

Grandes déviations et chaoticité : étude à l'aide d'une dynamique biaisée

Julien Tailleur & Jorge Kurchan

Laboratoire PMMH — UMR 7636 (ESPCI,CNRS,P6,P7), 10, rue Vauquelin 75005 Paris
 Julien.Tailleur@espci.fr

Résumé. La physique des systèmes dynamiques non-linéaires s'explique souvent par l'existence de trajectoires rares, qui jouent paradoxalement un rôle prépondérant. Par exemple, la présence de résonances détermine la stabilité des systèmes planétaires et l'existence de solutions localisées, tels les solitons, permet un transport rapide d'énergie dans des systèmes aussi divers que les condensats de Bose-Einstein ou certaines bio-molécules. Or, malgré les nombreux progrès réalisés au cours des dix dernières années, les méthodes permettant de localiser de tels objets restent confinées aux systèmes à peu de degrés de liberté, et leur application dans les domaines de la physique statistique, la chimie ou même l'astronomie reste difficile. Nous présentons ici une méthode introduite récemment qui permet de localiser des trajectoires ayant une chaoticité atypique dans des systèmes à plusieurs degrés de liberté.

En guise d'exemple de "haute" dimensionnalité, nous appliquons notre méthode à la chaîne Fermi-Pasta-Ulam d'oscillateurs non-linéaires, où elle détecte la présence de modes de respiration chaotiques ou de solitons, lorsque l'on cherche respectivement des solutions chaotiques ou intégrables.

Abstract. In non-linear dynamical systems, atypical trajectories often play an important role. For instance, resonances and separatrices determine the fate of planetary systems, and localised objects like solitons and breathers provide mechanisms of energy transport in systems such as Bose-Einstein condensates and biological molecules. Unfortunately, most of the numerical methods to locate these 'rare' trajectories are confined to low-dimensional or toy models, while the realms of statistical physics, chemical reactions, or astronomy are still hard to reach. Here we implement an efficient method that allows one to work in higher dimensions by selecting trajectories with unusual chaoticity. As an example, we study the Fermi-Pasta-Ulam nonlinear chain in equilibrium and show that the algorithm rapidly singles out the soliton solutions when searching for trajectories with low level of chaoticity, and chaotic-breathers in the opposite situation.

1 Introduction

Les systèmes dynamiques complexes sont typiquement chaotiques : deux trajectoires initialement proches s'écartent exponentiellement vite, à un taux λ_{orb} . Ainsi, un déplacement initial δx_0 croît au court du temps comme $|\delta x(t)| \sim |\delta x(0)| \exp(\lambda_{orb} t)$. Pour un système suffisamment chaotique, dans la limite des temps longs, toutes les conditions initiales mènent au même exposant $\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \lambda_{orb}(t)$. Toutefois, une description aussi uniforme échoue à saisir qualitativement la dynamique de nombreux systèmes, qui peuvent présenter en fonction de leurs conditions initiales des trajectoires de chaoticité atypique sur de très grandes échelles de temps.

Un cas d'école est donné par les systèmes planétaires [1,2,3] : de toutes les combinaisons de masses et de conditions initiales compatibles avec les observations actuelles, seules quelques unes débouchent sur une stabilité comparable à celle du système solaire.

Pour décrire quantitativement des fluctuations d'exposants de Lyapunov, et donc de chaoticité, il est naturel de faire appel aux outils de la physique statistique. Deux manières de réaliser l'échantillonnage des trajectoires ont été proposées par le passé. Tout d'abord, on peut regarder des trajectoires de durée finie, et moyennner sur les conditions initiales [4]. Alternativement, on peut perturber le système dynamique étudié par un petit bruit aléatoire et moyennner sur les réalisations du bruit [5]. Nous suivrons ici cette deuxième approche.

