

# Empilement de sphères browniennes interagissantes.

Sylvie Roelly (Potsdam)

travail en coopération avec

Myriam Fradon (Lille), [Patrick Cattiaux](#) et Alexei Kulik (Kiev)

Toulouse, 7 juin 2017

2018-2021:

en marche pour de nouvelles aventures avec le CDFA 01-18

## Processus stochastiques et apprentissage statistique

### Stochastische Prozesse und statistisches maschinelles Lernen

avec comme acteurs **potsdamiens**:

Gilles Blanchard, Alexandra Carpentier, Iurii Ganychenko, Maurilio Gutzeit, Tania Kosenkova, Andrea Locatelli, Sylvie Røelly, Oleksandr Zadorozhnyi...

et comme acteurs **toulousains**:

Patrick Cattiaux, Aurélien Garivier, Sébastien Gerchinovitz, Jean-Michel Loubès, Pierre Ménard, William Oçafrain, Laure Pédèches, Léonard Torossian...

# Une dynamique (aléatoire) de Langevin

**Modèle:**  $n$  **particules** browniennes évoluant dans  $\mathbb{R}^d$  et soumises à un **champ gradient**  $\varphi$  générant une **interaction par paires**. La position de la  $i$ ème particule satisfait l'EDS :

$$X_i(t) = X_i(0) + B_i(t) - \frac{a}{2} \int_0^t \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \nabla \varphi(X_i(s) - X_j(s)) ds, \quad t \geq 0. \quad (1)$$

- $(B_1, \dots, B_n)$  sont des **Browniens indépendants** de  $\mathbb{R}^d$
- le paramètre  $a > 0$  contrôle l'**intensité** de l'interaction
- la particule  $i$  est influencée par toutes les autres au temps  $s$  via le **potentiel aléatoire**  $a \sum_{j \neq i} \varphi(\cdot - X_j(s))$ .

Globalement le système  $X(t) = (X_1(t), \dots, X_n(t)) \in (\mathbb{R}^d)^n$  satisfait l'équation de Langevin

$$dX(t) = dB(t) - \frac{\alpha}{2} \nabla \Phi(X(t)) dt, \quad t \geq 0,$$

où

$$\Phi(x) := \sum_{\{i,j\}} \varphi(x_i - x_j)$$

est l'énergie globale des  $n$  particules  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ .

Questions :

- Existence de solutions (faibles, fortes)?

Globalement le système  $X(t) = (X_1(t), \dots, X_n(t)) \in (\mathbb{R}^d)^n$  satisfait l'équation de Langevin

$$dX(t) = dB(t) - \frac{a}{2} \nabla \Phi(X(t)) dt, \quad t \geq 0,$$

où

$$\Phi(x) := \sum_{\{i,j\}} \varphi(x_i - x_j)$$

est l'énergie globale des  $n$  particules  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ .

Questions :

- Existence de solutions (faibles, fortes)?
- Existence et structure géométrique de(s) état(s) d'équilibre de cette dynamique?

Globalement le système  $X(t) = (X_1(t), \dots, X_n(t)) \in (\mathbb{R}^d)^n$  satisfait l'équation de Langevin

$$dX(t) = dB(t) - \frac{a}{2} \nabla \Phi(X(t)) dt, \quad t \geq 0,$$

où

$$\Phi(x) := \sum_{\{i,j\}} \varphi(x_i - x_j)$$

est l'énergie globale des  $n$  particules  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ .

Questions :

- Existence de solutions (faibles, fortes)?
- Existence et structure géométrique de(s) état(s) d'équilibre de cette dynamique?
- Réversibilité du système?

Globalement le système  $X(t) = (X_1(t), \dots, X_n(t)) \in (\mathbb{R}^d)^n$  satisfait l'équation de Langevin

$$dX(t) = dB(t) - \frac{a}{2} \nabla \Phi(X(t)) dt, \quad t \geq 0,$$

où

$$\Phi(x) := \sum_{\{i,j\}} \varphi(x_i - x_j)$$

est l'énergie globale des  $n$  particules  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ .

Questions :

- Existence de solutions (faibles, fortes)?
- Existence et structure géométrique de(s) état(s) d'équilibre de cette dynamique?
- Réversibilité du système?
- Comportement en temps long? Vitesse de convergence vers l'équilibre?

