Calcul d'entropies non-concaves par l'entremise de l'ensemble canonique généralisé

Hugo Touchette

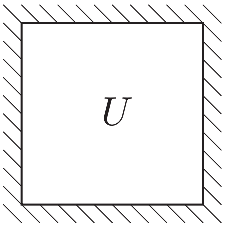
School of Mathematical Sciences, Queen Mary, University of London

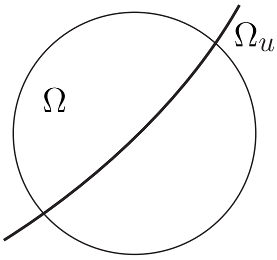
Institut non-linéaire de Nice, France
Octobre 2007

Financé par HEFCE (Angleterre)

Plan

Ensemble microcanonique





Ω	Espace des micro-états
$u = U/N$	Énergie par particule
Ω_u	Restriction

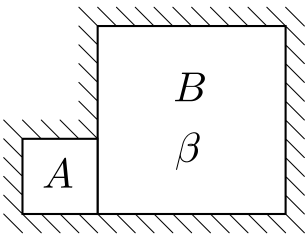
- Densité d'états:

$$\rho(u) = \# \text{ micro-états dans } \Omega_u = \text{volume}(\Omega_u)$$

- Entropie:

$$s(u) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \rho(u)$$

Ensemble canonique



$A \ll B$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} = const, \qquad P = \frac{e^{-\beta U}}{Z(\beta)}$$

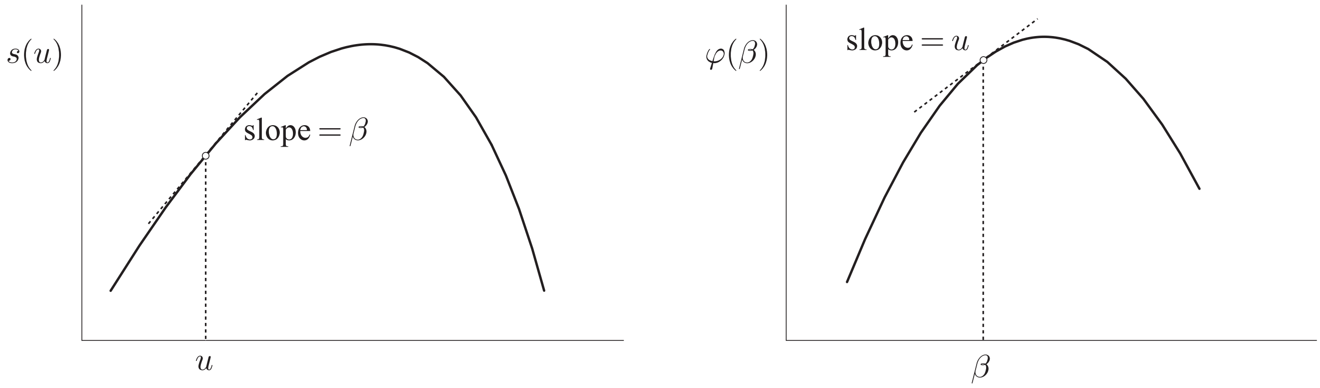
- Fonction de partition:

$$Z(\beta) = \sum_{\text{micro-états}} e^{-\beta U}$$

- Énergie libre:

