Du microscopique au macroscopique : modélisation de gaz de particules hors-équilibre

Clément Erignoux, Marielle Simon, Linjie Zhao
Équipe PARADYSE

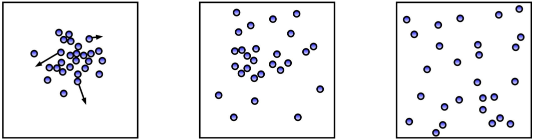
7 Octobre 2021

Laboratoire
Paul Painlevé

Physique statistique hors-équilibre : du micro au macro

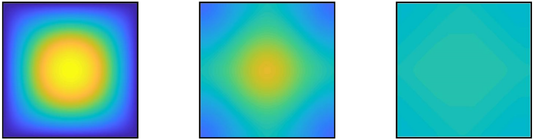
Objectif : Modéliser des **systèmes physiques complexes** afin d'apporter une **justification mathématique** à leur **phénoménologie macroscopique**.

- Niveau **microscopique** : e.g. particules et collisions élastiques.



Problème : trop ($\sim 10^{23}$) de degrés de libertés.

- Niveau **macroscopique** : diffusion selon l'équation de la chaleur.



"We shall focus on model derivation, study of stationary states and asymptotic behaviours, as well as **links between different levels of description (from microscopic to macroscopic)** and numerical methods to simulate such models."

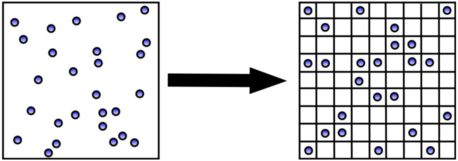
Introduction du texte fondateur de l'équipe.

GAZ SUR RÉSEAUX

QUESTIONS : Comment faire le lien entre les échelles **microscopiques** et **macroscopiques** ?

Besoin de **modéliser** et **simplifier** les systèmes physiques étudiés :

- **Discrétisation** en espace. *Exemple* : processus d'exclusion, où chaque site est soit **occupé par une particule**, soit **vide**.

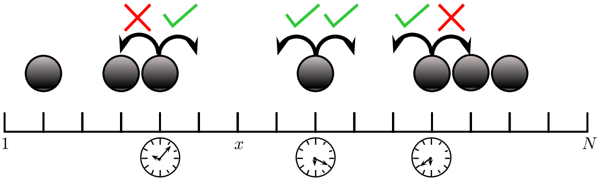


- Dynamiques **déterministes** modélisée par des dynamiques **stochastiques** : les particules sautent à des instants aléatoires, dans une direction aléatoire.

Ce type de modèles s'appelle des **gaz sur réseaux stochastiques**.

Limite hydrodynamique : relier l'**évolution temporelle** des systèmes microscopiques et macroscopiques

EXEMPLE DE DYNAMIQUE STOCHASTIQUE : le **P**rocessus d'**E**xclusion **S**imple **S**ymétrique (SSEP) en dimension 1.



LIMITE HYDRODYNAMIQUE : $N \to \infty$, $t = \tau N^2$, $u = x/N$.
On obtient la solution **déterministe** $\rho(t, u)$ de **l'équation de la chaleur** sur $[0, 1]$

$$\partial_t \rho = \Delta \rho.$$

Limites hydrodynamiques

- Les **limites hydrodynamiques** sont l'équivalent pour les systèmes de particules de la **loi des grands nombres** : on montre la convergence d'un **objet aléatoire** (le système microscopique) vers un **objet déterministe** (sa limite hydrodynamique), en faisant tendre le paramètre d'échelle N vers l'infini.

- La théorie des limites hydrodynamiques peut permettre l'accès à des phénomènes physiques de types **transitions de phase**, par exemple, à partir d'une dynamique microscopique.

- On peut aussi avoir accès au **théorème central limite** (processus de fluctuations), ainsi qu'à des **principes de grandes déviations**, qui permettent de déterminer pour N grand mais fini, la probabilité d'observer une **déviation de l'équation de la chaleur**.

Exemples d'application

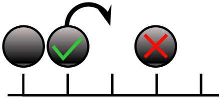
- Systèmes maintenus hors équilibre par des **dynamiques de bord** (systèmes **non-équilibre**).

- **Chaînes d'oscillateurs** avec beaucoup de quantités conservées.

- Modèles **cinétiquement contraints** pour les transitions de phase liquide-solide.

MODÈLES CINÉTIQUEMENT CONTRAINTS

Contrainte supplémentaire ajoutée aux sauts de particules ? Ex : **processus d'exclusion facilité** (FEP).



À cause de la contrainte cinétique, deux comportements possibles pour le système :

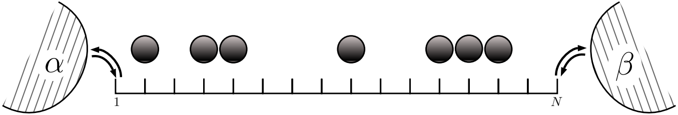
- A **faible densité** ($\rho < 1/2$) de particules, le système macroscopique devient **gelé**, parce que rapidement aucune particule n'a de voisin, et le système micro se bloque.
- A **forte densité** ($\rho > 1/2$) de particules, le système adopte un **comportement diffusif**, au fur et à mesure que les particules se propagent dans le système.

