



HAL
open science

Alignement de particules auto-propulsées, transitions de phase et contraintes géométriques

Amic Frouvelle

► **To cite this version:**

Amic Frouvelle. Alignement de particules auto-propulsées, transitions de phase et contraintes géométriques. Mathématiques [math]. Université Paris-Dauphine PSL, 2023. tel-04034643

HAL Id: tel-04034643

<https://hal.science/tel-04034643>

Submitted on 17 Mar 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**HABILITATION À DIRIGER
DES RECHERCHES**

DE L'UNIVERSITÉ PSL

Présentée à l'Université Paris-Dauphine

**Alignement de particules auto-propulsées,
transitions de phase et contraintes géométriques**

Présentation des travaux par

Amic FROUVELLE

Le 13 mars 2023

Discipline

Mathématiques

Composition du jury :

Jean DOLBEAULT Directeur de Recherche, Université de Paris-Dauphine PSL	<i>Coordinateur</i>
Vincent CALVEZ Directeur de Recherche, Université Claude Bernard Lyon 1	<i>Rapporteur</i>
Francis FILBET Professeur des Universités, Université Paul Sabatier Toulouse III	<i>Rapporteur</i>
Frédéric HÉRAU Professeur des Universités, Université de Nantes	<i>Rapporteur</i>
Pierre DEGOND Directeur de Recherche Université Paul Sabatier Toulouse III	<i>Membre du jury</i>
François BOLLEY Professeur des Universités École Normale Supérieure de Rennes	<i>Membre du jury</i>
Stéphane MISCHLER Professeur des Universités Université Paris-Dauphine PSL	<i>Membre du jury</i>
Francesco SALVARANI Associate Professor Università degli Studi di Pavia	<i>Membre du jury</i>

Mis en page avec la classe thesul.

Remerciements

Voici venu le temps des remerciements. Je suis aussi serré sur les délais pour les écrire (avant d'envoyer ce manuscrit au service repro) que lors de la rédaction du mémoire (avant envoi aux rapporteurs), alors je me permets d'ores et déjà de remercier l'ensemble — presque sûrement non vide — des personnes que j'aurai oubliées dans les lignes qui suivent, alors qu'elles méritent largement d'y figurer.

La rédaction de ce mémoire avait été prévue pour mon année de délégation à Poitiers en 2020–2021, pour que je puisse avoir le temps de le faire de façon sereine et organisée. Ce serait peu me connaître que d'imaginer que le plan a été respecté à la lettre, malgré une année de plus de CRCT, je me suis retrouvé à tout faire dans l'urgence au dernier moment. Je commencerai donc par un grand remerciement à Vincent Calvez, Francis Filbet et Frédéric Héreau d'avoir accepté de relire et de faire un rapport sur ce manuscrit, malgré le timing assez serré. Vos travaux, les exposés que je vous ai vu donner, et les discussions que nous avons pu avoir ont toujours été d'une grande richesse pour moi, et je pense que l'impact de vos contributions sur la communauté mathématique est conséquent. Je suis donc très touché de l'intérêt que vous avez porté à mes travaux, et ravi que vous puissiez participer à la soutenance.

Je tiens également à exprimer toute ma reconnaissance à Jean Dolbeault pour la coordination de cette habilitation. En plus de ton incroyable efficacité (au vu de mon démarrage tardif), je retiendrai surtout les échanges toujours passionnants et toutes les anecdotes qui m'ont permis de prendre un peu de recul sur l'exercice de la rédaction d'un tel mémoire (et sur tout ce qui va avec). Je sais que j'apprendrai toujours quelque chose à ton contact, que ce soit mathématiquement ou humainement, et je suis vraiment très honoré que tu aies pris bien plus qu'un rôle de simple coordinateur.

Merci à Stéphane Mischler, François Bolley et Francesco Salvarani d'avoir bien voulu faire partie de ce jury. Vous avez toujours été très accueillants tout au long de mon parcours mathématique. Je me souviens de Stéphane m'initiant aux EDP (avant ma thèse), de votre accueil enthousiaste (Stéphane et François, avec Jean) lors de mon arrivée au CEREMADE. Merci François de m'avoir fait confiance en me transmettant une partie de la responsabilité du séminaire ; malgré l'absence de nouveau François dans l'organisation (on avait pourtant réussi à tenir plusieurs passations en respectant la règle), il me semble que le bon esprit de ce séminaire y est toujours ! Depuis Porto Ercole 2008 (avant même ma thèse également), j'ai toujours eu conscience du lien fort entre les communautés italiennes et françaises sur des mathématiques qui me passionnent ; il me semble Francesco que tu es un des éléments moteurs de ce lien. Je l'ai déjà écrit dans ce mémoire, mais merci encore de m'avoir invité à Rome et d'avoir réussi à me faire écrire un compte-rendu de mon exposé (il en faut pourtant de la patience pour un tel exploit).

Le dernier membre du jury, Pierre Degond, mérite bien une mention particulière. Merci de m'avoir lancé dans ce monde de l'étude mathématique des comportements collectifs, depuis le mémoire de M2 jusqu'à la direction de ma thèse, et bien au-delà. Je ne crois pas exagérer en considérant que tu as su faire émerger une génération de mathématicien-ne-s sur des sujets nouveaux et passionnants, et je suis admiratif de la capacité que tu as de faire réellement interagir la communauté mathématique avec les biologistes sur ces thèmes. Je ne désespère pas d'y parvenir un jour, malgré ma dérive irrémédiable vers la géométrie et des choses plus abstraites. Je te suis très reconnaissant d'avoir fait appel à moi pour débloquer ces histoires de matrices de rotation, ce qui a ouvert plein de pistes par la suite. Merci de m'avoir fait confiance sur le coencadrement de la thèse d'Antoine (et celui, il y a bien longtemps, du stage de M2 de Marion, qui me vaut encore une quantité incroyable de demande de reviews sur la MHD, que je ne maîtrise plus du

tout). Je suis conscient qu'il n'est pas forcément très optimal pour l'avancement de sa carrière d'avoir comme collaborateur principal son directeur de thèse, mais je suis très heureux que tu continues à bien vouloir travailler avec moi et avec mon inefficacité, même sur des projets qui traînent depuis quelques années ; quand on les déterre on trouve parfois des pépites !

Je tiens maintenant à remercier justement (et à peu près dans l'ordre chronologique) tous les collaborateurs et collaboratrices qui ont eu la patience et l'énergie de supporter ma névrose orthotypographique et ma tatillonnerie. En premier lieu duquel Jian-Guo Liu, dont la jovialité et l'enthousiasme sont inébranlables ; c'est vraiment un grand plaisir et toujours un étonnement de travailler ensemble. Je garde un excellent souvenir des séjours à Duke et à Tsinghua (il est loin le temps où je pouvais m'absenter plusieurs mois). Merci à Gaël Raoul de m'avoir poussé à jouer avec des mesures et des distances de Wasserstein, je ressens encore le plaisir que j'ai eu sur cette collaboration (en plus de l'histoire rigolote qui m'y a inclus), et je suis très content que vous ayez eu la patience avec Pierre de me laisser partir dans mes généralisations à outrance en courbure quelconque. Merci à Sara Merino-Aceituno pour les nombreuses collaborations sur les matrices de rotations, et pour tous les moments passés entre l'Angleterre, la France, l'Écosse, l'Autriche (comment ça, on n'a pas encore travaillé ensemble en Espagne ?). C'est un peu grâce à toi et ton invitation à Vienne (ainsi qu'à l'enthousiasme de Francis et Vincent à cette occasion) que j'ai enfin véritablement réussi à trouver du temps pour me mettre à la rédaction de ce mémoire¹, alors merci infiniment. Je dois un moment Eurêka assez magique (et quaternionique) à Ariane Trescases, dans un train de retour (Londres-Paris ?) d'une session de travail où l'équivalence des modèles d'alignement matrices-quaternions nous est apparue. Je pense qu'une partie conséquente de ce mémoire n'aurait pas vu le jour sans ça, alors merci ! J'ai eu le privilège, pour mon premier coencadrement de thèse, de travailler avec Antoine Diez. La barre est haute pour les suivants ! Je pense manquer de superlatifs pour décrire ton travail et tes qualités mathématiques et humaines, et je suis évidemment bluffé par ta diabolique efficacité. Plus qu'un étudiant, tu as vraiment été dès le début un collaborateur, et j'espère que cela continuera. Merci à Laura Kanzler et Christian Schmeiser de m'avoir présenté ce problème de retournement de myxobactéries, que j'ai immédiatement saboté en le plaçant dans un cadre métrique abstrait. Ça a vraiment été très agréable de travailler avec vous sur ce sujet, ce qui a donné, selon les mots de Christian, ce "*strange, but funny paper*" qu'on en a tiré. J'espère surtout que l'on pourra continuer en incluant l'alignement.

Je change de paragraphe pour remercier ici chaleureusement Émeric Bouin. J'aurais bien aimé te mettre dans le paragraphe des collaborateurs officiels avant la soutenance, toutes mes excuses pour ne pas avoir réussi faire une version *arXiv*able de notre travail au long cours. Mais finalement tu mérites bien de figurer dans un nouvel alinéa, tant j'ai d'autres raisons de te remercier, en particulier pour avoir bien voulu prendre ma suite dans la responsabilité du L3, pour l'organisation impeccable (dans notre style particulier) des journées Maths-Bio à Dauphine, du séminaire du labo, pour le projet avec les biologistes ariégeois (un jour, on le reprendra), pour l'inspiration et la motivation que tu m'as données pour l'écriture de ce mémoire, et pour toute l'énergie que tu insuffles dans le labo et le département. Et pour tous les moments hors du cadre du labo (comme pour les œufs Kinder®) ! Cécile Taing aussi aurait dû mériter de figurer dans la liste précédente, ce n'est plus qu'une question de jours avant que notre travail sorte du plmLab, encore quelques `git push/pull` et on y est ! Encore un grand merci pour cette collaboration poitevine.

À propos de `git`, c'est ici que je dois remercier Sébastien Motsch. J'ai menti quelques para-

1. Procrastination oblige, je n'ai en fait vraiment réussi à démarrer mon `.tex` qu'au moment de prendre le train de nuit de retour, mais le fichier a été créé à (la gare de) Vienne, donc ça compte !

graphes au-dessus, c'est vraiment toi mon grand-frère, mon premier collaborateur. Mais comme tu me ressembles trop, notre article finira par gagner le concours du plus beau déterrage. Dans cette liste des gens avec qui j'ai beaucoup discuté, pas mal usé de craies et de stylos, parfois bien avancé mais encore rien publié, qu'il me soit permis d'inclure et de remercier François Bolley et José Antonio Carrillo ; Daniel Han-Kwan et Ning Jiang ; Helge Dietert, Bastien Fernandez et David Gérard-Varet ; ainsi que Thomas Rey. Je ne vous oublie pas, des bouts de fichiers `.tex` sont sur mon ordinateur, de ci, de là, des simulations numériques, et des scans de notes manuscrites, qui sait, peut-être un jour en tirera-t-on quelque chose ?

Pour faire de la recherche en mathématiques, l'environnement et le cadre de travail au CEREMADE est tout simplement merveilleux, je mesure la chance que j'ai eue d'avoir été recruté ici en 2012. Pour cela je souhaite remercier vivement Isabelle, César, Anne-Laure, (et Marie), Gilles, Thomas (et même Michel à l'époque de mon arrivée), ainsi que les trois directeurs Olivier, Vincent et maintenant Mathieu. Merci à tou·te·s les collègues (ou ancien·ne·s collègues) qui, autour d'un thé (apparemment certain·e·s d'entre vous prennent une autre boisson, je ne préfère pas tester), d'un repas (à une époque bénie où on se retrouvait en nombre, avec des chaises et des tables), ou simplement d'une discussion, rendent ce laboratoire plein de vie. Je commencerai évidemment par François H., avec qui j'ai partagé un téléphone fixe pendant de nombreuses années, et qui a supporté l'entropie diaboliquement croissante² de mon bureau, alors que le sien était tellement impeccable tous les soirs qu'il se sentait obligé de compenser avec des immenses tours de boîtes de capsules de café. Je ne pense pas pouvoir oublier ces années, qui j'espère m'auront fait prendre plus d'accent belge que parisien. Ensuite, et pêle-mêle, merci à François B. (il y aura des doublons — et des oublis), François S., Jimmy, Alessandra, Robin, Daniela, Joseph, Julien P., Laure, Cyril, Paul G., Pierre L., Michele, Yannick, Irène, Émeric, Djalil, Justin, Alexandre, Benjamin, Guillaume V., Boris, Isabelle B., Julien S., Angelina, David, José : vous avez survécu (et souvent avec enthousiasme) à ma lubie culinaire de faire un cassoulet annuel avec des gens du labo. Les suivant·e·s n'ont pas eu ce privilège³, et la dégustation commence à nécessiter un peu de voyage maintenant (vous êtes évidemment bienvenu·e·s à Poitiers), mais merci également à Maxime, Marc, Olivier, Jacques, Guillaume L., Vincent R., Paul P., Yating, Béatrice, Cristina, Jean, Éric, Mathieu, Maria, Pierre C., Patrick, Stéphane, Guillaume C., Antonin, Isabelle C., Madalina, Stefano, Christian, Katia, Imen, Miquel, Patrice, Nejla, Bruno, Juliette, Idriss, Anna, Clément, Philippe, et Vincent D., pour les petites et grandes discussions qui donnent de l'ambiance et de la vie dans notre lieu de travail. Merci aux doctorant·e·s aussi, qui font l'effort de venir de temps en temps discuter un peu en salle café du 6^e pour animer le labo.

J'ai ensuite aussi une pensée pour le côté enseignement de notre travail. Les deux années passées sans enseignement m'ont fait réaliser que d'une part, c'était une chance d'avoir pu éviter ces deux années difficiles, et que d'autre part c'est quand même quelque chose qui me tient vraiment à cœur, et je suis revenu enseigner cette année avec beaucoup de plaisir. J'exprime ma plus profonde gratitude à Jacques pour tout le travail réalisé, et pour m'avoir donné un service particulièrement adapté à la rédaction de ce mémoire, le mois de décembre sans enseignement était tout simplement parfait. Merci donc aux enseignants avec qui et pour qui j'ai essayé de faire vivre des cours, je pense en particulier à Halim, Jacques, François-Xavier, Gaspard, Éric, Justin, Daniela et maintenant Olivier. Merci à Samira (et en règle générale à toute l'équipe administrative de MIDO), et aux étudiants de L3 qui pendant 3 années m'ont supporté en tant que responsable pédagogique. J'en garde un bon souvenir même si j'étais heureux de laisser la

2. Oui, il est un peu physicien.

3. Ou alors mes archives ne sont pas assez précises, je me suis d'ailleurs peut-être déjà trompé dans la liste précédente.

main, et je sais qu'Émeric a pris la suite avec brio et mérite bien de se reposer à son tour ! Merci à Dauphine pour les goodies de qualité offerts lors de mes participations aux journées des lycéen·ne·s, le hoodie (malheureusement plus trop blanc maintenant) est tout simplement le plus confortable pour rédiger un mémoire, en compagnie de la gourde thermos floquée du nouveau logo, qui a bien dû voir passer une bonne vingtaine de litres de thé tout au long de l'écriture.

Sortons un peu de Dauphine, mais restons dans les maths avec des lycéen·ne·s. J'ai eu la chance pendant 8 ans d'encadrer des ateliers MATH.en.JEANS dans deux lycées parisiens. J'ai beaucoup apprécié cette expérience, et j'espère avoir pu un tant soit peu montrer ce que c'était que la recherche à des jeunes qui n'en ont pas forcément une idée claire. Merci Louis et Philippe d'avoir animé ça dans vos lycées, et Ariane de l'avoir fait perdurer.

Me voici donc maintenant à Poitiers. Lors de ma première année de délégation avec accueil au Laboratoire de Mathématiques et Applications de l'Université de Poitiers, je me suis senti extrêmement bien accueilli malgré la situation compliquée que l'on a tous connue. Je tiens à remercier ici tous les collègues qui ont participé à cet accueil chaleureux, en particulier Julien M., Alessandra, Cécile, Julien D., Philippe, Jocelyne et Léa. Je suis très reconnaissant au LMA (et en particulier à Boris) de m'avoir ensuite permis d'accéder aux locaux et à un bureau comme invité, et j'espère que cela pourra continuer, les discussions et les collaborations que j'ai commencées étant d'une grande richesse.

Merci à tous les amis qui me sont chers et me permettent parfois de réussir à sortir les maths de mon cerveau. Il y a celles et ceux lié·e·s d'une manière ou d'une autre aux mathématiques : Daniel, Nicolas, Thibault, Jérémie et Nina depuis l'ENS, Yohann et Nadine, Laurent, Léonard, Alice et Gilles pendant la thèse. Il y a les anciens de prépa et apparentés, devenus parisiens et hébergeurs ponctuels pour mes virées hebdomadaires : merci Arnaud, Émilie et les filles de m'accueillir toujours au dernier moment et toujours avec enthousiasme, merci également à Thierry et Nisita, à Matou, et merci à Vincent d'avoir en commun avec moi cette vie de nomade, peut-être qu'on réussira à synchroniser nos emplois du temps pour se voir ! Merci aux Chaussettes Modernes, éparpillées un peu partout en France maintenant, et avec qui chanter régulièrement était un vrai bonheur. Cela me manque un peu à Poitiers, mais à la place pour m'occuper, je me suis remis à jongler (il y a des gens qui disent que c'est pour faire plus de maths). Merci donc à toute la Mamagabie de m'avoir aussi bien accueilli, et d'accepter mes facéties théoriques de passing aléatoire et autres joyeusetés jonglistico-mathématiques. Dans la famille de la jongle, j'ai une pensée particulière pour Thomas, Denis, Raphaele et Mathieu qui partagent mes goûts tordus de mathématicien, et que je suis toujours heureux de rencontrer au détour d'une convention.

Vient enfin la famille. Mon cher grand-père mathématicien, je pense que je t'ai déjà remercié dans ma thèse, ce sera encore le cas ici. J'ai finalement suivi ta voie sur pas mal de choses, et je n'en suis pas peu fier. Il me reste encore à diminuer l'embonpoint, et ce n'est pas la rédaction de ce mémoire qui m'aura aidé ! Le challenge de rester sur un vélo à ton âge me paraît tout bonnement inatteignable, mais qui sait ? Merci à ma famille et à ma belle-famille d'essayer parfois de comprendre mon travail, en tout cas de me soutenir, et de ne pas (trop) me prendre pour un allumé. Et merci à toi William, maintenant qu'ils ont vu ta thèse, je peux vraiment prétendre que je fais des maths extrêmement appliquées !