$$\varphi(\beta) = \lim_{N\to\infty} -\frac{1}{N} \ln Z(\beta)$$

Transformée de Legendre



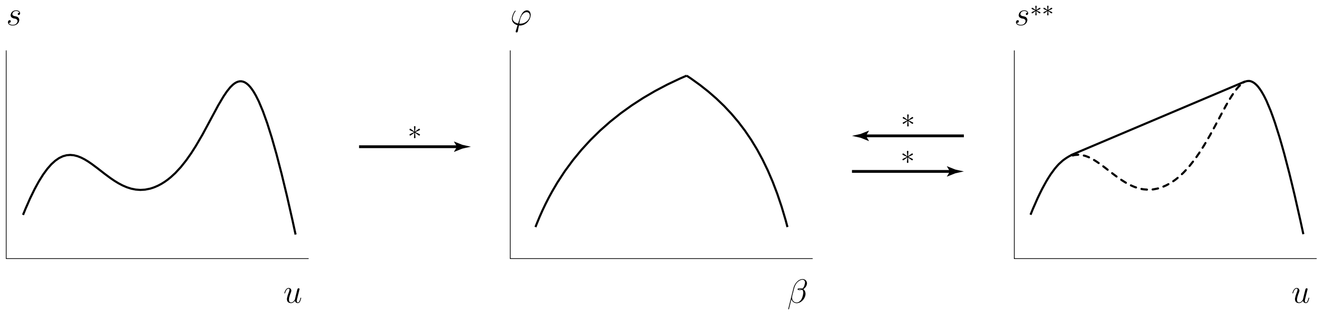
$$s(u) = \beta u - \varphi(\beta) \qquad \varphi(\beta) = \beta u - s(u)$$

$$\varphi'(\beta) = u \qquad s'(u) = \beta$$

$$s \longleftrightarrow \varphi$$
$$u \longleftrightarrow \beta$$

$$s = \varphi^* \qquad \varphi = s^*$$

Entropies non-concaves



Non-concave s

Toujours concave

$$\varphi = s^*$$

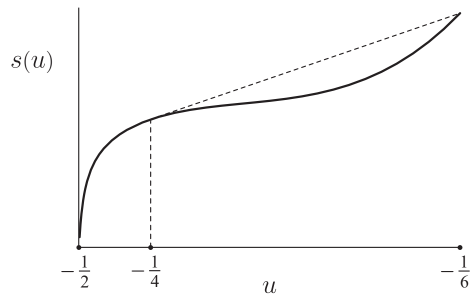
$$s \neq s^{**}$$

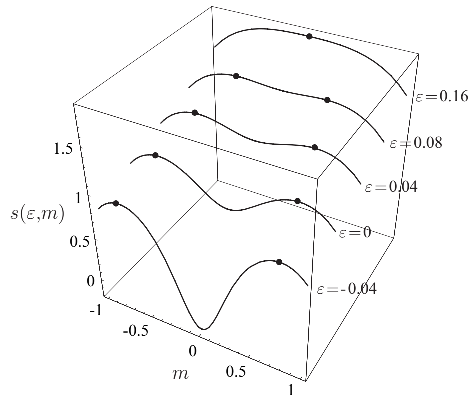
$$s^{**} = \varphi^*$$

- Non-équivalence d'ensembles
- $s^{**}(u) =$ enveloppe concave de $s(u)$
- $s^{**}(u) \geq s(u)$
- Relié aux transitions de phase 1er ordre

Systèmes ayant des entropies non-concaves

$$s \neq \varphi^*$$





- Systèmes gravitationnels
  - Lynden-Bell, Wood, Thirring (1960-)
  - Chavanis (2000-)
- Systèmes de spins
  - Modèle de Blume-Emery-Griffiths
  - Modèle de Potts, champ moyen ($q \geq 3$)
  - Modèle ϕ^4
- Modèle de turbulence 2D
  - Point-vortex models
  - Kiessling & Lebowitz (1997)
  - Ellis, Haven & Turkington (2002)
- Multifractales

