

Systèmes de particules en interaction

Léo Gayral

Ces notes sont basées sur le cours de [Thierry Bodineau](#).

Table des matières

1	Introduction	2
1.1	Définitions	2
1.2	Description statistique	2
2	Systèmes à l'équilibre	3
2.1	Modèles microscopiques	3
2.2	Preuve du théorème	6
3	Modèle d'Ising planaire	9
4	Dynamique de sphères dures	10
4.1	Description microscopique	10
4.2	Mesures invariantes	13
4.3	Hiérarchie BBGKY	14

1 Introduction

1.1 Définitions

Définition 1 (Système de particules) :

On définit un système de N particules comme un vecteur $Z_N = (z_i)$, où $z_i = (x_i, v_i) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$ décrit la position et la vitesse de la particulier $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$.

On notera aussi $X_N = (x_i)$ et $V_N = (v_i)$.

Définition 2 (Énergie cinétique) :

On pose $H_c(V_N) = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \|v_i\|_2^2$. Pour simplifier les calculs, on considère désormais $m = 1$.

Définition 3 (Énergie potentielle d'interaction) :

Soit $\Phi : \mathbb{R}^{+*} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de potentiel. On dit que le potentiel est attractif lorsque $\Phi(d) < 0$ et répulsif sinon.

Typiquement, on a $\varphi(r) = \frac{\alpha}{r^{12}} - \frac{\gamma}{r^6}$ en physique, avec deux constantes positives. On a ainsi un potentiel infiniment répulsif près de 0, attractif sur une échelle moyenne puis sans effet sur des grandes distances. On simplifie ce dernier effet en supposant que $\text{Supp}(\varphi) \subset [0, 1]$.

Soit en outre ε la distance caractéristique d'interaction entre deux particules. On pose alors $H_i(X_N) = \sum_{1 \leq i < j} \varphi\left(\frac{\|x_i - x_j\|_2}{\varepsilon}\right)$.

Définition 4 (Densité du gaz) :

Le facteur ε fait qu'une particule « occupe » typiquement un volume ε^d . Comme \mathbb{T}^d est de volume 1, on définit la densité par $\rho = \varepsilon^d N$.

1.2 Description statistique

Définition 5 (Température) :

On considère un gaz à température T , et on définit le facteur $\beta = \frac{1}{T} \geq 0$.

Définition 6 (Distribution de Gibbs) :

On munit l'ensemble des configurations d'une densité pour la mesure de Lebesgue :

$$\mathcal{G}_\beta(Z_N) = \frac{1}{W_\beta} \exp(-\beta(H_c(V_N) + H_i(X_N))),$$

où W_β est la fonction de partition.

Le facteur W_β sert à normaliser la densité pour obtenir une mesure de probabilité. Jusqu'ici, rien ne garantit que cette densité soit intégrable, et on développera plus en détail par la suite l'influence du choix de la fonction de potentiel φ .

Remarque 7 :

Ainsi, cette distribution favorise les configurations de basse énergie : sur ces configurations, on s'attend à observer des particules immobiles, équitablement réparties sur un réseau par exemple. En particulier, à très basse température, ce sont les seules configurations significatives, ce qui correspond à un solide.

Remarque 8 :

Sous la distribution de Gibbs, en particulier, les vitesses sont indépendantes des positions.

En passant les problèmes d'intégrabilité du potentiel et des positions sous silence, on peut alors intégrer une fonction des vitesses relativement facilement :

$$\mathbb{E}[H_c] = \frac{Nd}{2} \int_{\mathbb{R}} v^2 \times e^{-\beta v^2/2} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} dv,$$

car la vitesse de chacune des N particules suit un vecteur gaussien isotrope, en d dimensions, indépendant du reste.

Remarque 9 (Cinétique du gaz) :

Alternativement, on peut s'intéresser à l'évolution de $Z_N(t)$ en partant d'une configuration initiale $Z_N(0)$. Dans ce cas, on a les lois d'évolution $\dot{X}_N = V_N$ et $\dot{v}_i = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{j \neq i} \nabla \varphi \left(\frac{\|x_j - x_i\|}{\varepsilon} \right)$.

En passant à la limite hydrodynamique, à l'échelle macroscopique, on se ramène à des densités de vitesse et de particules, et on étudie dans ce cadre les équations d'Euler ou de Navier-Stokes.

On peut également travailler à l'échelle mésoscopique. On détaillera plus en avant la description mésoscopique dans le cadre d'un gaz dilué, où le nombre de collisions à un instant donné est faible.

2 Systèmes à l'équilibre

2.1 Modèles microscopiques

Définition 10 (Ensemble micro-canonique) :

À l'équilibre, on peut supposer que $H = H_c + H_i = \mathcal{E}N$ est constante, et \mathcal{E} représente l'énergie

d'une particule. On peut associer à un niveau d'énergie son ensemble micro-canonique, la mesure uniforme sur $\{Z_N, H(Z_N) = \mathcal{E}N\}$.

Cette description est peu pratique, car le niveau d'énergie est difficile à observer exactement. On peut alternativement travailler à N fixé, mais à énergie variable.

Définition 11 (Ensemble canonique) :

En pratique, la mesure de Gibbs est une meilleure description de l'équilibre. On peut alors vérifier que $\mathbb{E}_{\mathcal{G}_\beta}[H] = C(\beta) \times N$, pour une certaine fonction C . Au travers de cette fonction, on peut ainsi mettre en lien la température du gaz et son énergie moyenne. Cette description est appelée l'ensemble canonique.

Considérons un gaz parfait, où $\varphi = 0$, et donc $H_i = 0$, $H = H_c$.

Lemme 12 :

Fixons l'énergie $\mathcal{E} = 1$, de sorte que $H_c = N$ dans la description micro-canonique. Dans ce cas, V_N est uniforme sur la sphère de rayon \sqrt{N} dans \mathbb{R}^N .