Merci enfin et surtout à mes trois filles Lise, Ada, et Méloé. Ce n'est pas facile tous les jours d'avoir un papa matheux, surtout quand il s'en va deux semaines en conférences et qu'à son retour il n'est pas bien plus disponible pendant trois autres pour rédiger un mémoire. Merci Sandrine pour ton soutien sans faille dans ces moments un peu costauds, merci d'avoir tout géré, rien de tout cela n'existerait sans toi. Merci. Beaucoup.

À mes trois particules auto⁴-propulsées préférées, et à leur mère

4. cyclo?

Table des matières

Introduction	1
I Comportement en temps long de modèles cinétiques d'alignement avec transition de phase	11
1 Transitions de phase du point de vue des équilibres	13
1.1 Un modèle de type Vicsek avec intensités d'alignement et de bruit variables	15
1.2 Les orientations de corps rigides : des polymères en dimension 4	17
1.3 Rotations en dimensions supérieures	21
2 Comportement en temps long de modèles homogènes en espace	29
2.1 Équation de BGK pour l'alignement de corps rigides	30
2.2 Stabilité et convergence exponentielle en entropie relative pour Fokker–Planck sur $SO(3)$	31
2.3 Vers un cadre générique unifié	33
3 Vers les modèles inhomogènes : hypocoercivité et stabilité de l'équilibre isotrope	37
3.1 Un modèle d'alignement local de particules autopropulsées.	38
3.2 Estimées d'hypocoercivité-hypoellipticité pour le mouvement brownien sphérique en vitesse	39
3.3 Stabilité non-linéaire de l'équilibre isotrope jusqu'au seuil de transition de phase	47
II Dérivation et étude de modèles macroscopiques	57
4 Méthodes de moments pour la dérivation de modèles fluides	59
4.1 Invariants collisionnels généralisés pour les modèles de type Vicsek	59
4.2 Modèles macroscopiques pour l'alignement de corps rigides	61
4.3 Méthode de moments pour des modèles de cristaux liquides	67

Table des matières

5	Hyperbolicité des systèmes de type SOH	71
5.1	Lien entre hyperbolicité et paramètres de la transition de phase	71
5.2	Hyperbolicité du modèle SOHB	73
III	Modèles d'alignement sans bruit avec contraintes géométriques	77
6	Agrégation simple sur la sphère	79
6.1	Un modèle cinétique d'alignement sur la sphère	80
6.2	Le système de particules associé	82
7	Modèles de point-milieu	85
7.1	Modèles de point-milieu sur la sphère et au-delà	86
7.2	Le modèle infinitésimal de Fisher sans variabilité	90
8	Modèles de retournement de bactéries	99
8.1	Un modèle abstrait de retournement de particules	99
	Bibliographie	105

Introduction

Ce mémoire est une synthèse des travaux de recherche que j'ai effectués depuis la soutenance de ma thèse de doctorat (dirigé par Pierre Degond). J'ai continué à travailler sur des thèmes issus de ma thèse, en particulier sur la dérivation et l'étude de modèles macroscopiques provenant de systèmes de particules décrivant des comportements collectifs. Les trois mots-clés du titre de ce mémoire sont « alignement », « contraintes géométriques » et « transitions de phase », et ont fortement guidé mes recherches depuis 2011. Les phénomènes d'auto-organisation dans les systèmes de particules autopropulsées avec interactions d'alignement sont fascinants, autant du point de vue simplement esthétique des phénomènes que l'on veut modéliser (comme certaines nuées de dizaines de milliers d'étourneaux, complètement hypnotisantes) que de l'étude mathématique, qui amène des questions passionnantes. La modélisation et l'analyse mathématiques de tels phénomènes d'émergence sont des sujets de recherche actifs et en pleine effervescence.

Je me suis en particulier intéressé à des modèles cinétiques où les normes des vitesses des particules considérées sont constantes, ainsi que des modèles d'alignement de corps rigides, où l'alignement ne se fait pas uniquement sur la direction, mais sur toute l'orientation (en tant que rotation par rapport à un référentiel donné) des individus. Des modèles reliés sont les modèles de suspensions de polymères pour l'étude des cristaux liquides (des vecteurs unitaires représentant leur orientation, en identifiant deux vecteurs diamétralement opposés). Une partie de mes recherches a consisté à faire le lien entre ces différents modèles, qui partagent des propriétés et des structures communes. Ces contraintes géométriques impliquent en général l'absence de quantités conservées telles que le moment ou l'énergie des particules, à la différence de systèmes physiques dans lesquels on peut s'appuyer sur de telles conservations pour obtenir des propriétés utiles du point de vue de l'étude mathématique. La compréhension du comportement en temps long des solutions de ces modèles, malgré l'absence de quantités conservées, est une question importante dans de nombreux modèles de mathématiques appliquées (à la biologie ou à bien d'autres domaines). Enfin, la grande majorité des modèles inclut également des phénomènes de diffusion (provenant de termes stochastiques dans les systèmes de particules originaux) qui s'opposent aux phénomènes d'alignement. Cette compétition entre alignement et diffusion implique des phénomènes de transition de phase où, suivant les paramètres du modèle, un des mécanismes l'emporte. La description fine de ces phénomènes de transition de phase a également été un point constant dans une grande partie de mes recherches.

Ce mémoire est divisé en trois parties. La première consiste en l'étude de modèles (essentiellement homogènes en espace) dans lesquels on peut décrire finement la transition de phase et le comportement en temps long des solutions. Une deuxième partie, très reliée, concerne la dérivation et l'étude de modèles macroscopiques à partir des versions inhomogènes en espace des modèles cinétiques étudiés dans la première partie. Enfin, une troisième partie, un peu plus indépendante bien qu'également reliée, se concentre sur l'étude de phénomènes d'alignement en l'absence de bruit, toujours dans le cadre de contraintes géométriques, pour lesquels on s'attend à avoir convergence en temps long autour de solutions concentrées sur une configuration donnée.

Comportement en temps long de modèles cinétiques d’alignement avec transition de phase

Dans cette première partie, on étudie des modèles présentant une compétition entre phénomènes d’alignement (les « orientations » se rapprochent) et phénomènes de diffusion (exploration de tout l’espace des « orientations » possibles). On s’attend à ce que lorsque le bruit est faible, ou que l’intensité d’alignement est importante, l’état final présente des caractéristiques de concentration autour d’une orientation commune. Inversement, si la diffusion est suffisamment importante ou l’alignement assez faible on s’attend à une convergence vers un état isotrope où aucune orientation particulière n’est prépondérante. La description mathématique de ce phénomène de transition de phase peut se faire dans différentes directions.

Une première étape consiste en la caractérisation des solutions stationnaires. Lorsqu’une fonction de Lyapunov pour le système est disponible, on en recherche donc les points critiques. D’un point de vue mathématique, l’étude de tels points critiques est historiquement associée aux modèles de suspensions de polymères en forme de bâtonnets⁵, pour la description de cristaux liquides [Ons49, Doi81]. La fonctionnelle originale d’Onsager (pour des suspensions de bâtonnets avec contrainte de non-recouvrement) faisait intervenir un potentiel proportionnel à $|\sin(\theta)|$, où θ est l’angle entre deux bâtonnets. À ma connaissance, malgré des recherches actives, la description mathématique précise de cette transition est encore un problème ouvert : il n’y a pas en tout cas de solution explicite. Pour remédier à cela, un potentiel proche, en $\sin^2 \theta$, dit de Maier–Saupe [MS58], qui peut s’écrire comme un polynôme et ainsi faisant seulement intervenir un nombre fini de moments, a été bien plus étudié. La détermination des équilibres se fait au travers d’une équation de compatibilité qui est maintenant en dimension finie, et on peut alors caractériser et classier les équilibres, ce qui a été fait indépendamment par trois équipes différentes dans un laps de temps assez court [CKT04, FS05, LZZ05, ZWFW05]. Le cas du potentiel dipolaire, en $\sin \theta$, correspond à l’alignement de vecteurs unitaires (et au modèle de Kuramoto dans le cas de \mathbb{S}^1), et la transition de phase est dite du second ordre [F3, GPP12, FS05]. En dessous d’un seuil de transition, seul l’équilibre isotrope (de paramètre d’ordre nul) existe et c’est le minimum de l’énergie, et cet état devient un point selle au-delà du seuil ; dans ce cas une famille d’équilibres (les minimiseurs de l’énergie) apparaît et leur paramètre d’ordre varie continûment au passage du seuil. Dans le chapitre 1 on présente cette problématique, dans le cadre de la note [F6] en collaboration avec Pierre Degond et Jian-Guo Liu dans lequel on montre qu’une légère modification du potentiel dipolaire permet d’obtenir des transitions de phase d’ordre différent, pour le même type d’équilibre. On présente ensuite une partie de l’article [F13], provenant de la thèse d’Antoine Diez (que j’ai codirigée avec Pierre Degond et Sara Merino-Aceituno) dans lequel on classifie tous les équilibres dans le cas du potentiel d’alignement dans $SO(3)$ (à l’aide de quaternions unitaires, en ramenant le problème à un problème de type Maier–Saupe en dimension 4). Il y a également dans ce cas une transition de phase du premier ordre, avec un certain intervalle de paramètres dans lequel plusieurs minima locaux de l’énergie existent. On présente également un travail récent en cours qui étend cette étude dans $SO(n)$ pour $n \geq 4$.

La deuxième étape, décrite dans le chapitre 2, consiste alors à comprendre le comportement en temps long de l’équation d’évolution associée. Lorsque l’état stationnaire est unique (ou que c’est un minimum local strict), on peut en général espérer faire fonctionner une méthode d’entropie-dissipation d’entropie, au moins localement. Mais en pratique, au vu des symétries du problème,

5. Je n’ai pas trouvé de jolie traduction en français de « rodlike polymers », mais le nom « bâtonnet » semble être plus utilisé que « tige » par exemple.

on regarde souvent le comportement en temps long au voisinage d'une variété d'équilibres. Il n'est pas alors simple d'obtenir la convergence vers un équilibre unique. Une méthode qui permet de contourner ce problème est de considérer une variante du problème pour laquelle la dynamique est plus simple à étudier, mais qui présente les mêmes caractéristiques de transition de phase (et peut même avoir la même énergie libre), par exemple en transformant une équation de Fokker–Planck en équation de type BGK. C'est ce que nous avons fait dans l'article [F13], et la dynamique en temps peut alors se ramener à celle d'un flot-gradient en dimension finie, dont on peut caractériser le comportement en temps long. Récemment, dans l'article [F14], je suis parvenu à obtenir le comportement en temps long au voisinage des minimiseurs locaux pour l'alignement dans $SO(3)$ pour le modèle original de Fokker–Planck, en utilisant une entropie relative par rapport à un état non-stationnaire. Je décris également cette méthode et une future extension à un cadre plus général dans ce même chapitre.

Enfin, les modèles qui nous intéressent concernent souvent de l'alignement en vitesse pour des particules cinétiques. On considère donc des équations d'évolution qui ne sont plus homogènes en espace, et le terme de transport qui apparaît complique grandement la situation, en particulier si l'alignement n'a lieu que localement en espace. On est typiquement dans un cadre où on souhaite appliquer des techniques d'hypocoercivité : l'opérateur en vitesse a des équilibres locaux en espace, et ce n'est qu'avec l'effet du transport que l'on obtient la convergence vers un équilibre global, qui est constant en espace. Dans le chapitre 3, je présente un travail récent [F20] avec Émeric Bouin (en cours de finalisation) dans lequel on réussit à obtenir la stabilité locale du profil constant jusqu'au seuil de transition de phase pour un modèle d'alignement local de particules autopropulsées de type Vicsek. Le phénomène d'hypocoercivité est un peu plus subtil que dans le cas classique : le commutateur entre le gradient sur la sphère et l'opérateur de transport ne couvre pas toutes les directions en espace, et on doit utiliser des commutateurs d'ordre supérieur (d'une manière différente de la méthode classique présentée dans le mémoire de Villani [Vil09], qui ne fonctionne pas directement dans notre cas) si on veut par exemple comprendre la régularisation en temps court de l'opérateur linéarisé. Pour traiter la non-linéarité, on doit monter en ordre de dérivation en espace, mais on montre qu'on peut seulement garder une dérivée en vitesse, et ainsi obtenir un résultat de stabilité en norme $H^{s,1}$, sur \mathbb{R}^d ou sur le tore en espace (pour lequel on obtient alors convergence exponentielle vers l'équilibre).

Dérivation et étude de modèles macroscopiques

Dans cette deuxième partie, on s'intéresse à la dérivation de modèles macroscopiques à partir de modèles cinétiques inhomogènes en espace, lorsqu'un paramètre ε devient petit. Cela peut typiquement correspondre à un paramètre de changement d'échelle (limite dite « hydrodynamique »), ou simplement traduire le fait que les différents paramètres du modèle ont des ordres de grandeurs différents. L'équation que l'on considère s'écrit, de manière générique, sous la forme $Tf^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon}C(f^\varepsilon)$ où T est l'opérateur de transport $\partial_t + v \cdot \nabla_x$ et l'opérateur de collision C (en général non linéaire) n'agit essentiellement que sur la variable de vitesse v (cela correspond aux opérateurs homogènes en espace que l'on a étudié dans la première partie). Formellement, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, on s'attend à avoir une limite f^0 qui soit donc telle que $C(f^0) = 0$, c'est à dire un équilibre local, qui s'écrit de la forme $f^0 = \rho M_Y$ où les quantités macroscopiques ρ et Y dépendent de (t, x) . Pour l'équation de Boltzmann (le plus emblématique des modèles cinétiques [Bol72, CIP94, Max67], et historiquement le premier modèle décrit comme tel), M_Y correspond à une Maxwellienne, et Y correspond au couple (u, θ) de la vitesse et de la température macroscopiques. La question de la dérivation d'un modèle fluide consiste à savoir déterminer

Introduction

l'évolution en temps de telles quantités ρ et Y , et donc de traiter la singularité en $\frac{1}{\varepsilon}$ apparaissant devant l'opérateur de collision.

En théorie cinétique, il y a classiquement deux méthodes pour dériver des modèles fluides. La méthode du développement de Hilbert [Caf80, Cha16, Ens17, Hil12] consiste à écrire f^ε sous forme de développement selon les puissances de ε : $f^\varepsilon = f^0 + \varepsilon f^1 + O(\varepsilon^2)$, d'insérer cette expression dans l'équation et d'annuler séparément chaque puissance de ε . À l'ordre principal on obtient $C(f^0) = 0$, puis à l'ordre suivant on obtient $\mathcal{L}_0 f^1 = T f^0$ où \mathcal{L}_0 est l'opérateur linéarisé de C au voisinage de f^0 . L'existence d'une solution pour f^1 impose que $T f^0 \in (\ker \mathcal{L}_0^*)^\perp$. On obtient donc des relations de la forme $\int T f^0 \psi = 0$ pour des fonctions ψ dans le noyau de \mathcal{L}_0^* (l'adjoint de \mathcal{L}_0). En déterminant une base de ce noyau (comme $v \mapsto 1, v, |v|^2$ pour l'équation de Boltzmann), ces relations donnent alors l'évolution des quantités macroscopiques, et on obtient un système fermé lorsque la dimension de $\ker \mathcal{L}_0^*$ correspond à la dimension des paramètres ρ, Y définissant les équilibres locaux (comme dans le cas de Boltzmann). Une méthode plus directe consiste à obtenir directement des invariants collisionnels : des fonctions ψ telles que $\int C(f)\psi = 0$ pour toute fonction f (cela correspond à des relation de conservation au niveau microscopique), et en multipliant l'équation par ψ et intégrant, le terme en $\frac{1}{\varepsilon}$ disparaît et on obtient $\int T f^0 \psi = 0$. Pour revenir à l'équation de Boltzmann, on a que $1, v$ et $|v|^2$ sont de tels invariants collisionnels, ce qui donne l'évolution de ρ, u, θ (des « moments » de f^0 par rapport à v , d'où le nom de méthode de moments [BGL91, Mel10] pour ce type de dérivation). Cette méthode présente également d'autres avantages : pour obtenir des convergences rigoureuses, on a souvent besoin de moins de régularité qu'avec la méthode du développement de Hilbert (comparer par exemple [BGL93] avec [Caf80]), d'autre part elle permet naturellement de développer des méthodes numériques efficaces [Gra49, Lev96]. Cependant, elle ne fonctionne que lorsque l'on dispose de suffisamment d'invariants collisionnels. Dans les modèles avec contraintes géométriques qui nous intéressent (lorsque la variable de vitesse est sur la sphère, ou qu'elle provient d'une matrice de $SO(3)$), on n'a en général que la conservation de la masse. Pour contourner ce problème, les invariants collisionnels généralisés ont été proposés par Degond et Motsch [DM08], en relaxant la contrainte : plutôt que d'imposer que $\int C(f)\psi = 0$ pour tout f , on cherche à satisfaire cette conditions pour une classe réduite de fonctions f (dont on met par exemple des contraintes sur certains moments). Ceci permet de dériver formellement des modèles fluides dans l'esprit de la méthode de moments (et ainsi mettre en évidence certaines structures géométriques du problème). Cette méthode a été appliquée ensuite avec succès dans de nombreux modèles de comportements collectifs [DM11, F2, Nav13, F4, DDMW15, DN15, DMAVY19, DMA20]. Les articles présentés dans cette partie comportent souvent une grande quantité de calculs assez techniques. On essaye autant que possible de les éviter et de présenter surtout les concepts importants.

Dans le chapitre 4, on présente rapidement cette méthode, dans la section 4.1, à l'aide du modèle de type Vicsek étudié dans [F8]. On obtient un modèle fluide appelé SOH (pour « Self-Organized Hydrodynamics »), dont les coefficients dépendent de la densité ρ . Dans la section 4.2, on résume la série de travaux [F9, F10, F11, F13, F17], dans des collaborations avec Pierre Degond, Antoine Diez, Sara Merino-Aceituno et Ariane Trescases, où on adapte la méthode des invariants collisionnels généralisés pour obtenir un nouveau modèle fluide d'alignement de corps rigides (dans diverses situations, respectivement : pour une équation de Fokker–Planck dans $SO(3)$, dans les quaternions unitaires, pour une équation de type BGK dans ces deux espaces de « vitesses », puis avec transition de phase dans $SO(3)$ et enfin en toute dimension dans $SO(n)$, toujours pour le modèle BGK) appelé SOHB (pour « Self-Organized Hydrodynamics of Body attitude »). Dans la section 4.3, on présente l'article [F15], en collaboration avec Pierre Degond et Jian-Guo Liu, dans lequel on utilise cette méthode pour dériver la limite d'un modèle cinétique de cristaux liquides (équation de Doi avec potentiel de Maier–Saupe pour la suspension de polymères

en forme de bâtonnets, couplée avec Navier–Stokes pour le fluide) vers le modèle macroscopique de Ericksen–Leslie, dans la limite d’un petit nombre de Deborah (notre ε). Cette dérivation avait été précédemment faite dans le cadre du développement de Hilbert [EZ06, WZZ15], on montre qu’on peut obtenir la même chose avec une méthode de moments, qui permet également de généraliser le résultat dans deux directions : le cas d’une densité de polymères non uniforme, et le cas de dimensions supérieures à 3.