Interactions à longue portée

Ensemble canonique généralisé

Costeniuc, Ellis, Touchette & Turkington, JSP 2005; PRE 2006

- Système à N particules
- Énergie: U
- Énergie par particule: $u = U/N$

Canonique

$$P_\beta = \frac{e^{-N\beta u}}{Z(\beta)}$$

$$Z(\beta) = \sum_\omega e^{-N\beta u}$$

$$\varphi(\beta) = \lim_{N\to\infty} -\frac{1}{N} \ln Z(\beta)$$

Canonique généralisé

$$P_{g,\alpha} = \frac{e^{-N\alpha u - Ng(u)}}{Z_g(\alpha)}$$

$$Z_g(\alpha) = \sum_\omega e^{-N\alpha u - Ng(u)}$$

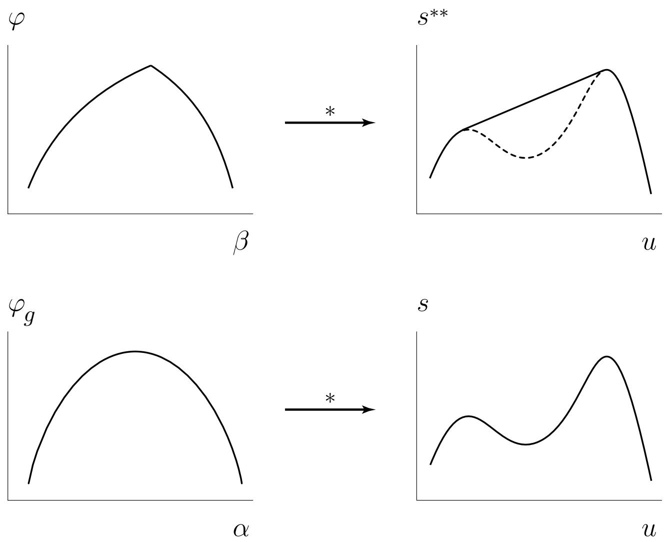
$$\varphi_g(\alpha) = \lim_{N\to\infty} -\frac{1}{N} \ln Z_g(\alpha)$$

Transformation de Legendre généralisée

1. Choix de g
2. Calcul de $\varphi_g(\alpha)$

Si $\varphi_g(\alpha)$ est dérivable à α, alors

$$s(u) = \alpha u - \varphi_g(\alpha) + g(u), \qquad \varphi_g'(\alpha) = u$$



Exemple 1: Modèle de Potts à 3 états

Costeniuc, Ellis & Touchette PRE 2006

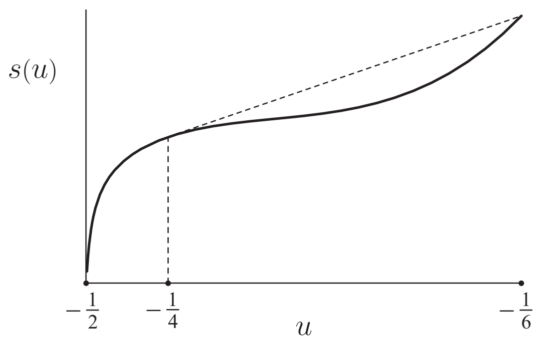
- Hamiltonien:

$$U(\omega) = -\frac{1}{2n} \sum_{i,k=1}^{n} \delta(\omega_i, \omega_k), \quad \omega_i \in \{1, 2, 3\}$$

- Énergie par spin:

$$u = \frac{U}{n} = -\frac{1}{2}(\nu_1^2 + \nu_2^2 + \nu_3^2), \qquad \nu_i = \frac{\#\text{ spins } i}{n}$$

- Entropie:



Costeniuc, Ellis & Touchette, JMP 2005

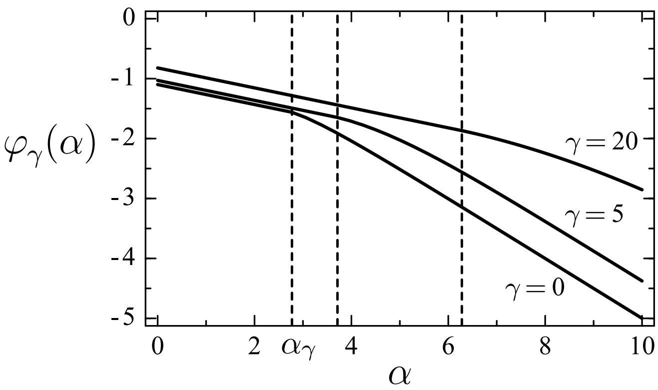
Ensemble Gaussien

- Fonction de partition:

$$Z_\gamma(\alpha) = \sum_{\text{micro-états}} e^{-n\alpha u - n\gamma u^2}, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \gamma > 0$$

