Frank Redig
IMAPP
Radboud Universiteit Nijmegen
Heyendaalseweg 135
6525 AJ Nijmegen
f.redig@math.ru.nl

Onderzoek

Hydrodynamische limieten en de pijl van de tijd

Op 1 juli 2011 organiseert het IMAPP, het onderzoeksinstituut voor wiskunde, sterrenkunde en deeltjesfysica van de Radboud Universiteit, het symposium 'The Arrow of Time'. In aanloop naar dat symposium beschrijft Frans Redig van het IMAPP in dit artikel een aantal aspecten van het 'Boltzmann-programma'.

In dit artikel geef ik een persoonlijke selectie van een aantal aspecten van het 'Boltzmann-programma'. Ik spits mij toe op het afleiden van hydrodynamische vergelijkingen vanuit een microscopische dynamica en beperk me tot de context van klassieke of stochastische microdynamica's. Op het IMAPP-symposium 'The Arrow of Time' zal Jean Bricmont aspecten van dit thema nader toelichten, in het bijzonder voor deterministische dynamica's, waar belangrijke recente ontwikkelingen zijn.

De pijl van de tijd

Vele alledaagse verschijnselen zijn irreversibel. Suiker lost op in onze koffie, en wordt (gelukkig) niet weer een klontje, een glas valt van de tafel in scherven die zich (spijtig genoeg) niet terug verzamelen tot een glas. Irreversibiliteit manifesteert zich ook in de levensloop van organismen, en in het proces van evolutie door natuurlijke selectie. Nooit zien we een organisme opstaan uit de dood, jonger worden, om uiteindelijk één enkele cel te worden die splitst in twee voortplantingscellen. Evenmin zien we dat uitgestorven soorten opnieuw ontstaan uit bestaande soorten.

De tijd heeft dus in vele alledaagse verschijnselen blijkbaar een voorkeursrichting: 'de pijl van de tijd'. Deze pijl van de tijd manifesteert zich ook in een *ruimtelijke* voorkeursrichting van stromingen: warmte stroomt van warm naar koud, deeltjes stromen van hoge naar lage chemische potentiaal.

In deze uiteenlopende irreversibele verschijnselen is de verklaring van de irreversibiliteit niet noodzakelijk steeds dezelfde. De irreversibiliteit geassocieerd aan organismen en evolutie is wellicht verschillend van de irreversibiliteit van het oplossen van suiker in koffie. We zullen ons voor dit stukje echter toespitsen op de 'pijl van de tijd' zoals ingevoerd door Arthur Eddington in het bekende boek *The Nature of the Physical World* uit 1928.

In de thermodynamica correspondeert deze pijl van de tijd met de tweede hoofdwet: de richting waarin de entropie toeneemt. De tweede hoofdwet is echter een *statistische* wet, analoog aan de wet van de grote aantallen in de kansrekening, en verschillend van (klassiek) *absolute* natuurwetten zoals de wetten van Kepler of de wet van Coulomb.

Onderliggend aan irreversibele macroscopische verschijnselen is een microwereld van chaotisch door elkaar bewegende deeltjes. Reeds in de eerste eeuw voor onze jaartelling gebruikte Lucretius de chaotische beweging van stofdeeltjes, zichtbaar in het zonlicht, als een metafoor voor deze microwereld. Hij was zo een voorloper van Robert Brown die de grillige trajecten van kleine deeltjes waarnam onder zijn microscoop. Richard Feynman geeft zijn bekende samenvatting over de microwereld aan als een van de fundamenteelste inzichten van de moderne wetenschap: "All things are made of atoms, little particles that move around in perpetual motion, attracting each other when they are a little distance apart, but repelling upon being squeezed into one another."

In de beweging van deze deeltjes valt geen 'pijl van de tijd' te bespeuren, ofwel de microdynamica is reversibel. Stellen we ons bijvoorbeeld voor dat we een druppel inkt in water laten oplossen en vervolgens van alle individuele inktdeeltjes een film maken die we omgekeerd in de tijd en in slow motion afspelen. Het publiek zal dit wellicht een lange en saaie vertoning vinden, maar zal verder niets bijzonders opmerken. Als aan het einde van de voorstelling echter het globale resultaat van alle trajecten wordt geprojecteerd, ziet men hoe uit een homogeen mengsel van inkt en water spontaan een inktdruppel gevormd wordt. Het (niet-ingewijde) publiek zal zich dan bij de neus genomen voelen door een spitsvondige goocheltruc. Als enkele aanwezigen een toevallig aanwezige natuurkundeprofessor wakker maken en zijn mening vragen over dit ongewone verschijnsel, mompelt deze iets over 'uitzonderlijke beginvoorwaarden'.

