

Problèmes de diffusion pour des systèmes de particules en interaction

Marielle Simon,
École Normale Supérieure de Lyon

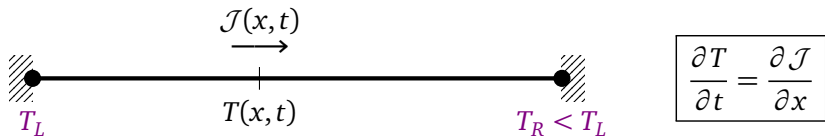
Colloque Jeunes Probabilistes et Statisticiens
Forges-les-Eaux, 2014

Quelques minutes de physique

Question 1. Qu'est-ce que l'équation de la chaleur ?

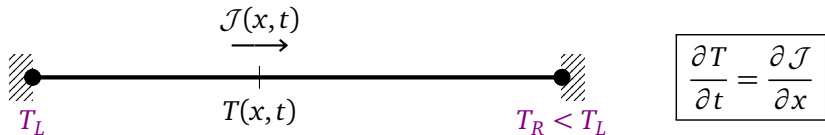
Quelques minutes de physique

Question 1. Qu'est-ce que l'équation de la chaleur ?



Quelques minutes de physique

Question 1. Qu'est-ce que l'équation de la chaleur ?



LOI DE FOURIER (1822) : à l'état stationnaire,

$$\mathcal{J}(x, t) = \mathbf{D}(T) \frac{\partial T}{\partial x}(x, t)$$

\mathbf{D} = coefficient de diffusion.

Une loi seulement empirique

Question 2. Où sont les difficultés ?

Une loi seulement empirique

Question 2. Où sont les difficultés ?

- 1 Définir les fonctions $T(x, t)$ et $\mathcal{J}(x, t)$.

Une loi seulement empirique

Question 2. Où sont les difficultés ?

① Définir les fonctions $T(x, t)$ et $\mathcal{J}(x, t)$.

⇒ Propriété d'équilibre local.

Une loi seulement empirique

Question 2. Où sont les difficultés ?

- 1 Définir les fonctions $T(x, t)$ et $\mathcal{J}(x, t)$.
⇒ Propriété d'équilibre local.
- 2 Trouver un bon modèle *microscopique* :

Une loi seulement empirique

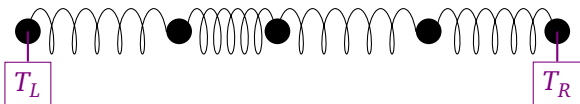
Question 2. Où sont les difficultés ?

- 1 Définir les fonctions $T(x, t)$ et $\mathcal{J}(x, t)$.

⇒ Propriété d'équilibre local.

- 2 Trouver un bon modèle *microscopique* :

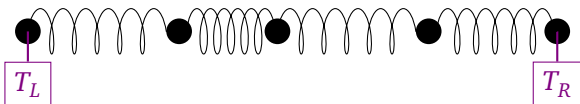
⇒ Chaîne de N particules, capables de transporter l'énergie.



Une loi seulement empirique

Question 2. Où sont les difficultés ?

- 1 Définir les fonctions $T(x, t)$ et $\mathcal{J}(x, t)$.
⇒ Propriété d'équilibre local.
- 2 Trouver un bon modèle *microscopique* :
⇒ Chaîne de N particules, capables de transporter l'énergie.



Quelle est la dynamique du système ?

Modèle microscopique

- Chaîne de N oscillateurs *harmoniques* couplés



p_x : moment de l'atome x ,

r_x : distance entre les atomes x et $x + 1$,

m_x : masse de l'atome x .

Modèle microscopique

- Chaîne de N oscillateurs *harmoniques* couplés



p_x : moment de l'atome x ,
 r_x : distance entre les atomes x et $x + 1$,
 m_x : masse de l'atome x .