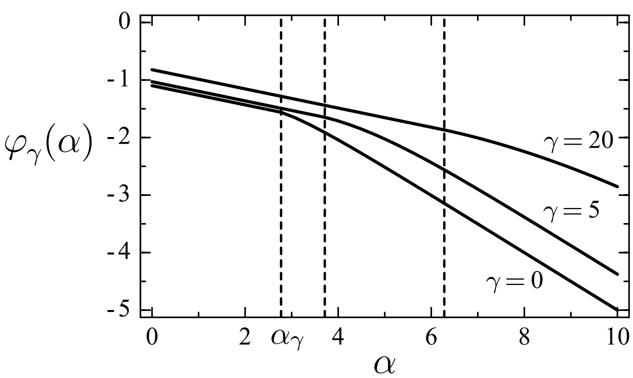
- Énergie libre:

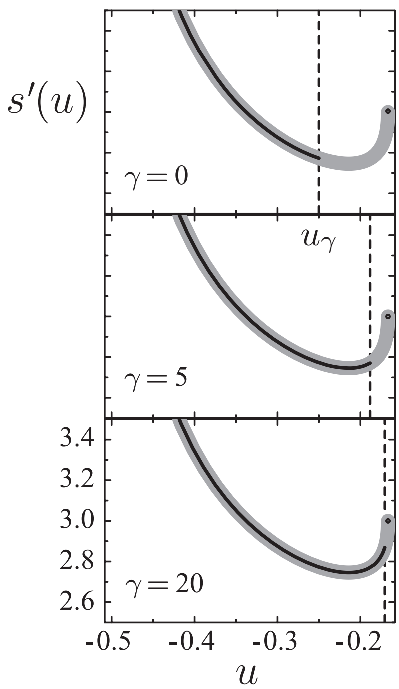
$$\varphi_\gamma(\alpha) = -\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log Z_\gamma(\alpha)$$



- Point critique: α_γ
- Branche 1: $\varphi'_\gamma(\alpha) = -\frac{1}{6}$
- Branche 2: $\varphi'_\gamma(\alpha) \in (-\frac{1}{2}, u_\gamma)$

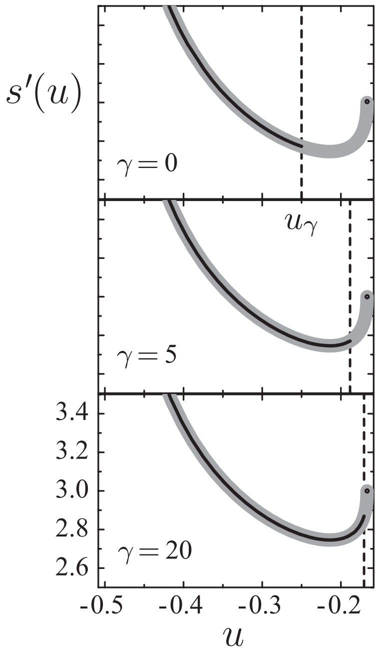
Calcul de l'entropie

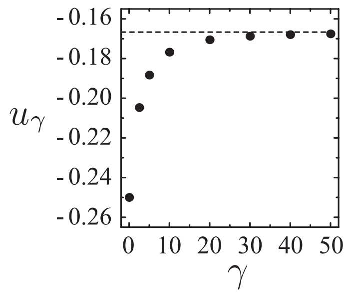


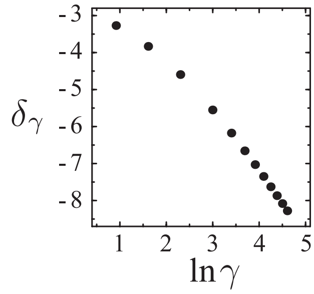


- Tranformée de Legendre généralisée:
  - $s(u) = \alpha u + \gamma u^2 - \varphi_\gamma(\alpha)$
  - $u = \varphi'_\gamma(\alpha) \in (-1/2, u_\gamma)$