Réponses bien connues:

- Si  $\Phi$  est régulier et satisfait par ex.  $x \cdot \nabla \Phi(x) \geq c|x|^2 + b$ , ( $c, b \in \mathbb{R}$ ),  
 $\exists!$  processus de Langevin.
- La mesure sur  $(\mathbb{R}^d)^n$

$$\mu_{equ}(dx) := e^{-a\Phi(x)} dx = e^{-a\sum_{\{i,j\}} \varphi(x_i - x_j)} dx_1 \cdots dx_n$$

est non seulement **stationnaire** sous l'action de la dynamique, mais aussi **réversible**.

Elle n'est **pas normalisable** à cause de son invariance par translations spatiales.

- Les maxima de la densité de  $\mu_{equ} \leftrightarrow$  Minima de l'énergie  $\Phi$ .  
 Pour  $a \rightarrow +\infty$ , le support de  $\mu_{equ}$  se concentre sur les configurations qui minimisent  $\Phi$ .



## Exemple type: l'énergie est quadratique

L'interaction par paires quadratique  $\varphi(y) = |y|^2, y \in \mathbb{R}^d$ , génère une énergie quadratique

$$\Phi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\{i,j\}} |x_i - x_j|^2 = n \sum_i |x_i - \bar{x}|^2,$$

où  $\bar{x} := \frac{x_1 + \dots + x_n}{n}$  est le barycentre du système. L'EDS de Langevin devient linéaire:

$$dX_i(t) = dB_i(t) - \frac{a}{2} \sum_{j=1}^n (X_i(t) - X_j(t)) dt, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2)$$

- $a$  est l'intensité de l'attraction entre les particules
- Condition initiale gaussienne  $\Rightarrow X$  est un processus gaussien.

## Les positions relatives autour du barycentre

- Le processus  $Y = (Y_1, \dots, Y_n)$  des positions relatives

$$Y_i := X_i - \bar{X} = X_i - \frac{X_1 + \dots + X_n}{n}, \quad i = 1, \dots, n,$$

évolue dans  $\mathcal{D} := \{(y_1, \dots, y_n) \in (\mathbb{R}^d)^n : \sum_{i=1}^n y_i = 0\}$ .

- Il a la même **dérivée linéaire** que  $X$  et est **gaussien**.
- Il admet une **unique probabilité stationnaire**  $\pi_{equ}$  de densité sur  $\mathcal{D}$  proportionnelle à  $e^{-na \sum_i |y_i|^2}$
- Quelque soit la configuration initiale  $y \in \mathcal{D}$ , la dynamique se **stabilise vers**  $\pi_{equ}$  à **vitesse exponentielle** :

$$\exists \beta > 0, \quad \|\mathcal{L}(Y(t) | Y(0) \equiv y) - \pi_{equ}\|_{TV} \leq c(y) e^{-\beta t}.$$

# Une dynamique de Langevin pour des sphères

**Modèle:**  $n$  sphères dures de diamètre 1 dans  $\mathbb{R}^d$  soumises à la même force qu'avant. Elles ne peuvent pas s'intersecter, donc, à tout instant  $t$ , la position de leurs centres  $X(t) = (X_1(t), \dots, X_n(t))$  est un élément de

- $\mathcal{A}_n := \mathcal{A} \cap (\mathbb{R}^d)^n$ , où  $\mathcal{A}$  est l'ensemble des configurations autorisées

$$\mathcal{A} := \{(x_i)_i : \forall k \neq j, |x_k - x_j| \geq 1\}.$$

Le processus  $X(t)$  résout le système:

$$\begin{aligned} X_i(t) = X_i(0) &+ B_i(t) - \frac{a}{2} \int_0^t \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \nabla \varphi(X_i(s) - X_j(s)) ds \\ &+ \sum_{j=1}^n \int_0^t (X_i(s) - X_j(s)) dL_{ij}(s), \quad i = 1, \dots, n. \quad (3) \end{aligned}$$

- Les collisions sont **élastiques** (simulation)
- Les processus  $L_{ij}$  sont des **temps locaux de collision** qui satisfont  $\forall i \neq j \quad L_{ij} = L_{ji} \in \mathbb{R}^+, L_{ij}(0) = 0, t \rightarrow L_{ij}(t)$  est continu et

$$L_{ij}(t) = \int_0^t \mathbf{1}_{\{|X_i(s) - X_j(s)|=1\}} dL_{ij}(s) :$$

$L_{ij}$  croît **uniquement** quand la sphère  $i$  rencontre la sphère  $j$ .