- Énergie totale du système

$$\mathcal{H} := \sum_x \left\{ \frac{p_x^2}{2m_x} + V(r_x) \right\} = \sum_x e_x.$$

Dynamique Hamiltonienne

- Équations de Newton

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dr_x}{dt} = \frac{p_{x+1}}{m_{x+1}} - \frac{p_x}{m_x} \\ \frac{dp_x}{dt} = V'(r_x) - V'(r_{x-1}) \end{array} \right. \quad + \text{ conditions au bord.}$$

Dynamique Hamiltonienne

- Équations de Newton

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dr_x}{dt} = \frac{p_{x+1}}{m_{x+1}} - \frac{p_x}{m_x} \\ \frac{dp_x}{dt} = V'(r_x) - V'(r_{x-1}) \end{array} \right. \quad + \text{ conditions au bord.}$$

- Courant microscopique $j_{x,x+1}$ donné par

$$\frac{de_x}{dt} = j_{x-1,x} - j_{x,x+1}$$

Dynamique Hamiltonienne

- Équations de Newton

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dr_x}{dt} = \frac{p_{x+1}}{m_{x+1}} - \frac{p_x}{m_x} \\ \frac{dp_x}{dt} = V'(r_x) - V'(r_{x-1}) \end{array} \right. \quad + \text{ conditions au bord.}$$

- Courant microscopique $j_{x,x+1}$ donné par

$$\frac{de_x}{dt} = j_{x-1,x} - j_{x,x+1}$$

- Lois stationnaires (invariantes) sur les états $\omega := \{p_x, r_x\}$

Dynamique Hamiltonienne

- Équations de Newton

$$\begin{cases} \frac{dr_x}{dt} = \frac{p_{x+1}}{m_{x+1}} - \frac{p_x}{m_x} \\ \frac{dp_x}{dt} = V'(r_x) - V'(r_{x-1}) \end{cases} \quad + \text{ conditions au bord.}$$

- Courant microscopique $j_{x,x+1}$ donné par

$$\frac{de_x}{dt} = j_{x-1,x} - j_{x,x+1}$$

- Lois stationnaires (invariantes) sur les états $\omega := \{p_x, r_x\}$
 - ◇ Si $T_L - T_R \neq 0 \rightarrow$ loi **stationnaire** μ_{ss}^N .

Dynamique Hamiltonienne

- Équations de Newton

$$\begin{cases} \frac{dr_x}{dt} = \frac{p_{x+1}}{m_{x+1}} - \frac{p_x}{m_x} \\ \frac{dp_x}{dt} = V'(r_x) - V'(r_{x-1}) \end{cases} \quad + \text{ conditions au bord.}$$

- Courant microscopique $j_{x,x+1}$ donné par

$$\frac{de_x}{dt} = j_{x-1,x} - j_{x,x+1}$$

- Lois stationnaires (invariantes) sur les états $\omega := \{p_x, r_x\}$
 - ◇ Si $T_L - T_R \neq 0$ → loi stationnaire μ_{ss}^N .
 - ◇ Si $T_L = T_R = T$ → loi d'équilibre μ_T^N .

Coefficient de diffusion

Question 3. Comment calculer $D(T)$?

Coefficient de diffusion

Question 3. Comment calculer $D(T)$?

- Conductivité pour le système fini

$$\mathbf{D}_{N,\Delta T} := \frac{\int J_N d\mu_{ss}^N}{\Delta T/N} \quad \left\{ \begin{array}{l} J_N := \text{courant total} \\ \Delta T := T_L - T_R \end{array} \right.$$

Coefficient de diffusion

Question 3. Comment calculer $D(T)$?

- Conductivité pour le système fini

$$\mathbf{D}_{N,\Delta T} := \frac{\int J_N d\mu_{ss}^N}{\Delta T/N} \quad \left\{ \begin{array}{l} J_N := \text{courant total} \\ \Delta T := T_L - T_R \end{array} \right.$$

- Étude (existence ?) de

$$\mathbf{D}(T) := \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \mathbf{D}_{N,\Delta T}$$

Coefficient de diffusion

Question 3. Comment calculer $D(T)$?