Équivalence asymptotique







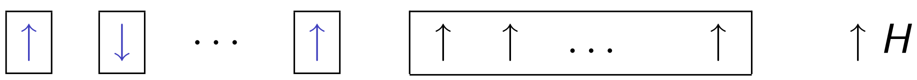
- Énergie max: $u_\gamma = \varphi'_\gamma(\alpha_\gamma + 0)$
- Limite asymptotique:

$$u_\gamma \to u_{\max} = -\frac{1}{6} \quad \text{as} \quad \gamma \to \infty$$

- Scaling: $\delta_\gamma = \ln|u_\gamma - u_{\max}| \sim -2\ln\gamma$

Exemple 2: Modèle de spins en deux blocs

Touchette, Am. J. Phys. 2007



N spins libres

$$U_1 = \sum_{i=1}^{N} s_i$$

$$s_i = \pm 1, \quad \mu H = 1$$

N spins gelés

$$U_2 = \sum_{i=1}^{N} s_i = N s_i$$

$$s_i = \pm 1$$

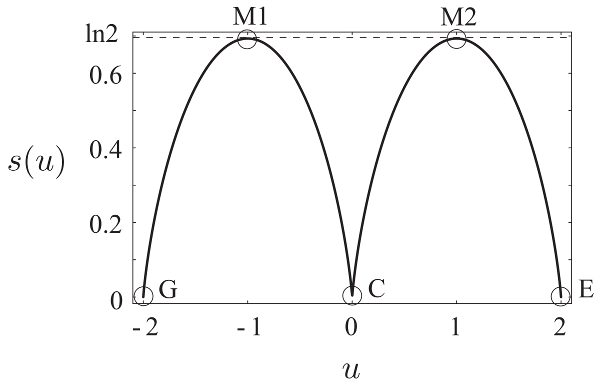
- Énergie totale:

$$U = U_1 + U_2$$

- Énergie par spin:

$$u = \frac{U}{N} \in [-2, 2]$$

Entropie

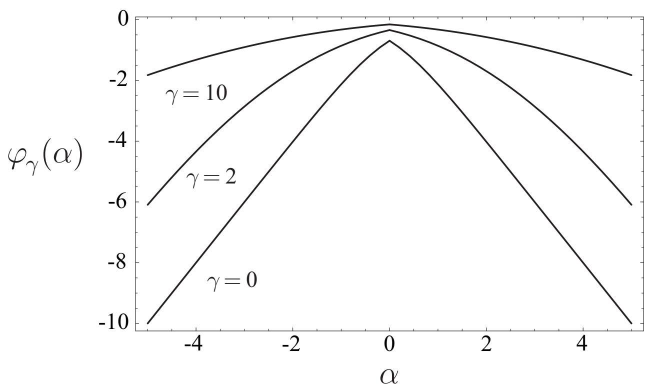


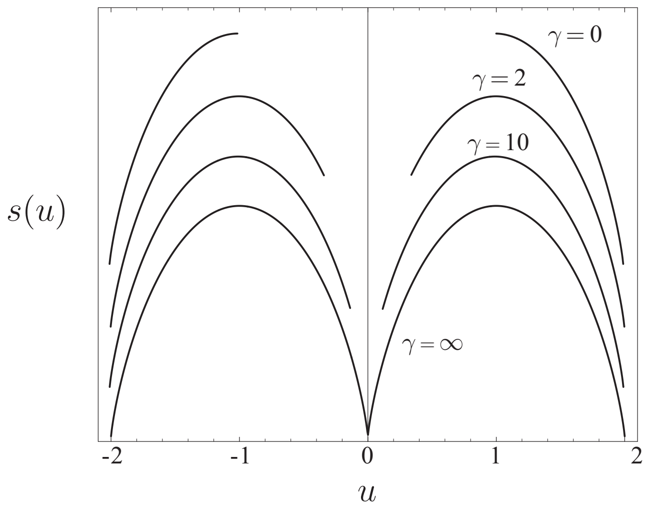
G	:	$\downarrow\downarrow\cdots\downarrow \mid \downarrow\downarrow\cdots\downarrow$
M1	:	$\downarrow\uparrow\cdots\downarrow \mid \downarrow\downarrow\cdots\downarrow$
M2	:	$\downarrow\uparrow\cdots\downarrow \mid \uparrow\uparrow\cdots\uparrow$
C	:	$\uparrow\uparrow\cdots\uparrow \mid \downarrow\downarrow\cdots\downarrow$
		$\downarrow\downarrow\cdots\downarrow \mid \uparrow\uparrow\cdots\uparrow$
E	:	$\uparrow\uparrow\cdots\uparrow \mid \uparrow\uparrow\cdots\uparrow$

$$s(u) = \begin{cases} s_0(u+1) & u \in [-2,0] \\ s_0(u-1) & u \in (0,2] \end{cases}$$

$$s_0(u) = -\left(\frac{1-u}{2}\right)\ln\left(\frac{1-u}{2}\right) - \left(\frac{1+u}{2}\right)\ln\left(\frac{1+u}{2}\right)$$