Si on considère un nombre fini k de variables fixées, pour $N \rightarrow \infty$, on a la convergence en loi vers un vecteur gaussien :

$$(v_1, \dots, v_k) \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, I_k),$$

ce qui donne donc un comportement analogue à la densité de Gibbs en observant une sous-partie d'un grand ensemble de particules.

Démonstration. En coordonnées polaires, $Y \sim \mathcal{N}(0, I_k)$ se décompose en un vecteur uniforme sur la sphère de rayon 1, et un rayon aléatoire R_N , tel que $\frac{R_N}{N} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i^2}$ converge p.s. vers 1.

Ainsi, $(v_1, \dots, v_N) \stackrel{d}{=} (Y_1, \dots, Y_N) \frac{\sqrt{N}}{R_N}$. En conséquence, lorsque $N \rightarrow \infty$, par continuité de la projection sur les k premiers coefficients, on a bien la convergence presque-sûre donc en loi souhaitée. \square

On peut également étendre l'ensemble sur lequel on travaille, afin de ne plus fixer la valeur de N .

Définition 13 (Ensemble grand-canonique) :

On s'intéresse alors à un système de particules sans vitesses. On considère la densité de probabilités sur $\bigsqcup_{N \in \mathbb{N}} \{N\} \times (\mathbb{T}^d)^N$ donnée par :

$$\frac{1}{Z_\varepsilon} \times \frac{1}{N!} \mu^N \exp(-\beta H_i(X_N))$$

où Z_ε est un facteur de normalisation, et μ est la fugacité.

En particulier, à N fixé, on retrouve la distribution de Gibbs sur les positions. Ceci signifie donc qu'on a un problème similaire pour Z_ε et W_β , dans le sens où rien ne garantit que la mesure est finie, normalisable.

Remarque 14 :

Dans le cas où $\beta = 0$, on a $Z_\varepsilon = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\mu^j}{j!} = e^\mu$. Dans ce cas, N suit en fait une loi de Poisson $\mathcal{P}(\mu)$, et conditionnellement à N les particules sont uniformément réparties.

Si on oublie la valeur totale de N , et l'ordre sur les particules, l'ensemble des particules suit en fait une mesure de Poisson d'intensité μ .

Ainsi, $\mathbb{E}[N] = \mu_\varepsilon$ dans ce cas. Pour faire écho à la densité lorsque le nombre de particules est fixé, on considère donc $\mu_\varepsilon \times \varepsilon^d = w$.

Lemme 15 :

Soit h une fonction mesurable bornée sur \mathbb{T}^d . Par invariance de la mesure par permutation :

$$\mathbb{E} \left[\frac{1}{\mu} \sum_{j=1}^N h(x_j) \right] = \frac{1}{Z_\varepsilon} \sum_{N=1}^{\infty} \int_{\mathbb{T}^d} dx_1 h(x_1) \int_{(\mathbb{T}^d)^{N-1}} dx_2 \dots dx_N \frac{\mu^{N-1}}{(N-1)!} \exp(-\beta H_i(X_N)).$$

Lemme 16 :

Soient $(h_i)_{i \leq K}$ des fonctions mesurables bornées sur \mathbb{T}^d , et $\lambda_1, \dots, \lambda_K \in \mathbb{R}$. On définit alors $h_\lambda = \sum_{j=1}^K \lambda_j h_j$. On étend la définition de Z via :

$$Z_\varepsilon(\lambda) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu^n}{n!} \int_{(\mathbb{T}^d)^n} \exp \left(-\beta H_i(X_n) + \sum_{j=1}^n h_\lambda(x_j) \right).$$

Posons alors $F(\lambda) = \frac{1}{\mu} \ln \left(\frac{Z(\lambda)}{Z(0)} \right)$. Dans ce cas, $\partial_i F(0) = \mathbb{E} \left[\frac{1}{\mu} \sum_{j=1}^N h_i(x_j) \right]$.

$$\text{En outre, } \partial_i \partial_j F(0) = \frac{1}{\mu} \text{Cov} \left(\sum_{k=1}^N h_i(x_k), \sum_{k=1}^N h_j(x_k) \right).$$

Encore une fois, tous ces résultats ont un sens conditionnellement à l'intégrabilité des objets considérés, ce sur quoi on reviendra par la suite.

Remarque 17 :

Considérons le cas où φ est négatif au voisinage de 0, où le potentiel est attractif sur des courtes distances. Dans ce cas, quitte à restreindre toutes les particules dans une petite boîte de côté δ , on a $Z^\varepsilon \geq 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\varepsilon \delta^n}{n!} \exp(\beta c n^2)$ pour une constante $c > 0$, et cette somme est infinie. Il faut donc avoir un potentiel positif, répulsif au voisinage de 0.

Définition 18 (Cas des sphères dures) :

Dans le cas où on modélise le gaz par des sphères dures *sans* interactions, on pose le potentiel $\varphi(u) = \mathbb{1}_{u \leq 1} \times \infty$.

Autrement, on exclut totalement les configurations où deux particules se chevauchent, et aucune interaction lorsqu'elles ne se touchent pas.

Théorème 19 (Ueltschi) :

Supposons $\varphi \geq 0$. Notons $F_\beta(w) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\mu_\varepsilon} \ln(Z^\varepsilon)$, l'énergie libre.

Il existe $w_0 > 0$ tel que, pour tout $w < w_0$, pour tous $A, B \subset \mathbb{T}^d$, en notant N_A le nombre de particules dans A :

$$|\mathbb{E}[N_A N_B] - \mathbb{E}[N_A] \mathbb{E}[N_B]| \leq C w^{\frac{d(A,B)}{\varepsilon}} \times \frac{|A|}{\varepsilon^d} \times \frac{|B|}{\varepsilon^d},$$

où $|A|$ est la mesure de Lebesgue de l'ensemble.

