

Propriétés statistiques des triangles de Delaunay du gaz parfait 2D

Étudiant : Antoine Herrmann
Directeur : Jean Farago

Institut Charles Sadron
Université de Strasbourg

14 Mai 2019



Un peu d'Histoire

XIX^e siècle - XX^e siècle

Thermodynamique :

Description des gaz et liquides par des grandeurs macroscopiques : $PV = nRT$ pour le gaz parfait.

Physique Statistique :

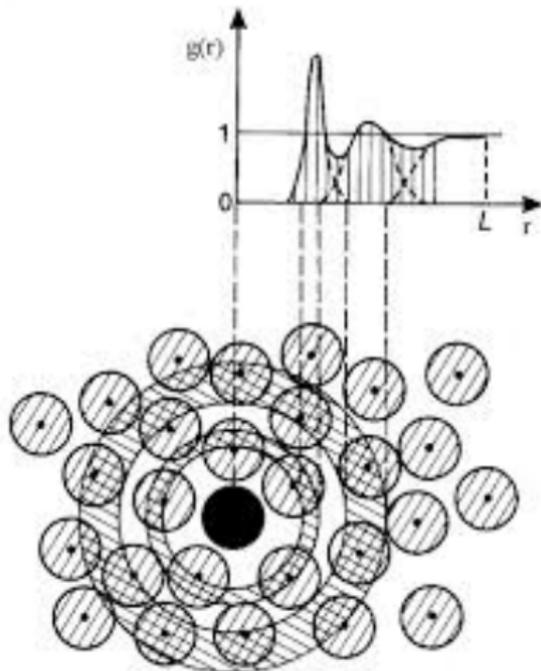
Idée de l'atome ponctuel → Description des systèmes physiques par des grandeurs microscopiques :

$$Z = \sum_{\lambda} e^{-\beta \varepsilon_{\lambda}}$$

Fonction de distribution radiale :

Diffusion des neutrons et simulations par éléments finis → Description des fluides par la probabilité de présence d'une particule à distance donnée d'une autre.

$$g(r) = \frac{1}{NV\rho_0} \sum_i \left\langle \sum_{j \neq i} \delta(r - \|\vec{r}_{i,j}\|) \right\rangle$$



Motivations du stage

1960 -

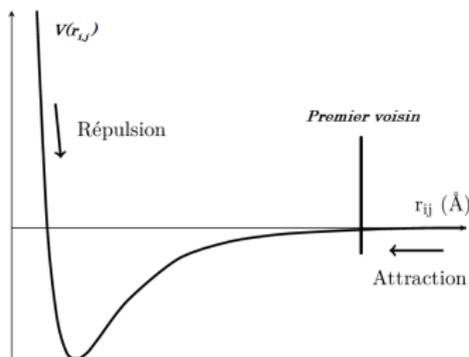
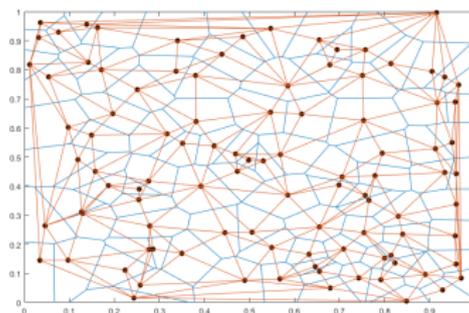
Formalisme pour décrire les fluides par les cellules de Voronoï, puis extension aux triangles de Delaunay.

Pourquoi Voronoï : Description du fluide par tout l'environnement proche d'une particule - construction à N corps

Pourquoi Delaunay : retranscrit les interactions de courte portée :

$$\varepsilon_p = \sum_{\langle i,j \rangle} V(r_{i,j})$$

Motivation : Les propriétés des triangles de Delaunay sont mal connues



Contexte

Soit un fluide en interaction de courte portée représenté par des particules ponctuelles placées aléatoirement.

$$Z = \sum_{\lambda} e^{-\beta \varepsilon_{\lambda}}$$

On écrit l'énergie tel que :

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_{\text{triangles de Delaunay}} \varepsilon_T$$

Et la fonction de partition devient :

$$Z_C = V^N \int P(T_1 \dots T_{\tau}) e^{-\frac{\beta}{2} \sum T_j \varepsilon(T_j)} dT_1 \dots dT_{\tau}$$