Het omkeren van de tijd en de beginsnelheden in een traject dat voldoet aan de bewegingsvergelijkingen, geeft immers opnieuw

Illustratie: Ryu Tajiri

Ludwig Boltzmann door de jaren heen

een traject dat voldoet aan de bewegingsvergelijkingen. Deze reversibiliteit van de microdynamica impliceert echter niet dat de macroverschijnselen ook reversibel zijn.

Voor deze schijnbare 'irreversibiliteitsparadox' gaven Thomson, Maxwell en Boltzmann in de negentiende eeuw reeds een verklaring, die in de woorden van Lebowitz [16] "de tand des tijds doorstaan heeft", zie bijvoorbeeld [1].

Voor een gegeven macrotoestand zijn er veel hiermee consistente microtoestanden: de Boltzmann-entropie is hiervoor een maat. Indien we enkel de macrotoestand specificeren, dan correspondeert dit met een beginvoorwaarde die uniform is op de verzameling van alle microtoestanden die consistent zijn met de gegeven macrotoestand: deze onzekerheid over de begintoestand introduceert toeval in de (verder deterministische) dynamica. Met overweldigende waarschijnlijkheid zal de macrotoestand evolueren, zodanig dat het aantal corresponderende microtoestanden (of de maat van de verzameling microtoestanden) toeneemt: dit is precies de toename van de Boltzman-entropie in de loop van de tijd.

De wiskundige details van dit 'Boltzmann-programma' zijn echter verre van triviaal in concrete systemen. Ten eerste ligt de probleemstelling zelf hier al niet voor de hand, namelijk hoe we macrotoestanden goed kunnen *definiëren*. Vervolgens moet nog de stap gezet worden om een *autonome* irreversibele evolutie voor de macrovariabelen af te leiden in de limiet van grote systemen. In [3] en [16] wordt een goed overzicht gegeven van de moeilijkheden en verwarringen rond deze problematiek, in het bijzonder rond de rol van 'chaos' in de microdynamica voor het afleiden van irreversibele macrodynamica.

Irreversibele macroscopische vergelijkingen

Lang voor het bestaan van atomen experimenteel werd aangetoond, gebruikte men reeds vergelijkingen die verschijnselen zoals het oplossen van inkt in water (wet van Fick), of het verspreiden van warmte (wet van Fourier) goed beschrijven. Hierbij gaat men meestal uit van een continuümbeschrijving van de vloeistof of gas (zodat men kan spreken van bijvoorbeeld 'infinitesimale vloeistofelementjes'). Gebruikmakend van behoud van massa en het (intuïtief voor de hand liggende) feit dat (voor niet al te grote gradiënten) de stroom evenredig is met de gradiënt van de dichtheid, komt men via een standaard afleiding tot de (mogelijk niet lineaire) diffusievergelijking.

Die diffusievergelijking beschrijft een irreversibele evolutie: ze bevat een eerste tijdsafgeleide versus een tweede afgeleide in de ruimtelijke coördinaten: ze blijkt dus de tweede hoofdwet van de thermodynamica automatisch te volgen.

Hoewel de korte afleiding van de diffusievergelijking een (niet al te ingewijde) lezer misschien kan overtuigen, voelt iedereen aan dat het beschouwen van een vloeistof of gas als een continuüm een benadering is die in deze afleiding niet kwantitatief wordt verantwoord. De diffusievergelijking kan bijvoorbeeld niet gebruikt worden voor één inktmolecule bewegend tussen vier watermoleculen. Indien we echt beschikten over een wiskundig rigoureuze afleiding vertrekkend van de microscopische beweging van atomen, dan zouden we ook weten waarom de afleiding niet werkt voor vijf deeltjes, en hoeveel deeltjes we ongeveer nodig hebben om een redelijke benadering te hebben, of op z'n minst wat de rol is van 'veel deeltjes' (bijvoorbeeld komen we tot de vergelijking na het nemen van een limiet).

Dat voor het afleiden van macroscopische vergelijkingen een *schalingslimiet* in ruimte en tijd moet worden genomen, werd voor het eerst (wiskundig) duidelijk gesteld in een artikel van Morrey [15] uit 1955. Eerder hadden Boltzmann en Chapman-Enskog vanuit een theoretisch-fysisch standpunt het belang van schaling in de afleiding van hydrodynamica reeds ingezien. De afleiding van hydrodynamische vergelijkingen, en meer in het algemeen het wiskundig onderbouwen van het 'Boltzmann-programma' is een belangrijk onderdeel van Hilberts zesde probleem en is voor een groot deel nog open.

Flippende spins

Een karikaturaal eenvoudige dynamica die goed illustreert hoe irreversibel gedrag kan ontstaan uit een microscopisch reversibele dynamica is onafhankelijke spinflip dynamica. We bekijken hierbij N 'spins' die de waarde ± 1 kunnen aannemen. Gegeven een beginconfiguratie flippen we iedere spin onafhankelijk van alle andere spins op random tijden die onafhankelijk en exponentieel verdeeld zijn met parameter 1. De evolutie van de individuele spins is dan duidelijk reversibel: zowel voorwaarts als achterwaarts in de tijd zien we enkel random flips van spins op random tijden. Een natuurlijke macrogrootheid in deze context is de magnetisatie:

$$m_N(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i(t)$$

met $\sigma_i(t)$ de waarde van de i-de spin op tijdstip t.