2 Formalisme thermodynamique

Considérons $\rho(\lambda, t)$ la distribution de probabilité d'observer une trajectoire de durée t présentant un exposant de Lyapunov λ . Aux temps longs, celle-ci prend la forme d'une fonction de grandes déviations

$$\rho(\lambda, t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} e^{tf(\lambda)}. \quad (1)$$

Notons ici l'analogie avec la physique statistique classique d'un système de N particules, où la distribution de probabilité $\rho(e)$ de la densité d'énergie se met sous la forme $\rho(e) \sim \exp[Ns(e)]$, $s(e)$ étant la densité d'entropie. $f(\lambda)$ joue ainsi le rôle d'une entropie "dynamique". Si la limite thermodynamique est obtenue en physique statistique en envoyant le nombre de composants élémentaires d'un système à l'infini, c'est ici la durée t des trajectoires qui joue le rôle du grand paramètre [6].

La difficulté du calcul de l'entropie amène habituellement à introduire l'ensemble canonique, dont les fonctions thermodynamiques sont souvent plus simples à calculer. On peut de même introduire une fonction de partition dynamique

$$Z(\beta, t) = \langle e^{\beta\lambda t} \rangle \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} e^{t\psi(\beta)} \quad (2)$$

la moyenne étant réalisée par rapport au bruit. $\psi(\beta)$ joue alors le rôle d'une énergie libre dynamique. Changer d'ensemble revient à peser par $\exp(\beta\lambda t)$ les trajectoires ayant un exposant de Lyapunov λ . β joue un rôle analogue à [l'inverse de] la température en physique statistique : fixer un β positif équivaut, dans la limite des temps longs, à sélectionner des trajectoires présentant une valeur de λ fixé, supérieure à la valeur typique, alors qu'un β négatif favorise au contraire des trajectoires plus régulières. En effet,

$$Z(\beta, t) = \int d\lambda \rho(\lambda, t) e^{\beta\lambda t} = \int d\lambda e^{t[f(\lambda) + \beta\lambda]} \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} e^{t[f(\lambda^*) + \beta\lambda^*]}, \quad (3)$$

où λ^* satisfait $f'(\lambda^*) = -\beta$ et correspond à l'exposant typique des trajectoires dominant la mesure pour une "température" β . L'intérêt d'un tel ensemble est que l'on va ici présenter une méthode récemment introduite [7] qui permet de réaliser des simulations à β fixée et donc de sélectionner des trajectoires de chaoticité atypique.

3 Principe de l'algorithme

On désire réaliser un échantillonnage de l'espace des trajectoires en pesant chacune d'elles par un facteur $\exp(\beta\lambda t)$, où β est un paramètre arbitraire fixé. On utilise pour cela une dynamique de population de type "Diffusion Monte Carlo". Considérons par exemple un système dynamique à N degrés de liberté, défini par un Hamiltonien $H(q, p)$, où q et p sont les coordonnées généralisées de l'espace des phases. On fait évoluer un ensemble de \mathcal{N} marcheurs suivant la procédure suivante. Leur position évolue selon :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i} + \sqrt{\epsilon}\eta_i \quad (4)$$

que l'on peut écrire plus généralement

$$\dot{x}_i = -\Omega_{ij} \frac{\partial H}{\partial x_j} + \sqrt{\epsilon} d_i \eta_i \quad \mathbf{x} = (q_1 \cdots q_N, p_1 \cdots p_N) \quad \Omega = \begin{pmatrix} 0_N & -1_N \\ 1_N & 0_N \end{pmatrix} \quad d_i = 1_{i \in [N+1 \cdots 2N]} \quad (5)$$

Les η_i correspondent à N bruits blancs gaussiens η_i , de variance 1, dont l'intensité est fixé par le petit paramètre ϵ . Pour évaluer l'exposant de Lyapunov de chaque marcheur, on calcule en parallèle l'évolution linéarisée

$$\dot{u}_i = -A_{ij} u_j \quad A_{ij} = -\Omega_{ik} \frac{\partial^2 H}{\partial x_k \partial x_j} \quad (6)$$