Si on fait l'approximation des triangles non corrélés :

$$P(T_1 \dots T_{\tau}) \simeq P(T_1) \dots P(T_{\tau})$$

Il est possible de factoriser la fonction de partition par triangle :

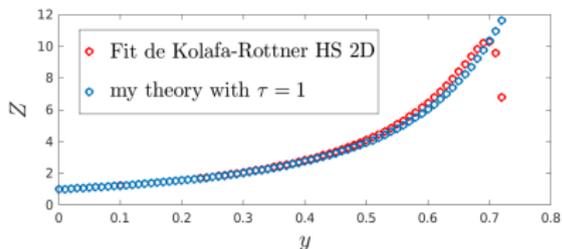
$$Z_C \simeq V^N \left(\int P(T) e^{-\frac{\beta}{2} \varepsilon(T)} \right)^N$$

Avec pour le gaz parfait $P(T)$ qui dérive de la fonction de densité de probabilité :

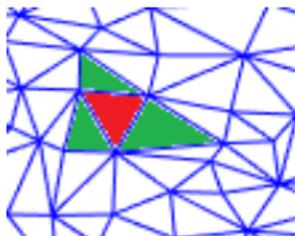
$$f(r) = \frac{4\pi^{\frac{5}{2}} \lambda^2 \Gamma^2(\frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{5}{2})} \Delta_2 r^4 e^{-\pi \lambda r^2}$$

Problématique

→ Fit expérimental de Kolafa-Rottner (rouge) et prédictions par le développement sur les triangles de Delaunay pour un gaz parfait de sphères dures : équation d'état $Z = \frac{PV}{Nk_B T}$ en fonction de la densité $y = \frac{\pi \rho \sigma^2}{4}$



→ Les erreurs peuvent provenir de l'approximation $P(T_1 \cdots T_\tau) \simeq P(T_1) \cdots P(T_\tau)$.



**Comment justifier
l'approximation et en quelle
mesure est elle acceptable ?**

**Si oui, les écarts sont ils
expliquables ?**

Méthodologie

Méthodologie :

- Construction des grandeurs :
 - Réseau de Delaunay pour un gaz parfait
 - Distances
- Etude des corrélations des aires des triangles
- Etude des corrélations des orientations des triangles

Réseau de gaz parfait

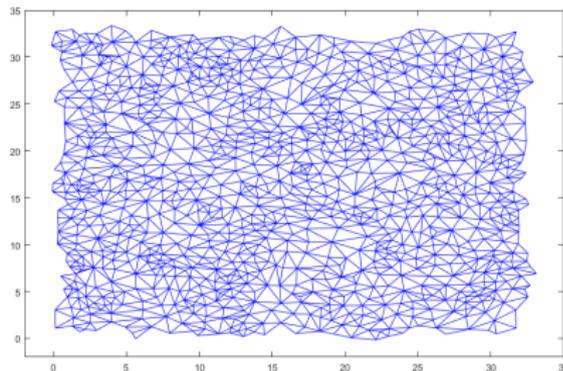
Soit une configuration de 1000 points aléatoires

Contrainte

Conditions limites périodiques :

→ s'affranchir des effets de bords
de l'enveloppe convexe

→ Tous les triangles jouent le
même rôle statistique



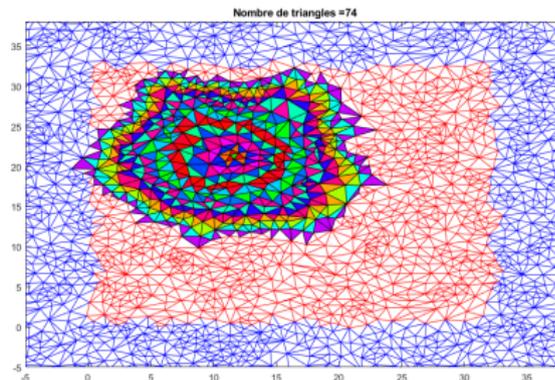
Distances

Soit une configuration de 1000 points aléatoires de densité 1 triangulée selon Delaunay à conditions limites périodiques.