Indien op tijdstip $t = 0$ de limiet $\lim_N m_N(0) = m(0)$ bestaat, dan volgt uit de wet van de grote aantallen dat op een later tijdstip

$$m_N(t) \to m(t) = m(0)e^{-2t} \tag{1}$$

als $N \to \infty$, met kans 1. Dit geeft dus een irreversibele relaxatie naar de toestand met maximale Boltzmann-entropie $m = 0$.

Omdat de dynamica zeer eenvoudig is, kan echter veel meer gezegd worden. Voor eindige (grote) N kunnen we de kans op een afwijkend traject in leidende orde berekenen met stellingen uit de theorie van de grote afwijkingen (stelling van Mogulskii). Noemen we $m_N = \{m_N(t) : 0 \le t \le 1\}$ het traject van de magnetisatie, dan geldt voor de kans op een traject $\gamma : [0,1] \to [-1,1]$,

$$\mathbb{P}\left(m_N \approx \gamma\right) \approx \exp(-N\mathcal{I}(\gamma)). \tag{2}$$

Hierbij moeten we $\approx$ interpreteren in de zin van 'het large deviation principle', ingevoerd door Varadhan (zie bijvoorbeeld [19] voor een uitstekend overzichtsartikel over large deviations, zie ook de bijdrage in NAW, september 2008, van Frank den Hollander over het werk van Varadhan, [9]), ofwel,

$$\limsup_{N\to\infty} \frac{1}{N}\log \mathbb{P}\left(m_N \in F\right) \le -\inf_{\gamma\in F}\mathcal{I}(\gamma) \tag{3}$$

voor F een gesloten verzameling trajecten, en

$$\liminf_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log \mathbb{P}(m_N \in G) \geq - \inf_{\gamma \in G} \mathcal{I}(\gamma) \qquad (4)$$

voor G een open verzameling trajecten.

Hierbij wordt $\mathcal{I}$, de entropiefunctie van het grote-afwijkingenprincipe, gegeven door

$$\mathcal{I}(\gamma) = \int_0^1 \mathcal{L}(\gamma_s, \dot{\gamma}_s)\, ds \qquad (5)$$

met $\mathcal{L}$ de 'macro-Lagrangiaan' gelijk aan de Legendre getransformeerde van een 'macro-Hamiltoniaan'

$$\mathcal{L}(m, v) = \sup_p (pv - H(m, p)) \qquad (6)$$

met

$$H(m, p) = \frac{1+m}{2}(e^{-2p} - 1) + \frac{1-m}{2}(e^{2p} - 1).$$

We vermelden deze functies hier enkel om aan te geven dat ze expliciet bekend zijn, en we dus de leidende orde van de kans op een afwijkend (van de macrodynamica) traject ook expliciet kunnen berekenen. In het bijzonder is $\mathcal{I}(\gamma) = 0$ voor γ een typisch macrotraject $\gamma_t = \gamma_0 e^{-2t}$. Verder, indien de tijdsafgeleide $\dot{\gamma}$ (in L^1-zin) niet bestaat dan is $\mathcal{I}(\gamma) = \infty$, en gaat de kans op het traject sneller dan exponentieel in N naar nul. Samenvattend:

- De irreversibele macrodynamica volgt uit de reversibele microdynamica door het nemen van de limiet $N \to \infty$. Dit is een manifestatie van de wet van de grote aantallen. De macrodynamica is consistent met het stijgen van de Boltzmann-entropie (tweede hoofdwet).
- Voor eindige (grote) N kunnen we in leidende orde berekenen dat de kans op een afwijkend traject (bijvoorbeeld een traject waar de Boltzmann-entropie afneemt) exponentieel klein is in N.

Het feit dat de dynamica stochastisch is, maakt de afleiding van de irreversibele macrodynamica technisch *makkelijker*, maar is geen *vereiste*.

We kunnen de spins ook laten flippen op discrete tijden, via een deterministisch mechanisme. Hier is een mogelijk voorbeeld. Voor iedere $i = 1, \ldots, N$ kiezen we een getal $x_i \in [0, 1]$. Deze getallen evolueren volgens een 'chaotische afbeelding': $x_i(n+1) = (2x_i)(\mathrm{mod} 1)$, en de geassocieerde spin is $\sigma_i(n) = 1$ indien $x_i(n) \in [0, 1/2)$, $\sigma_i(n) = -1$ indien $x_i(n) \in [1/2, 1]$. Voor (Lebesgue) bijna alle keuzes van x_i zullen deze deterministisch evoluerende spins ook aanleiding geven tot een macrodynamica die vanuit een beginmagnetisatie naar magnetisatie nul relaxeert. De formules, in het bijzonder het analogon van (2),(5) en (6), worden iets gecompliceerder, maar kwalitatief verandert er niets aan de macro-evolutie.