- *Remarque:* L'ensemble  $\mathcal{A}_n$  n'est ni convexe ni de complémentaire convexe!

$$x, y \in \mathcal{A}_2 \not\Rightarrow \frac{1}{2}(x + y) \in \mathcal{A}_2 \text{ and } x, y \in (\mathcal{A}_3)^c \not\Rightarrow \frac{1}{2}(x + y) \in (\mathcal{A}_3)^c$$

L'EDS (3) de type Skorohod est une évolution sous contraintes géométriques:  $X$  se réfléchit orthogonalement sur le bord du domaine  $\mathcal{A}_n$ .

- $\exists!$  solution si l'interaction  $\varphi$  est assez régulière (Saisho, Tanaka, 1986), car la frontière de  $\mathcal{A}_n$  satisfait les propriétés de cône normal uniforme et de sphère extérieure uniforme .
- La mesure

$$\mu_{equ}(dx) := e^{-a \sum_{\{i,j\}} \varphi(x_i - x_j)} \mathbf{1}_{\mathcal{A}_n}(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n$$

est stationnaire sous cette dynamique.

- Stabilisation en temps long? Vitesse?  
Pour  $n$  et  $\varphi$  quelconques, c'est un problème ouvert, car aucune des méthodes habituelles ne peut s'appliquer à cause des temps locaux.

## Quelques méthodes pour prouver la stabilisation exponentielle

- (Meyn, Tweedie, 1993) irréductibilité via la condition (locale) de Dobrushin  $\sup_{y,y' \in K} \|P_t(y, \cdot) - P_t(y', \cdot)\|_{TV} < 2$   
+ condition de Foster-Lyapunov  $\exists \Phi, K, \quad L\Phi \leq -\alpha\Phi + c\mathbf{1}_K$ .
- Approche spectrale via l'inégalité de Poincaré satisfaite par  $\pi_{equ}$

$$\text{Var}_\pi(f) \leq \frac{1}{2\beta} \int |\nabla f|^2 d\pi$$

(Bakry, Cattiaux, Guillin, Zitt & Kulik, 2008-2013).

- Couplage exponentiel (Veretennikov, 1987) via moments exponentiels du temps d'atteinte  $\tau_K$  d'un ensemble compact  $K$  (Kulik, 2011)  
irréductibility +

$$\mathbf{E}_y(\Phi(Y(t))\mathbf{1}_{\tau_K > t}) \leq ce^{-\alpha t}\Phi(y) \text{ et } \sup_{y \in K, t} \mathbf{E}_y(\Phi(Y(t))\mathbf{1}_{\Phi(Y(t)) > M}) \xrightarrow{M \rightarrow \infty} 0$$

# Stabilisation exponentielle

(Cattiaux, Fradon, Kulik, R. 2016, 2017)

Pour une **attraction linéaire** de  $n$  sphères, les positions relatives  $Y_t$  convergent exponentiellement rapidement vers l'unique mesure d'équilibre (gaussienne tronquée)

$$\pi_{equ}(dy) = \frac{1}{Z_a} e^{-na \sum_i |y_i|^2} \mathbf{1}_{\mathcal{D}}(y) \prod_i \mathbf{1}_{|y_i - y_j| \geq 1} dy$$

$t$  assez long  $\Rightarrow \quad \|\mathcal{L}(Y(t) | Y(0) = y) - \pi_{equ}\|_{TV} \leq c(y) e^{-\beta(a)t}$ .

# Équilibre et minimisation de l'énergie

Définissons l'ensemble des configurations d'énergie quadratique minimale :

$$\mathcal{E}_{min} := \left\{ x \in \mathcal{A}_n, \sum_{\{i,j\}} |x_i - x_j|^2 = \min_{x' \in \mathcal{A}_n} \sum_{\{i,j\}} |x'_i - x'_j|^2 \right\}.$$

- Dans le régime de forte attraction mutuelle ( $a \rightarrow +\infty$ ),  $\pi_{equ}$  se concentre autour de  $\mathcal{E}_{min}$ .
- Quels sont ces ensembles de configurations  $\mathcal{E}_{min}$ ?  
 Pour  $n=3$ ,  $\mathcal{E}_{min}$  se réduit aux configurations triangulaires.  
 Et puis  $n = 4$ ,  $n \geq 5$ ?

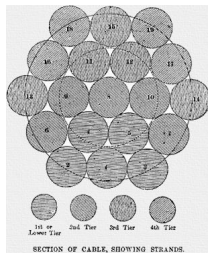




- $n = 19$ . Cette configuration est-elle optimale?