Démonstration. Voir infra. □

2.2 Preuve du théorème

Dans cette sous-section, on se place sous l'hypothèse $\varphi \geq 0$ du théorème.

Remarque 20 :

Soit $\xi(x, y) = \exp\left(-\beta\varphi\left(\frac{|x-y|}{\varepsilon}\right)\right) - 1 \in [-1, 0]$. On peut réécrire :

$$Z^\varepsilon = 1 + \sum_{N \geq 1} \frac{\mu_\varepsilon^N}{N!} \int_{(\mathbb{T}^d)^N} \prod_{i < j} (\xi(x_i, x_j) + 1) dX_N.$$

Fixons $H : \mathbb{T}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mesurable bornée. On étend ainsi la notion de Z^ε en tant que fonctions d'un paramètre $\lambda \in \mathbb{R}$ via :

$$Z^\varepsilon = 1 + \sum_{N \geq 1} \frac{\mu_\varepsilon^N}{N!} \int_{(\mathbb{T}^d)^N} \prod_{i < j} (\xi(x_i, x_j) + 1) \exp\left(\lambda \sum_{i=1}^N H(x_i)\right) dX_N.$$

Définition 21 :

On note la mesure $d\nu(x) = e^{\lambda H(x)} \mu_\varepsilon dx$ sur \mathbb{T}^d , et $d\nu(X_N)$ la mesure produit associée.

Définition 22 :

On note \mathcal{G}_N l'ensemble des graphes à N sommets, non-orientés, sans arêtes doubles ni boucles sur un sommet. On note \mathcal{C}^N le sous-ensemble des graphes connexes.

Notons $\psi(x) = 1$ sur \mathbb{T}^d , et pour $N \geq 2$:

$$\psi(X_N) = \frac{1}{N!} \sum_{G \in \mathcal{C}_N} \prod_{\{i,j\} \in G} \xi(x_i, x_j).$$

Théorème 23 :

Il existe $w_0 > 0$, et $\delta > 0$, tels que pour tout $w < w_0$ et $-\delta \leq \lambda \leq \delta$, on a :

$$\ln(Z^\varepsilon(\lambda)) = \sum_{N \geq 1} \int_{(\mathbb{T}^d)^N} \varphi(X_N) d\nu(X_N) \in \mathbb{R}.$$

Démonstration. Quitte à voir chaque terme du produit comme la possibilité de garder ou non l'arête dans le graphe, on a :

$$\begin{aligned} Z^\varepsilon &= 1 + \sum_{N \geq 1} \frac{1}{N!} \int_{(\mathbb{T}^d)^N} \prod_{i < j} (1 + \xi(x_i, x_j)) d\nu(X_N) \\ &= 1 + \sum_{N \in \mathbb{N}} \frac{1}{N!} \sum_{G \in \mathcal{G}_N} \int_{(\mathbb{T}^d)^N} \prod_{\{i,j\} \in G} \xi(x_i, x_j) d\nu(X_N). \end{aligned}$$

On peut alors découper un graphe suivant ses composantes connexes, ce qui nous ramène à des graphes plus petits mais connexes :

$$\begin{aligned} Z^\varepsilon &= 1 + \sum_{N \geq 1} \sum_{k=1}^N \frac{1}{k! N!} \sum_{m_1, \dots, m_k} \binom{n}{m_1, \dots, m_k} \prod_{j=1}^k \int_{(\mathbb{T}^d)^{m_j}} \psi(X_{m_j}) (m_j)! d\nu(X_{m_j}) \\ &= 1 + \sum_{N \geq 1} \sum_{k=1}^N \frac{1}{k!} \sum_{m_1 + \dots + m_k = N} \prod_{j=1}^k \int_{(\mathbb{T}^d)^{m_j}} \psi(X_{m_j}) d\nu(X_{m_j}) \\ &= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\sum_{m \geq 1} \int_{(\mathbb{T}^d)^m} \psi(X_m) d\nu(X_m) \right)^k \\ &= \exp \left(\sum_{m \geq 1} \int_{(\mathbb{T}^d)^m} \psi(X_m) d\nu(X_m) \right), \end{aligned}$$

d'où le résultat souhaité en passant au logarithme, modulo le fait que la famille sommée est bien définie pour appliquer un produit de Cauchy. Cette justification se fait avec le lemme ci-après. \square

Lemme 24 (Lemme technique) :

Supposons qu'il existe une fonction a positive sur \mathbb{T}^d , telle que $\int_{\mathbb{T}^d} |\xi(x, y)| e^{a(y)} d\nu(y) \leq a(x)$.

Alors :

$$1 + \sum_{m=2}^{\infty} m \int_{(\mathbb{T}^d)^{m-1}} |\psi(X_m)| d\nu(x_2) \dots d\nu(x_m) \leq e^{a(x_1)},$$

pour tout rang K .

Démonstration. Le cas où la somme s'arrête à $K = 2$ est direct.

Pour relier x_1 à m autres points de façon connexe, il faut choisir $m_1, \dots, m_k \geq 1$ tels que $m_1 + \dots + m_k = m$. Ce faisant, on considère k graphes connexes disjoints, à m_j points, et $2^{m_j} - 1$ façons différentes de relier x_1 à chaque composante. On vérifie alors que :

$$|\varphi(X_m)| \leq \frac{1}{m!} \sum_{k=1}^{m-1} \frac{1}{k!} \sum_{v_1 \sqcup \dots \sqcup v_k} \prod_{j=1}^k (m_j)! |\varphi(X_{v_k})| \left(\sum_{j \in v_k} |\xi(x_1, x_j)| \right),$$

et on peut majorer le terme de droite par m_l . En prenant des précautions, on peut alors propager notre majoration de proche en proche, de K en $K + 1$. \square

Dans notre modèle, on peut prendre $a = 1$.