Calcul de l'entropie dans l'ensemble Gaussien



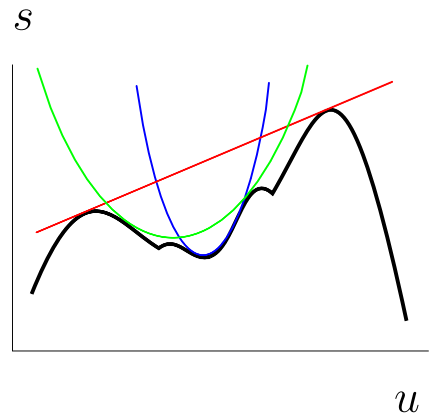


- Transformée de Legendre généralisée:
  - $s(u) = \alpha_u u - \varphi_\gamma(\alpha_u) + \gamma u^2$
  - $\varphi'_\gamma(\alpha_u) = u$
- Équivalence asymptotique: $\gamma \to \infty$

Ensemble universel

$$Z_g(\alpha) = \sum_{\text{micro-états}} e^{-N\alpha u - Ng(u)}$$

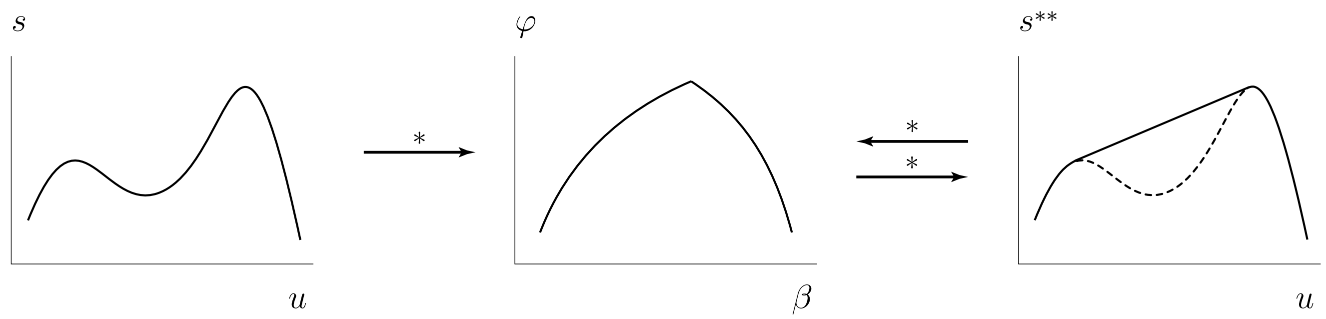
- Canonique: $g = 0$, $g = \text{const}$, $g = \gamma u$
- Gaussien: $g(u) = \gamma u^2$
- Betrag: $g(u) = \gamma |u|$
- Autre?



Universalité

Toute fonction d'entropie peut être calculée via l'ensemble Gaussien (possiblement dans la limite $\gamma \to \infty$).

Résumé



- s peut être non-concave
- Non-équivalence d'ensembles: $s \neq \varphi^*$
- Reliée aux transitions de phase de premier ordre (discontinues)
- Ensemble canonique généralisé: $\varphi \longrightarrow \varphi_g$
- Équivalence d'ensemble: $s = \varphi_g^* + g$

Pour en savoir plus

T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo, and M. Wilkens
Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long Range Interactions
Springer Verlag, New York, 2002.

H. Touchette, R. S. Ellis, and B. Turkington
An introduction to the thermodynamic and macrostate levels of nonequivalent ensembles
Physica A 340, 138, 2004.

M. Costeniuc, R. S. Ellis, H. Touchette, and B. Turkington
Generalized canonical ensembles and ensemble equivalence
Phys. Rev. E 73, 026105, 2006.

http://www.maths.qmul.ac.uk/~ht
ht@maths.qmul.ac.uk