Définition

Triangles voisins : deux triangles sont voisins si et seulement si ils possèdent une arête en commun

Distance : deux triangles i et j sont à distance k entière l'un de l'autre, k étant le nombre de couches de voisins qu'il faut traverser pour joindre les deux triangles



Fonction de corrélation d'aires

Soit i et j deux triangles du réseau.

Définition de la fonction de corrélation :

$$C_A = \langle A_i A_j \rangle - \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle = \langle A_i A_j \rangle - \langle A_i \rangle^2$$

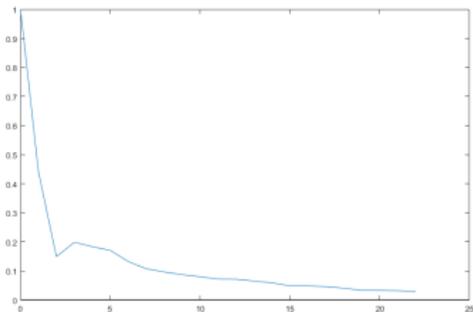
On s'intéresse aux corrélations des aires en fonction de la distance ν définie précédemment.

$$C_A(\nu) = \left\langle \sum_{\text{triangles}} A_{\text{triangle}} \sum_{\text{triangles voisins } \nu} A_{\text{triangle voisin } \nu} \right\rangle - \left\langle \sum_{\text{triangles}} A_{\text{triangle}} \right\rangle$$

Remarque : Pour $N \gg 1$,

$$\left\langle \sum_{\text{triangles}} A_{\text{triangle}} \right\rangle \simeq \frac{S}{\text{Nb triangles}} = \frac{N}{2N} = \frac{1}{2}$$

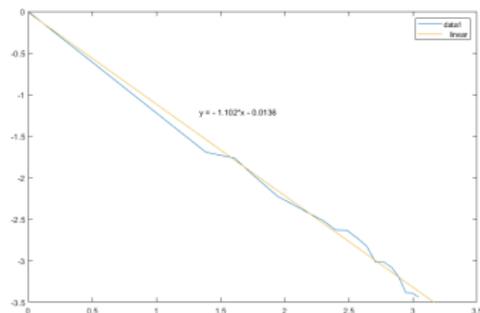
Fonction de corrélation d'aires



Fonction de corrélation normalisée des aires en fonction de la distance, statistique sur 250 configurations.

Curiosité : Pour $\nu = 3$: creux de corrélation

Développement aux longues distances en \log/\log : $y \approx -1.102x$ (+constante $\ll 1$)



→ corrélations longues portées :

$$C_A(\nu) \approx 0.96 \nu^{-1.1}$$

→ exposant 1.1 dû aux effets de taille finie ?

Fonction de corrélation d'orientations

Orientation d'un triangle : Direction définie par le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de la matrice d'inertie du triangle.

$$I = \begin{pmatrix} \int_S y^2 f(x, y) dx dy & - \int_S xy f(x, y) dx dy \\ - \int_S xy f(x, y) dx dy & \int_S x^2 f(x, y) dx dy \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{diag}} \overleftrightarrow{V} = \text{Vect}(\max(\lambda_1, \lambda_2))$$

C'est une direction !

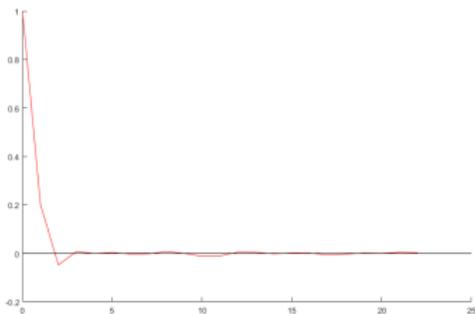
On définit la fonction de corrélation alors :

$$C_O = \langle (\overleftrightarrow{V}_i \overleftrightarrow{V}_j)^2 \rangle - \frac{1}{2}$$

Qui se réécrit :

$$C_O(\nu) = \left\langle \sum_{\text{triangles}} \sum_{\text{voisins } \nu} (\overleftrightarrow{V}_{\text{triangle}} \cdot \overleftrightarrow{V}_{\text{triangle voisin } \nu})^2 \right\rangle - \frac{1}{2}$$

Fonction de corrélation d'orientations

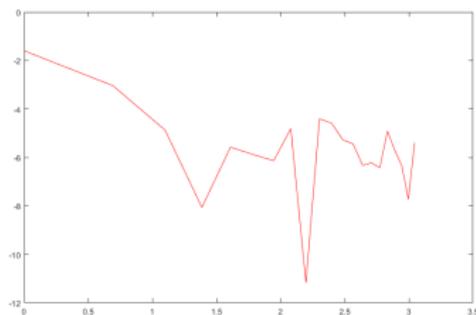


Fonction de corrélation normalisée des orientations en fonction de la distance, statistique sur 250 configurations.