Dans le chapitre 5, on étudie les modèles SOH et SOHB du point de vue de l’hyperbolicité. J’avais déjà montré dans le cadre de ma thèse [F2] que lorsque le paramètre d’ordre des équilibres dépend de la densité ρ , cela mène à un modèle SOH (à coefficients dépendants de ρ également) qui peut présenter une perte d’hyperbolicité. Dans l’article [F8], en collaboration avec Pierre Degond et Jian-Guo Liu, présenté dans la section 5.1, on établit un lien entre les paramètres de la transition de phase (transition continue ou discontinue, exposant critique) et l’hyperbolicité du modèle. En particulier lorsque la transition est discontinue, le modèle n’est pas hyperbolique au voisinage de la discontinuité. Une façon de contourner ce problème est de considérer une échelle différente pour le noyau d’interaction : lorsque les particules interagissent avec celles situées dans un rayon d’ordre $\sqrt{\varepsilon}$ (et non pas ε comme dans le changement d’échelle hyperbolique), un terme diffusif supplémentaire apparaît dans l’équation limite, qui pourrait permettre au modèle obtenu d’être alors bien posé. Dans la section 5.2, on présente le travail récent [F16] dans lequel on montre l’hyperbolicité du modèle SOHB (à coefficients constants). Cependant, même si le modèle est hyperbolique, il est par nature non-conservatif, ce qui ne permet pas de donner facilement un sens à des solutions discontinues. On discute alors deux approches pour s’attaquer à ce problème : comme dans [MN11], on peut approcher le système SOHB par un système conservatif avec un terme de relaxation d’une part, et d’autre part, on considère également la dérivation d’un terme de viscosité supplémentaire, comme dans la section précédente, à l’aide d’une échelle différente pour le noyau d’interaction.

Modèles d’alignement sans bruit avec contraintes géométriques

Dans cette dernière partie, on étudie des équations liées à des modèles d’alignement sans bruit. Typiquement, lorsque le coefficient σ de bruit angulaire dans les modèles étudiés dans les deux premières parties tend vers 0, les équilibres locaux stables sont des distributions de von Mises avec grand paramètre de concentration, proches de masses de Dirac autour d’une « phase » (vitesse, rotation, ou direction) donnée. On s’attend à ce que le modèle sans bruit se comporte similairement, mais on n’a pas accès en général à la limite $\sigma \rightarrow 0$. Lorsque $\sigma = 0$, on n’a plus de phénomène de régularisation par le bruit, mais les modèles sont en général bien posés dans des espaces de probabilités et on peut se poser la question de leur comportement en temps long, par exemple en distance de Wasserstein. Dans le chapitre 6, basé sur l’article [F12], on étudie le modèle d’alignement sur la sphère correspondant à une équation d’agrégation avec potentiel $V(v, v') = -v \cdot v'$. On y caractérise le comportement en temps long pour toute condition initiale, ainsi que celui du modèle de particules associé.

Dans le chapitre 7, on présente le mécanisme d’alignement sur la sphère de Bertin, Droz et Grégoire [BDG06] : un modèle de saut où deux particules choisies uniformément au hasard se placent au point milieu de la géodésique joignant leur deux orientations. Dans l’article [F7], en collaboration avec Pierre Degond et Gaël Raoul, on montre la convergence en distance de Wasserstein, avec un taux exponentiel (optimal) pour toute solution suffisamment proche initialement d’une masse de Dirac en distance W_2 (en particulier il peut y avoir de la masse partout initialement, on ne suppose pas un support restreint). On étend également ce modèle et ces résultats sur

Introduction

une variété Riemannienne quelconque⁶. Pour le cas de \mathbb{R} (ou \mathbb{R}^d), ce modèle conserve le centre de masse, et cela correspond (entre autres) à un modèle d'économie étudié par Pareschi, Toscani et Matthes [MT08, PT06] pour lequel on peut montrer la convergence vers un profil autosimilaire (à queue lourde) dans une distance de type Fourier. Il se trouve que l'opérateur associé est le même que l'opérateur infinitésimal de Fisher apparaissant dans des modèles de dynamiques de populations sexuées, dans la limite de variabilité nulle. Dans l'article [F19] en collaboration avec Cécile Taing, on considère un tel modèle de dynamique des populations sexuées, qui partage avec les modèles sur la sphère le fait que le centre de masse n'est pas conservé. Et on montre, comme dans le cas du modèle d'alignement sur la sphère, la stabilité locale (en distance de Wasserstein) des masses de Dirac en des points pour lesquels la différence de mortalité avec la mortalité minimale est inférieure à $\frac{1}{2}$. Dans ce cas on étend également les résultats de convergence vers un profil autosimilaire à queue lourde.

Enfin, le chapitre 8 est quelque peu différent, mais a pour origine un modèle similaire d'alignement de myxobactéries [HKMS21], qui peuvent également se retourner lorsque leurs voisines ont une orientation essentiellement opposée. Dans ce modèle, le terme d'alignement est le même que celui étudié dans le chapitre 7, et on pourrait espérer obtenir le même genre de stabilité locale. Cependant l'opérateur de retournement introduit des difficultés structurelles : par exemple, même pour une condition initiale concentrée en support autour d'un équilibre (deux Diracs diamétralement opposés), la convergence peut se montrer grâce à une combinaison de deux énergies, faisant penser à de l'hypocoercivité. Dans l'article [F18], en collaboration avec Laura Kanzler et Christian Schmeiser, nous nous sommes donc concentrés sur l'opérateur de retournement seul. Il n'y a plus d'alignement à proprement parler, mais la compréhension de ce phénomène de retournement pourra sans doute être utile pour comprendre la combinaison avec l'alignement. Dans un cadre très général de modèle de retournement, on y décrit les états stationnaires en fonction de notions de connectivité de graphes d'interaction. Et on montre la convergence exponentielle vers un état stationnaire, déterminé explicitement par la condition initiale.

Dans tout ce mémoire, j'ai essayé autant que faire se peut d'avoir des notations cohérentes et unifiées. On notera génériquement d (parfois n) la dimension d'espace, $(\mathbf{e}_i)_{1 \leq i \leq d}$ la base canonique de \mathbb{R}^d . On travaille souvent sur la sphère unité de \mathbb{R}^d , que l'on notera \mathbb{S} , pour des variables liées à l'espace des vitesses. On normalisera toujours la mesure sur la sphère de sorte que $\int_{\mathbb{S}} dv = 1$. Pour un vecteur unitaire $v \in \mathbb{S}$, on note P_{v^\perp} la projection sur l'hyperplan orthogonal à v .

Une partie conséquente de ce mémoire concerne des travaux n'étant pas encore sous forme de prépublications au moment du dépôt de ce mémoire (en particulier les sections 1.3, 2.3, le chapitre 3, et la section 7.2). La réalisation de ce mémoire aura été l'occasion de bien avancer sur leur rédaction⁷, et j'ai essayé autant que possible de donner un peu plus de détails sur ces parties (en particulier sur certaines preuves) dans ce mémoire, en espérant ne pas les avoir rendues trop longues.

Enfin, un axe de recherche qui me tient à cœur depuis ma thèse⁸, mais qui n'est pas présenté dans ce mémoire, concerne l'influence de la géométrie du domaine spatial sur des modèles de particules autopropulsées. En effet de nombreuses structures, telles que les bandes de forte concentration se propageant au-dessus d'une zone de faible densité, présentent un lien fort avec la géométrie du domaine (périodique en espace) et l'objectif est de comprendre, au moins numériquement, à quel point ces structures peuvent apparaître dans d'autres géométries. Le travail

6. Techniquement, avec rayon d'injectivité strictement positif et à courbure sectionnelle bornée.

7. Procrastination structurée : <http://www.structuredprocrastination.com>

8. Cela constituait même un chapitre, en collaboration avec Sébastien Motsch, qui n'a toujours pas fait l'objet de publication, mais je ne désespère pas, le sujet étant toujours d'actualité!

d'Antoine Diez dans sa thèse [Die21], permettant de faire des simulations de grand nombre de particules en utilisant des calculs sur GPU, m'a poussé à reprendre cette exploration (déjà laissée de côté puis reprise de nombreuses fois) qui j'espère fera enfin un jour l'objet d'une publication.

Liste de Publications

- [F1] ★ Marion Acheritogaray, Pierre Degond, Amic Frouvelle, and Jian-Guo Liu. Kinetic formulation and global existence for the hall-magneto-hydrodynamics system. *Kinet. Relat. Models*, 4(4):901–918, 2011.
- [F2] ★ Amic Frouvelle. A continuum model for alignment of self-propelled particles with anisotropy and density-dependent parameters. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 22(7):1250011, 40, 2012.
- [F3] ★ Amic Frouvelle and Jian-Guo Liu. Dynamics in a kinetic model of oriented particles with phase transition. *SIAM J. Math. Anal.*, 44(2):791–826, 2012.
- [F4] ★ Pierre Degond, Amic Frouvelle, and Jian-Guo Liu. Macroscopic limits and phase transition in a system of self-propelled particles. *J. Nonlinear Sci.*, 23(3):427–456, 2013.
- [F5] Pierre Degond, Amic Frouvelle, Jian-Guo Liu, Sébastien Motsch, and Laurent Navoret. Macroscopic models of collective motion and self-organization. *Sémin. Laurent Schwartz, EDP Appl.*, 2012-2013:ex, 2014.
- [F6] Pierre Degond, Amic Frouvelle, and Jian-Guo Liu. A note on phase transitions for the Smoluchowski equation with dipolar potential. In F. Ancona, A. Bressan, P. Marcati, and A. Marson, editors, *Hyperbolic Problems: Theory, Numerics, Applications — Proceedings of the 14th International Conference on Hyperbolic Problems held in Padova, June 25-29, 2012*, pages 179–192. AIMS, 2014.
- [F7] Pierre Degond, Amic Frouvelle, and Gaël Raoul. Local stability of perfect alignment for a spatially homogeneous kinetic model. *J. Stat. Phys.*, 157(1):84–112, 2014.
- [F8] Pierre Degond, Amic Frouvelle, and Jian-Guo Liu. Phase transitions, hysteresis, and hyperbolicity for self-organized alignment dynamics. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 216(1):63–115, 2015.
- [F9] Pierre Degond, Amic Frouvelle, and Sara Merino-Aceituno. A new flocking model through body attitude coordination. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 27(06):1005–1049, 2017.
- [F10] Pierre Degond, Amic Frouvelle, Sara Merino-Aceituno, and Ariane Trescases. Quaternions in collective dynamics. *Multiscale Mod. Simul.*, 16(1):28–77, 2018.
- [F11] Pierre Degond, Amic Frouvelle, Sara Merino-Aceituno, and Ariane Trescases. Alignment of self-propelled rigid bodies : from particle systems to macroscopic equations. In G. Giacomin, S. Olla, E. Saada, H. Spohn, and Stoltz G., editors, *Stochastic Dynamics Out of Equilibrium. IHPStochDyn 2017*, volume 282 of *Springer proceedings in mathematics and statistics*, pages 28–66. Springer, 2019.
- [F12] Amic Frouvelle and Jian-Guo Liu. Long-time dynamics for a simple aggregation equation on the sphere. In G. Giacomin, S. Olla, E. Saada, H. Spohn, and Stoltz G., editors, *Stochastic Dynamics Out of Equilibrium. IHPStochDyn 2017*, Springer proceedings in mathematics and statistics, pages 457–479. Springer, 2019.
- [F13] Pierre Degond, Antoine Diez, Amic Frouvelle, and Sara Merino-Aceituno. Phase transitions and macroscopic limits in a BGK model of body-attitude coordination. *J. Nonlinear Sci.*, 30(6):2671–2736, 2020.

- [F14] Amic Frouvelle. Body-attitude alignment: first order phase transition, link with rodlike polymers through quaternions, and stability. In F. Salvarani, editor, *Recent Advances in Kinetic Equations and Applications*, volume 48 of *Springer INdAM Series*, pages 147–181. Springer, Cham, 2021.
- [F15] Pierre Degond, Amic Frouvelle, and Jian-Guo Liu. From kinetic to fluid models of liquid crystals by the moment method. *Kinet. Relat. Models*, 15(3):417–465, 2022.
- [F16] Pierre Degond, Amic Frouvelle, Sara Merino-Aceituno, and Ariane Trescases. Hyperbolicity and non-conservativity of a hydrodynamic model of swarming rigid bodies, 2022. accepté dans Quarterly of Applied Mathematics.

Prépublications et travaux non publiés présentés dans ce mémoire

- [F17] Pierre Degond, Antoine Diez, and Amic Frouvelle. Body-attitude coordination in arbitrary dimension, 2021. arXiv:2111.05614.
- [F18] Amic Frouvelle, Laura Kanzler, and Christian Schmeiser. Reversal collision dynamics, 2022. arXiv:2209.11413.
- [F19] Amic Frouvelle and Cécile Taing. On the Fisher infinitesimal model without variability. en cours de finalisation, 2023.
- [F20] Émeric Bouin and Amic Frouvelle. Hypocoercivity around constant equilibria in non-linear alignment models of self-propelled particles. en préparation, 2023.

Les travaux [F1, F2, F3, F4], identifiés avec une étoile \star sont issus de ma thèse et ne sont pas présentés (mais parfois cités). Le compte-rendu [F5] du séminaire Laurent Schwartz inclut des travaux issus de ma thèse, et n'est également pas présenté dans ce mémoire. On résume ci-dessous la correspondance entre articles présentés et sections concernées dans ce mémoire.

Articles	Sections
[F6]	1.1
[F7]	7.1
[F8]	1.1 - 4.1 - 5.1
[F9, F10, F11, F17]	4.2
[F12]	6.1 - 6.2
[F13]	1.2 - 2.1 - 4.2
[F14]	1.2 - 2.2
[F15]	4.3
[F16]	5.2
[F18]	8.1
[F19]	7.2
[F20]	3.1 - 3.2 - 3.3

Introduction

Première partie

Comportement en temps long de modèles cinétiques d'alignement avec transition de phase

Chapitre 1

Transitions de phase du point de vue des équilibres

Contenu

1.1	Un modèle de type Vicsek avec intensités d'alignement et de bruit variables	15
1.2	Les orientations de corps rigides : des polymères en dimension 4	17
1.3	Rotations en dimensions supérieures	21
1.3.1	Des points critiques obtenus par des considérations de symétries	22
1.3.2	Encore des quaternions pour $SO(4)$	24
1.3.3	Perturbation au voisinage du seuil critique pour $n \geq 5$	26

On s'intéresse à des équations de type Fokker–Planck :

$$\partial_t f + \nu \nabla_v \cdot (\nabla_v (J_f \cdot v) f) = \sigma \Delta_v f, \quad J_f = \int_{\mathcal{S}} v f dv, \quad (1.1)$$

où $f(t, \cdot)$ est une mesure de masse totale $\rho > 0$ sur un ensemble \mathcal{S} de configurations (« orientations ») notées v , avec \mathcal{S} inclus dans un espace \mathcal{M} de dimension finie m . On a typiquement $v \in \mathbb{S}^{d-1}$, avec $m = d$ (mais de nombreux modèles peuvent également se mettre sous cette forme, comme on le verra plus tard). Cette équation modélise la compétition entre un phénomène d'alignement d'intensité ν (les particules d'orientation v subissent une force d'alignement tendant à maximiser $J_f \cdot v$, qui est la moyenne des $v' \cdot v$, dont le maximum est obtenu quand v est « aligné » avec v'), et une diffusion de coefficient σ . Comme on ne suppose pas $\rho = 1$, pour être plus précis l'intensité d'alignement est également proportionnelle à ρ ici, puisque J_f l'est. De façon générique, on peut écrire l'équation sous la forme

$$\partial_t f = \sigma \nabla_v \cdot \left(M_{\frac{\nu}{\sigma} J_f} \nabla_v \left(\frac{f}{M_{\frac{\nu}{\sigma} J_f}} \right) \right),$$

où $M_Y(v) = \frac{\exp(v \cdot Y)}{\mathcal{Z}(Y)}$ est une distribution de type von Mises sur \mathcal{S} pour un paramètre $Y \in \mathcal{M}$, où le coefficient de normalisation est donné par $\mathcal{Z}(Y) = \int_{\mathcal{S}} \exp(v \cdot Y) dy$. On voit alors que les équilibres recherchés sont de la forme $f = \rho M_Y$ où $Y = \frac{\nu}{\sigma} J_f$. On obtient donc l'équation de compatibilité suivante (non-linéaire, dans l'espace \mathcal{M} de dimension m) :

$$Y = \frac{\rho \nu}{\sigma} J_{M_Y},$$

et sa résolution permet de décrire les états stationnaires possibles suivant les valeurs des paramètres ρ, ν et σ . Une première étape est en général de réduire la dimension de ce problème en utilisant les symétries.

Lorsque \mathcal{S} est la sphère \mathbb{S}^{d-1} , on obtient le modèle étudié dans [F3] dans le cadre de ma thèse, aussi appelé dans la communauté « cristaux liquides » équation de Smoluchowski avec potentiel dipolaire [FS05], ou correspondant au modèle de Kuramoto avec oscillateurs identiques dans le cas $d = 2$ [GPP12]. En écrivant $Y = \kappa\Omega \in \mathbb{R}^d$ avec $\kappa \geq 0$ et $\Omega \in \mathbb{S}^{d-1}$, l'équation de compatibilité devient une équation scalaire sur κ (indépendante de Ω , qui peut être choisi arbitrairement). La transition de phase est du second ordre :

- Pour $\frac{\nu\rho}{\sigma} \leq d$, un seul état stationnaire : la distribution uniforme sur la sphère.
- Pour $\frac{\nu\rho}{\sigma} > d$, deux types d'équilibres : la distribution uniforme, et une famille d'équilibres de la forme $\rho M_{\kappa\Omega}$ (des distributions de von Mises), concentrées autour de $\Omega \in \mathbb{S}^{d-1}$, avec $\kappa > 0$ (dépendant de $\frac{\nu\rho}{\sigma}$), et dont le paramètre d'ordre $c(\kappa)$ converge vers 0 lorsque $\frac{\nu\rho}{\sigma} \rightarrow d$.