λ est alors donné par

$$\lambda = -\frac{1}{t} \int_0^t \frac{u_i A_{ij} u_j}{|u|^2} dt \quad (7)$$

Ainsi, $\exp(\beta\lambda t)$ peut s'écrire comme un produit le long des trajectoires

$$\exp \beta\lambda t = \exp \left(- \int_0^t dt \beta \frac{u_i A_{ij} u_j}{|u|^2} \right) = \prod_{k=1}^{t/dt} \left(1 - \beta dt \frac{u_i A_{ij} u_j}{|u|^2} \Big|_{t=kd} \right) \quad (8)$$

À chaque pas de temps dt , on calcule pour chaque marcheur le facteur

$$W = 1 - \beta dt \frac{u_i A_{ij} u_j}{|u|^2} \quad (9)$$

qui est simplement donné par l'éirement instantané du vecteur tangent u élevé à la puissance β . Pour "peser" les trajectoires, on remplace alors chaque marcheur par

- $[W]$ marcheurs avec probabilité $1 - (W - [W])$
- $[W] + 1$ marcheurs avec probabilité $W - [W]$

Puis on renormalise la population par un facteur $\mathcal{K}(t)$ pour la garder constante. Aux temps long, l'échantillon de marcheurs converge vers la "mesure d'équilibre canonique" (dans l'espace des trajectoires) fixée par la "température" β . Notons qu'à partir des facteurs de renormalisation, on peut calculer l'énergie libre dynamique :

$$\psi(\beta) = \frac{1}{t} \log[\mathcal{K}(0)\mathcal{K}(dt)\dots\mathcal{K}(t)]. \quad (10)$$

4 Quelques exemples

4.1 Convergence vers les séparatrices

Les séparatrices sont les frontières de l'espace des phases entre des régimes dynamiques distincts. En tant que berceau du chaos, elles jouent un rôle fondamental dans l'analyse des systèmes dynamiques. Si l'on simule un système intégrable à une "température" $\beta = 1$, les marcheurs convergent vers les séparatrices et les peuplent uniformément. Pour voir cela sur un exemple simple, considérons un double puits de potentiel défini par $H(q, p) = p^2/2 + q^4 - 2q^2$. Les particules peuvent soit osciller dans l'un des deux puits, soit passer de l'un à l'autre. La séparatrice est la courbe émanant du point fixe instable qui sépare ces deux régimes. On voit sur la figure 1 qu'en appliquant la dynamique biaisée avec $\beta = 1$, les marcheurs diffusent lentement en énergie sous l'action du bruit, jusqu'à ce qu'ils convergent sur la séparatrice.

4.2 Transition vers le chaos

Considérons maintenant le cas d'une transition vers le chaos pour un système modèle : l'*application standard*

$$p_{n+1} = p_n - \frac{k\delta}{2\pi} \sin(2\pi q_n) \quad q_{n+1} = q_n + \delta p_{n+1} \quad (11)$$

Cette application représente l'évolution d'un rotor libre, soumis à des pulses d'une force d'orientation fixée. k paramétrise l'intensité de la force, et δ la période entre deux pulses. Dans la limite $\delta \rightarrow 0$, le système se réduit à un pendule pesant. Pour $\delta > 0$, le système est chaotique, d'autant plus que k et δ sont grands. En appliquant la dynamique biaisée pour $\beta = 1$ proche de l'intégrabilité, les marcheurs se concentrent sur la séparatrice (Fig. 2a). Quand le chaos est plus important, de nombreuses structures secondaires apparaissent. Autour de l'île principale, une couche stochastique est désormais la structure la plus chaotique. Néanmoins, si l'on démarre d'une île intégrable secondaire, les marcheurs convergent dans un premier temps vers la couche stochastique la plus proche où ils restent pour un temps d'autant plus grand que le bruit est faible (Fig. 2b). Les structures stochastiques secondaires jouent donc le rôle d'états métastables pour la dynamique biaisée. En présence de fort chaos, on favorise les orbites régulières en choisissant $\beta = -1$, révélant ainsi les dernières îles intégrables (Fig. 2c).