Hydrodynamische limieten

In de jaren 70 van de vorige eeuw ontstond het vakgebied 'interacting particle systems' (IPS), onder meer geïnspireerd door een belangrijk artikel van Spitzer [17] en werk van Dobrushin, Vasilyev en Toom over probabilistische cellulaire automaten [5]. In 1985 verscheen de eerste samenvatting van dit gebied [14], die tot op heden nog steeds een standaard referentie is voor IPS.

Een belangrijk onderdeel van dit gebied is het onderwerp 'hydrodynamische limieten': het rigoureus afleiden van macroscopische vergelijkingen vanuit een microscopische dynamica van het type IPS. Dobrushin noemde voor deze doeleinden IPS dan ook 'caricatures of hydrodynamics' en gaf zelf één van de eerste afleidingen van de Euler-vergelijkingen voor onafhankelijke deeltjes [6]. Uitstekende referenties op dit gebied zijn [4, 10, 18]. De IPS die gebruikt worden voor hydrodynamische limieten zijn stochastische dynamica's waar (mogelijk oneindig) veel deeltjes op toevallige wijze bewegen op een (mogelijk oneindig) rooster en met elkaar interageren. Een veel bestudeerd voorbeeld is het symmetrische exclusie proces, waarbij de deeltjes random en symmetrisch naar links of naar rechts kunnen springen en met elkaar interageren doordat ze niet op dezelfde roosterplaats mogen zitten (exclusie). Complexere interacties tussen de deeltjes zijn mogelijk in bijvoorbeeld Kawasaki-dynamica, of in zero-range processen.

Voor de context van hydrodynamische limieten is het van cruciaal belang dat er een behouden grootheid is. Voor het vervolg van dit verhaal is dit de deeltjesdichtheid.

Het stochastische karakter van de dynamica in IPS is een technische *vereenvoudiging* (ten opzichte van bijvoorbeeld Hamiltoniaanse dynamica's van oneindig veel deeltjes). Dit toevallige karakter van de microscopische dynamica is met name niet de *oorzaak* van de irreversibiliteit in de macrovergelijking. In een deterministische dynamica is de enige bron van toeval de onzekerheid over de begintoestand, en dit is technisch een veel moeilijkere situatie; conceptueel verandert er echter niets.

Omdat de dichtheid behouden is, heeft de IPS-dynamica een familie extreem invariante of ergodische kansmaten, geparametriseerd door de mogelijke waarden van de dichtheid.

Hydrodynamische limiet: probleemstelling

De natuurlijke macrogrootheid in deze context is het *empirische dichtheidsprofiel*, voor de eenvoud hier gedefinieerd in het geval waar de deeltje op een ééndimensionaal rooster $\{0, \ldots, N\}$ bewegen,

$$\mu_N(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \eta_i(tN^2)\delta_{i/N}. \qquad (7)$$

Hierbij is $\eta_i(N^2 t)$ het aantal deeltjes op roosterplaats i op tijdstip $N^2 t$.

$\mu_N(t)$, een random kansmaat op het interval $[0, 1]$, kunnen we bekijken als het 'oneindig-dimensionale' analogon van de macrogrootheid 'magnetisatie' $m_N(t)$ uit de vorige sectie. Omdat de deeltjes stochastisch bewegen is het traject van het dichtheidsprofiel , $\{\mu_N(t) : 0 \leq t \leq 1\}$, een random traject met waarden in de ruimte van kansmaten op het interval $[0, 1]$.

In de overgang van de microscopische configuratie η (die de volledige informatie bevat hoeveel deeltjes op elke roosterplaats zitten) naar het macroscopische dichtheidsprofiel (die veel globalere informatie geeft) worden ruimte en tijd *herschaald*. Elk deeltje op 'micropositie' $i \in \{0, \ldots, N\}$ geeft een bijdrage $1/N$ op 'macropositie' $i/N \in [0, 1]$, en de tijd wordt herschaald met een factor N^2. De herschaling in de tijd is noodzakelijk als we bedenken dat om het profiel te veranderen orde N deeltjes verplaatst moeten worden, en dit duurt gemiddeld een tijd van orde N^2 (omdat de sprongen symmetrisch naar links en naar rechts zijn). Merk op dat we in de karikaturale dynamica van de vorige sectie de tijd niet hoefden te herschalen, omdat er voor deze dynamica geen behouden grootheid is.