Les physiciens ont longtemps débattu pour savoir quel était l'ordre de la transition de phase dans le modèle de Vicsek⁹. Dans la note [F6] (suivie de l'article [F8], qui sera présenté dans la partie suivante pour la dérivation de modèles macroscopiques), en collaboration avec Pierre Degond et Jian-Guo Liu, nous avons montré qu'un simple changement faisant varier les coefficients ν et σ en fonction de $|J_f|$ pouvait donner lieu à de nombreux diagrammes de phase différents, ce que nous présentons dans la section 1.1.

En plus du cas de la sphère, où v représente une vitesse de norme 1, les deux exemples qui nous intéressent ici sont:

- les polymères en forme de bâtonnets, avec le potentiel de Maier-Saupe : tout élément de $\mathbb{S}^2/\{\pm 1\}$ peut être représenté par la matrice $q \otimes q - \frac{1}{3}\mathbb{I}_3$ où $q \in \mathbb{S}^2$. L'ensemble \mathcal{S} de telles matrices (appelées Q -tenseurs uniaxiaux) est donc inclus dans l'ensemble \mathcal{M} (de dimension 5) des matrices symétriques de trace nulles (appelées Q -tenseurs). En utilisant les symétries, l'équation de compatibilité peut être réduite en dimension 2 en considérant seulement des matrices diagonales de trace nulle. Cette équation a été résolue dans [FS05, LZZ05, ZFW05] : toutes les solutions sont axisymétriques (seulement deux valeurs propres pour la matrice diagonale), et on se ramène donc à un problème scalaire. La transition est du premier ordre, avec deux seuils (disons $\rho_* < \rho_c$ si on prend pour paramètre la densité ρ). Lorsque $\rho < \rho_*$, il n'y a que l'équilibre isotrope, entre ρ_* et ρ_c il y a en plus des familles d'équilibres de la forme $\rho M_{\kappa_{\pm}(q_0 \otimes q_0 - \frac{1}{3}\mathbb{I}_3)}$ avec $0 < \kappa_- < \kappa_+$ (équilibres appelés « prolata »¹⁰) et pour $\rho > \rho_c$ le signe de κ_- devient négatif (l'équilibre devient « oblate »¹¹). Ces résultats ont été étendus dans [WH08] en dimension $d \geq 3$: cette fois-ci on a toujours seulement deux valeurs propres pour la matrice diagonale, et pour chaque dimension possible de sous-espace propre, on a une équation de compatibilité scalaire.
- les matrices de rotation, introduites dans [F9] pour modéliser l'alignement de corps rigides (on présentera cet article, en collaboration avec Pierre Degond et Sara Merino-Aceituno, dans la partie suivante pour la dérivation d'un modèle macroscopique). La version homogène en espace du modèle original, légèrement différente du cadre présenté ici (qui correspond, lui à l'article [F14]), ne présente pas de transition de phase (la moyenne J_f est remplacée par la partie orthogonale de sa décomposition polaire), mais le mécanisme d'alignement est essentiellement le même. On a ici $\mathcal{S} = SO(3)$ et \mathcal{M} est simplement l'ensemble

9. Leur principale difficulté étant de s'entendre sur le modèle en lui-même. . .

10. Ballon de rugby.

11. Smarties[®].

1.1. Un modèle de type Vicsek avec intensités d'alignement et de bruit variables

des matrices carrées de taille 3. Dans une partie de l'article [F13], en collaboration avec Pierre Degond, Antoine Diez et Sara Merino-Aceituno, on résout complètement l'équation de compatibilité, en transformant le problème via les quaternions unitaires, et se ramenant à un problème de polymères en dimension 4. C'est ce que l'on présente dans la section 1.2. Pour les rotations en dimensions supérieures, j'ai trouvé un moyen de résoudre complètement l'équation de compatibilité en dimension 4, toujours en passant par les quaternions, ainsi qu'en dimension 5 ou plus, mais seulement au voisinage du seuil de transition, avec des considérations de symétries. Cela ne fait pas encore l'objet d'une publication, mais j'en présente les idées dans la section 1.3.

1.1 Un modèle de type Vicsek avec intensités d'alignement et de bruit variables

Dans [F6, F8], on considère l'équation

$$\partial_t f + \nu(|J_f|) \nabla_v \cdot (\nabla_v (\Omega_f \cdot v) f) = \sigma(|J_f|) \Delta_v f, \quad J_f = \int_{\mathbb{S}} v f dv, \quad \Omega_f = \frac{J_f}{|J_f|},$$

où cette fois-ci les coefficients d'alignement et de diffusion dépendent de la norme de la quantité de mouvement J_f . Lorsque $\nu(|J_f|) = \nu_0 |J_f|$ et $\sigma(|J_f|) = \sigma_0$, on retrouve (1.1). On impose aux fonctions ν et σ d'être C^1 , avec $\sigma > 0$ et $\nu(0) = 0$, de sorte que le modèle n'est pas singulier, et pour des raisons de simplicité, on suppose que $|J| \mapsto k(|J|) = \frac{\nu(|J|)}{\sigma(|J|)}$ est croissante (lorsque que $|J|$ augmente, autrement dit lorsque f se concentre autour de Ω_f , le phénomène d'alignement est renforcé par rapport à la diffusion). On note alors j la réciproque de cette fonction, de sorte que $\kappa = k(|J|) \Leftrightarrow |J| = j(\kappa)$. En notant Φ une primitive de k , on peut relier l'équation à un flot-gradient (pour la distance de Wasserstein W_2) de l'énergie suivante

$$\mathcal{F}(f) = \int_{\mathbb{S}} f \ln f dv - \Phi(|J_f|),$$

dont la dissipation $\mathcal{D}(f) = -\frac{d}{dt} \mathcal{F}(f)$ est donnée par

$$\mathcal{D}(f) = \sigma(|J_f|) \int_{\mathbb{S}} f |\nabla_v (\ln f - k(J_f) \Omega_f \cdot v)|^2 dv.$$

On a alors plusieurs caractérisations des états d'équilibre, dont la détermination se ramène à la résolution d'une équation scalaire.

Proposition 1.1. *Les conditions suivantes sont équivalentes :*

- (i) *État stationnaire : $f \in C^2(\mathbb{S})$ et $\nabla_v \cdot \left(M_{k(|J_f|)\Omega_f} \nabla_v \left(\frac{f}{M_{k(|J_f|)\Omega_f}} \right) \right) = 0$.*
- (ii) *Pas de dissipation : $f \in C^1(\mathbb{S})$ et $\mathcal{D}(f) = 0$.*
- (iii) *f est un point critique de \mathcal{F} sous contrainte de masse totale ρ .*
- (iv) *$f = \rho M_{\kappa\Omega}$ pour $\Omega \in \mathbb{S}$ et $\kappa \geq 0$ vérifiant l'équation de compatibilité suivante :*

$$j(\kappa) = \rho c(\kappa),$$

où le « paramètre d'ordre » $c(\kappa) = |J_{M_{\kappa\Omega}}| \in [0, 1]$ (indépendant de Ω) est donné par

$$c(\kappa) = \frac{\int_0^\pi \cos \theta e^{\kappa \cos \theta} \sin^{d-2} \theta d\theta}{\int_0^\pi e^{\kappa \cos \theta} \sin^{d-2} \theta d\theta}.$$

On voit donc que le diagramme de phase (l'ensemble des familles possibles d'équilibres en fonction de la valeur de ρ , une fois les fonctions ν et σ fixées) dépend du comportement de la fonction $\kappa \mapsto \frac{j(\kappa)}{c(\kappa)}$. On peut alors définir deux seuils ρ_* (le minimum de cette fonction) et ρ_c (sa limite en 0, supérieure à ρ_* , pouvant éventuellement être la même). Pour $\rho < \rho_*$, la seule solution est $\kappa = 0$, correspondant à l'équilibre uniforme. Dès que $\rho \geq \rho_*$, on a des familles d'équilibres non-isotropes de la forme $\rho M_{\kappa\Omega}$ pour des solutions $\kappa > 0$ de l'équation de compatibilité. Et lorsque ρ traverse le seuil ρ_c , alors le nombre de telles familles change (sous des hypothèses de non-dégénérescence, on passe d'un nombre pair à un nombre impair). On ne peut rien dire de plus a priori sur la fonction $\kappa \mapsto \frac{j(\kappa)}{c(\kappa)}$, on peut en fait avoir des diagrammes de phase assez arbitraires. Par contre on peut montrer que le seuil ρ_c correspond à la valeur pour laquelle l'équilibre isotrope cesse d'être un minimum local strict de \mathcal{F} (sous contrainte de masse totale ρ). Et on obtient également que le sens de variation de cette fonction $\frac{j}{c}$ permet de déterminer la nature du point critique associé à une famille d'équilibres de von Mises : lorsque $(\frac{j}{c})'(\kappa) > 0$, l'équilibre $\rho M_{\kappa\Omega}$ est un minimum local (non strict, puisque tout équilibre $\rho M_{\kappa\tilde{\Omega}}$ avec $\tilde{\Omega} \in \mathbb{S}$ est un point pour lequel \mathcal{F} prend la même valeur), et ce n'est plus le cas lorsque $(\frac{j}{c})'(\kappa) < 0$.

On a alors un cas générique de transition de phase du second ordre lorsque $(\frac{j}{c})'(\kappa) > 0$ pour tout $\kappa > 0$ (par exemple pour $\nu(|J|) = \nu_0|J|$, $\sigma(|J|) = \sigma_0$): dans ce cas il n'y a qu'un seuil $\rho_* = \rho_c$, et qu'une famille d'équilibres non-isotropes (qui correspond au minimum global de \mathcal{F}) lorsque $\rho > \rho_c$, et la valeur du paramètre d'ordre associé au minimum global de \mathcal{F} varie continûment, passant de 0 pour $\rho \leq \rho_c$ à $c(\kappa(\rho))$ pour $\rho > \rho_c$, où $\kappa(\rho)$ est la seule solution positive de l'équation de compatibilité. On montre alors que ce paramètre d'ordre se comporte comme $\alpha(\rho - \rho_c)^\beta$ lorsque $\rho \xrightarrow{>} \rho_c$, l'exposant critique¹² β pouvant a priori prendre toutes les valeurs possibles dans $]0, 1]$ suivant les choix des fonctions ν et σ .

Un autre cas typique est le cas où $\frac{j}{c}$ est décroissante puis croissante. C'est par exemple le cas lorsque l'alignement est de la forme $\nu(|J|) = \nu_0|J|$ et le coefficient de diffusion de la forme $\frac{\sigma_0}{1+|J|}$ (la figure 1.1 illustre ce phénomène, avec le calcul numérique du diagramme de phase pour le cas $\nu_0 = \sigma_0 = 1$). Cela peut être relié au « vectorial noise » de [CGGR08], appelé parfois bruit extrinsèque [ALV09], où le bruit est présent dans l'évaluation de la vitesse moyenne de chaque voisin : si les voisins sont bien alignés, les termes bruités se compensent lors de la normalisation pour calculer l'orientation moyenne. Dans ce cas on a seulement l'équilibre uniforme pour $\rho < \rho_*$, puis deux familles d'équilibres de von Mises pour $\rho_* < \rho < \rho_c$ (l'une étant un minimum local pour \mathcal{F} , l'autre non), l'équilibre uniforme restant un minimum local, et enfin une seule famille de distributions de von Mises pour $\rho > \rho_c$ (réalisant le minimum global de \mathcal{F}), l'équilibre uniforme n'étant plus un minimum local. On a alors un phénomène d'hystérésis. Partant d'un équilibre uniforme pour $\rho < \rho_*$, si on augmente ρ , cet équilibre (avec paramètre d'ordre 0) reste un minimum local jusqu'à ce que ρ dépasse ρ_c , et alors le paramètre d'ordre (commun) des minima locaux est proche de $c(\kappa(\rho_c)) = c_c$: il y a une discontinuité du paramètre d'ordre. Puis si l'on diminue ρ partant de $\rho > \rho_c$, cette fois-ci l'équilibre de type von Mises reste un minimum local jusqu'à sa disparition en $\rho = \rho_*$, le paramètre d'ordre passe cette fois-ci de $c_* = c(\kappa(\rho_*))$ à 0, avec une deuxième discontinuité. Cette transition de phase est discontinue, dite de premier ordre¹³.

On présentera dans le chapitre 5.1 un lien entre ces différents types de transitions de phase et l'hyperbolicité du modèle macroscopique dérivé formellement comme limite hydrodynamique du modèle inhomogène en espace associé.

12. Une partie du débat chez les physiciens : l'exposant critique est-il bien strictement inférieur à $\frac{1}{2}$, décrit à l'origine comme « a novel type of phase transition » par Vicsek [VCBJ⁺95] ?

13. Une partie de la réponse au débat : lorsqu'on change de type de bruit, donc de modèle, la transition n'est pas forcément la même...

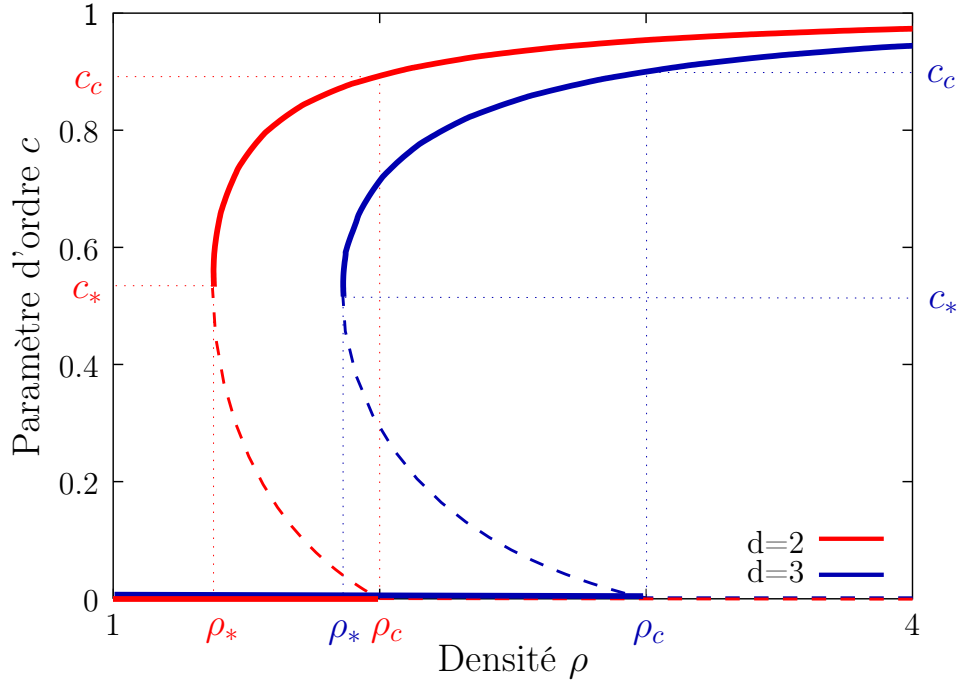


FIGURE 1.1 – Diagramme de phase du modèle avec hystérésis, dans le cas où $\nu(|J|) = |J|$ et $\sigma(|J|) = \frac{1}{1+|J|}$, en dimension 2 et 3. Les lignes pleines (resp. interrompues) correspondent à des équilibres minimisant (resp. ne minimisant pas) localement \mathcal{F} .

1.2 Les orientations de corps rigides : des polymères en dimension 4

Dans [F14], on considère un modèle d'alignement de matrices de rotation, notées $A \in SO(3)$. On a alors, pour reprendre l'introduction de ce chapitre, $\mathcal{S} = SO(3)$ et $\mathcal{M} = M_3(\mathbb{R})$. En normalisant de nouveau la mesure sur $SO(3)$ comme une mesure de probabilité, l'équation de Fokker-Planck s'écrit donc (en prenant $\nu = \sigma = 1$) :

$$\partial_t f + \nabla_A \cdot (\nabla_A (J_f \cdot A) f) = \Delta_A f, \quad J_f = \int_{SO(3)} A f dA.$$

On a fait le choix de prendre ici $A \cdot B = \frac{1}{2} \text{Tr}(AB^\top)$ comme produit scalaire sur \mathcal{M} , pour lequel la distance géodésique entre une rotation d'angle θ et l'identité vaut θ .

Dans la figure 1.2, des simulations numériques du modèle de particules associé mettent en évidence un phénomène de transition de phase du premier ordre, tel que dans la section précédente, avec deux seuils ρ_* et ρ_c . On lance 500 simulations d'un système de 500 particules, avec diverses configurations initiales pour lesquelles on trace le paramètre d'ordre c correspondant à $\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\|J_f\|}{\rho}$ (qui vaut 0 pour une distribution uniforme, et 1 lorsque la distribution est concentrée autour d'une matrice de rotation A_0 donnée)¹⁴. En temps grand, on observe que le paramètre d'ordre reste proche de 0 lorsque ρ est plus petit qu'un seuil ρ_* , qu'il se concentre autour d'une valeur positive (croissante avec ρ) lorsque ρ est plus grand qu'un deuxième seuil ρ_c , et qu'entre les deux,

14. Pour une meilleure illustration, le paramètre ρ et le paramètre d'ordre c ne sont pas initialement tirés uniformément, de façon à obtenir plus de points dans les régions d'intérêt.

certaines configurations voient leur paramètre d'ordre rester proche de 0 alors que d'autres ont leur paramètre d'ordre proche d'une valeur positive, dépendant de ρ .

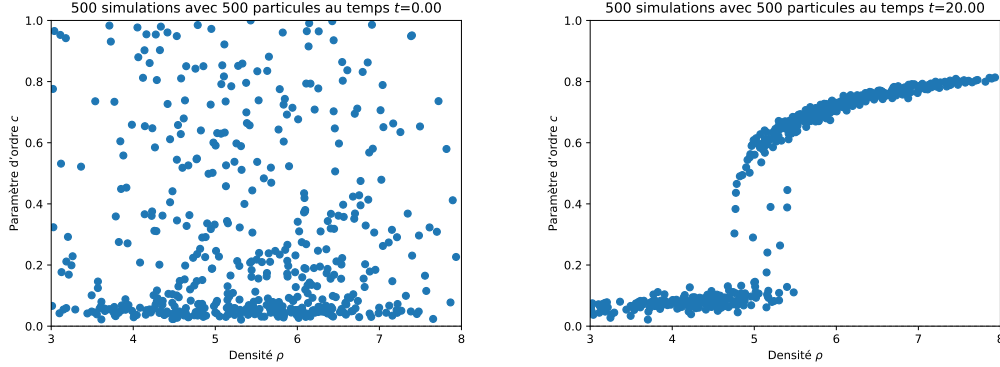


FIGURE 1.2 – Illustration numérique du phénomène de transition du premier ordre.