Proposition 25 :

On peut, en dénombrant attentivement les clusters, montrer une majoration du type :

$$\int_{(\mathbb{T}^d)^N} |\psi(X_N)| d\nu(X_N) \leq (Cw)^{N-1} \mu_\varepsilon,$$

ainsi que :

$$\sup_{x_N \in \mathbb{T}^d} \int_{(\mathbb{T}^d)^{N-1}} |\psi(X_N)| d\nu(X_{N-1}) \leq C' \times (Cw)^{N-1},$$

avec des constantes qui dépendent de la fonction H (et de λ).

En considérant un cas à deux paramètres λ au lieu d'un seul, via $H = \lambda_1 \mathbf{1}_A + \lambda_2 \mathbf{1}_B$, on obtient $\partial_{\lambda_1} \partial_{\lambda_2} \ln(Z^\varepsilon)(0, 0) = \mathbb{E}_\varepsilon[N_A N_B] - \mathbb{E}_\varepsilon[N_A] \mathbb{E}_\varepsilon[N_B]$. D'autre part, par dérivation sous l'intégrale, on obtient une égalité avec :

$$\sum_{N \geq 1} \sum_{1 \leq i, j \leq N} \int \mathbf{1}_A(x_i) \mathbf{1}_B(x_j) \varphi(X_N) dX_N.$$

En particulier, pour relier $x_i \in A$ et $x_j \in B$, il faut forcément passer une composante connexe assez large, étalée, ce qui fait ressortir la puissance $\frac{d(A, B)}{\varepsilon}$.

3 Modèle d'Ising planaire

Définition 26 (Espace des configurations) :

Soit $\Lambda_N = \llbracket -N, N \rrbracket^2$. On considère $\sigma : \mathbb{Z}^d \rightarrow \{\pm 1\}$, égale à 1 en dehors de Λ_N , et on note σ_{Λ_N} sa restriction, une configuration du système.

Définition 27 (Hamiltonien) :

Dans ce modèle, on note $H(\sigma_{\Lambda_N}) = -\beta \sum_{\{x,y\} \cap \Lambda_N \neq \emptyset, d(x,y)=1} \sigma_x \sigma_y$, en sommant sur les *couples* de sommets.

Définition 28 :

On pose alors $\mu_{N,\beta}^+(\sigma) = \frac{1}{Z_{N,\beta}} \exp(-H(\sigma))$.

Remarque 29 :

En fixant N , la courbe $\beta \mapsto \mathbb{E}_{N,\beta}[\sigma_0]$ a une allure de sigmoïde, qui tend vers 0 en 0 et vers 1 en l'infini.

Théorème 30 :

Il existe $\beta_0 > 0$ au dessus duquel, pour tout $N \geq 1$, on a $\mathbb{P}_{\mu_{N,\beta}^+}(\sigma_0 = -1) \leq \frac{1}{4}$.

Démonstration. On va utiliser ici l'argument de Peierls. Sous l'évènement $\sigma_0 = -1$, on a un bloc de -1 connexe, nécessairement borné dans Λ_N .

On peut réécrire $H(\sigma_{\Lambda_N}) = -\beta \sum_{(i,j)} (\sigma_i \sigma_j - 1) - \beta |E_{\Lambda_N}|$ avec E_{Λ_N} les arêtes du réseau qui ont une extrémité au moins dans Λ_N . Ce faisant, les seules contributions à H deviennent les frontières, les zones où σ change de signe. On peut donc majorer $\mathbb{P}(\sigma_0 = -1)$ par la probabilité d'observer un *contour* autour de 0, avec des -1 sur le bord intérieur et des $+1$ sur le bord extérieur.

Pour un choix de lacet γ , notons $I(\gamma)$ et $E(\gamma)$ les sommets à l'intérieur et à l'extérieur. Si σ est une configuration qui admet le lacet γ , on a $H(\sigma_{\Lambda_N}) = \beta \sum_{I(\gamma)} \sigma_i \sigma_j - \beta \sum_{E(\gamma)} \sigma_i \sigma_j + \beta |\gamma|$. Notons $\hat{\sigma}$ la configuration où on a changé les -1 en $+1$ sur le bord intérieur. On a alors $H(\hat{\sigma}) = H(\sigma) - 2\beta |\gamma|$. Ainsi, on majore la probabilité d'observer γ par $\mathbb{P}(\gamma) \leq e^{-2\beta |\gamma|}$, et ce indépendamment de N .

En outre, on peut majorer le nombre de *lacs* de longueur n par $n \times 3^n$, avec n positions possibles pour un sommet sur l'axe horizontal, et 3^n chemins auto-évitant possibles. Pour β

assez grand, ce terme exponentiel est écrasé par $e^{-2n\beta}$, d'où le résultat. \square

Définition 31 (Contours) :

Étant donnée une configuration σ , on note $\Gamma(\sigma_{\Lambda_N})$ l'ensemble des contours, bordés par des -1 d'un côté et des $+1$ de l'autre.

On peut réécrire $H(\sigma_{\Lambda_N}) = -2\beta \sum_{\gamma \in \Gamma(\sigma_{\Lambda_N})} |\gamma| - \beta |E_{\Lambda_N}|$.

Notons que deux contours distincts ne peuvent avoir aucune *arête* en commun. Pour deux lacets, on note donc $\delta(\gamma, \gamma') = 1$ ssi ils n'ont pas d'arêtes en commun, et 0 sinon.

Lemme 32 :

On a $Z_N^+ = \exp(\beta |E_N|) \left(1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_n} \prod_{i < j} \delta(\gamma_i, \gamma_j) \prod_{i=1}^n W_\beta(\gamma_i) \right)$, avec $W_\beta(\gamma) = e^{-2\beta|\gamma|}$.

On réutilise alors le lemme technique précédent, l'argument de *cluster expansion*, avec la fonction $a(\gamma) = |\gamma|$, et la mesure de comptage avec la densité $\nu(\gamma) = W_\beta(\gamma)$. Ce faisant, on obtient finalement :

$$\ln(Z_{\beta, N}) = \beta |E_N| + \sum_{x \in X} \psi(x),$$

avec X l'ensemble de n -uplets de lacets pour tout n .