- Conductivité pour le système fini

$$\mathbf{D}_{N,\Delta T} := \frac{\int J_N d\mu_{ss}^N}{\Delta T/N} \quad \left\{ \begin{array}{l} J_N := \text{courant total} \\ \Delta T := T_L - T_R \end{array} \right.$$

- Étude (existence ?) de

$$\mathbf{D}(T) := \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \mathbf{D}_{N,\Delta T}$$

- Formule de Green-Kubo (existence ?)

$$\mathbf{D}^{GK}(T) := \frac{1}{T^2} \sum_{x \in \mathbb{Z}} \int_0^{+\infty} \langle j_{x,x+1}(t) j_{0,1}(0) \rangle_T dt.$$

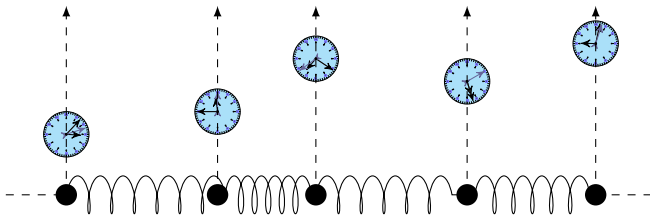
Un peu de bruit

Ajout d'une **perturbation stochastique** \rightsquigarrow "ergodicité".

Un peu de bruit

Ajout d'une **perturbation stochastique** \rightsquigarrow "ergodicité".

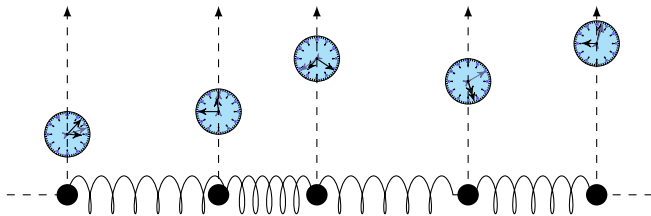
À chaque atome x est attaché un processus de Poisson.



Un peu de bruit

Ajout d'une **perturbation stochastique** \rightsquigarrow "ergodicité".

À chaque atome x est attaché un processus de Poisson.

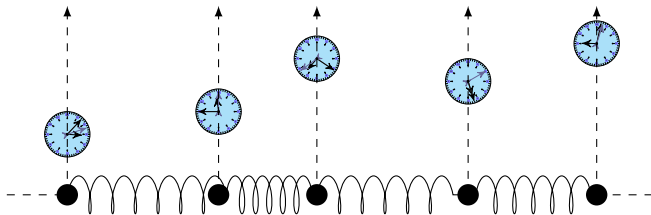


Quand l'horloge sonne...

Un peu de bruit

Ajout d'une **perturbation stochastique** \rightsquigarrow "ergodicité".

À chaque atome x est attaché un processus de Poisson.



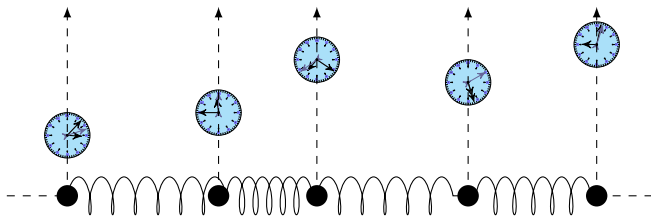
Quand l'horloge sonne...

a) Flip : le moment p_x devient $-p_x$

Un peu de bruit

Ajout d'une **perturbation stochastique** \rightsquigarrow "ergodicité".

À chaque atome x est attaché un processus de Poisson.



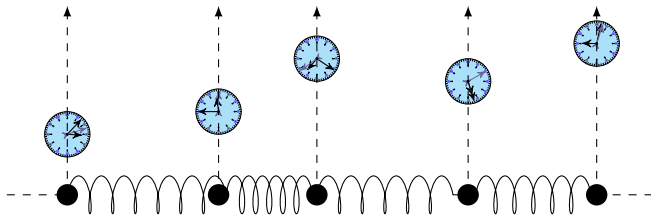
Quand l'horloge sonne...

- a) **Flip** : le moment p_x devient $-p_x$
- b) **Échange faible** : on échange p_x et p_{x+1}

Un peu de bruit

Ajout d'une **perturbation stochastique** \rightsquigarrow "ergodicité".

À chaque atome x est attaché un processus de Poisson.



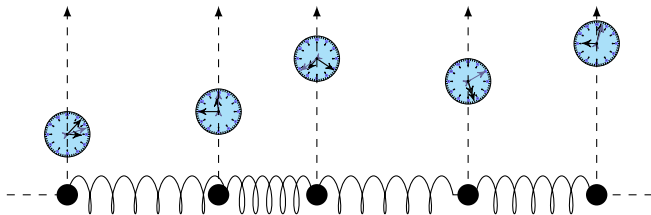
Quand l'horloge sonne...