L'empereur Othon Ier et son épouse Editha, Magdebourg, 1245



Sans doute!

Cables du pont de Brooklyn, inauguré en 1883. Ils sont formés de 19 brins, chacun composé de 331 fils métalliques de diamètre  $1/8$

**Remarque:**  $n = 19$  ou  $n = 331$  sont des **nombre hexagonaux centrés**: si  $h$  est le cardinal du côté,  $n(h) = h^3 - (h - 1)^3$ .

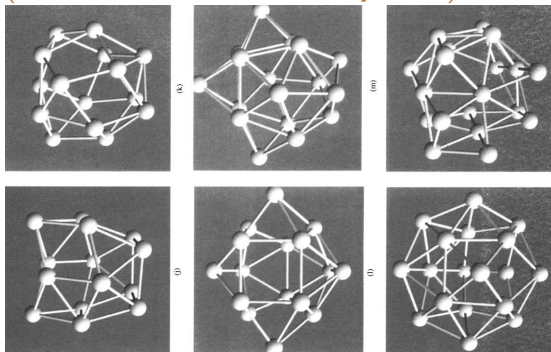
Pour ces configurations, l'énergie quadratique vaut

$$\frac{1}{4}h(h-1)(5h(h-1)+2) = \frac{(n-1)(5n+1)}{36}.$$

- Dans  $\mathbb{R}^3$ , la pyramide de boules de neige est-elle optimale? Non!



Configurations optimales **conjecturées** pour  $4 \leq n \leq 32$   
 (Sloane, Hardin, Duff, Conway, 1995)



$n=15-20$ . Le diamètre des sphères est réduit, les contacts entre elles remplacés par des liens, la sphère centrale effacée.

- Cela nous amène à proposer une **approche aléatoire et dynamique** de la question de F. Toth (1967):

*What is the shape of a cluster of  $n$  spheres with equal radii minimizing their quadratic energy, i.e. their 2nd moment about their center of mass?*

- Dans le régime de **forte attraction mutuelle** ( $a \rightarrow +\infty$ ), le système de  $n$  sphères soumis à la dynamique de Langevin **se concentre en temps long** autour de  $\mathcal{E}_{min}$ .

$$\forall \varepsilon, \eta > 0 \text{ pour } t, a \text{ assez grands} \Rightarrow \mathbf{P}(d(Y(t), \mathcal{E}_{min}) \leq \eta) \geq 1 - \varepsilon.$$

250 disques convergeant vers une configuration circulaire

# Infinité de sphères en interaction

**Modèle:** **Infinité** de sphères browniennes indistinguables interagissant dans  $\mathbb{R}^d$  et soumises à un champ gradient  $\varphi$ . La position des centres  $X(t) = (X_i(t))_{i \in \mathbb{N}} \in (\mathbb{R}^d)^{\mathbb{N}}$  satisfait

$$\begin{aligned}
 X_i(t) = X_i(0) + B_i(t) & - \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{j \neq i} \nabla \varphi(X_i(s) - X_j(s)) ds \\
 & + \sum_{j \neq i} \int_0^t (X_i(s) - X_j(s)) dL_{ij}(s). \quad (4)
 \end{aligned}$$

- $X(t) = \sum_i \delta_{X_i(t)}$ , mesure de Radon sur  $\mathbb{R}^d$  et  $X(0) \sim \mu$ , champ aléatoire
- $L_{ij}$ : temps local de collision ( $L_{ij} \equiv 0$  if  $r = 0$ )
- interaction à **décroissance exponentielle** :  $\exists c, b > 0, |\nabla \varphi(x)| \leq e^{-c|x|^b}$
- **Difficultés majeures** : les deux sommes de (4) sont infinies!

## Quelques résultats

- **Existence et unicité** (Fradon, R., Tanemura, 2000)  
 $\exists \underline{\mathcal{A}} \subset \mathcal{A}, \forall X_0 \in \underline{\mathcal{A}}, \exists!$  solution forte  $t \mapsto X(t) \in \underline{\mathcal{A}}$ .

- **Mesures d'équilibre**

Toute champ de Gibbs hard core  $\mu$  associé au potentiel  $\varphi$  et d'activité  $z$  est concentré sur  $\underline{\mathcal{A}}$  et la solution  $X$  de (4) avec condition initiale  $\mu$  est réversible.