Comme dans la section précédente, on peut obtenir une énergie libre \mathcal{F} similaire, qui décroît au cours du temps: $\frac{d}{dt}\mathcal{F}(f) = -\mathcal{D}(f)$, avec

$$\mathcal{F}(f) = \int_{SO(3)} f \ln f dA - \frac{1}{2}|J_f|^2, \quad \mathcal{D}(f) = \int_{SO(3)} f |\nabla_A(\ln f - J_f \cdot A)|^2 dA.$$

On a de même, comme dans la proposition 1.1, équivalence entre f solution stationnaire de l'équation de Fokker–Planck, $\mathcal{D}(f) = 0$, f point critique de \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ , et f de la forme $f = \rho M_Y$ où $Y \in \mathcal{M}$ est solution de l'équation de compatibilité suivante :

$$Y = \rho J_{M_Y}, \quad \text{où } M_Y(A) = \frac{\exp(A \cdot Y)}{\mathcal{Z}(Y)}, \quad \text{avec } \mathcal{Z}(Y) = \int_{SO(3)} \exp(A \cdot Y) dA. \quad (1.2)$$

Cette équation, à résoudre dans \mathcal{M} de dimension 9, ne peut pas se ramener directement à une équation scalaire : il n'y a aucune raison a priori que Y soit proportionnel à une matrice de rotation. On peut cependant utiliser les symétries du problème pour se ramener au cas de Y diagonale, en écrivant $Y = PDQ$ avec $P, Q \in SO(3)$ et Y diagonale, et on a alors $D = \rho J_{M_D}$ par invariance à gauche et à droite de la mesure de Haar sur $SO(3)$. On obtient donc une équation de compatibilité dans un espace de dimension 3, mais cela ne suffit pas pour résoudre le problème simplement.

Dans [F13], en collaboration avec Pierre Degond, Antoine Diez et Sara Merino-Aceituno, nous résolvons cette équation de compatibilité¹⁵, grâce au lien entre ce modèle et le modèle de polymères avec potentiel de Maier–Saupe en dimension 4. En effet, en notant \mathbb{H}_1 l'ensemble des quaternions unitaires (qui s'identifie à \mathbb{S}^3), on a une identification entre $\mathbb{H}_1/\pm 1$ et $SO(3)$ par l'application suivante : à un quaternion q on associe l'application $\mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}q\mathbf{u}^*$ qui envoie un quaternion imaginaire pur (vu comme un élément de \mathbb{R}^3) vers un quaternion imaginaire pur de même norme, correspondant donc à une matrice orthogonale de dimension 3, c'est même une rotation, que l'on note $\Phi(q)$. En pratique, si $q = \cos(\frac{\theta}{2}) + \sin(\frac{\theta}{2})\mathbf{n}$, où le quaternion imaginaire

15. Cet article considère une équation de type BGK plutôt que Fokker–Planck pour simplifier le problème de convergence en temps long, mais les équilibres sont les mêmes, et on doit résoudre la même équation de compatibilité. On verra même dans le chapitre 2 que la même énergie \mathcal{F} est décroissante.

1.2. Les orientations de corps rigides : des polymères en dimension 4

pur \mathbf{n} est identifié à un vecteur unitaire de \mathbb{R}^3 , la rotation $\Phi(q)$ associée est la rotation d'angle θ autour de l'axe dirigé par \mathbf{n} . Réciproquement toute rotation peut s'écrire de cette forme (le quaternion q étant unique au signe près). Cette analogie était le point de départ de l'article [F10], où nous utilisons les quaternions pour décrire des modèles d'alignement de corps rigides (et dont le modèle macroscopique associé est décrit dans le chapitre 4), et elle se révèle très utile pour comprendre la solution de l'équation de compatibilité, en la transformant en une équation de compatibilité pour le modèles des polymères avec potentiel de Maier–Saupe, qui a été résolue dans [WH08]. En effet, à tout quaternion unitaire on peut associer le Q -tenseur $q \otimes q - \frac{1}{4}\mathbf{I}_4$, qui ne change pas lorsqu'on change q en $-q$. Ces deux plongements de $\mathbb{H}_1/\{\pm 1\}$ sont en fait les mêmes à travers un isomorphisme linéaire entre \mathcal{M} et les Q -tenseurs d'ordre 4 (l'ensemble $\mathcal{S}_4^0(\mathbb{R})$ des matrices symétriques de trace nulle et de taille 4, également de dimension 9), qui a de bonnes propriétés :

Proposition 1.2. *Il existe un isomorphisme linéaire ϕ entre $\mathcal{M} = M_3(\mathbb{R})$ et $\mathcal{S}_4^0(\mathbb{R})$ (tous deux de dimension 9) avec les propriétés suivantes :*

$$\begin{aligned} \forall q \in \mathbb{H}_1, \quad \phi(\Phi(q)) &= q \otimes q - \frac{1}{4}\mathbf{I}_4, \\ \forall Y \in M_3(\mathbb{R}), \forall q \in \mathbb{H}_1, \quad \frac{1}{2}Y \cdot \Phi(q) &= q \cdot \phi(Y)q = \phi(Y) \cdot (q \otimes q - \frac{1}{4}\mathbf{I}_4). \end{aligned}$$

Les produits scalaires apparaissant étant respectivement celui que l'on prend sur \mathcal{M} , puis le produit scalaire canonique dans \mathbb{R}^4 , et enfin le produit scalaire $\text{Tr}(Q\tilde{Q})$ pour $Q, \tilde{Q} \in \mathcal{S}_4^0(\mathbb{R})$. De plus, l'isomorphisme ϕ préserve la structure diagonale: $Y \in M_3(\mathbb{R})$ est diagonale si et seulement si $\phi(Y)$ est diagonale dans $\mathcal{S}_4^0(\mathbb{R})$.

On peut donc obtenir toutes les solutions de l'équation de compatibilité.

Proposition 1.3. *Les solutions de l'équation de compatibilité 1.2 sont les suivantes:*

- La matrice $Y = 0$,
- les matrices de la forme $Y = \alpha A_0$ avec $A_0 \in SO(3)$ et où $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ est solution de l'équation de compatibilité scalaire

$$\alpha = \rho c_1(\alpha), \tag{1.3}$$

- les matrices de la forme $Y = \alpha\sqrt{3}\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$ où \mathbf{a} et \mathbf{b} sont deux vecteurs unitaires de \mathbb{R}^3 et où $\alpha > 0$ est solution de l'équation de compatibilité scalaire

$$\alpha = \rho c_2(\alpha), \tag{1.4}$$

avec les fonctions c_1 et c_2 données par

$$\begin{aligned} c_1(\alpha) &= \frac{\int_0^\pi \frac{1}{3}(2 \cos \theta + 1) \sin^2(\frac{\theta}{2}) \exp(\alpha \cos \theta) d\theta}{\int_0^\pi \sin^2(\frac{\theta}{2}) \exp(\alpha \cos \theta) d\theta}, \\ c_2(\alpha) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\int_0^\pi \cos \varphi \sin \varphi \exp(\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha \cos \varphi) d\varphi}{\int_0^\pi \sin \varphi \exp(\frac{\sqrt{3}}{2}\alpha \cos \varphi) d\varphi}. \end{aligned}$$

En étudiant les variations des fonctions $\alpha \mapsto \frac{\alpha}{c_1(\alpha)}$ (décroissante, jusqu'à un $\alpha_* \approx 1.9395$, puis croissante), et $\alpha \mapsto \frac{\alpha}{c_2(\alpha)}$ (croissante), on peut alors démontrer l'existence des deux seuils de la transition de phase du premier ordre :

$$\rho_* = \frac{\alpha_*}{c_1(\alpha_*)} \approx 4.5832, \quad \rho_c = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\alpha}{c_1(\alpha)} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\alpha}{c_2(\alpha)} = 6.$$

On peut alors décrire complètement le diagramme de phase, représenté dans la figure 1.3.

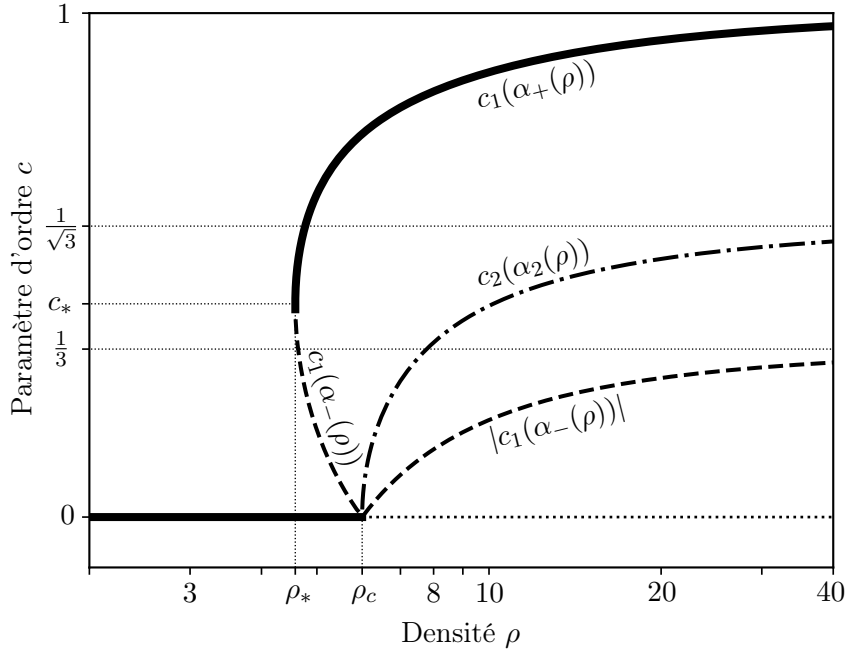


FIGURE 1.3 – Diagramme de phase du modèle d’alignement sur $SO(3)$, décrit en détail ci-dessous. Les lignes pleines correspondent aux minima locaux de \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ .

- Lorsque $\rho < \rho_*$, la seule solution est $Y = 0$, correspondant à l’équilibre uniforme sur $SO(3)$, qui est le minimum global de l’énergie sous contrainte de masse ρ . Le paramètre d’ordre vaut 0 (trait plein sur la figure 1.3).
- Lorsque $\rho_* < \rho < \rho_c$, l’équilibre uniforme reste un minimum local. On a deux familles supplémentaires de solutions, $Y = \alpha_{\pm}(\rho)A_0$ où $A_0 \in SO(3)$ et $0 < \alpha_-(\rho) < \alpha_+$ sont les deux solutions non nulles de (1.3). Cela donne deux familles d’équilibres (chacune de dimension 3, homéomorphe à $SO(3)$) de la forme $\rho M_{\alpha_{\pm}(\rho)A_0}$ (concentrés autour de la matrice de rotation A_0), les équilibres associés à $\alpha_+(\rho)$ sont des minima locaux, ceux associés à $\alpha_-(\rho)$ ne le sont pas. Les paramètres d’ordre de ces deux familles sont $c_1(\alpha_{\pm}(\rho))$ (trait plein pour α_+ , trait interrompu pour α_- sur la figure 1.3).
- Lorsque $\rho > \rho_c$, l’équilibre uniforme n’est plus un minimum local (en pointillé sur la figure 1.3). Les solutions non-nulles de (1.3) s’écrivent $\alpha_-(\rho) < 0 < \alpha_+(\rho)$, on a toujours deux familles d’équilibres, et il se rajoute une troisième famille d’équilibres (de dimension 4, homéomorphe à $\mathbb{S}^2 \times \mathbb{S}^2 / \{\pm 1\}$) associée à l’unique solution $\alpha_2 > 0$ de (1.4).
 - Un équilibre associé à $\alpha_+(\rho)$, de la forme $\rho M_{\alpha_+(\rho)A_0}$ correspond au minimum global de \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ . Le paramètre d’ordre est $c_1(\alpha_+(\rho))$ (trait plein sur la figure 1.3) et tend vers 1 lorsque $\rho \rightarrow +\infty$: l’équilibre s’approche de la masse de Dirac autour de A_0 .
 - Pour un équilibre associé à $\alpha_-(\rho) < 0$, de la forme $\rho M_{\alpha_-(\rho)A_0}$, le paramètre d’ordre vaut $|c_1(\alpha_-(\rho))|$ (en trait interrompu sur la figure 1.3), et l’équilibre n’est pas un minimum local de \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ . La densité de la distribution est maximale pour les rotations de la forme $A_0 R$, où R est une rotation d’angle π autour d’un vecteur unitaire quelconque. On peut également les voir comme les rotations de la forme $(-A_0)S_u$ où S_u est la réflexion autour de l’hyperplan orthogonal à u ,

pour un vecteur unitaire quelconque u . Cet ensemble de rotations forme une variété de dimension 2, isométrique à $\mathbb{S}^2/\{\pm 1\}$ (à une dilatation près), et la distribution se concentre autour de cette variété lorsque $\rho \rightarrow +\infty$, le paramètre d'ordre tendant alors vers $\frac{1}{3}$.

- Un équilibre associé à $\alpha_2(\rho)$, de la forme $\rho M_{\alpha_2(\rho)\sqrt{3}\mathbf{a}\otimes\mathbf{b}}$ avec \mathbf{a}, \mathbf{b} dans \mathbb{S}^2 n'est pas non plus un minimum local de \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ , et le paramètre d'ordre vaut $c_2(\alpha_2(\rho))$ (trait mixte sur la figure 1.3). La densité de la distribution est maximale pour les rotations envoyant \mathbf{b} sur \mathbf{a} . Cet ensemble de rotations forme une variété de dimension 1 isométrique à \mathbb{S}^1 , autour de laquelle la distribution se concentre lorsque $\rho \rightarrow +\infty$, et le paramètre d'ordre tend vers $\frac{1}{\sqrt{3}}$.

1.3 Rotations en dimensions supérieures

Se pose alors la question naturelle de savoir si on peut généraliser ce résultat en dimension supérieure. À cela on oppose tout de suite la réplique « mais pourquoi donc vouloir généraliser ceci en dimension supérieure »¹⁶ ? En terme d'application il n'y a pas à ma connaissance de besoin actuel d'étudier de l'alignement-diffusion sur $SO(4)$ et plus, mais sait-on jamais¹⁷... Dans tous les cas, obtenir des résultats en dimensions supérieures apporte parfois un éclairage sur les dimensions plus petites (on le verra également dans le chapitre 4). Et je dois avouer que le résultat sur les polymères en toute dimension de [WH08] nous a bien aidés pour comprendre l'alignement dans $SO(3)$ (je ne sais toujours pas comment le montrer directement sans passer par cette interprétation), alors j'espère que le travail que je présente dans cette section pourra servir un jour ! Ces résultats ne font pas encore l'objet d'une publication, la rédaction est en cours, avec le soutien précieux de Pierre Degond et Antoine Diez¹⁸.

On se place donc dans $SO(n)$, avec $n \geq 3$. On prend ici le produit scalaire $A \cdot B = \text{Tr}(AB^\top)$ sans le coefficient $\frac{1}{2}$. On cherche comme précédemment les états stationnaires de l'équation de Fokker-Planck (1.1) avec $\nu = \sigma = 1$, et $\mathcal{S} = SO(n)$ (on normalise la mesure de Haar de telle sorte que ce soit une probabilité). Cela revient à résoudre l'équation de compatibilité

$$Y = \rho J_{M_Y}, \quad \text{où } M_Y(A) = \frac{\exp(A \cdot Y)}{\mathcal{Z}(Y)}, \quad \text{avec } \mathcal{Z}(Y) = \int_{SO(n)} \exp(A \cdot Y) dA. \quad (1.5)$$

avec $Y \in \mathcal{M} = M_n(\mathbb{R})$. On a également comme précédemment $\frac{d}{dt}\mathcal{F}(f) = -\mathcal{D}(f)$, avec

$$\mathcal{F}(f) = \int_{SO(n)} f \ln f dA - \frac{1}{2}|J_f|^2, \quad \mathcal{D}(f) = \int_{SO(n)} f |\nabla_A(\ln f - J_f \cdot A)|^2 dA.$$

Le premier résultat que l'on obtient c'est que l'équilibre uniforme (correspondant à $Y = 0$) est un minimum local de l'énergie \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ lorsque $\rho < \rho_c = n$, et ce n'est plus le cas lorsque $\rho > \rho_c$ (la différence avec la section précédente où on avait $\rho_c = 6$ pour $n = 3$ provient du changement de produit scalaire). On s'intéresse donc aux solutions non-nulles, qui peuvent être caractérisées comme points critiques de la fonction de partition \mathcal{Z} sous contrainte de norme constante :

16. Argument spontané, celui qui vient du cœur : « parce qu'on aime les maths ».

17. Argument marketing, celui qu'on doit mettre dans les appels à projets : « exploration de configurations particulières en grande dimension \Rightarrow intelligence artificielle, *data science* ».

18. sans qui mes vieilles notes « vague thoughts on compatibility equations » de 2018 traîneraient encore dans la poussière (numérique).