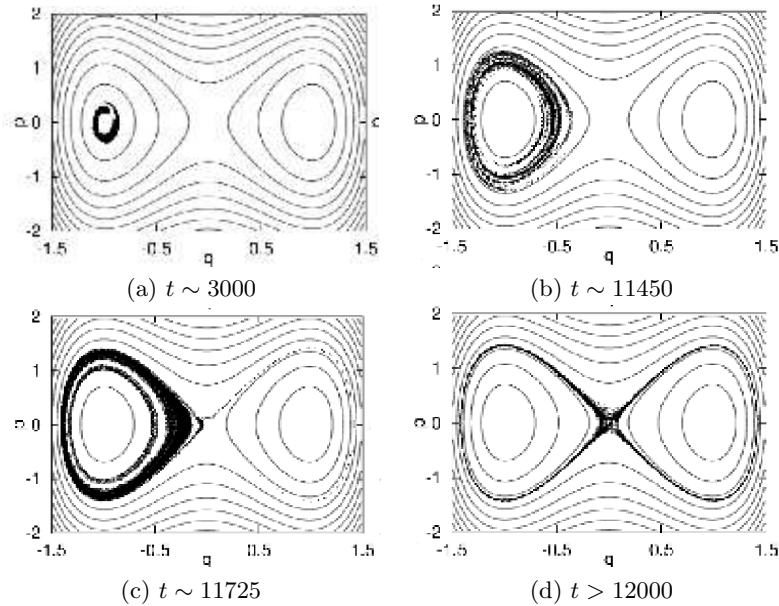


Fig.1. Convergence vers la séparatrice. Les lignes de niveau en gris clair correspondent aux valeurs du Hamiltonien. Partant de l'un des puits (a), les marcheurs (points noirs) diffusent dans l'espace des phases (b) jusqu'à ce qu'ils atteignent la séparatrice (c), qu'ils colonisent (d). La simulation fut réalisée avec 2000 marcheurs, pour $\epsilon = 10^{-5}$ et $\beta = 1$.

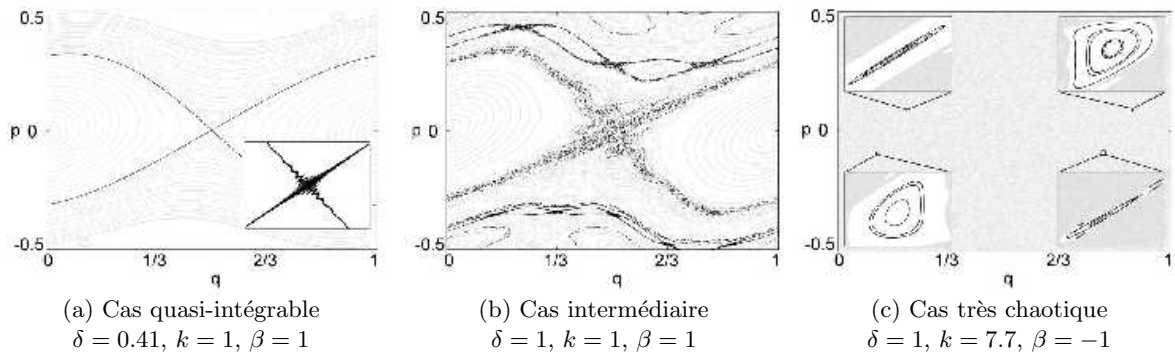


Fig.2. L'application standard. Les trajectoires de l'application standard sont représentées en gris clair. En noir, 1000 marcheurs sont représentés après 10 000 pas de temps, pour $\epsilon = 10^{-16}$. Dans le cas quasi-intégrable (a), l'application est très légèrement chaotique, et les marcheurs convergent pour $\beta = 1$ vers la variété instable émanant du point fixe instable. L'encart est agrandi 75 fois. Dans un cas intermédiaire (b), des structures secondaires sont également observées : plusieurs couches stochastiques sont révélées, en partant de différentes îles intégrables avec $\beta = 1$. Les quatre dernières îles intégrables (c) observées dans un cas très chaotique [8]. Les encarts sont agrandis entre 25 et 150 fois (respectivement en bas à droite et en haut) et sont centrés sur : (0.207; 0.09), (0.883; 0.09), (0.116; -0.09) et (0.8; -0.09).

