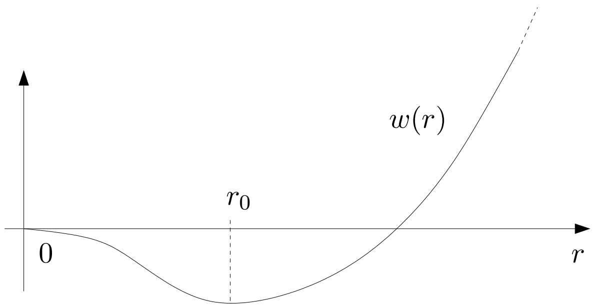
Dimension des minimiseurs d'une énergie d'interaction entre particules

Benoît Merlet, merlet@cmap.polytechnique.fr

Nous proposons d'étudier numériquement un type de modèles utilisé dans l'étude de la répartition d'objets qui interagissent à distance que ce soit en chimie (atomes, molécules) en astro-physique (amas de galaxies) ou en biologie (répartition des oiseaux volant en groupe, ...).

On se donne un potentiel d'interaction $W(x) = w(|x|)$ où $w \in C^1(\mathbf{R}_+, \mathbf{R})$ décroît sur $[0, r_0]$ puis croît vers l'infini pour $r \uparrow \infty$.



La distribution des objets est donnée par une mesure μ positive de masse totale fixée $\mu(\mathbf{R}^d) = \int d\mu = M$. Par exemple pour représenter k masses de valeurs $m_1, \cdots, m_k$ situées aux points $x_1, \cdots, x_k$, on utilisera la somme de masses Dirac : $\mu = \sum_{i=1}^k m_i \delta_{x_i}$. Le potentiel en un point $y \in R^d$ engendré par cette mesure est

$$V_\mu(y) \ := \ \sum_{i=1}^k W(y - x_i) m_i \ = \ \int_{\mathbf{R}^d} W(y - x)\, d\mu(x).$$

L'énergie d'interaction de cette mesure est

$$E(\mu) \ := \int_{\mathbf{R}^d} V_\mu(y)\, d\mu(x) \ = \ \sum_{j=1}^k m_j V_\mu(x_j) \ = \ \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k m_i m_j W(x_j - x_i).$$

Le potentiel et l'énergie d'une mesure positive (à support compact) μ se définissent de la même façon :

$$V_\mu(y) \ := \int_{\mathbf{R}^d} W(y - x)\, d\mu(x), \qquad E(\mu) \ := \int_{\mathbf{R}^d} V_\mu(y)\, d\mu(x) \ = \int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} W(y - x)\, d\mu(x)\, d\mu(y). \quad (1)$$

On s'intéresse aux points de minimum (dans la mesure où il en existe au moins un) de cette énergie dans l'ensemble des mesures μ positives de masse totale fixée M.

Le but du modal est d'étudier numériquement la dimension naturelle des minimiseurs selon la caractère "répulsif" de W au voisinage de 0. Celui-ci sera mesuré par la vitesse avec laquelle w décroît au voisinage de 0, par exemple la valeur de α quand $w(r) \sim -c\, r^\alpha$.
En effet, contrairement au potentiel électrostatique ou gravitationnel, l'auto-interaction $w(0)[m(x)]^2$ d'une particule $m\delta_x$ avec elle-même s'annule. On peut se demander si la présence de masses de Dirac est favorable ou si au contraire, on peut gagner de l'énergie en remplaçant la masse $m\delta_x$ par une masse diffuse de même poids au voisinage de x ? Dans ce cas, est-ce qu'il est favorable d'avoir une masse diffuse sur une ligne, une surface, un volume ?

Le modal pourra s'orienter vers les applications concrètes ou amusantes des énergies d'interaction (1).

Potentiel et Energie associés à une mesure de Radon

Pour clarifier les choses, nous définissons rigoureusement le potentiel V_μ et l'énergie E_μ associées à une mesure de Radon à support compact.