La limite hydrodynamique du FEP est donnée par le **problème de Stefan**,

$$\partial_t \rho = \Delta \left\{ \frac{2\rho - 1}{\rho} \mathbf{1}_{\{\rho \geq 1/2\}} \right\}$$

Systèmes non-équilibre

Particules créées/détruites au bord ? Ex : système en contact avec des thermostats/réservoirs

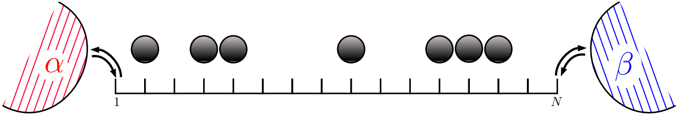


$$\partial_t \rho = \Delta \rho \qquad \rho(\cdot, 0) = \alpha, \qquad \rho(\cdot, 1) = \beta.$$

Les réservoirs fixent la densité macroscopique **au bord du système**.

SYSTÈMES NON-ÉQUILIBRE

PARTICULES CRÉÉES/DÉTRUITES AU BORD ? Ex : système en contact avec des thermostats/réservoirs

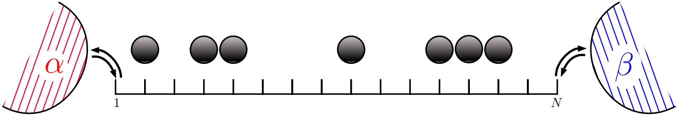


$$\partial_t \rho = \Delta \rho \qquad \rho(\cdot, 0) = \alpha, \qquad \rho(\cdot, 1) = \beta.$$

Les réservoirs fixent la densité macroscopique **au bord du système**.

Systèmes non-équilibre

Particules créées/détruites au bord ? Ex : système en contact avec des thermostats/réservoirs



$$\partial_t \rho = \Delta \rho \qquad \rho(\cdot, 0) = \alpha, \qquad \rho(\cdot, 1) = \beta.$$

Les réservoirs fixent la densité macroscopique **au bord du système**.

- L'interaction avec les réservoirs déforme la mesure du processus microscopique, ce qui complique la **loi des grands nombres**.
- Les réservoirs ont des **interactions anormales** pour les modèles avec contraintes cinétiques.

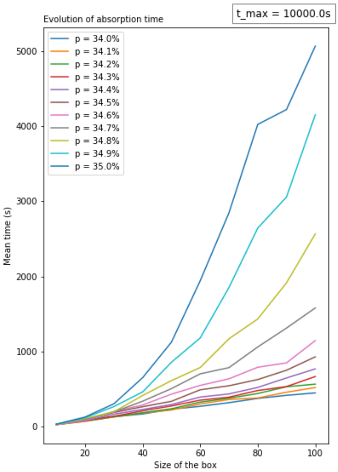


Figure – Absorption time for the avalanche model.

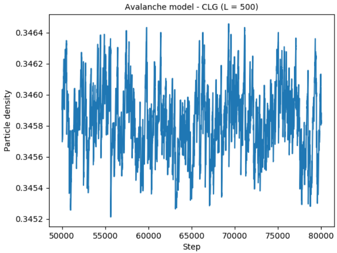


Figure – Critical density for the avalanche model.

QUELQUES PROJETS EN COURS AU SEIN DE L'ÉQUIPE

- Influence des **conditions de bords** sur les processus de zero-range **asymétriques**. [Clément Erignoux, Marielle Simon, Linjie Zhao]

- **Mapping** entre processus d'exclusion facilité et processus de zero-range, aspects micros et macros. [Clément Erignoux, Marielle Simon, Linjie Zhao]

- Processus **cinétiquement contraints** en dimension $d = 1$ et $d = 2$: densités critiques et influence des conditions de bord, [Clément Erignoux, Alexandre Roget, Marielle Simon], *avec Assaf Shapira (Paris)*.

Quelques autres projets en cours

- **Fluctuations de type KPZ** pour le FEP avec faible asymétrie, *avec Guillaume Barraquand (Paris) et Oriane Blondel (Lyon)*.
- **KCLG pour l'équation des milieux poreux** généralisée, *avec Patricia Gonçalves et Gabriel Nahum (Lisbonne)*.
- **Condensation spontanée** pour un gaz actif dégénéré, *avec T. Bodineau (Paris)*.
- **Sharpness de la transition de phase** des entrelacs aléatoires en dimension 2, *avec A. Teixeira (Rio de janeiro)*.
- Limite hydrodynamique du processus de **zero-range asymétrique non-attractif**, *avec Lu Xu (L'Aquila)*.