→ Disparition rapide des corrélations

Curiosité : Pour $\nu = 3$: on retrouve le creux de corrélation

Développement aux longues distances en log/log :



→ impossible de conclure à cause du bruit

Bilan final

Corrélations d'aires

- Corrélations à longue portée : longueur d'extinction à 10% : $\lambda \approx 8.1$
- Observation d'allées de triangles d'aires équivalentes.
- Creux de corrélation aux 3^e voisins → fiable au franchissement des allées ?

Corrélations d'orientations

- Corrélations à courte portée : extinction après 4 voisins
- Creux de corrélation aux 3^e voisins → fiable au franchissement des allées ?

Conclusion :

Hypothèse d'indépendance des triangles de Delaunay non acceptable mais néanmoins pertinente.

→ Pour aller plus loin :

Comment expliquer que cette hypothèse marche ?

Comment expliquer le creux de corrélation aux 3^e voisins ?

Que se passe-t'il si on ordonne légèrement le système ?

Ordination du système

Construction

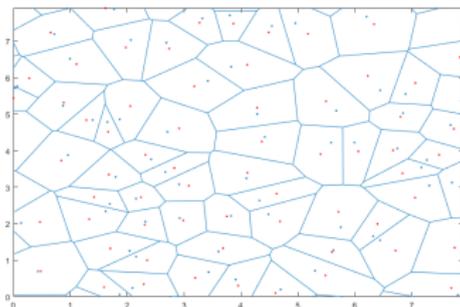
Soit un ensemble de gaz parfait et la tessellation de Voronoï associée au gaz parfait

On déplace à chaque pas la particule génératrice d'une cellule sur le centre de masse de la cellule de Voronoï associée.

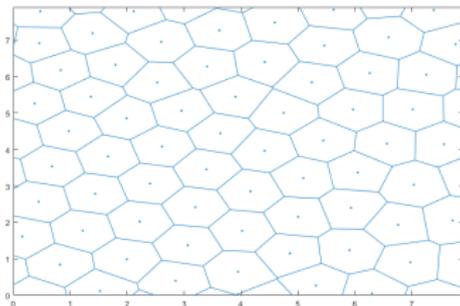
→ Ordination du système vers un réseau en nids d'abeilles

→ Réseau de Delaunay tend vers un réseau triangulaire équilatéral (structure cristalline)

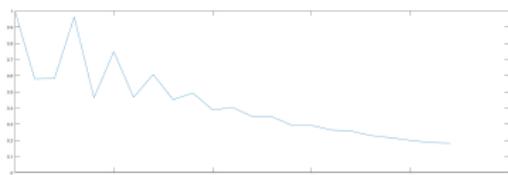
→ Perte d'amplitude de corrélation :
 $A(0) \sim \frac{1}{n}$



Ordination par algorithme de Lloyd



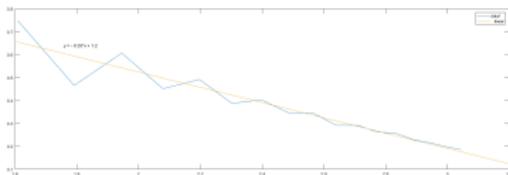
Evolution des fonctions de Corrélation



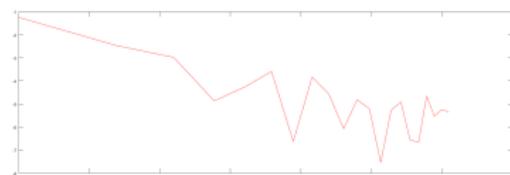
Fonction de corrélation des aires après 10 ordinations



Fonction de corrélation des orientations après 10 ordinations



Représentation longue portée en échelle semi-logarithmique



Représentation longue portée en échelle log/log

→ Les fonctions de corrélations ont l'air d'augmenter en amplitude mais il est difficile de conclure.