Met verschillende schalingen in ruimte en tijd — hier de zogenaamde diffusieve herschaling — anticiperen we reeds op de vergelijking die we willen verkrijgen in de limiet $N \to \infty$: een parabolische vergelijking met een eerste afgeleide naar de tijd en tweede afgeleiden naar de ruimtelijke variabelen.

De bewering "het deeltjessysteem heeft de diffusievergelijking als *hydrodynamische limiet*" kan dan precies geformuleerd worden

Het graf van Ludwig Boltzmann in Wenen met bovenaan de entropieformule

als volgt: Indien

$$\mu_N(0) \to \rho(x)dx \tag{8}$$

als $N \to \infty$, ofwel, op tijdstip $t = 0$ is er een welgedefinieerd dichtheidsprofiel, ρ, dan

$$\mu_N(t) \to \rho_t(x)dx,$$

ofwel, op macrotijd t is er opnieuw een welgedefinieerd dichtheidsprofiel. Hierbij is dan $\rho_t(x)$ de oplossing van de diffusievergelijking met beginvoorwaarde $\rho_0 = \rho$.

Deze uitspraak kan dan meestal makkelijk worden uitgebreid naar de padenruimte, ofwel, indien (8) geldt, dan convergeert het hele *random* traject $(\mu_N(t))_{0\le t\le 1}$ naar het *deterministische* traject $\{\rho(t,x)dx : 0 \le t \le 1\}$ met $\rho(t,x)$ de oplossing van de macroscopische vergelijking (convergentie is hierbij zwakke convergentie in de ruimte van trajecten, uitgerust met de Skorohod-topologie). Deze uitbreiding is analoog aan de uitbreiding van de centrale limietstelling naar het invariantieprincipe.

Hiermee beschikken we dus nu over een *welgedefinieerde* bewering die men in concrete vrij algemene IPS-dynamica's ook rigoureus kan bewijzen.

Verschillende vergelijkingen (met mogelijk andere herschalingen van ruimte en tijd) kunnen voorkomen als hydrodynamische limiet. We hebben ons hier toegespitst op de diffusievergelijking. Op kortere tijdschalen — tijd herschaald als Nt, de zogenaamde Euler-herschaling — verkrijgt men vergelijkingen van het type hyperbolische behoudswetten zoals de Euler-vergelijking, de Burgers-vergelijking. De vergelijkingen die via Euler-herschaling gevonden worden zijn typisch nog reversibel (bijvoorbeeld de Euler-vergelijking). Het irreversibele dissipatieve gedrag manifesteert zich pas op langere tijdschalen (diffusieve tijdschaal N^2t versus Nt) of in correcties op de Euler-vergelijkingen (zogenaamde Navier–Stokes correcties).

Replacementlemma

Om een idee te krijgen van de moeilijkheden die men tegenkomt in het bewijs van zo'n hydrodynamische limiet, volstaat het in te zien dat er een fenomenale reductie van variabelen optreedt. Indien we de tijdsevolutie bekijken van de grootheid $\mu_N(t)$ dan zullen hierin behalve het dichtheidsprofiel ook allerlei 'andere velden' (empirische gemiddelden van andere functies) een rol spelen (tenzij in zeer uitzonderlijke gevallen van zogenaamde zelfduale modellen). Er zullen bijvoorbeeld termen verschijnen van de vorm

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \eta_i(N^2t)\eta_{i+1}(N^2t), \tag{9}$$

wat niet kan uitgedrukt worden in termen van het dichtheidsprofiel $\mu_N(t)$.

De cruciale stap bestaat erin om aan te tonen dat dergelijke empirische gemiddelden in de limiet $N \to \infty$ kunnen worden benaderd door functies van het *dichtheidsprofiel*. Intuïtief kunnen we dit aanvoelen omdat het dichtheidsveld het traagst fluctuerende veld is, geassocieerd aan de behouden grootheid.

Het cruciale idee hierbij is dat de kansverdeling van de configuratie op *macrotijdschalen* N^2t effectief kan worden benaderd (in de zin van relatieve entropie) door een *lokale* evenwichtstoestand. Dit is een kansverdeling op configuraties gekarakteriseerd door een traag (in microscopische ruimte) variërend dichtheidsprofiel en op natuurlijke wijze afgeleid uit de ergodische maten die geparametriseerd worden door de dichtheid. Hieruit volgt dan dat de empirische gemiddelden zoals (9) kunnen worden vervangen worden door *gemiddelden* in deze lokale evenwichtstoestand, geparametriseerd door het dichtheidsprofiel.

Deze cruciale stap wordt in de literatuur over hydrodynamische limieten het 'replacementlemma' genoemd. Via dit replacement lemma wordt de 'hiërarchie van velden' die optreedt in de evolutie van het dichtheidsprofiel na het nemen van de macroscopische limiet 'gesloten' en is het dichtheidsprofiel de enige relevante parameter die nog een rol speelt.