- **Reversible  $\Rightarrow$  canonical Gibbs** (Fradon, R., 2006)

Si  $X$  est réversible et si la condition initiale  $\mu$  est localement absolument continue par rapport à un champ de Poisson, alors  $\mu$  est un champ de Gibbs canonique de potentiel  $\varphi$ , i.e. un mélange de champs de Gibbs hard core.

- La **stabilisation** reste en général un **problème ouvert**.

Uniquement résolu dans le cas de particules browniennes ( $\varphi = 0$ ) sans hard core (diamètre = 0) (Stone, 1968):

$$\forall \mu \text{ de densité moyenne } z, \mathcal{L}(X(t)|X(0) \sim \mu) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \text{Poisson}^z.$$

- Nouveau paramètre du système:

La **densité moyenne** initiale  $\bar{D}$  ( $\leftrightarrow$  **activité gibbsienne**) définie par

$$\bar{D}(\mu) := \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}_\mu(N_{x+[-n,n]^d}) / (2n)^d,$$

si la limite existe uniformément en  $x$ , où  $N_\Lambda := \#$  points dans  $\Lambda$ .

Quel est l'influence d'une densité initiale **très grande** sur la dynamique?



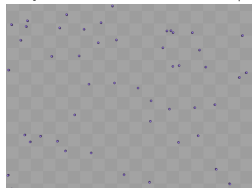
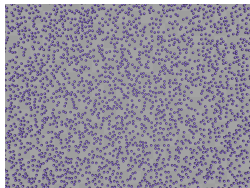
## Mesures d'équilibre d'un système infini de sphères browniennes libres

- Ce sont des **champs gibbsiens canoniques**, mélanges de champs **poissoniens avec hard core** d'activité  $z$ :

$$\mu \in \mathcal{G}(z) \Leftrightarrow \forall \Lambda \subset \mathbb{R}^d, \eta = \sum_{\eta_i \in \Lambda^c} \delta_{\eta_i}, \xi_\Lambda = \sum_{\xi_i \in \Lambda} \delta_{\xi_i}$$

$$(DLR) \quad \mu(d\xi_\Lambda | \eta) = \frac{1}{Z_z^{\Lambda, \eta}} \mathbf{1}_A(\xi_\Lambda + \eta) \text{Poisson}_\Lambda^z(d\xi_\Lambda).$$

- $z$  petit  $\Rightarrow$  **unicité**:  $\#\mathcal{G}(z) = 1$  (Dobrushin, Ruelle 1969)


 $z = 0.007$ 

 $z = 0.03$ 

Quid quand  $z$  augmente?

- $z$  grand  $\stackrel{?}{\Rightarrow}$  **transition de phases** :  $\#\mathcal{G}(z) > 1$  (conjecturé par Kirkwood, Ruelle)

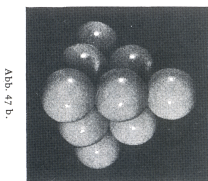
- Soit  $\mu_z \in \mathcal{G}(z)$ , invariante par translation. Alors

$$\overline{D}(\mu_z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} D_{max},$$

densité de l'empilement maximal de sphères dures dans  $\mathbb{R}^d$ . (Georgii, 2000, Mase et al., 2001). Donc si

$$\mu_z \rightarrow_z \mu_\infty \Rightarrow \text{support}(\mu_\infty) \subset \{\text{empilements maximaux}\}.$$

- Dans  $\mathbb{R}^2$ :  $D_{max} = \frac{\pi}{\sqrt{12}} \simeq 0.91$ . Empilement hexagonal packing comme pour  $n = 19$ .
- In  $\mathbb{R}^3$ :  $D_{max} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \simeq 0.74$ , densité du face-centered cubic et/ou empilements hexagonaux (conjecturé par Kepler, 1611, prouvé par Hales, 1998/2002).



- $d \geq 4$ : valeur de  $D_{max}$ ? Description des empilements maximaux?  
Il existe seulement des encadrements :

$$2^{-d} \leq D_{max} \leq 2^{-0.5990 d} \quad (\text{Rogers, 1958}).$$

## Perspectives...

- Lien entre la transition de phases pour  $z$  grand et l'existence d'un nombre infini de configurations d'empilement maximal.
- Approximer l'empilement infini de sphères dures comme asymptotique en temps long ( $t \rightarrow \infty$ ) d'une **dynamique aléatoire** de sphères en grande densité ( $z \rightarrow \infty$ ).