (Z_t^z) est récurrente.

μ est ergodique
$h(z) = \mathbf{P}\left[\mathbb{1}_{Z_t \in A}\right]$ est invariante $\quad\Rightarrow\quad$ (Z_t^z) est récurrente.
$h(Z_t)$ est convergente
$h(z) = 1$ μ-p.s.

Corollaire

Le système déterministe (S) est alors faiblement contrôlable

Remarque : Pour des températures égales, le système est faiblement contrôlable.

UNIVERSITÉ DE NANTES

Polymères Dirigés & Réseaux Conducteurs de Chaleur

A. Camanes

Contrôlabilité et unicité

▶ *Unicité de la mesure invariante* [Hairer 2005] : Supposons que la condition de Hörmander soit satisfaite. Si (S) est faiblement contrôlable alors la mesure invariante μ de (Σ) est unique (si elle existe) et $\mathrm{Supp}\,\mu = \mathbb{R}^n$.

Remarque : Pour toute matrice σ inversible, la contrôlabilité faible des systèmes suivants est équivalente :

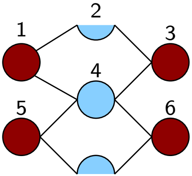
$$\begin{array}{ll} (S_1) & \dot{z}_t = f(z_t) + \sigma\, u(t) \\ (S_2) & \dot{z}_t = f(z_t) + u(t) \end{array}$$

Théorème

Si la condition d'Hörmander est satisfaite et les températures sont toutes strictement positives, la diffusion possède au plus une mesure invariante.

Freinage sans excitation

- Thermostats à température nulle :



$\mathcal{D}$: $\bullet$, $\bullet$: Atomes freinés.
$\partial\mathcal{V}$: $\bullet$: Atomes freinés et excités.

- Les équations différentielles stochastiques :

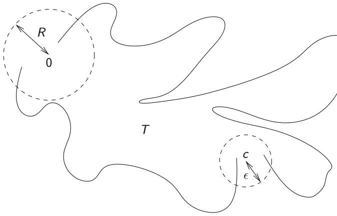
$$\begin{cases} dq_i = \partial_{p_i} H \ dt \\ dp_i = -\partial_{q_i} H \ dt + \cdots \\ \qquad \cdots - p_i \mathbb{1}_{i\in\mathcal{D}} \ dt + \sqrt{2T_i}\mathbb{1}_{i\in\partial\mathcal{V}} \ dB_i \end{cases}$$

Supports disjoints & Principe de Lasalle

- *Régularité* : (P_t) est asymptotiquement fortement fellerien au point z s'il existe $d_n(x,y) \to \mathbb{1}_{x\neq y}$, (t_n) telles que

$$\lim_{\gamma\to 0} \limsup_{n\to\infty} \sup_{y\in\mathcal{B}(z,\gamma)} \|P_{t_n}(z,\cdot) - P_{t_n}(y,\cdot)\|_{d_n} = 0.$$

- *Principe de Lasalle* : S'il existe une unique solution à l'équation $\dot{H}(z) = 0$ alors toute solution de l'équation sans bruit converge vers l'unique minimum de H.



- *Propriété* [Hairer, Mattingly 06] : Si le semigroupe est ASF en c alors c appartient au support d'au plus une mesure invariante.

Conditions de régularité et d'unicité

On note c le point où H atteint son minimum.

▶ *Condition de rigidité* : On dit que le réseau est rigide si toute solution de l'équation sans bruit satisfaisant $p_i \mathbb{1}_{i \in \mathcal{D}} \equiv 0$ est la solution constante $z = c$.

Théorème

Lorsque le semigroupe est fortement fellerien en c et le réseau est rigide, il existe au plus une mesure invariante.
De plus, $c \in Supp\, \mu$.

Remarque : Lorsque les potentiels sont harmoniques, le système est rigide si et seulement si $dim\, \mathcal{E}_{M,\mathcal{D}} = n$.

Perspectives

- Étude de la production entropique : [Maes, Netočnỳ, Vershuere 03] La production d'entropie est strictement négative si et seulement si les températures sont différentes.

- Généraliser les résultats sur les vitesses [Hairer 08] de convergence aux réseaux.

- Lorsque l'interaction est quadratique et l'accrochage au moins de degré 4, la convergence n'est pas exponentielle.