- a) **Flip** : le moment p_x devient $-p_x$
- b) **Échange faible** : on échange p_x et p_{x+1} \rightarrow conserve $\sum p_x$!!

Un peu de bruit

Ajout d'une **perturbation stochastique** \rightsquigarrow "ergodicité".

À chaque atome x est attaché un processus de Poisson.



Quand l'horloge sonne...

- a) **Flip** : le moment p_x devient $-p_x$
- b) **Échange faible** : on échange p_x et p_{x+1} \rightarrow conserve $\sum p_x$!!
- c) **Échange fort** : on échange $p_x/\sqrt{m_x}$ et r_x

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

① MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

① MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit

$D_N \sim N$

[Lebowitz L. R. 1967]

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

① MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit

$D_N \sim N$ [Lebowitz L. R. 1967]

+ échange faible

$D_N^{GK} \sim \sqrt{N}$ [Basile B. O. 2009]

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

① MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit

$$D_N \sim N$$

[Lebowitz L. R. 1967]

+ échange faible

$$D_N^{GK} \sim \sqrt{N}$$

[Basile B. O. 2009]

+ échange fort ou flip

$$D_N \rightarrow D$$

[Bernardin O. 2005]

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

① MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit

$$\mathbf{D}_N \sim N \quad [\text{Lebowitz L. R. 1967}]$$

+ échange faible

$$\mathbf{D}_N^{GK} \sim \sqrt{N} \quad [\text{Basile B. O. 2009}]$$

+ échange fort ou flip

$$\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D} \quad [\text{Bernardin O. 2005}]$$

b) Cas général $V(r)$

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

① MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit

$D_N \sim N$ [Lebowitz L. R. 1967]

+ échange faible

$D_N^{GK} \sim \sqrt{N}$ [Basile B. O. 2009]

+ échange fort ou flip

$D_N \rightarrow D$ [Bernardin O. 2005]

b) Cas général $V(r)$

pur, non intégrable

$D_N \rightarrow D$

??

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

① MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit $\mathbf{D}_N \sim N$ [Lebowitz L. R. 1967]

+ échange faible $\mathbf{D}_N^{GK} \sim \sqrt{N}$ [Basile B. O. 2009]

+ échange fort ou flip $\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D}$ [Bernardin O. 2005]

b) Cas général $V(r)$

pur, non intégrable $\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D}$??

+ échange faible Bornes sur \mathbf{D}_N^{GK} [Basile B. O. 2009]

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

1 MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit $\mathbf{D}_N \sim N$ [Lebowitz L. R. 1967]

+ échange faible $\mathbf{D}_N^{GK} \sim \sqrt{N}$ [Basile B. O. 2009]

+ échange fort ou flip $\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D}$ [Bernardin O. 2005]

b) Cas général $V(r)$

pur, non intégrable $\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D}$??

+ échange faible Bornes sur \mathbf{D}_N^{GK} [Basile B. O. 2009]

2 MASSES I.I.D BORNÉES

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

1 MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit $\mathbf{D}_N \sim N$ [Lebowitz L. R. 1967]

+ échange faible $\mathbf{D}_N^{GK} \sim \sqrt{N}$ [Basile B. O. 2009]

+ échange fort ou flip $\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D}$ [Bernardin O. 2005]

b) Cas général $V(r)$

pur, non intégrable $\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D}$??

+ échange faible Bornes sur \mathbf{D}_N^{GK} [Basile B. O. 2009]

2 MASSES I.I.D BORNÉES

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit $\mathbb{E}[\mathbf{D}_N] \sim N^{1/2}$ [Ajanki H. 2011]

Question 4. Que sait-on sur $D(T)$?

1 MASSES CONSTANTES $m_x \equiv 1$

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit $\mathbf{D}_N \sim N$ [Lebowitz L. R. 1967]

+ échange faible $\mathbf{D}_N^{GK} \sim \sqrt{N}$ [Basile B. O. 2009]

+ échange fort ou flip $\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D}$ [Bernardin O. 2005]

b) Cas général $V(r)$

pur, non intégrable $\mathbf{D}_N \rightarrow \mathbf{D}$??