Proposition 1.4. *Si $Y \neq 0$ est une solution de l'équation de compatibilité (1.5), c'est alors un point critique de \mathcal{Z} sous contrainte de norme constante. Et réciproquement, si $Y \neq 0$ est un tel point critique, il existe alors $\rho > 0$ tel que Y soit une solution de l'équation de compatibilité (1.5).*

1.3.1 Des points critiques obtenus par des considérations de symétries

On peut également utiliser les symétries pour réduire le problème : si on multiplie à gauche et à droite une solution Y par des matrices de rotation $P, Q \in SO(n)$, on obtient de nouveau une solution. Et comme on peut toujours écrire une matrice $Y \in \mathcal{M}$ comme $Y = PDQ$ avec P, Q dans $SO(n)$ et $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$ diagonale (on peut même imposer $d_1 \geq \dots \geq d_{n-1} \geq |d_n|$, ce qu'on a appelé décomposition spéciale en valeurs singulières dans [F13]), on se ramène donc à chercher les points critiques de $D \mapsto \mathcal{Z}(D)$ dans l'espace des matrices diagonales (sous contrainte de norme constante). On écrira $\zeta(v) = \mathcal{Z}(\text{diag}(v))$ et on cherche les points critiques de ζ sur la sphère de rayon $r > 0$ dans \mathbb{R}^n . Si on considère la mesure image μ de la mesure de Haar sur $SO(n)$ par l'application qui à $A \in SO(n)$ associe sa diagonale principale (vue comme un vecteur de \mathbb{R}^n), on obtient donc

$$\zeta(v) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{v \cdot a} d\mu(a).$$

On va maintenant utiliser des symétries supplémentaires de la mesure μ pour obtenir des points critiques de ζ . Par le théorème de Horn [Hor54, Bor93], on sait déjà que le support de μ (l'ensemble des diagonales possibles de matrices de rotations) est le demi-hypercube H_n : l'enveloppe convexe des points de la forme $(\pm 1, \dots, \pm 1)$ avec un nombre pair de signes moins. Et on note D_n le groupe de Coxeter constitué des matrices de permutation dont on change éventuellement le signe d'un nombre pair de « uns ». C'est un groupe de symétries qui laisse H_n invariant, et il se trouve qu'il laisse également μ invariante. On a besoin d'un peu de vocabulaire d'action de groupe :

Définition 1.1. *Pour G un sous-groupe de $GL_n(\mathbb{R})$, et v un élément de \mathbb{R}^n , on note $\text{Stab}_G(v)$ son stabilisateur (le sous-groupe des matrices $P \in G$ telles que $Pv = v$). Et si G est un sous-ensemble de matrices, on note $\text{Fix}(G)$ le sous-espace vectoriel des points fixes communs à tous les éléments de G .*

On obtient alors une famille de points critiques en utilisant seulement ces symétries :

Proposition 1.5. *La fonction ζ est invariante sous l'action de D_n .*

Par conséquent, si $v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ est tel que $\text{Fix}(\text{Stab}_{D_n}(v)) = \text{Vect}(v)$, alors v (ainsi que tout point dans son orbite par l'action de D_n) est un point critique de ζ sur la sphère de rayon $\|v\|$ centrée en 0.

De plus, les points $v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ tels que $\text{Fix}(\text{Stab}_{D_n}(v)) = \text{Vect}(v)$ sont exactement les points proportionnels à $\mathbf{d}_0 = (1, \dots, 1)$, $\mathbf{d}_i = (1, 1, \dots, 1, 0, \dots, 0)$ (avec $n - i$ uns et i zéros) pour $2 \leq i < n$, $\mathbf{s} = (1, \dots, 1, -1)$, ou les points dans leurs orbites sous l'action de D_n .

Ces points donnent donc des points critiques sur la sphère de n'importe quel rayon $r > 0$. Lorsqu'on observe les points donnés par la proposition 1.5, on peut les voir comme les centres d'éléments particuliers du polytope H_n : les points dans l'orbite de \mathbf{d}_0 sont les sommets, ceux dans l'orbite de \mathbf{d}_2 sont les milieux des arêtes, ceux dans l'orbite de \mathbf{d}_m pour $m \geq 3$ sont proportionnels aux centres des cellules m -dimensionnelles qui sont des demi-hypercubes. Il y a un autre type de cellules m -dimensionnelles dans H_n , des simplexes, et leurs centres ne sont pas en général dans la liste des points donnés par la proposition 1.5, sauf dans le cas $m = n - 1$, qui correspond au point \mathbf{s} (à une dilatation près).

Lorsqu'on revient au problème original, on obtient donc des familles d'équilibres pour l'équation de Fokker–Planck, que l'on peut caractériser grâce à des solutions d'équations de compatibilité scalaire comme dans la section précédente. Lorsque $u \in \mathbb{S}^{n-1}$, on note $S_u = I_n - 2u \otimes u$ la réflexion orthogonale qui fixe l'hyperplan orthogonal à u . Pour $i = 0$ ou $2 \leq i < n$, on obtient des fonctions $c_i(\alpha)$, ainsi qu'une fonction $\tilde{c}(\alpha)$, dont on ne précise pas les expressions ici¹⁹. Et on a la description suivante des solutions de l'équation de compatibilité que l'on obtient, ainsi que des équilibres associés.

Théorème 1.1. *Les solutions de l'équation de compatibilité (1.5) correspondant aux points critiques donnés par la proposition 1.5 sont les suivants :*

- Toute matrice de la forme $Y = \alpha \Lambda$ où $\Lambda \in SO(n)$ et $\alpha > 0$ est une solution de l'équation de compatibilité $\alpha = \rho_{c_0}(\alpha)$. Lorsque α est grand, la distribution M_Y est concentrée autour de Λ .

Cet ensemble d'équilibres est une variété de dimension $\frac{n(n-1)}{2}$, homéomorphe à $SO(n)$.

- Pour $2 \leq i \leq n-1$, toute matrice de la forme $Y = \sqrt{\frac{n}{n-i}} \alpha G_{E_{n-i}, F_{n-i}}$, où E_{n-i} et F_{n-i} sont deux sous-espaces de \mathbb{R}^n de dimension $n-i$, $G_{E_{n-i}, F_{n-i}}$ est la matrice d'une application linéaire g de noyau E_{n-i}^\perp et d'image F_{n-i} , telle que $g|_{E_{n-i}}$ est une application orthogonale de E_{n-i} vers F_{n-i} , et $\alpha > 0$ est une solution de l'équation de compatibilité $\alpha = \rho_{c_i}(\alpha)$. Lorsque α est grand, la distribution M_Y se concentre autour de l'ensemble des matrices de rotation A (vues comme des applications linéaires) dont la restriction à E_{n-i} est égale à $g|_{E_{n-i}}$ (cet ensemble de matrices est isométrique à $SO(i)$).

Cet ensemble d'équilibres est une variété de dimension $\frac{(n-i)(n+3i-1)}{2}$.

- Toute matrice de la forme $Y = \alpha \tilde{\Lambda}$ avec $\tilde{\Lambda} \in O(n) \setminus SO(n)$, où $\alpha > 0$ est une solution de l'équation de compatibilité $\alpha = \rho_{\tilde{c}}(\alpha)$. Lorsque α est grand, la distribution M_Y se concentre autour de l'ensemble des matrices de rotation de la forme $A = \tilde{\Lambda} S_u$ avec $u \in \mathbb{S}^{n-1}$ (cet ensemble de matrices est isométrique, à une dilatation près, à $\mathbb{S}^{n-1}/\{\pm 1\}$).

Cet ensemble d'équilibres est une variété de dimension $\frac{n(n-1)}{2}$, homéomorphe à $SO(n)$.

On n'a pas encore caractérisé la nature des points critiques de \mathcal{F} correspondant, même si on n'a pas trop de doute sur ce qu'on espère obtenir : seule la première famille est un minimum local, et seulement lorsque la dérivée de $\alpha \mapsto \frac{\alpha}{c_0(\alpha)}$ est strictement positive. On s'attend également à ce que cette fonction soit décroissante puis croissante, donnant lieu à une transition de phase du premier ordre.

Lorsqu'on observe la résolution dans le cas de $SO(3)$ donnée dans la section précédente, on obtient que tous les équilibres sont présents dans le théorème 1.1, avec $c_0(\alpha)$ correspondant au $c_1(\alpha)$ de la section précédente pour $\alpha > 0$, $c_2(\alpha)$ étant inchangé (E_1 et F_1 correspondant à $\text{Vect}(\mathbf{b})$ et $\text{Vect}(\mathbf{a})$), et $\tilde{c}(\alpha)$ correspondant à $-c_1(-\alpha)$ pour $\alpha < 0$.

On peut donc se demander si c'est le cas pour $n \geq 4$. Est-ce que le théorème 1.1 contient toutes les solutions de l'équation de compatibilité ? La réponse est non pour $n = 4$ (il est connu que $SO(4)$ est particulier parmi les $SO(n)$, en particulier il n'est pas simple en tant que groupe de Lie, son algèbre de Lie étant isomorphe à $\mathfrak{o}(3) \oplus \mathfrak{o}(3)$), et c'est l'objet de la sous-section suivante. Pour $n \geq 5$, on conjecture que c'est le cas, et c'est en effet le cas au voisinage de la distribution uniforme (donc du seuil critique ρ_c), ce que l'on explique dans la dernière sous-section.

19. ce sont des moyennes de fonctions de la forme $\omega \cdot a$ contre une mesure proportionnelle à $e^{\alpha \omega \cdot a} d\mu$, pour des points ω proportionnels aux points donnés par la proposition 1.5.

1.3.2 Encore des quaternions pour $SO(4)$

Si on regarde le demi-hypercube H_4 il est en fait composé de 16 cellules tridimensionnelles : 8 tétraèdres, vus comme des demi-cubes, dont les centres sont dans les orbites de \mathbf{d}_0 par l'action de D_4 , et 8 tétraèdres, vus comme des 3-simplexes, dont les centres sont dans l'orbite de $\frac{1}{2}\mathbf{s}$. Le demi-hypercube H_4 est en fait un polytope régulier (de même que le demi-cube H_3 est en fait un tétraèdre régulier), l'hyperoctaèdre (le dual de l'hypercube). Et son groupe de symétrie est donc plus grand que D_4 : on peut y rajouter des rotations qui envoient les tétraèdres du premier type vers des tétraèdres de l'autre type. La magie est alors que ζ est également invariant sous l'action de ce nouveau groupe. En faisant agir ce groupe à la place de D_4 , on obtient donc de nouveaux points, qui n'étaient pas présents dans la proposition 1.5 : les points proportionnels à $\mathbf{s}_2 = (1, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, -\frac{1}{3})$ ou aux points dans leur orbite sous l'action de D_4 , qui correspondent aux centres des faces de H_4 . On ne détaille pas la preuve de l'invariance de ζ par rapport à ce nouveau groupe, parce que ce qui nous intéresse est de montrer que l'on obtient bien l'ensemble des solutions, et que l'on a une méthode plus directe pour cela, qui donnera alors toutes les solutions.

L'idée est d'utiliser de nouveau un lien avec les quaternions. En effet si on considère la multiplication à gauche par un quaternion unitaire $q \in \mathbb{H}_1$, cela correspond à appliquer une matrice de rotation $L(q)$ dans \mathbb{R}^4 , dite « isocline gauche ». De même pour la multiplication à droite, on obtient $R(q)$ dite « isocline droite ». Il se trouve que toute rotation isocline gauche commute avec toute isocline droite, et que tout élément de $SO(4)$ peut s'écrire sous la forme $L(q)R(\tilde{q})$ (de seulement deux manières, l'autre étant $L(-q)R(-\tilde{q})$). On a donc un isomorphisme entre $SO(4)$ et $(\mathbb{H}_1 \times \mathbb{H}_1)/\{\pm 1\}$, qui nous permet d'avoir une expression simple de la mesure de Haar : pour toute fonction continue f sur $SO(4)$, on a

$$\int_{SO(4)} f(A) dA = \int_{\mathbb{H}_1 \times \mathbb{H}_1} f(L(q)R(\tilde{q})) dq d\tilde{q}.$$

On peut alors exprimer la fonction ζ d'une manière assez simple, à l'aide de produits de Schur, et en utilisant une transformation qui envoie l'hypercube H_4 sur l'hyperoctaèdre de sommets $\pm \mathbf{e}_i$ pour $1 \leq i \leq 4$.

Lemme 1.1. *On identifie \mathbb{H} avec \mathbb{R}^4 et on note \odot pour le produit de Schur de deux vecteurs : si $q = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$ et $\tilde{q} = \tilde{a} + \tilde{b}\mathbf{i} + \tilde{c}\mathbf{j} + \tilde{d}\mathbf{k}$, alors $q \odot \tilde{q} = a\tilde{a} + b\tilde{b}\mathbf{i} + c\tilde{c}\mathbf{j} + d\tilde{d}\mathbf{k}$.*

On introduit la réflexion orthogonale fixant l'hyperplan orthogonal à $\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_4$, donnée par la matrice

$$N = S_{\frac{1}{2}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_4)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Enfin, pour $u \in \mathbb{R}^4$, on définit

$$\xi(u) = \int_{\mathbb{H}_1 \times \mathbb{H}_1} e^{u \cdot (q \odot \tilde{q})} d\tilde{q} dq.$$

Alors, pour tout $v \in \mathbb{R}^4$, on a $\zeta(v) = \xi(2Nv)$.

Comme la transformation N est orthogonale, les points critiques de ζ sous contrainte de norme constante correspondent à des points critiques de ξ sous contrainte de norme constante.

On peut alors utiliser l'expression du gradient de ξ , en identifiant de nouveau les quaternions avec \mathbb{R}^4 :

$$\nabla_u \xi(u) = \int_{\mathbb{S}_3 \times \mathbb{S}_3} (v \odot \tilde{v}) e^{u \cdot (v \odot \tilde{v})} d\tilde{v} dv,$$

ainsi que quelques lemmes de calculs techniques pour montrer que les points critiques de ξ sur toute sphère centrée en 0 sont exactement ceux ayant leurs coordonnées non-nulles de même valeur absolue. Et en appliquant de nouveau la transformation N , on obtient donc bien tous les points critiques pour ζ . Au final on obtient donc la caractérisation de tous les équilibres en dimension 4, à l'aide d'une dernière fonction c_1 .

Théorème 1.2. *Les solutions de l'équation de compatibilité (1.5) en dimension $n = 4$ sont les suivantes :*

- La matrice $Y = 0$ (pour tout $\rho > 0$), correspondant à l'état stationnaire uniforme.
- Toute matrice Y décrite dans le théorème 1.1, qui donne 4 familles d'équilibres, avec les relations de compatibilité $\alpha = \rho c_i(\alpha)$ pour $i = 0, 2, 3$, ainsi que $\alpha = \rho \tilde{c}(\alpha)$. Par ailleurs, on a $c_3(\alpha) = \tilde{c}(\alpha)$.
- Toute matrice de la forme $Y = \frac{1}{\sqrt{3}} \alpha (4(\Lambda \mathbf{a}) \otimes \mathbf{a} - \Lambda)$ où $\Lambda \in SO(4)$, $\mathbf{a} \in \mathbb{S}^3$, et $\alpha > 0$ est une solution de l'équation de compatibilité $\alpha = \rho c_1(\alpha)$. Lorsque α est grand, la distribution M_Y se concentre autour de matrices de rotations A telles que $A\mathbf{a} = \mathbf{a}$ et la restriction de A à \mathbf{a}^\perp est une rotation d'angle π autour d'un vecteur unitaire \mathbf{b} orthogonal à \mathbf{a} (cet ensemble de matrices est isométrique à $\mathbb{S}^2/\{\pm 1\}$, à dilatation près).

Ces équilibres forment une variété de dimension 9, homéomorphe à $SO(4) \times (\mathbb{S}_3/\{\pm 1\})$.

Numériquement, on obtient un diagramme de phase toujours de type « transition du premier ordre », avec deux seuils $\rho_* \approx 3.3894$ et $\rho_c = 4$. (voir la figure 1.4). Contrairement au cas $n = 3$, toutes les branches de ce diagramme ont une dérivée verticale au voisinage de $\rho = \rho_c$.

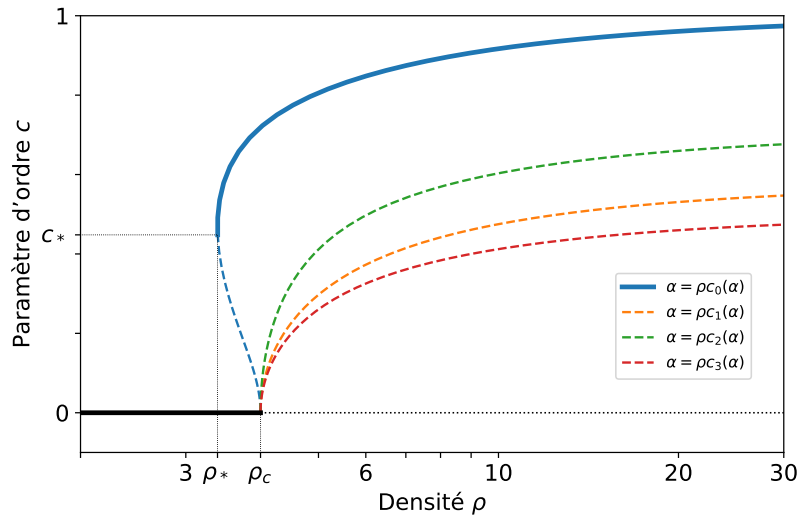


FIGURE 1.4 – Diagramme de phase du modèle d'alignement sur $SO(4)$. On s'attend à ce que les lignes pleines correspondent aux minima locaux de \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ .

1.3.3 Perturbation au voisinage du seuil critique pour $n \geq 5$

En dimension supérieure à 5, on n'a pas pour l'instant su exploiter de forme convenable de la mesure de Haar qui nous permette de conclure. Mais on peut effectuer un développement asymptotique de la fonction ζ sur une sphère de petit rayon $r > 0$, et ainsi essayer de comprendre les solutions de l'équation de compatibilité au voisinage de zéro (ce qui correspond à des équilibres proches de l'uniforme). On peut d'ailleurs montrer que dans ce cas, ρ doit être proche de $\rho_c = n$.

Pour une fonction φ dépendant de $a = (a_1, \dots, a_n)$, on note $\langle \varphi(a) \rangle_\mu = \int_{H^n} \varphi(a) d\mu$, et on cherche les points critiques de $\zeta_r(v) = \zeta(rv) = \langle e^{r \cdot v \cdot a} \rangle_\mu$ sur la sphère de rayon 1. Ceci correspond à trouver des points v de \mathbb{S}^{n-1} tels que $\langle a e^{r \cdot v \cdot a} \rangle_\mu = \lambda v$ (on a alors $\lambda > 0$ pour des raisons de convexité). On a

$$\zeta_r(v) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r^k}{k!} \langle (v \cdot a)^k \rangle_\mu = \sum_{(k_1, \dots, k_n)} \left(\prod_{i=1}^n \frac{r^{k_i} v_i^{k_i}}{k_i!} \right) \langle \prod_{i=1}^n a_i^{k_i} \rangle_\mu,$$

et on peut réduire l'étude des points critiques de ζ_r à celle d'une fonction plus simple, avec une expression pratique lorsque r est petit.