Définition 33 :

Dans ce contexte, l'énergie libre est $F(\beta) = \lim_{|\Lambda_N|} \frac{1}{|\Lambda_N|} \ln(Z_N^+)$.

Proposition 34 :

On a $F(\beta) = 2\beta + e^{-8\beta} + 2e^{-12\beta} + O(e^{-16\beta})$.

Remarquons d'autre part que, désormais, le signe de σ_0 est entièrement déterminé par n_c le nombre de contours qui englobent 0. Ce faisant, $\mathbb{E}_N[\sigma_0] = \frac{1}{Z_N^+} e^{\beta |E_N|} \left(1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_n} \prod_{i=1}^n W_\beta(\gamma_i) (-1)^{n_c} \right)$.

Quitte définir W_β^0 comme W_β multiplié par -1 lorsque un lacet englobe 0, on a une expression similaire à celle déjà étudiée, encore une fois. Quitte à faire une étude complète sur cette nouvelle fonction, on obtient ici des fonctions ψ^0 , et finalement $\mathbb{E}_N[\sigma_0] = \exp\left(\sum_{x \in X} \psi^0(x) - \psi(x)\right)$.

4 Dynamique de sphères dures

4.1 Description microscopique

Définition 35 :

Soit $\Phi(u) = \infty \mathbf{1}_{u < 1}$. Cette fonction de potentiel induit une mesure de Gibbs supportée par $\mathbb{D}_\varepsilon^N = \{Z_N, d(x_i, x_j) \geq \varepsilon, \forall i < j\}$.

Tant qu'il n'y a pas de collision, $\partial_t x_i = v_i$, et v_i reste constante.

Lors d'une collision entre deux sphères i et j , on a $x_j - x_i = \varepsilon v$ pour un vecteur v unitaire. on change les vitesses en $v'_i = v_i - \langle v_i - v_j, v \rangle v$ et $v'_j = v_j - \langle v_j - v_i, v \rangle v$.

Lemme 36 :

Lors d'une collision, les grandeurs suivantes sont préservées :

1. Énergie cinétique : $v_i^2 + v_j^2 = (v'_i)^2 + (v'_j)^2$,
2. Moment : $v_i + v_j = v'_i + v'_j$.

Proposition 37 :

Lebesgue-p.p. sur les conditions initiales dans \mathbb{D}_ε^N , les propriétés suivantes sont vérifiées :

1. on n'a aucune collision triple (ou plus),
2. le nombre de collisions est localement fini,
3. on n'a pas de collisions *rasantes*, où deux sphères se croisent de façon tangente.

Démonstration. Fixons $R > 0$ et $\delta > 0$. On pose P_δ comme l'ensemble des conditions initiales de $\mathbb{D}_\varepsilon^{N,R}$ pour lesquelles on observe deux collisions sur l'intervalle $[0, \delta]$ contre une même particule, sachant qu'une collision triple compte pour deux, etc.

On voudrait montrer $\lambda(P_\delta) \leq C(N, R, \varepsilon)\delta^2$. Par invariance de la dynamique par permutations, quitte à ajouter un facteur N on peut supposer que la particule en question est X_1 . Comme l'énergie est bornée, on a forcément $|V_i| \leq R$, donc dans l'intervalle de temps considéré la distance parcourue est au plus δR . Ainsi, il faut garantir que deux autres particules sont assez proches de X_1 , ce qui donne finalement la borne attendue.

En dehors de P_δ , on peut en particulier définir la trajectoire jusqu'au temps δ , et donc cela a un sens de regarder l'image réciproque $T_{-\delta}(P_\delta)$, les trajectoires qui atteignent P_δ au temps δ .

Plus largement, posons $B_\delta = \bigcup_{k=0}^{K_\delta} T_{-k\delta}(P_\delta)$, jusqu'à un rang $K_\delta = \lceil \frac{T}{\delta} \rceil$.

On pourrait vérifier que la dynamique préserve la mesure de Lebesgue, donc on peut définir la dynamique sans soucis jusqu'au temps T sur B_δ^c . Comme $\lambda(B_\delta) \leq CT\delta$, on en déduit que

$\bigcup_{\delta > 0} B_\delta^c$ est de mesure pleine, et qu'on peut définir la dynamique sans soucis sur cet ensemble, sans collisions triples ou une infinité de collisions en temps fini.

Notons que sous cet évènement, la probabilité que la première « collision » soit un croisement

est nulle, donc à nouveau, quitte à tirer en arrière, la probabilité qu'un croisement se produise est nulle. On peut enfin passer à la limite pour $R \rightarrow \infty$ pour avoir le résultat. \square

Remarque 38 :

Le système dynamique ainsi défini est totalement réversible. Ainsi, le long d'une trajectoire, l'énergie $H(Z_N) = H_c(V_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N v_i^2$ est préservée.

On peut donc partitionner la dynamique sur des ensembles de niveau, et définir l'ensemble $\mathbb{D}_\varepsilon^{N,R} = \{Z_N \in \mathbb{D}_\varepsilon^N, H(Z_N) \leq R^2\}$ laissé stable par la dynamique.

Remarque 39 (Équation de Liouville) :

Soit f_N une distribution initiale sur N particules.

Considérons d'abord un système à une seule particule. Posons $f(t, x, v) = f(0, x - tv, v)$ une fonction de la position initiale. On a alors $\partial_t f(t, z) = -v \nabla_x f(t, z)$. Autrement dit, on a obtenu une équation de transport.

Avec N particules, on a plus généralement $\partial_t f_N(t, Z_N) + \sum_{i=1}^N V_i \nabla_{X_i} f_N(t, Z_N) = 0$, avec des conditions au bord adaptées aux trous dans l'espace des configurations, correspondant aux cas de collisions.