+ échange faible Bornes sur \mathbf{D}_N^{GK} [Basile B. O. 2009]

2 MASSES I.I.D BORNÉES

a) Cas harmonique $V(r) = r^2$

sans bruit $\mathbb{E}[\mathbf{D}_N] \sim N^{1/2}$ [Ajanki H. 2011]

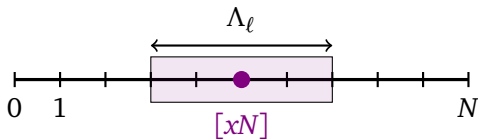
+ flip $\mathbb{E}[\mathbf{D}_N^{GK}] \rightarrow \mathbf{D}$ [S. 2014]

Allons plus loin !

1. Limites hydrodynamiques

Allons plus loin !

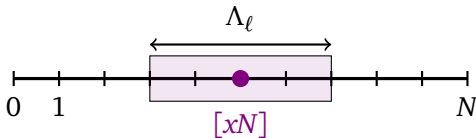
1. Limites hydrodynamiques



$$1 \ll \ell \ll N$$

Allons plus loin !

1. Limites hydrodynamiques



$$1 \ll \ell \ll N$$

Accélération du temps à l'échelle diffusive tN^2

$$\frac{1}{\ell} \sum_{y \in \Lambda_\ell} e_y(tN^2) \simeq e(x, t)$$

où $e(x, t)$ est solution de l'équation de la chaleur

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mathbf{D}(e) \frac{\partial e}{\partial x} \right]$$

2. Fluctuations de l'énergie à l'équilibre

2. Fluctuations de l'énergie à l'équilibre

- Mesures d'équilibre $\mu_T^N =$ mesures de Gibbs

$$d\mu_T(\omega) := \frac{1}{Z(T)} \prod_{x=1}^N \exp\left(-\frac{e_x}{T}\right) dr_x dp_x$$

2. Fluctuations de l'énergie à l'équilibre

- Mesures d'équilibre $\mu_T^N =$ mesures de Gibbs

$$d\mu_T(\omega) := \frac{1}{Z(T)} \prod_{x=1}^N \exp\left(-\frac{e_x}{T}\right) dr_x dp_x$$

- Initialement : $\{r_x, p_x\}$ distribués selon μ_T et $\langle e_x \rangle_T = T$.

2. Fluctuations de l'énergie à l'équilibre

- Mesures d'équilibre $\mu_T^N =$ mesures de Gibbs

$$d\mu_T(\omega) := \frac{1}{Z(T)} \prod_{x=1}^N \exp\left(-\frac{e_x}{T}\right) dr_x dp_x$$

- Initialement : $\{r_x, p_x\}$ distribués selon μ_T et $\langle e_x \rangle_T = T$.

Conséquence du TCL

$$\mathcal{Y}^N(\cdot) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N \delta_{x/N}(\cdot) \{e_x - T\}$$

converge en distribution vers un champ Gaussien.

2. Fluctuations de l'énergie à l'équilibre

- Mesures d'équilibre $\mu_T^N =$ mesures de Gibbs

$$d\mu_T(\omega) := \frac{1}{Z(T)} \prod_{x=1}^N \exp\left(-\frac{e_x}{T}\right) dr_x dp_x$$

- Initialement : $\{r_x, p_x\}$ distribués selon μ_T et $\langle e_x \rangle_T = T$.

Conséquence du TCL

$$\mathcal{Y}^N(\cdot) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N \delta_{x/N}(\cdot) \{e_x - T\}$$

converge en distribution vers un champ Gaussien.

Autrement dit : Pour F, G fonctions lisses,

$$\left\langle \mathcal{Y}^N(F) \mathcal{Y}^N(G) \right\rangle_T \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 2T^2 \iint F(u)G(v)du dv$$

Question 5. Et quand le temps évolue ?

Question 5. Et quand le temps évolue ?

Champ de fluctuations de l'énergie

$$\mathcal{Y}_t^N(\cdot) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N \delta_{x/N}(\cdot) \left\{ e_x(tN^a) - T \right\}$$

Question 5. Et quand le temps évolue ?

Champ de fluctuations de l'énergie

$$\mathcal{Y}_t^N(\cdot) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N \delta_{x/N}(\cdot) \left\{ e_x(tN^a) - T \right\}$$

Diffusion ?

Question 5. Et quand le temps évolue ?