4.3 Chaîne d'oscillateurs anharmoniques

Si les systèmes de basse dimensionnalité offrent l'avantage d'une visualisation directe de l'espace des phases, l'étude de systèmes réalistes requiert un plus grand nombre de degrés de liberté. En guise d'exemple, nous étudions ici la chaîne d'oscillateurs non-linéaires introduite par Fermi, Pasta et Ulam

(FPU) et définie par l'Hamiltonien

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} p_i^2 + \frac{1}{2} (q_i - q_{i+1})^2 + \frac{1}{40} (q_i - q_{i+1})^4 \right). \quad (12)$$

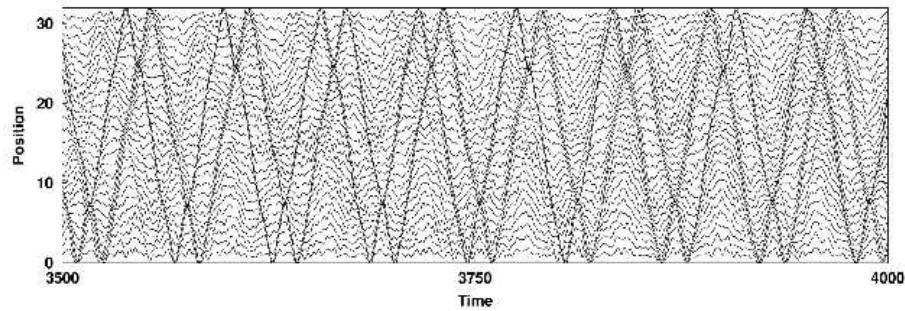


Fig.3. À la recherche de solitons. Simulation pour un β fortement négatif d'une chaîne FPU ($N=32$) de densité d'énergie $E = 1$ avec conditions aux bords fixes, partant d'une configuration d'équilibre. La position de chaque particule au cours du temps est représentée par une ligne. Plusieurs chocs, se réfléchissant sur les bords, sont clairement visibles. L'exposant de Lyapunov est la moitié de la valeur typique. (Par soucis de clarté, la position moyenne de chaque particule a été décalée).

Cette chaîne est connue pour avoir des excitations localisées de type soliton, ainsi que des "modes de respiration chaotiques" [9,10]. Le bruit que nous utilisons ici pour perturber la chaîne conserve l'énergie, et nous réalisons donc une version microcanonique de notre dynamique biaisée. Pour une densité d'énergie $E=1$, correspondant à la région de transition entre faible et fort chaos, les résultats sont montrés sur les figures 3 et 4.

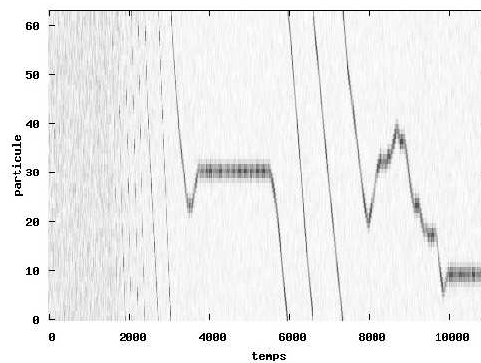


Fig.4. Révéler un mode de respiration chaotique. Simulation pour un β fortement positif d'une chaîne FPU ($N=64$) à énergie fixée ($E = 1$) avec conditions aux bords périodiques, obtenue en partant d'une configuration d'équilibre. La configuration évolue vers un mode de respiration chaotique, caractérisé par un exposant de Lyapunov trois fois supérieur à la moyenne. L'échelle de gris représente l'énergie de chaque site.