Het replacementlemma werd voor het eerst bewezen in werk van Guo, Papanicolaou en Varadhan [12] in de context van interagerende diffusies, en de daar ontwikkelde methode heet sindsdien de GPV-methode. De GPV-methode werkt goed voor het afleiden van parabolische vergelijkingen in vrij algemene IPS-setting. Later werden allerlei alternatieve methoden ontwikkeld voor het afleiden van hyperbolische vergelijkingen (conservation laws), door onder meer Yau, Rezakhanlou, Fritz en Tóth. Deze methoden dienen steeds om een versie van lokaal evenwicht en het 'replacementlemma' te bewijzen.

Grote afwijkingen

In 2007 werd aan Varadhan de Abelprijs uitgereikt "voor zijn fundamentele bijdragen aan de kansrekening en in het bijzonder voor het scheppen van een geünificeerde theorie van de grote afwijkingen" (zie [9] voor de NAW bijdrage hierover).

Hierin speelde zijn werk over grote afwijkingen in de context van hydrodynamische limieten voor IPS een belangrijke rol. Varadhan ging in werk met Donsker [8], Guo en Papanicolaou, en later in werk met Kipnis en Olla, nog een stapje verder dan enkel het afleiden van de hydrodynamische limiet. Zijn doel was om een principe van grote afwijkingen aan te tonen voor het traject van het empirische dichtheidsprofiel $\mu_N = \{\mu_N(t) : 0 \le t \le 1\}$. Dit betekent

$$\mathbb{P}\left(\mu_N \approx \gamma\right) \approx \exp\left(-N\mathcal{I}(\gamma)\right), \qquad (10)$$

formeel te interpreteren in de zin van het grote-afwijkingenprincipe (3), (4). Hierbij is γ nu een traject van kansmaten: een dichtheidsprofiel als functie van de tijd, mogelijk afwijkend van een traject dat de macroscopische vergelijking volgt. Kort door de bocht willen we te weten komen wat de leidende orde is van de exponentieel kleine kans dat het empirische dichtheidsprofiel een "verkeerd traject volgt", in plaats van zich te gedragen "zoals het hoort", oftewel, volgens de macroscopische vergelijking. We kunnen (10) dus beschouwen als het oneindig-dimensionale analogon van (2), in plaats van de magnetisatie hebben we nu een dichtheidsprofiel. Het probleem, hoewel technisch veel gecompliceerder, is conceptueel echter van dezelfde aard als het bepalen van de kleine kans dat bij een groot aantal muntworpen de fractie worpen 'kop' afwijkt van $\frac{1}{2}$.

Indien γ de oplossing is van de diffusievergelijking met beginvoorwaarde γ_0 dan is het traject 'typisch' en is dus $\mathcal{I}(\gamma) = 0$. Buiten een omgeving van de oplossing van de macroscopische vergelijking is $\mathcal{I}(\gamma) > 0$ en de kans op een dergelijke afwijking is dus exponentieel klein.

In de afleiding van (10) en in het verkrijgen van een uitdrukking voor $\mathcal{I}(\gamma)$ wordt een 'superexponentiële versie' van het replacementlemma gebruikt, oftewel, de kans dat een empirisch gemiddelde van de vorm (9) afwijkt van de benaderende functie van het empirische dichtheidsveld gaat sneller naar nul dan e^{-aN} voor elke $a > 0$. Daarom kan in de berekening van de functie $\mathcal{I}$ in (10) het replacementlemma nog steeds gebruikt worden, de afwijkingen hiervan spelen geen rol zelfs in de grote-afwijkingenkansen. Meer concreet betekent dit dat bijvoorbeeld zelfs in *exponentiële uitdrukkingen* zoals

$$\exp\left(\sum_{i=1}^{N} \eta_i(N^2t)\eta_{i+1}(N^2t)\right)$$

het empirische gemiddelde

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \eta_i(N^2t)\eta_{i+1}(N^2t)$$

kan worden vervangen door de benaderende functie van het dichtheidsprofiel. Verrassend genoeg is het bewijs van deze sterkere versie van het replacementlemma nauwelijks moeilijker dan dat van de zwakkere vorm.

Oneindig dimensionale Cramer-tilting

Gebruikmakend van de superexponentiële versie van het replacementlemma kan een *expliciete* uitdrukking verkregen worden voor $\mathcal{I}(\gamma)$, en dus voor de kans dat het traject van het empirische dichtheidsprofiel afwijkt van de oplossing van de macroscopische vergelijking. Het idee hierbij is dat de leidende orde van de kans op een afwijkend traject wordt gevonden door deze afwijking op een zo 'waarschijnlijk mogelijke' manier (in de entropische zin) te laten gebeuren. Dit is een zeer gebruikelijke strategie in de theorie van de grote afwijkingen, en staat bekend onder de naam 'Cramer-tilting'. We lichten deze strategie kort toe in de context van het symmetrische exclusieproces.