Définition 40 :

On aimerait obtenir des informations sur la distribution typique d'une particule donnée. Ainsi, on peut définir la distribution marginale de s particules parmi N :

$$f_N^{(s)}(t, z_1, \dots, z_s) = \int f_N(t, z_1, \dots, z_N) dz_{s+1} \dots dz_N.$$

4.2 Mesures invariantes**Définition 41 :**

La mesure $M_{N,\beta}(Z_N) = \exp\left(-\beta \sum_{j=1}^N v_j^2\right) \mathbb{1}_{D_\varepsilon^N}(X_N)$ est invariante pour l'équation de Liouville.

On la normalise pour obtenir une probabilité. Le facteur de normalisation, qu'on notera $\mathcal{Z}_{N,\beta}$, est de l'ordre de $\exp(-\sqrt{N})$.

On peut alors définir la marginale $M_{N,\beta}^{(s)}(Z_s)$ à densité $\int M_{N,\beta}(Z_N) dz_{s+1} \dots dz_N$.

Définition 42 (Limite de Boltzmann-Grad) :

Considérons ici un autre changement d'échelle $N\varepsilon^{d-1} = 1$, ce qui implique $w = N\varepsilon^d \rightarrow 0$ lorsque $N \rightarrow \infty$, autrement dit un gaz très dilué.

L'intérêt de cette mise à l'échelle est de contrôler le nombre de collisions par unité de temps.

Proposition 43 :

Considérons la mesure *produit* $M_\beta^{\otimes s}(Z_s)$ à densité $\exp\left(-\beta \sum_{i=1}^N v_i^2\right)$.

Alors il existe $C(\beta) > 0$ telle que, pour tout $s \leq N \in \mathbb{N}$: on a :

$$\left| M_{N,\beta}^{(s)}(Z_s) - M_\beta^{\otimes s}(Z_s) \right| \mathbb{1}_{D_\varepsilon^s}(Z_s) \leq C^s \varepsilon M_\beta^{\otimes s}(Z_s).$$

Démonstration. On peut oublier la contribution de β , l'influence des vitesses, sur le résultat.

On peut alors considérer le facteur de normalisation \mathcal{Z}_K pour K particules uniformes sur D_ε^K . On a naturellement $\mathcal{Z}_{K+1} \leq \mathcal{Z}_K$.

Une fois K particules fixées, on peut exclure chaque autre particule du domaine accessible à la particule $K+1$. Ainsi, $\mathcal{Z}_{K+1} \geq (1 - K\varepsilon^d) \mathcal{Z}_K$. Comme $K \leq N$, et que $N\varepsilon^{d-1} = 1$, on a donc $\mathcal{Z}_{K+1} \geq (1 - \varepsilon) \mathcal{Z}_K$.

Lorsque Z_s n'est pas admissible, le terme de gauche est nul. On suppose donc $Z_s \in D_\varepsilon^s$, donc $M_\beta^{\otimes s}(Z_s) = 1$.

Si on pouvait négliger la contribution des s particules, on se ramènerait alors à la relation

$M_{N,\beta}^{(s)}(Z_s) - M_{\beta}^{\otimes s}(Z_s) \approx \frac{Z_{N-s}}{Z_N} - 1$, avec le terme de droite majoré par $((1 - \varepsilon)^{-s} - 1) \leq C^s \varepsilon$, positif. L'erreur d'approximation est en fait égale à :

$$\frac{1}{Z_N} \int \left(\prod_{i \leq s < j} \mathbb{1}_{\|x_i - x_j\| > \varepsilon} - 1 \right) \times \prod_{s < k \leq l} \mathbb{1}_{\|x_k - x_l\| \geq \varepsilon} dx_s \dots dx_N.$$

Or $1 - \prod_{i \leq s < j} \mathbb{1}_{\|x_i - x_j\| > \varepsilon} \leq \sum_{i \leq s < j} \mathbb{1}_{\|x_i - x_j\| \leq \varepsilon}$. On peut alors sommer selon i pour obtenir $s(N - s)$ fois le même terme. Disons par exemple que $i = 1$ et $j = N$:

$$\frac{1}{Z_N} \int \mathbb{1}_{\|x_1 - x_N\| \leq \varepsilon} \times \prod_{s < k \leq l} \mathbb{1}_{\|x_k - x_l\| \geq \varepsilon} dx_s \dots dx_N \approx \varepsilon^d Z_{N-s-1},$$

d'où finalement une erreur de l'ordre de $s(N - s) \frac{Z_{N-s-1}}{Z_N} \varepsilon^d \approx sN \varepsilon^d \approx s\varepsilon$. \square

4.3 Hiérarchie BBGKY

Remarque 44 :

Considérons l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \partial_t f_N^{(1)}(t, z_1) + v_1 \nabla_{x_1} f_N^{(1)}(t, z_1) &= (N - 1) \varepsilon^{d-1} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} d\vec{n} \int_{\mathbb{R}^d} dv_2 f_N^{(2)}(t, x_1, v_1', x_1 + \varepsilon \vec{n}, v_2') \langle v_2 - v_1, \vec{n} \rangle^+ \\ &- (N - 1) \varepsilon^{d-1} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} d\vec{n} \int_{\mathbb{R}^d} dv_2 f_N^{(2)}(t, x_1, v_1, x_1 + \varepsilon \vec{n}, v_2) \langle v_2 - v_1, \vec{n} \rangle^-. \end{aligned}$$

Les signes utilisés ont un sens, puisque le terme positif correspond à l'énergie ajoutée, et le terme négatif à l'énergie soustraite.