Proposition 1.6. *Les points critiques de ζ_r sur la sphère de rayon 1 sont les mêmes que ceux de la fonction F_r donnée par*

$$F_r(v) = \sum_i v_i^4 + \alpha r^2 \sum_i v_i^6 + r^4 g(r, v) + r^{n-4} (\beta + \gamma r^2) \prod_{i=1}^n v_i + r^n h(r, v), \quad (1.6)$$

où :

- la fonction g est un polynôme en les sommes de Newton $s_p = \sum_{i=1}^n v_i^{2p}$ pour $2 \leq p \leq n$, dont les coefficients sont des fonctions lisses de r ;
- la fonction h est lisse (et symétrique en les variables v_i) ;
- les coefficients α , β and γ sont donnés par

$$\alpha = \frac{\langle a_1^6 - 15a_1^4 a_2^2 + 30a_1^2 a_2^2 a_3^2 \rangle_\mu}{30 \langle a_1^4 - 3a_1^2 a_2^2 \rangle_\mu}, \quad \beta = \frac{24 \langle \prod_{i=1}^n a_i \rangle_\mu}{\langle a_1^4 - 3a_1^2 a_2^2 \rangle_\mu},$$

$$\gamma = \frac{4 \langle a_1^2 \prod_{i=1}^n a_i \rangle_\mu}{\langle a_1^4 - 3a_1^2 a_2^2 \rangle_\mu} - \frac{12 \langle a_1^4 a_2^2 - 3a_1^2 a_2^2 a_3^2 \rangle_\mu \langle \prod_{i=1}^n a_i \rangle_\mu}{(\langle a_1^4 - 3a_1^2 a_2^2 \rangle_\mu)^2}.$$

La partie technique, une fois obtenues les expressions de α, β, γ , consiste à obtenir leur valeur en fonction de n . On y arrive en utilisant les symétries de μ . Et en écrivant les multiplicateurs de Lagrange associés au problème de recherche des points critiques de F_r sur la sphère de rayon 1, on obtient²⁰ que pour r suffisamment petit et pour $n \geq 5$, les seules solutions correspondent aux solutions obtenues par la proposition 1.5. On voit bien dans l'expression de F_r que le terme en r^{n-4} peut avoir un rôle différent en dimension 4 (et même en dimension 3), et c'est effectivement ce qui fait apparaître des solutions supplémentaires pour $n = 4$.

Conjecture 1.1. *Pour $n \geq 5$, les seules solutions non-nulles de l'équation de compatibilité sont celles données par le théorème 1.1.*

²⁰. sous réserve de certification des calculs par les autorités compétentes.

Perspectives La résolution de la conjecture 1.1 n'est peut-être pas la priorité, mais c'est une question intéressante. La preuve de [WH08] pour le cas des polymères en toute dimension pourrait éventuellement être une inspiration, mais ce n'est pas si clair (il reste un peu de magie dans cette preuve, où on voit bien que tout fonctionne dans le cas du potentiel de Maier–Saupe, mais pour laquelle on n'a pas une vue très globale du cadre dans lequel on pourrait l'adapter). Il reste également à déterminer la nature des points critiques de \mathcal{F} donnés par le théorème 1.1. En règle générale, la détermination des équilibres pour des modèles présentant des symétries et des contraintes géométriques peut se révéler assez complexe. Il a par exemple été montré, dans le cas du couplage entre le potentiel dipolaire et celui de Maier–Saupe, que les minimiseurs locaux de \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ constante sont axisymétriques [ZWWF07, WH08], mais à ma connaissance la détermination complète des équilibres n'est pas disponible. On peut également noter le résultat récent [Li21] pour le modèle de Cucker–Smale avec friction (qui joue le rôle d'une contrainte géométrique, bien que l'espace en vitesse soit \mathbb{R}^d), où le diagramme de phase, initialement obtenu loin du seuil de transition dans [BCCD16], est décrit pour toutes les valeurs des paramètres.

Chapitre 2

Comportement en temps long de modèles homogènes en espace

Contenu

2.1	Équation de BGK pour l’alignement de corps rigides	30
2.2	Stabilité et convergence exponentielle en entropie relative pour Fokker–Planck sur $SO(3)$	31
2.3	Vers un cadre générique unifié	33

On s’intéresse maintenant au comportement en temps long des solutions des modèles avec transition de phase étudiés dans le chapitre précédent. Comme on a accès à une énergie libre \mathcal{F} décroissante en temps, on se concentre sur la description au voisinage de familles d’équilibres minimisant localement \mathcal{F} (sous contrainte de masse constante, on note \mathcal{F}_∞ la valeur de \mathcal{F} pour chaque famille d’équilibre considérée).

Pour ce qui est du modèle de type Vicsek avec différents types de transitions de phase, correspondant à la section 1.1, le comportement en temps long est décrit dans [F6, F8], en collaboration avec Pierre Degond et Jian-Guo Liu, suivant la méthode développée durant ma thèse dans [F3] (voir aussi [FKM18] pour une approche similaire en entropie relative, dans le cas du modèle normalisé sans transition de phase). L’idée est de comparer localement $\mathcal{F} - \mathcal{F}_\infty$ et sa dissipation \mathcal{D} avec une distance en norme H^s entre f et l’équilibre de von Mises $\rho M_{\kappa\Omega(t)}$, où $\Omega(t) \in \mathbb{S}^{d-1}$ est l’orientation moyenne de la distribution f (la direction de $J_f = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} v f(v) dv$), et κ est la solution de l’équation de compatibilité scalaire associée à ρ . On obtient alors que pour les branches d’équilibres minimisant localement \mathcal{F} , ces normes H^s convergent exponentiellement vite vers 0. L’idée est alors de contrôler ensuite le déplacement de $\Omega(t)$ par ces normes H^s , ce qui donne alors la convergence de $\Omega(t)$ vers un Ω_∞ , avec la même vitesse de convergence (on suspecte en fait que $\Omega(t)$ converge plus vite²¹, de manière analogue à ce que l’on montrera dans le chapitre 6 pour le modèle sans bruit). On obtient donc la convergence exponentielle en toute norme H^s vers un unique équilibre.

Lorsqu’on essaye d’appliquer cette méthode au modèle d’alignement sur $SO(3)$, des difficultés apparaissent. Il faut d’abord choisir l’équilibre (dépendant du temps) que l’on compare à f , et les comparaisons avec \mathcal{F} et \mathcal{D} se révèlent plus techniques. Je pense qu’il serait possible d’aller au bout de ces calculs, mais on verra plus tard qu’il y a une meilleure approche.

²¹. nous avons commencé à obtenir des résultats en ce sens avec Jian-Guo Liu, mais la rédaction n’a pas suivi. . .

Nous avons donc commencé, dans le cadre de la thèse d'Antoine Diez (en codirection avec Pierre Degond et Sara Merino-Aceituno), à regarder le comportement en temps long pour l'équation de type BGK plutôt que Fokker–Planck. Ces deux équations sont liées par le fait qu'elles ont les mêmes types d'équilibres (l'équation de BGK est construite en ce but), mais également parce l'énergie libre \mathcal{F} est également décroissante en temps. La simplification principale de l'étude du modèle de BGK est alors que le moment J_f satisfait en fait une équation différentielle en dimension finie. De plus cette équation est le flot-gradient d'un potentiel V lié à la fonction de partition \mathcal{Z} . La connaissance du potentiel permet donc d'obtenir le comportement en temps long de J_f , et donc de la distribution f . Il y a également une sorte de loi de conservation supplémentaire qui fait que l'on peut déterminer facilement la limite en temps long à partir de la donnée initiale. On présente ces résultats obtenus dans la section 2.1.

J'ai ensuite développé dans [F14] une méthode pour traiter le cas de l'équation de Fokker–Planck²² sur $SO(3)$. Plutôt que de comparer f à un équilibre, on le compare à ρM_{J_f} (qui n'est un équilibre que si J_f est solution de l'équation de compatibilité). En effet, les termes \mathcal{F} et \mathcal{D} font naturellement apparaître l'entropie relative et l'information de Fisher par rapport à cet état ρM_{J_f} . On a alors seulement besoin de comprendre le comportement de V (le même potentiel que pour l'équation de BGK!) pour obtenir la convergence exponentielle vers un équilibre (en contrôlant de même le déplacement de J_f). Je présente ces résultats dans la section 2.2.

Inspirés par ce travail sur $SO(3)$, un projet est en cours avec Pierre Degond et Antoine Diez pour appliquer cette méthode dans un cadre unifié. Cela permettrait d'obtenir par exemple des taux de convergence vers l'équilibre pour le cas des polymères avec potentiel de Maier–Saupe, ce qui, à ma connaissance, est un résultat nouveau. On en présente les idées dans la section 2.3.

2.1 Équation de BGK pour l'alignement de corps rigides

Dans [F13], en collaboration avec Pierre Degond, Antoine Diez et Sara Merino-Aceituno, on considère l'équation de type BGK suivante

$$\partial_t f = \rho M_{J_f} - f,$$

où, comme dans (1.2), on a

$$M_Y(A) = \frac{\exp(A \cdot Y)}{\mathcal{Z}(Y)}, \quad \text{avec } \mathcal{Z}(Y) = \int_{SO(3)} \exp(A \cdot Y) dA.$$

On observe donc qu'un équilibre doit être de la forme ρM_Y avec $Y = \rho J_{M_Y}$, c'est à dire exactement une solution de l'équation de compatibilité (1.2). Il se trouve que l'on a également décroissance de la même énergie : $\frac{d}{dt} \mathcal{F} = -\tilde{\mathcal{D}}(f)$, avec

$$\mathcal{F}(f) = \int_{SO(3)} f \ln f dA - \frac{1}{2} |J_f|^2, \quad \tilde{\mathcal{D}}(f) = \int_{SO(3)} (f - \rho M_{J_f}) (\ln f - \ln(\rho M_{J_f})) dA.$$

Si on écrit $Y(t) = J_{f(t, \cdot)}$ on obtient que Y satisfait une équation différentielle de type flot-gradient :

$$\frac{d}{dt} Y = \rho J_{M_Y} - Y = -\nabla_Y V, \quad V(Y) = \frac{1}{2} |Y|^2 - \rho \ln \mathcal{Z}(Y). \quad (2.1)$$

22. L'idée de départ était simplement, dans le cadre d'un compte-rendu d'un workshop à Rome, de présenter les résultats sur BGK, de montrer les différences avec Fokker–Planck, et d'expliquer pourquoi on n'arrivait pas à le faire pour Fokker–Planck, et finalement l'article de revue s'est transformé en un joli théorème. Je ne remercie jamais assez Francesco Salvarani de m'avoir poussé à écrire ce papier !

2.2. Stabilité et convergence exponentielle en entropie relative pour Fokker–Planck sur $SO(3)$

La particularité de ce potentiel est qu’il est invariant par multiplication à gauche et à droite par une matrice de rotation. Ainsi si initialement $Y(0) = P_0 D_0 Q_0$ avec $P, Q \in SO(3)$ et D_0 une matrice diagonale $\text{diag}(d_{1,0}, d_{2,0}, d_{3,0})$ (où $d_{1,0} \geq d_{2,0} \geq |d_{3,0}|$, il est toujours possible de décomposer $Y(0)$ de la sorte, ce qu’on appelle la décomposition spéciale en valeurs singulières), alors pour tout $t \geq 0$, on a $Y(t) = P_0 D(t) Q_0$ avec $D(t) = \text{diag}(d_1(t), d_2(t), d_3(t))$ satisfaisant la même équation différentielle que Y (on a également $d_1(t) \geq d_2(t) \geq |d_3(t)|$ pour tout temps). On est donc ramené à un flot-gradient dans \mathbb{R}^3 (identifié à l’ensemble des matrices diagonales), pour lequel les points critiques, déterminés dans la section 1.2, sont en nombre fini. On peut montrer que dans tous les cas la solution converge vers un de ces points critiques (et donc la solution f converge vers un unique équilibre, dont les paramètres peuvent être simplement déterminés à partir des matrices P_0 et Q_0).

Proposition 2.1. *On a les trois possibilités suivantes, en fonction de la valeur de ρ (les notations sont celles de la section 1.2):*

- (i) Si $\rho < \rho^*$, alors $D(t) \rightarrow 0$ et $f(t, \cdot)$ converge vers la distribution uniforme lorsque $t \rightarrow +\infty$.
- (ii) Si $\rho^* \leq \rho \leq \rho_c$, il y a trois familles d’états stationnaires (dont deux sont confondues lorsque $\rho = \rho^*$ ou $\rho = \rho_c$), et $f(t, \cdot)$ converge vers l’un de ces états, lorsque $t \rightarrow +\infty$:
 - soit $D(t) \rightarrow 0$, et $f(t, \cdot)$ converge vers la distribution uniforme,
 - soit $D(t) \rightarrow \alpha_+(\rho)I_3$, et $f(t, \cdot) \rightarrow \rho M_{\alpha_+(\rho)A_0}$, où $A_0 = P_0 Q_0$,
 - soit $D(t) \rightarrow \alpha_-(\rho)I_3$, and $f(t, \cdot) \rightarrow \rho M_{\alpha_-(\rho)A_0}$, où $A_0 = P_0 Q_0$.
- (iii) Si $\rho > \rho_c$, il y a une famille additionnelle d’états stationnaires, et lorsque $t \rightarrow +\infty$, on a :
 - soit $D(t) \rightarrow 0$, et $f(t, \cdot)$ converge vers la distribution uniforme,
 - soit $D(t) \rightarrow \alpha_+(\rho)I_3$, et $f(t, \cdot) \rightarrow \rho M_{\alpha_+(\rho)A_0}$, où $A_0 = P_0 Q_0$,
 - soit $D(t) \rightarrow \alpha_-(\rho) \text{diag}(-1, -1, 1)$, et, en notant $A_0 = P_0 \text{diag}(-1, -1, 1) Q_0$, la solution $f(t, \cdot)$ converge vers $\rho M_{\alpha_-(\rho)A_0}$,
 - soit $D(t) \rightarrow \alpha_2(\rho) \text{diag}(\sqrt{3}, 0, 0)$, et $f(t, \cdot)$ converge vers $\rho M_{\alpha_2(\rho)\sqrt{3}\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}}$, avec $\mathbf{a} = P_0 \mathbf{e}_1$ et $\mathbf{b} = Q_0^\top \mathbf{e}_1$.

Enfin, lorsque V est restreint aux matrices diagonales, on peut obtenir la signature de sa Hessienne aux points critiques, et donc on obtient que les points critiques correspondant aux minima locaux de \mathcal{F} sous contrainte de masse ρ sont asymptotiquement stables (avec taux de convergence exponentiel). On peut même avoir une description plus précise du comportement des solutions de l’équation différentielle à l’aide du théorème de la variété stable (lorsque $\rho \neq \rho^*$ et $\rho \neq \rho_c$, tous les points critiques sont hyperboliques).

2.2 Stabilité et convergence exponentielle en entropie relative pour Fokker–Planck sur $SO(3)$

Dans [F14], on s’intéresse au comportement en temps long de l’équation de Fokker–Planck sur $SO(3)$:

$$\partial_t f + \nabla_A \cdot (\nabla_A (J_f \cdot A) f) = \Delta_A f, \quad J_f = \int_{SO(3)} A f dA.$$

On rappelle la décroissance de l’énergie libre au cours du temps: $\frac{d}{dt} \mathcal{F}(f) = -\mathcal{D}(f)$, avec

$$\mathcal{F}(f) = \int_{SO(3)} f \ln f dA - \frac{1}{2} |J_f|^2, \quad \mathcal{D}(f) = \int_{SO(3)} f |\nabla_A (\ln f - J_f \cdot A)|^2 dA.$$

Une des difficultés majeures par rapport à la section précédente est l'absence de quantité conservée, on ne peut pas déterminer l'équilibre final simplement à partir de la condition initiale f_0 . Cependant l'étude de l'équation de BGK et du potentiel V associé, défini en (2.1), s'avère utile pour avoir une meilleure compréhension de l'énergie libre \mathcal{F} , qui est également une fonction de Lyapunov pour l'équation de BGK.

Proposition 2.2. *Pour $Y \in \mathcal{M} = M_3(\mathbb{R})$, on note $W(Y) = \mathcal{F}(\rho M_Y)$. Alors Y est solution de l'équation de compatibilité $Y = \rho J_{M_Y}$ si et seulement si $\nabla_Y W(Y) = 0$, ce qui est équivalent à $\nabla_Y V(Y) = 0$. D'autre part, en de tels points critiques, les Hessiennes de W et V ont la même signature, et plus précisément, les Hessiennes de leurs restrictions \bar{V} et \bar{W} aux matrices diagonales ont la même signature.*

On a donc une nouvelle description de solutions de l'équation de compatibilité comme points critiques de W (ou V). Et la connaissance de V permet alors d'obtenir des informations sur la nature des points critiques de \mathcal{F} (indépendamment de l'équation d'évolution que l'on considère). En particulier on voit directement que les points critiques qui ne sont pas des minima locaux pour W ne le sont pas pour \mathcal{F} , mais on a également que si la Hessienne de \bar{V} est définie positive en un point critique D , alors la famille d'équilibres associée est un minimum local strict pour \mathcal{F} . En effet, les familles d'équilibres étant isolées les unes des autres, partant d'un autre point dans le voisinage, on sait que la solution de l'équation de BGK correspondante fait strictement décroître l'énergie, et qu'elle converge vers la famille donnée. Pour être précis, c'est grâce à ce fait que l'on a pu obtenir la détermination de la nature des points critiques donnée dans le chapitre 1.