Om het empirische dichtheidsprofiel een gegeven traject γ te laten volgen, hebben we een langzaam (in microscopische lengte-eenheden) variërend veld nodig. Dat wil zeggen, in plaats van de deeltjes met gelijke kans naar links en naar rechts te laten bewegen, laten we ze een stap naar links (rechts) zetten met kans evenredig met $e^{H((i\pm1)/N,t)-H(i/N,t)}$, waarbij H een nader te vinden functie is, bepaald door γ (het traject waarvan we de kans willen bepalen). De hydrodynamische limiet van dit 'zwak-asymmetrische' exclusieproces ('zwak' omdat de asymetrie van orde $1/N$ is) kan bepaald worden en geeft de macroscopische vergelijking

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} &= \frac{1}{2}\frac{\partial^2\rho(x,t)}{\partial x^2}\\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho(x,t)(1-\rho(x,t))\frac{\partial H(x,t)}{\partial x}\right).\end{aligned}$$

We vatten dit nu op als een vergelijking voor H bij gegeven afwijkend traject $\gamma = \{\rho(x,t)dx : 0 \le t \le 1\}$. Ofwel, gegeven γ, lossen we deze vergelijking op naar H. De functie $\mathcal{I}(\gamma)$ wordt dan (op randtermen na) gegeven door

$$\mathcal{I}(\gamma) = \int_0^1\int_0^1 \rho(x,t)(1-\rho(x,t))\left(\frac{\partial H(x,t)}{\partial x}\right)^2 dt\,dx. \qquad (11)$$

In woorden samengevat: om de kans op een gegeven afwijkend traject γ van het dichtheidsprofiel te berekenen, zoekt men eerst naar het 'veld' $E(x,t) = \frac{\partial H(x,t)}{\partial x}$ dat het traject γ genereert als *typisch* traject. Vervolgens moet de 'prijs voor dit veld betaald worden' ('prijs' is hier dan in de zin van 'relatieve entropie'). Deze 'prijs' kan bepaald worden via de berekening van de Radon–Nikodym afgeleide van de symmetrische dynamica naar de asymmetrische dynamica. Deze wordt na toepassing van de superexponentiële versie van het replacementlemma gegeven door

$$\exp\Big(-N\int_0^1\int_0^1 \rho(x,t)(1-\rho(x,t)) \cdot E(x,t)^2\,dx\,dt\Big)$$

wat precies (10) en (11) geeft.

De factor $\rho(1-\rho)$ is de 'mobiliteit' voor het symmetrische exclusieproces, oftewel, indien we een veld E aanleggen dan is de 'drift' van de deeltjes gemiddeld $\rho(1-\rho)E$. In meer algemene IPS moet deze factor vervangen worden door een modelafhankelijke functie van de dichtheid.

Deterministische dynamica's

De toevalligheid in de beweging van de deeltjes in IPS is belangrijk in de *technische details* van de afleiding van de hydrodynamische limiet. Irreversibele macrovergelijkingen zoals de diffusievergelijkingen moeten echter ook rigoureus kunnen worden afgeleid uit zuiver deterministische dynamica's zoals Hamiltoniaanse dynamica. Een voorbeeld van (relatief) succes in dit programma is de afleiding van de Boltzmann-vergelijking uit Hamiltoniaanse dynamica door Lanford [13]. De Boltzmann-vergelijking wordt echter verkregen als een 'kinetische limiet' (de interacties worden mee herschaald) en is enkel geldig voor (zeer) korte tijden ($1/5$ van de typische tijd tussen twee botsingen). Het is dus niet mogelijk om hieruit hydrodynamische vergelijkingen af te leiden die spelen op langere tijdschalen.

Voor deterministische dynamica's is de enige bron van toeval de onzekerheid over de microtoestand bij gegeven macrotoestand, bijvoorbeeld bij gegeven dichtheidsprofiel. In de eenvoudige speelgoeddynamica hebben we reeds laten zien dat deze bron van toeval voldoende is: we kunnen het random flippen van spins vervangen door een deterministische imitatie hiervan.

In de context van hydrodynamische limieten zou hetzelfde moeten gelden. Voor een gegeven macrotoestand (dichtheidsprofiel) hebben we een kansmaat op de verzameling van microscopische beginconfiguraties die hiermee consistent zijn, en voor bijna alle consistente beginconfiguraties zal een macroscopische tijd later het dichtheidsprofiel gegeven worden door een oplossing van de hydrodynamische vergelijking.