Champ de fluctuations de l'énergie

$$\mathcal{Y}_t^N(\cdot) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N \delta_{x/N}(\cdot) \left\{ e_x(tN^a) - T \right\}$$

Diffusion ? \mathcal{Y}_t^N converge en distribution vers un processus de Ornstein-Uhlenbeck généralisé \mathcal{Y}_t solution de l'EPDS linéaire

$$\partial_t \mathcal{Y} = \mathbf{D} \partial_x^2 \mathcal{Y} \, dt + \sqrt{4\mathbf{D}T^2} \, \partial_x \mathcal{B}(x, t)$$

où \mathcal{B} est un bruit blanc standard en espace et en temps.

Question 5. Et quand le temps évolue ?

Champ de fluctuations de l'énergie

$$\mathcal{Y}_t^N(\cdot) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N \delta_{x/N}(\cdot) \left\{ e_x(tN^a) - T \right\}$$

Diffusion ? \mathcal{Y}_t^N converge en distribution vers un processus de Ornstein-Uhlenbeck généralisé \mathcal{Y}_t solution de l'EPDS linéaire

$$\partial_t \mathcal{Y} = \mathbf{D} \partial_x^2 \mathcal{Y} \, dt + \sqrt{4\mathbf{D}T^2} \, \partial_x \mathcal{B}(x, t)$$

où \mathcal{B} est un bruit blanc standard en espace et en temps.

Échelle diffusive : $a = 2$.

Résultats : cas harmonique

Soient F et G deux fonctions lisses,

$$\left\langle \mathcal{Y}_t^N(F) \mathcal{Y}_t^N(G) \right\rangle_T \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 2T^2 \iint_{\mathbb{R}^2} F(u)G(v) \mathbf{P}_t(u-v) du dv$$

où \mathbf{P}_t est le semi-groupe associé aux générateurs suivants :

Résultats : cas harmonique

Soient F et G deux fonctions lisses,

$$\left\langle \mathcal{Y}_t^N(F) \mathcal{Y}_t^N(G) \right\rangle_T \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 2T^2 \iint_{\mathbb{R}^2} F(u)G(v)\mathbf{P}_t(u-v)dudv$$

où \mathbf{P}_t est le semi-groupe associé aux générateurs suivants :

(i) **Harmonique + flip et $a = 2$** [S. 2013]

$$\mathcal{L} = \mathbf{D} \cdot \Delta$$

Résultats : cas harmonique

Soient F et G deux fonctions lisses,

$$\left\langle \mathcal{Y}_t^N(F) \mathcal{Y}_t^N(G) \right\rangle_T \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 2T^2 \iint_{\mathbb{R}^2} F(u)G(v) \mathbf{P}_t(u-v) du dv$$

où \mathbf{P}_t est le semi-groupe associé aux générateurs suivants :

- (i) **Harmonique + flip et $a = 2$** [S. 2013]

$$\mathcal{L} = \mathbf{D} \cdot \Delta$$

- (ii) **Harmonique + échange faible et $a = 3/2$** [Bernardin G. J. 2014]

$$\mathcal{L} = -(-\Delta)^{3/4} - \nabla(-\Delta)^{1/4}$$

Vers un “crossover” ?

Nouveau système !

Vers un “crossover” ?

Nouveau système !

Harmonique

Vers un “crossover” ?

Nouveau système !

Harmonique + Échange faible

Vers un “crossover” ?

Nouveau système !

Harmonique + Échange faible + **Flip** avec intensité N^{-b}

Vers un “crossover” ?

Nouveau système !

Harmonique + Échange faible + **Flip** avec intensité N^{-b}

Résultats

$b < 2/3$ Laplacien standard (échelle $a = 2 - b/2$)

Vers un “crossover” ?

Nouveau système !

Harmonique + Échange faible + **Flip** avec intensité N^{-b}

Résultats

$b < 2/3$	Laplacien standard	(échelle $a = 2 - b/2$)
$b > 1$	Laplacien fractionnaire	(échelle $a = 3/2$)

Vers un “crossover” ?

Nouveau système !

Harmonique + Échange faible + **Flip avec intensité N^{-b}**

Résultats

$b < 2/3$ Laplacien standard (échelle $a = 2 - b/2$)

$b > 1$ Laplacien fractionnaire (échelle $a = 3/2$)

[Bernardin Gonçalves Jara Sasada S. 2014]

Merci !