Cette équation fait apparaître $f_N^{(2)}$. L'équation correspondante pour 2 particules contient $f_N^{(3)}$, et ainsi de suite, d'où la notion de hiérarchie, jusqu'à atteindre la fonction complète f_N :

$$\partial_t F_N^{(s)} + \sum_{i=1}^s \langle v_i, \nabla_{x_i} F_N^{(s)} \rangle = C_{s,s+1} \left[F_N^{(s+1)}(t) \right] (Z_s),$$

avec $\frac{1}{(N-1)\varepsilon^{d-1}} C_{s,s+1} \left[F_N^{(s+1)} \right] (Z_s)$ défini par :

$$\sum_{i=1}^s \int d\vec{n} dv_{s+1} \langle v_i - v_{s+1}, \vec{n} \rangle^+ \left[F_N^{(s+1)}(x_i, v_i', \dots, x_i + \varepsilon \vec{n}, v_{s+1}') - F_N^{(s+1)}(x_i, v_i, \dots, x_i + \varepsilon \vec{n}, v_{s+1}) \right].$$

Définition 45 (Équation de Boltzman) :

De façon informelle, passons à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, et considérons une mesure produit à la limite,

de sorte que $f^{(2)}(z_1, z_2) = f^{(1)}(z_1)f^{(1)}(z_2)$. Dans ce cas, l'équation précédente devient :

$$\begin{aligned} & \partial_t f(t, z) + \langle v, \nabla_x f(t, z) \rangle \\ &= \int_{\mathbb{S}^{d-1}} d\vec{n} \int_{\mathbb{R}^d} dv_2 (f(t, x_1, v'_1) f(t, x_1, v'_2) - f(t, z) f(t, x_1, v_2)) \langle v_1 - v_2, \vec{n} \rangle^+ \\ &=: Q(f, f). \end{aligned}$$

Proposition 46 :

Notons S_N l'opérateur de translations-collisions sur N particules, en particulier de sorte que $S_1(t)(x, v) = (x + tv, v)$ dans le cas à une particule.

Notons également $C_{1,2}$ l'opérateur de collision, qui *scinde* une particule en deux, de sorte que $\partial_t f^{(1)} + \langle v, \nabla_x f^{(1)} \rangle = C_{1,2}[f^{(2)}]$ dans la hiérarchie BBGKY.

On a :

$$f_N^{(1)}(t + \delta, z_1) = S_1(\delta) \left[f_N^{(1)}(t) \right] (z_1) + \int_0^\delta S_1(\delta - \tau) \left[C_{1,2} \left[S_2(\tau) \left[f_N^{(2)}(t) \right] \right] \right] (z_1) d\tau + O(\delta^2).$$

Démonstration. On se ramène à $t = 0$. On distingue ainsi trois cas, selon si au temps δ on a eu 0, 1 ou plusieurs chocs avec la particule 1. On peut vérifier que, pour ce processus de Poisson, la probabilité d'avoir au moins deux chocs est un $O(\delta^2)$. Les calculs correspondant à 1 particule font ressortir l'intégrale positive de $C_{1,2}$.

Il faut alors pousser les calculs du cas à 0 collisions pour faire ressortir le terme de translation pure, un terme correctif négatif qui finit de compléter l'expression de $C_{1,2}$ pour compenser les configurations translattées qui *auraient* du être déviées, et à nouveau un terme d'erreur $O(\delta^2)$. \square

Remarque 47 :

Pour la mesure initiale, on part d'une mesure sous la forme $f_N(0, Z_N) = \prod_{j=1}^N f_0(z_j) \frac{\mathbf{1}_{D_N}(Z_N)}{\mathcal{Z}}$, afin de s'approcher au maximum d'une mesure produit. Dès lors que f_0 est assez régulière, on a une propriété de chaos moléculaire, une quasi-factorisation de la mesure.

Théorème 48 (Théorème H) :

Supposons que f est solution de l'équation de Boltzmann, et correspond à une densité de probabilité pour la mesure de Lebesgue.

Posons $H(t) = \int_{\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d} f(t, z) \ln \circ f(t, z) dz$ l'entropie du système au temps t . Alors $H'(t) \leq 0$, ce qui correspond au second principe de la thermodynamique.

Alternativement, en définissant H_N à partir de la distribution f_N , en intégrant contre Z_N , on obtient une entropie constante, $H'_N(t) = 0$.

Démonstration. Par dérivation sous l'intégrale :

$$\begin{aligned} \partial_t H(t) &= \int \partial_t f(t, z) (\ln \circ f(t, z) + 1) dz \\ &= - \int \langle v, \nabla_x f \rangle (\ln \circ f + 1) dz + \int Q(f, f) \varphi(t, z) dz, \end{aligned}$$

avec $\varphi(t, z) = \ln \circ f(t, z) + 1$. Le terme de gauche, par intégration par parties, est en fait nul, d'où $H'(t) = \int Q(f, f) \varphi(t, z) dz$.

Par un changement de variables habile, pour toute fonction φ , on peut obtenir :

$$\begin{aligned} &\int Q(f, f) \varphi(t, z) dz \\ &= -\frac{1}{4} \int dx dv dw d\vec{n} (\langle v - w, \vec{n} \rangle)^+ (f(v')f(w') - f(v)f(w)) (\varphi(v) + \varphi(w) - \varphi(v') - \varphi(w')). \end{aligned}$$

Dans le cas particulier de notre fonction φ , le facteur de droite devient $\ln \left(\frac{f(v')f(w')}{f(v)f(w)} \right)$. On peut alors vérifier que, de façon générale, $(a - b) \ln \left(\frac{a}{b} \right) \geq 0$, d'où enfin $H'(t) \leq 0$.

Dans le cas de f_N , avec du transport pur, l'opérateur de translation T_{-t} préserve la mesure de Lebesgue, d'où $H_N(t) = H_N(0)$ via le changement induit par T_{-t} . \square

Remarque 49 :

Soit X une chaîne de Markov indexée par \mathbb{R} , de mesure invariante $\pi(x) dx$. Notons $\mu_t \ll dx$ la loi de X_t . Alors la divergence de Kullback, l'entropie relative $H(\mu_t | \pi) := \int \ln \left(\frac{\mu_t(x)}{\pi(x)} \right) \mu_t(x) dx$ est décroissante en fonction du temps. En particulier, $H(\mu_t | \pi) = 0$ ssi $\mu_t = \pi$.