Si l'on biaise la mesure en faveur de configurations intégrables, le système évolue vers des trajectoires solitoniques (Fig. 3). Au contraire lorsque l'on favorise des trajectoires très chaotiques, on génère des modes de respiration chaotiques (Fig. 4). Ces trajectoires sont à comparer avec une simulation non-biaisée ($\beta = 0$) présentée sur la figure 5.

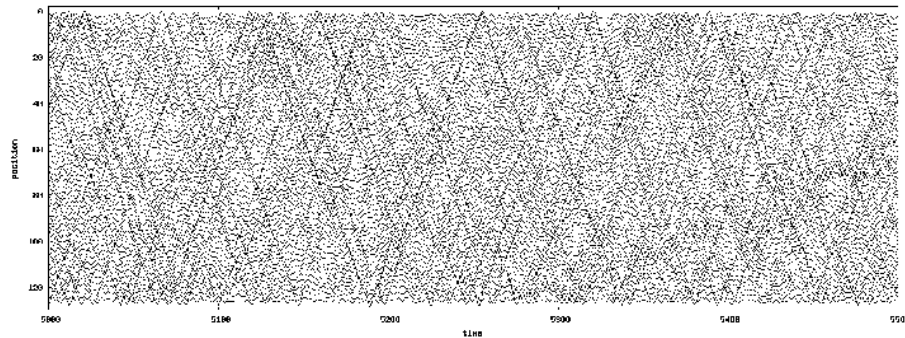


Fig.5. Dynamique non-biaisée. Simulation pour $\beta = 0$ d'une chaîne FPU ($N=64$) à énergie fixée ($E = 1$) avec conditions aux bords fixes.

5 Conclusion

Notons finalement que si cette dynamique biaisée permet de chercher des trajectoires atypiques, la question du rôle que jouent ces trajectoires dans la réelle mesure d'équilibre ($\beta = 0$) reste à priori entière. Toutefois, en mesurant le taux de clonage instantané lors d'une simulation, on peut extraire l'énergie libre dynamique $\psi(\beta)$ (ou pression topologique) qui permet d'interpréter l'hétérogénéité dynamique d'un système en terme de transition de phase [11]. Ainsi, l'existence d'îlots intégrables pour la standard Map se traduit par une transition de phase du premier ordre, à $\beta = 0$.

Références

1. J. LASKAR, A numerical experiment on the chaotic behaviour of the Solar System, *Nature*, **338**, 237-238 (1989).
2. N. MURRAY & M. HOLMAN, The role of chaotic resonances in the Solar System, *Nature*, **410**, 773-779 (2001).
3. N. MURRAY & M. HOLMAN, The origin of chaos in the outer solar system, *Science*, **283**, 1877-1881 (1999).
4. P. GRASSBERGER, R. BADI & A. POLITI, Scaling laws for invariant measures on hyperbolic and nonhyperbolic attractors, *J. Stat. Phys* **51**, **135**, 135-178 (1988).
5. R. BENZI, G. PALADIN, G. PARISI & A. VULPIANI, Characterisation of intermittency in chaotic systems, *J. Phys. A*, **18**, 2157-2165 (1985).
6. C. BECK & F. SCHLÖGL, *Thermodynamics of chaotic systems*, Cambridge University Press, (1993).
7. J. TAILLEUX & J. KURCHAN, Probing rare physical trajectories with Lyapunov weighted dynamics, *Nature Physics*, à paraître.
8. J. H. E. CARTWRIGHT, M. O. MAGNASCO, O. PIRO & I. TUVAL, An apparently unrelated method to do this can be found in : Bailout Embeddings and Neutrally Buoyant Particles in Three-Dimensional Flows, *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 264501 (2002).
9. T. CRETEGNY, T. DAUXOIS, S. RUFFO & A. TORCINI, Localization and equipartition of energy in the beta-FPU chain : Chaotic breathers, *Physica D*, **121**, 109-126 (1998).
10. A. TROMBETTONI & A. SMERZI, Discrete Solitons and Breathers with Dilute Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 2353-2356 (2001).
11. J. TAILLEUX & J. KURCHAN, *En préparation*.