Wiskundig is dit probleem dus welgedefinieerd, de vraag is nu voor welke deterministische dynamica's een bewijs kan worden gegeven en of er een analogon is voor het geassocieerde principe van grote afwijkingen zoals we dit kennen in IPS. Recente resultaten zijn afgeleid door Bricmont en Kupiainen [2], en door Dolgopyat en Liverani [7], voor onder meer 'coupled map lattices' (voor eerdere resultaten voor deterministische dynamica's zie bijvoorbeeld [7]). Coupled map lattices (CML) zijn chaotische dynamica's in oneindige dimensie die we verkrijgen via een samenstelling van chaotische dynamica's (zoals uniform expanderende afbeeldingen van het interval $[0,1]$) op individuele coördinaten met een 'koppeling' tussen verschillende coördinaten, bijvoorbeeld van de 'diffusieve' vorm

$$(C(\eta))_i = \eta_i(1-2\epsilon) + \eta_{i-1}\epsilon + \eta_{i+1}\epsilon,$$

waarbij massa wordt uitgewisseld met de buren. CML zijn dus natuurlijke deterministische analoga van IPS.

Voor de afleiding van de diffusievergelijking heeft de CML-dynamica bovendien een behouden grootheid.

Hoewel er dus resultaten zijn, zoals de afleiding van de diffusievergelijking, zijn we voor dergelijke deterministische dynamica's zoals CML nog ver verwijderd van een rijk en volledig beeld zoals we dat hebben voor IPS. Voor realistische Hamiltoniaanse dynamica's is het probleem zelfs nagenoeg volledig open.

Illustratie: Bernhard Reischl

Dankwoord

Met dank aan Aernout Van Enter, Klaas Landsman en Christian Maes voor nuttige opmerkingen en aanvullingen.

Referenties

1 L. Boltzmann, 'On Zermelo's paper "On the mechanical explanation of irreversible processes"', *Ann. Phys.* **60**, pp. 392–398, 1897.

2 J. Bricmont en A. Kupiainen, 'Diffusion in energy conserving coupled maps', preprint available at http://arxiv.org/abs/1102.3831, 2011.

3 J. Bricmont, 'Science of chaos or chaos in science?' (English summary) 'The flight from science and reason', New York, 1995, pp. 131–175, *Ann. New York Acad. Sci.*, **775**, *New York Acad. Sci.*, New York, 1996.

4 A. de Masi, E. Presutti, *Mathematical methods for hydrodynamic limits*, Lecture Notes in Mathematics **1501**, Springer-Verlag, Berlin, 1991.

5 R.L. Dobrushin, V.I. Krioukov en A.L. Toom (eds.), *Stochastic cellular systems: ergodicity, memory, morphogenesis* , Manchester University Press, 1990.

6 R.L. Dobrushin, Ra. Siegmund-Schultze, 'The hydrodynamic limit for systems of particles with independent evolution', *Math. Nachr.* **105**, pp. 199–224, 1982.

7 D. Dolgopyat en C. Liverani, 'Energy transfer in a fast-slow Hamiltonian system', preprint available at http://arxiv.org/abs/1010.3972, 2010.

8 M.D. Donsker, S.R.S. Varadhan, 'Large deviations from a hydrodynamic scaling limit', *Comm. Pure Appl. Math.* **42**, pp. 243–270, 1989.

9 F. den Hollander, 'Abelprijs 2007, S.R. Srinivasa Varadhan', *Nieuw Archief voor Wiskunde*, september 2008, pp. 192–196, 2008.

10 C. Kipnis en C. Landim, 'Scaling limits of interacting particle systems', *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]* **320**, Springer-Verlag, Berlin, 1999.

11 C. Kipnis, S. Olla en S.R.S. Varadhan, 'Hydrodynamics and large deviation for simple exclusion processes', *Comm. Pure Appl. Math.* **42**, pp. 115–137, 1989.

12 M.Z. Guo, G.C. Papanicolaou en S.R.S. Varadhan, 'Nonlinear diffusion limit for a system with nearest neighbor interactions', *Comm. Math. Phys.* **118**, pp. 31–59, 1989

13 O.E. Lanford, 'A derivation of the Boltzmann equation from classical mechanics', *Probability Proc. Sympos. Pure Math.*, Vol. XXXI, Univ. Illinois, Urbana, Ill., 1976, pp. 87–89. Amer. Math. Soc., Providence, R. I. , 1977.

14 T. Liggett, *Interacting Particle Systems*, Springer-verlag, Berlin, 1985.

15 C.B. Morrey Jr., 'On the derivation of the equations of hydrodynamics from statistical mechanics', *Proc. Nat. Acad. Sci. U. S. A.* **40**, pp. 317–322, 1954.

16 J.L. Lebowitz, 'Microscopic origins of irreversible macroscopic behavior', *Physica A* **263**, pp. 516–527, 1999.

17 F. Spitzer, 'Interaction of Markov processes', *Advances in Math.* **5**, pp. 246–290, 1970.

18 H. Spohn, *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*, Texts and Monographs in Physics, Springer Verlag, Heidelberg, 1991.

19 S.R.S. Varadhan, 'Large deviations', *Ann. Prob.* **36**, pp. 397–419, 2008.