La décroissance de l'entropie dans le modèle « limite » mais pas dans les modèles exacts à N particules a été un contre-argument historique à la rigueur de la notion de limite considérée.

Remarque 50 (Anneau de Kac) :

On se place sur $Z = \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$, On considère une configuration $\eta : Z \rightarrow \{\pm 1\}$.

On place un certain nombre de marqueurs entre des positions $(i, i + 1)$ consécutives.

On considère alors l'opérateur T sur $\{\pm 1\}^Z$, tel que $T\eta(i + 1) = \eta(i)$, sauf lorsque $(i, i + 1)$ est marqué, auquel cas on a une inversion $T\eta(i + 1) = -\eta(i)$. Cette dynamique est déterministe,

totallement réversible. On obtient ainsi un processus via $\eta(t+1) = T\eta(t)$.

Si on s'intéresse à $C_N(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i(t)$, on obtient alors une grandeur $2N$ -périodique, qui visite occasionnellement des valeurs proches de ± 1 , mais reste près de 0 la plupart du temps.

En considérant des marqueurs $m_i \in \{\pm 1\}$, on peut réécrire $T\eta(i+1) = m_i\eta(i)$. Supposons que les marqueurs valent -1 avec probabilité $p < \frac{1}{2}$, indépendamment les uns des autres. En partant de $\eta = 1$, on a $\eta_0(t) = m_{-1}\eta_{-1}(t-1)$, donc pour $t < N$:

$$\mathbb{E}[C_N(t)] = N\mathbb{E}[m_{-1} \dots m_{-t}] = N(1-2p)^t.$$

Ainsi, en partant de $\frac{C_N(0)}{N} = 1$, on observe une décroissance initiale à vitesse géométrique.

Remarque 51 (Urnes d'Ehrenfest) :

On considère $0 \leq l \leq N$ le nombre de particules dans l'urne de gauche. A chaque étape, une des N particules prise uniformément change d'urne.

Ainsi, on a la loi de transition $P(l, l+1) = \frac{l}{N}$ et $P(l, l-1) = \frac{N-l}{N}$. Ce noyau est réversible, avec la mesure invariante $\pi(l) = \frac{1}{2^N} \binom{N}{l}$. Le temps de premier retour en k vérifie $\mathbb{E}_k[T_k] = \frac{1}{\pi(k)}$. En particulier, en partant de 0 ou N , il faudra en moyenne 2^N étapes pour observer à nouveau la configuration en question.

Ces deux exemples ont pour but de souligner que des dynamiques réversibles, déterministes, peuvent donner l'impression d'une perte d'information sur des échelles de temps « trop » courtes.

Théorème 52 (Lanford, 1975) :

Soit une mesure initiale f_0 pour Boltzmann, et la condition initiale $\prod_{j=1}^N f_0(z_j)$ conditionnée sur le domaine de validité pour f_N .

Alors il existe $T^*(c, \beta) > 0$ tel que, pour tout $t \leq T^*$, on a $F_N^{(1)}(t, \cdot) \xrightarrow{\text{d}z \text{ p.s.}} f(t, \cdot)$.

Plus généralement, si on fixe le nombre k de particules, alors $F_N^{(k)}(t, Z_N) \xrightarrow{\text{d}Z_N \text{ p.s.}} \prod_{j=1}^k f(t, z_j)$.

Démonstration. Dans BBGKY, si on oublie le coefficient $(N-1)\varepsilon^{d-1}$, on obtient plutôt des opérateurs $C_{s,s+1}^0$. On obtient ainsi une hiérarchie de Boltzmann, indexée par \mathbb{N} , sous la forme $\partial_t g^{(s)} + \sum_{j=1}^s \langle v_j, \nabla_{x_i} g^{(s)} \rangle = C_{s,s+1}^0 [g^{(s+1)}]$. On obtient ainsi des équations de transport libre, sans collisions.

Pour montrer l'existence de solutions dans cette hiérarchie, on va devoir manipuler l'opérateur $|C_{s,s+1}| = C_{s,s+1}^+ + C_{s,s+1}^-$, qui cumule les effets des collisions au lieu de les compenser.

Formellement, en partant de f une solution de l'équation de Boltzmann, les fonctions produit $g^{(s)}(t, Z_s) = \prod_{j=1}^s f(t, z_j)$ est solution de la hiérarchie de Boltzmann.

On a également la décomposition en somme $g^{(s)}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} Q_{1,n+1}^0(t) g^{n+1}(0)$. On doit alors justifier que cette famille est sommable, sur des petits temps. On a une équation analogue en ce qui concerne la hiérarchie BBGKY, pour $(f_N^{(s)})_{s \leq N}$.

Du côté de la condition initiale, on a l'encadrement :

$$\left| f_N^{(s)}(0) - g^{(s)}(0) \right| \mathbb{1}_{D_\varepsilon^s} \leq C^s \varepsilon e^{-\beta \sum \|v_i\|^2},$$

et $f_N^{(s)}(Z_s) \leq C^k \exp(-\beta \sum |v_i|^2)$.

D'autre part, on peut montrer que $\|Q_{1,1+n}(t) f_{n+1}\|_{\varepsilon,1,\lambda/2} \leq (C\lambda t)^n \|f_{n+1}\|_{\varepsilon,1+n,\lambda}$ avec la norme $\|f_k\|_{\varepsilon,1+n,\lambda} = \|f_k \times \exp(\lambda \sum \|v_i\|^2)\|_{\infty, Z_k \in \mathbb{D}_\varepsilon^k}$.

En emboitant ces inégalités, en ajustant les valeurs de λ , on peut ainsi établir la convergence normale sur des temps très courts. \square