Définition 1 *On munit l'espace $C_c(\mathbf{R}^d)$ des fonctions continues à support compact de la norme uniforme $\|\varphi\|_\infty = \max_{\mathbf{R}^d} |\varphi|$.*
L'espace $(C_c(\mathbf{R}^d), \|\cdot\|_\infty)$ est un vectoriel normé complet (un espace de Banach).
On note $\mathcal{M}(\mathbf{R}^d)$ l'espace des formes linéaires continues sur $(C_c(\mathbf{R}^d), \|\cdot\|_\infty)$, i.e. $\mu \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^d)$ si

$$\varphi \in C_c(\mathbf{R}^d) \mapsto \langle \mu\,;\,\varphi\rangle \in \mathbf{R} \text{ est linéaire.}$$

et s'il existe $K \geq 0$ telle que

$$\langle \mu, \varphi\rangle \;\leq\; K\|\varphi\|_\infty \quad \forall \varphi \in C_c(\mathbf{R}^d).$$

On note aussi

$$\langle \mu, \varphi\rangle \;=\; \int \varphi\, d\mu \;=\; \int_{\mathbf{R}^d} \varphi(x)\, d\mu(x).$$

On dira que $\mu \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^d)$ est positive si pour tout $\varphi \in C_c(\mathbf{R}^d, \mathbf{R}_+)$ on a $\langle \mu, \varphi\rangle \geq 0$.
On dira que $\mu \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^d)$ est à support compact s'il existe $R > 0$ tel que si $\varphi \equiv 0$ dans $B(0, R)$ alors $\langle \mu, \varphi\rangle = 0$.

Si μ est une mesure de Radon à support compact, on peut définir son potentiel. En effet, prenons $\chi \in C_c(\mathbf{R}^d)$ à valeurs dans $[0, 1]$ telle que $\chi_R \equiv 1$ sur $B(0, R)$. Pour tout y, la fonction $x \mapsto W(y-x)\chi(x)$ est un élément de $C_c(\mathbf{R}^d)$, on peut alors poser.

$$V_\mu(y) \;:=\; \int_{\mathbf{R}^d} W(y - x)\chi_R(x)\, d\mu(x).$$

On peut vérifier facilement que $V_\mu \in C(\mathbf{R}^d)$ et que V_μ ne dépend pas du choix de la fonction de troncature χ_R. On écrira donc sans risque d'ambiguïté :

$$V_\mu(y) \;=\; \int_{\mathbf{R}^d} W(y - x)\, d\mu(x).$$

L'énergie d'interaction associée à une mesure à support compact μ est alors définie par

$$E(\mu) \;:=\; \int_{\mathbf{R}^d} V_\mu(x)\chi_R(x)\, d\mu(x) \;=\; \int_{\mathbf{R}^d} \left[\int_{\mathbf{R}^d} W(y - x)\chi_R(y)\, d\mu(y)\right] \chi_R(x)\, d\mu(x).$$

En pratique nous rencontrerons dans cette étude des mesures μ de la forme suivante :

1. $\mu = \sum_{i=1}^k m_i \delta_{x_i}$ est une somme de masses de Dirac comme précédemment,
2. μ se concentre sur une courbe $\mathcal{C}$ de longueur L, c'est à dire

$$\int \varphi\, d\mu \;=\; \int_0^L m_l(x(s))\varphi(x(s))\, ds,$$

   où $x : [0, L] \to \mathcal{C}$ est un paramétrage de $\mathcal{C}$ par l'abscisse curviligne et où $m_l : \mathcal{C} \to \mathbf{R}_+$ est une fonction régulière représentant la densité linéique de masse sur $\mathcal{C}$.
3. μ se concentre sur une surface Σ compacte régulière,

$$\int \varphi\, d\mu \;=\; \int_\Sigma m_s(x)\varphi(x)\, dS(x),$$

   avec une densité surfacique $m_s : \Sigma \to \mathbf{R}_+$ régulière.

4. μ admet une densité volumique régulière $m_v : \mathbf{R}^3 \to \mathbf{R}_+$ et à support compact,

$$\int \varphi \, d\mu \;=\; \int m_v(x)\varphi(x)\, dx.$$

5. μ est une combinaison convexe de mesures des types précédents.

On a selon le cas, $V_\mu(y) \;=$

$$\sum_{i=1}^{k} m_i W(y-x_i), \qquad \int_0^L W(y-x(s)) m_l(s)\, ds, \qquad \int_\Sigma W(y-x) m_s(x)\, dS(x) \quad \text{ou} \quad \int W(y-x) m_v(x)\, dx.$$

De la même façon, l'énergie $E(\mu)$ est selon le cas,

$$\sum_{1\le i,j\le k}^{k} m_i m_j W(x_j - x_i), \qquad \int_0^L \int_0^L W(x(t)-x(s)) m_l(t) m_l(s)\, dt\, ds,$$

$$\int_\Sigma \int_\Sigma W(y-x) m_s(x) m_s(y)\, dS(x)\, dS(y) \qquad \text{ou} \qquad \int_{\mathbf{R}^d\times\mathbf{R}^d} W(y-x) m_v(x) m_v(y)\, dx\, dy.$$