Pour l'étude du comportement en temps long, on utilise l'entropie relative et l'information de Fisher pour des mesures de masse ρ , ainsi que des inégalités classiques qui leur sont associées :

Proposition 2.3. *Si f, g sont deux fonctions mesurables positives sur $SO(3)$, de masse totale ρ , avec $g > 0$, on définit l'entropie relative et l'information de Fisher par*

$$\mathcal{H}(f|g) = \int_{SO(3)} f(A) \ln \left(\frac{f(A)}{g(A)} \right) dA, \quad \mathcal{I}(f|g) = \int_{SO(3)} f(A) \left| \nabla_A \ln \left(\frac{f(A)}{g(A)} \right) \right|^2 dA.$$

Pour deux telles fonctions, on a alors l'inégalité de Csiszár–Kullback–Pinsker:

$$\int_{SO(3)} |f(A) - g(A)| dA \leq \sqrt{2\rho \mathcal{H}(f|g)}.$$

Enfin, on a les familles d'inégalités de Sobolev logarithmiques (à poids) suivantes: il existe une constante $\lambda > 0$ telle que pour tout $Y \in M_3(\mathbb{R})$ avec $|Y| \leq \frac{\sqrt{3}}{2}\rho$, et pour toute fonction mesurable positive f de masse totale ρ , on a

$$\mathcal{H}(f|\rho M_Y) \leq \frac{1}{2\lambda} \mathcal{I}(f|\rho M_Y).$$

L'observation principale de [F14] est le lien entre l'énergie libre \mathcal{F} , la dissipation \mathcal{D} , le potentiel V étudié dans l'étude de l'équation de BGK, et des entropies relatives et informations de Fisher bien choisies :

Proposition 2.4. *Soit f_{eq} un état stationnaire, on note $Y_{\text{eq}} = J_{f_{\text{eq}}}$ la solution de l'équation de compatibilité associée. Pour toute fonction f mesurable positive de masse totale ρ , on a*

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(f) - \mathcal{F}(f_{\text{eq}}) &= \mathcal{H}(f|\rho M_{J_f}) + V(J_f) - V(Y_{\text{eq}}), \\ \mathcal{H}(f|f_{\text{eq}}) &= \mathcal{F}(f) - \mathcal{F}(f_{\text{eq}}) + \frac{1}{2}|Y_{\text{eq}} - J_f|^2, \\ \mathcal{D}(f) &= \mathcal{I}(f|\rho M_{J_f}). \end{aligned} \tag{2.2}$$

En notant E_∞ l'ensemble des solutions de compatibilité associées à une même famille d'équilibres, et V_∞ la valeur du potentiel V sur E_∞ , le dernier ingrédient dont on a besoin est le suivant : un voisinage U de E_∞ sur lequel on ait $\eta > 0$ tel que pour tout $Y \in U$, on a l'existence d'un $Y_{\text{eq}} \in E_\infty$ tel que pour tout Y dans U , on ait

$$\frac{\eta}{2}|Y - Y_{\text{eq}}| \leq V(Y) - V_\infty \leq \frac{1}{2\eta}|\nabla V(Y)|^2 = \frac{1}{2\eta}|Y - \rho J_{M_Y}|^2. \quad (2.3)$$

On peut montrer (en utilisant la décomposition spéciale en valeurs singulières) que l'on a un tel voisinage lorsque E_∞ correspond aux deux familles d'équilibres minimisant localement \mathcal{F} : l'équilibre isotrope pour $\rho < \rho_c$, et les équilibres de la forme $\rho M_{\alpha_+(\rho)A_0}$ pour $\rho > \rho_*$.

Une fois muni de ces ingrédients, on obtient alors le résultat principal de [F14], qui donne la stabilité asymptotique des deux familles d'équilibres, avec convergence exponentielle en entropie relative :

Théorème 2.1. *Supposons $\rho > \rho^*$ (resp. $\rho < \rho_c$).*

On définit l'ensemble $\mathcal{E}_\infty = \{\rho M_{\alpha_+(\rho)A_0}, A_0 \in SO(3)\}$ (resp. \mathcal{E}_∞ réduit à la distribution uniforme sur $SO(3)$ de masse totale ρ).

Alors il existe $\delta > 0$, $\tilde{\lambda} > 0$ et $C > 0$ tels que pour toute fonction mesurable positive f_0 de masse ρ , s'il existe $f_{\text{eq},0} \in \mathcal{E}_\infty$ telle que $\mathcal{H}(f_0|f_{\text{eq},0}) < \delta$, alors il existe $f_\infty \in \mathcal{E}_\infty$ telle que pour tout temps $t \geq 0$, on ait

$$\mathcal{H}(f(t, \cdot)|f_\infty) \leq C e^{-2\tilde{\lambda}t} \mathcal{H}(f_0|f_{\text{eq},0}).$$

Ce n'est pas précisé dans l'énoncé du théorème, mais on obtient bien que plus l'entropie relative initiale par rapport à $f_{\text{eq},0}$ est faible, plus l'équilibre final f_∞ est proche de $f_{\text{eq},0}$. La clé de la démonstration réside dans l'utilisation de l'entropie relative $\mathcal{H}(f|\rho M_{J_f})$, dans l'expression (2.2), pour contrôler la différence d'énergie libre. On note bien que ce n'est pas une entropie relative par rapport à un équilibre. C'est ensuite le contrôle du déplacement de J_f qui permet d'obtenir que J_f converge bien vers une solution de l'équation de compatibilité.

2.3 Vers un cadre générique unifié

Dans un travail en cours avec Pierre Degond et Antoine Diez, on a pour objectif d'adapter la méthode de la section précédente dans un cadre général. En effet, si on prend comme dans le début du chapitre 1 une équation de Fokker–Planck de la forme

$$\partial_t f + \nabla_v \cdot (\nabla_v (J_f \cdot v) f) = \Delta_v f, \quad J_f = \int_{\mathcal{S}} v f dv,$$

avec les mêmes notations, si Y_{eq} est une solution de l'équation de compatibilité $Y = \rho J_{M_Y}$, en notant $f_{\text{eq}} = \rho M_{Y_{\text{eq}}}$ l'équilibre associé, on obtient directement les mêmes relations que dans la proposition (2.4):

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(f) - \mathcal{F}(f_{\text{eq}}) &= \mathcal{H}(f|\rho M_{J_f}) + V(J_f) - V(Y_{\text{eq}}), \\ \mathcal{H}(f|f_{\text{eq}}) &= \mathcal{F}(f) - \mathcal{F}(f_{\text{eq}}) + \frac{1}{2}|Y_{\text{eq}} - J_f|^2, \\ \mathcal{D}(f) &= \mathcal{I}(f|\rho M_{J_f}). \end{aligned}$$

L'objectif de notre travail est de pouvoir traiter à la fois les modèles de type Vicsek (avec alignement dépendant de $|J_f|$), les modèles de polymères (avec potentiel de Maier–Saupe, ou

combinaison de Maier–Saupe et dipolaire pour lequel on connaît les équilibres stables), et l’alignement sur $SO(n)$. Le cadre qui semble fonctionner pour l’instant est le suivant : on considère une variété \mathcal{S} et $\psi : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^m$ (correspondant à l’injection $\mathcal{S} \subset \mathcal{M}$ dans les cas précédents) ainsi qu’une fonction Γ convexe de \mathbb{R}^m dans \mathbb{R} . On note $\gamma(Y) = \nabla_Y \Gamma$ et $J_f = \int_{\mathcal{S}} \psi(v) f dv$, et on s’intéresse à l’équation de Fokker–Planck

$$\partial_t f + \nabla_v \cdot (\nabla_v (\gamma(J_f) \cdot \psi(v)) f) = \Delta_v f.$$

On pose également $M_Y = \frac{\exp(\gamma(Y) \cdot \psi(v))}{\mathcal{Z}(Y)}$ où $\mathcal{Z}(Y) = \int_{\mathcal{S}} \exp(\gamma(Y) \cdot \psi(v)) dv$. Et on a alors dissipation de l’énergie $\frac{d}{dt} \mathcal{F} = -\mathcal{D}$ comme précédemment, avec

$$\mathcal{F} = \int_{\mathcal{S}} f \ln f dv - \Gamma(J_f), \quad \mathcal{D}(f) = \mathcal{I}(f | \rho M_{J_f}).$$

Les équilibres sont toujours caractérisés comme points critiques de l’énergie sous contrainte de masse ρ , ou de la forme ρM_Y avec Y solution de l’équation de compatibilité $Y = \rho J_{M_Y}$. Et ces solutions peuvent être également vues comme points critiques du potentiel $V : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ suivant :

$$V(Y) = Y \cdot \gamma(Y) - \Gamma(Y) - \rho \ln \mathcal{Z}(Y).$$

On obtient alors les mêmes expressions de \mathcal{F} faisant intervenir l’entropie relative et le potentiel V que dans la proposition 2.4 :

Proposition 2.5. *Si Y_{eq} est une solution de l’équation de compatibilité, et $f_{\text{eq}} = \rho M_{Y_{\text{eq}}}$ l’état stationnaire associé, pour toute fonction f mesurable positive de masse totale ρ , on a*

$$\mathcal{F}(f) - \mathcal{F}(f_{\text{eq}}) = \mathcal{H}(f | \rho M_{J_f}) + V(J_f) - V(Y_{\text{eq}}), \quad (2.4)$$

$$\mathcal{H}(f | f_{\text{eq}}) = \mathcal{F}(f) - \mathcal{F}(f_{\text{eq}}) + \int_0^1 \text{Hess}(\Gamma)_{Y_{\text{eq}} + s(J_f - Y_{\text{eq}})}(J_f - Y_{\text{eq}}, J_f - Y_{\text{eq}}) ds. \quad (2.5)$$

Démonstration. Pour $Y \in \mathbb{R}^m$ quelconque, on a

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(f | \rho M_Y) &= \int_{\mathcal{S}} f \ln f - \int_{\mathcal{S}} \gamma(Y) \cdot \psi(v) f(v) dv + \rho \ln \mathcal{Z}(Y) - \rho \ln \rho. \\ &= \mathcal{F}(f) + \Gamma(J_f) - \gamma(Y) \cdot J_f + \rho \ln \mathcal{Z}(Y) - \rho \ln \rho. \end{aligned} \quad (2.6)$$

En particulier pour $Y = J_f$, on obtient

$$\mathcal{H}(f | \rho M_{J_f}) = \mathcal{F}(f) - V(J_f) - \rho \ln \rho. \quad (2.7)$$

Et donc si $f_{\text{eq}} = \rho M_{Y_{\text{eq}}} = \rho M_{J_{f_{\text{eq}}}}$ (avec Y_{eq} une solution de l’équation de compatibilité), on obtient

$$0 = \mathcal{F}(f_{\text{eq}}) - V(Y_{\text{eq}}) - \rho \ln \rho,$$

ce qui donne une expression de $\rho \ln \rho$, que l’on utilise dans (2.7) pour obtenir (2.4). On peut aussi l’utiliser dans (2.6) pour obtenir

$$\mathcal{H}(f | f_{\text{eq}}) = \mathcal{F}(f) - \mathcal{F}(f_{\text{eq}}) + \Gamma(J_f) - \gamma(Y_{\text{eq}}) \cdot J_f - \Gamma(Y_{\text{eq}}) + \gamma(Y_{\text{eq}}) \cdot Y_{\text{eq}},$$

qui correspond exactement à la formule de Taylor (2.5). □

Sous condition que les fonctions $v \mapsto 1$ et $v \mapsto \psi(v) \cdot \mathbf{e}_i$ pour $1 \leq i \leq m$ soient linéairement indépendantes, que l'on dispose d'une inégalité de Sobolev logarithmique sur \mathcal{S} , ainsi que d'une estimation similaire à (2.3) au voisinage d'une variété de points critiques de V (c'est ici que l'on a besoin de bien connaître le diagramme de phase du modèle considéré), on obtient alors le même résultat de décroissance exponentielle de l'énergie.

On devrait pouvoir appliquer ce résultat au modèle de polymères avec potentiel de Maier–Saube, mais aussi à des extensions de ce modèle, lorsque l'on considère par exemple un écoulement donnant une force extérieure d'élongation, ou le cas d'un potentiel dipolaire additionnel.

Perspectives Comme on connaît le diagramme de phase du modèle d'alignement sur $SO(4)$ (et plus), on doit pouvoir, comme dans la section 2.1, obtenir le comportement en temps long du modèle de BGK associé (en déterminant la signature de la Hessienne de V), et ainsi également obtenir la convergence exponentielle pour l'équation de Fokker–Planck. On pourra essayer de voir si cette méthode est applicable au résultat pour le modèle de Cucker–Smale avec friction et force de propulsion [Li21], pour lequel les résultats de convergence au voisinage des équilibres non-isotropes ne sont disponibles que pour des conditions initiales présentant des symétries (et pour lesquelles on connaît donc a priori la limite en temps grand).

Dans le cadre du mémoire de maîtrise de Charles Elbar (coencadré avec Pierre Degond et Antoine Diez), nous avons également étudié le modèle « Persistent turning walker with alignment », présenté initialement dans [DM11] (alors sans transition de phase). On étend le modèle en dimension 3 (et plus) et on ne normalise pas l'alignement, afin de retrouver un modèle avec transition de phase. Les trajectoires du modèle de particules associé sont plus lisses, le bruit intervenant seulement sur leur courbure. Dans le modèle homogène en espace, on garde un phénomène d'hypocoercivité (le terme d'alignement étant un hamiltonien, la diffusion agissant seulement sur la variable de courbure), mais avec toujours le même diagramme de phase pour les équilibres locaux (une transition du second ordre, avec une équation de compatibilité très similaire à celle pour les modèles de type Vicsek). On espère pouvoir combiner ces méthodes d'entropie relative par rapport à des distributions bien choisies (qui ne sont pas forcément des équilibres) avec des méthodes d'hypocoercivité pour caractériser le comportement en temps long.

Enfin, une dernière piste de réflexion, maintenant que l'on comprend le temps long pour le modèle cinétique, est de revenir au système de particules dont il est tiré. En effet l'équation de Fokker–Planck est une limite de champ moyen d'un système d'un grand nombre de particules N , qui prend la forme d'une loi des grands nombres. On s'attend donc à des fluctuations de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{N}}$. En pratique on obtient des estimations de la distance entre la mesure empirique du système de particules et la solution de l'équation de Fokker–Planck avec des bornes telles que $\frac{e^{Ct}}{\sqrt{N}}$ pour $t \in [0, T]$. Si l'on veut des temps grands, on ne peut pas espérer mieux que des temps de l'ordre de $\ln N$. Toutefois, puisque les équilibres sont exponentiellement stables, les fluctuations qui pousseraient la distribution empirique loin de la famille d'équilibres stables sont alors compensées par la dynamique de l'équation de Fokker–Planck. Les seules fluctuations restantes seraient dans les composantes tangentielles de la famille d'équilibres. Cette approche a été rendue rigoureuse dans [BGP14] pour le cas d'oscillateurs de Kuramoto identiques (qui correspond à un modèle de type Vicsek en dimension 2) : la solution reste proche de l'ensemble des états d'équilibres jusqu'à un temps de l'ordre de N , avec « l'orientation moyenne » $\Omega(t)$ qui suit alors un mouvement brownien sur le cercle dans ces échelles de temps. Dans notre cas, par exemple sur $SO(3)$, on s'attend à ce que, proche de la famille stable d'équilibres de la forme $\rho M_{\alpha_+(\rho)A}$ avec $A \in SO(3)$, la mesure empirique des particules au temps $t = sN$ soit proche de $\rho M_{\alpha_+(\rho)A(s)}$, où $s \mapsto A(s)$ est un mouvement Brownien sur $SO(3)$.

Chapitre 3

Vers les modèles inhomogènes : hypo coercivité et stabilité de l'équilibre isotrope

Contenu

3.1	Un modèle d'alignement local de particules autpropulsées. . .	38
3.2	Estimées d'hypo coercivité-hypo ellipticité pour le mouvement brownien sphérique en vitesse	39
3.2.1	Première approche par hypo coercivité	39
3.2.2	Un cadre algébrique pratique pour les opérateurs sur la sphère . . .	41
3.3	Stabilité non-linéaire de l'équilibre isotrope jusqu'au seuil de transition de phase	47

On s'intéresse maintenant au comportement en temps long de l'équation cinétique de Vicsek, dérivée rigoureusement comme limite de champ moyen [BCC12] d'un système couplé de N équations différentielles stochastiques décrivant des particules se déplaçant à vitesse unité et s'alignant avec leurs voisines. En dépit de son expression simple, peu de choses sont rigoureusement établies sur le comportement de ses solutions. Dans ce chapitre, basé sur un travail [F20] en collaboration avec Émeric Bouin (en cours de rédaction), on étudie la version localisée en espace, et son comportement en temps long au voisinage de l'équilibre uniforme.

Lorsque l'on localise l'équation en espace (en remplaçant le noyau d'observation K utilisé habituellement par un Dirac en espace), le modèle n'est plus a priori globalement bien posé et pourrait exploser en temps fini. L'objectif de ce chapitre est d'utiliser des méthodes d'hypo coercivité pour montrer que ce n'est pas le cas au voisinage de l'équilibre uniforme et homogène en espace en dessous du seuil critique ρ_c .

La méthode suit l'approche maintenant classique [Vil09] de modifications de normes de type Sobolev par l'ajout de termes croisés, liés à des commutateurs entre les différents opérateurs apparaissant dans l'équation cinétique. Cependant, le fait que l'espace des vitesses soit la sphère ajoute des subtilités. En particulier, lorsque l'on souhaite comprendre les phénomènes de régularisation en temps court, dans une approche à la Hérau [Hé07], la chaîne de commutateurs décrite dans le mémoire de Villani n'est pas adaptée. En affectant les bonnes puissances de t aux différents termes apparaissant dans la fonctionnelle d'énergie, on réussit à faire marcher la méthode à la Hérau. Pour monter en ordre et ainsi obtenir suffisamment de contrôle sur la non-linéarité, on montre que l'on peut simplement considérer d (ou $d + 1$ si d est pair) dérivées en espace et

une seule en vitesse.

Lorsque l'espace des positions est \mathbb{R}^d , comme on n'a pas de confinement donné par le modèle, on arrive seulement à montrer de la stabilité (alors que sur le tore, l'inégalité de Poincaré nous donne également la convergence exponentielle vers l'équilibre). On pourrait espérer obtenir au moins des taux algébriques (correspondant à une équation de diffusion sur \mathbb{R}^d , qui est en fait une limite d'échelle du modèle autour de l'équilibre uniforme ; on en parlera également dans le chapitre 4). Cependant, la perturbation que l'on considère n'a pas a priori de bonnes bornes en norme L^1 , ne nous permettant pas d'utiliser une approche de type inégalité de Nash, comme dans [BDM⁺20].

3.1 Un modèle d'alignement local de particules autopropulsées.

On s'intéresse à l'équation de Vlasov–Fokker–Planck suivante :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (\nabla_v (J_f \cdot v) f) = \Delta_v f, \quad J_f = \int_{\mathbb{S}} v f \, dv, \quad (3.1)$$

où $f(t, x, v)$ représente la densité de particules à la position $x \in \mathbb{R}^d$ ou \mathbb{T}^d ayant la vitesse $v \in \mathbb{S}$. Cette équation peut être dérivée comme limite du système de particules suivant, dit en interaction « modérée » :

$$\begin{cases} dX_k = V_k dt, \\ dV_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\varepsilon_N^d} K\left(\frac{1}{\varepsilon_N} (X_i - X_j)\right) \nabla_{V_k} (V_i \cdot V_k) dt + P_{V_k^\perp} \circ dB_{t,k}, \end{cases}$$

où les interactions se font à une distance d'ordre ε_N , convergeant vers 0 lorsque $N \rightarrow \infty$, via le noyau d'interaction K , de masse totale 1. Les méthodes utilisées pour obtenir ce genre de limite vers une équation locale en espace nécessitent d'avoir un système limite bien posé (voir par exemple [Oel85, JM98, Die20, CDHJ21, CD22]).

La densité f n'est pas supposée de masse totale finie (si $x \in \mathbb{R}^d$), et en particulier on s'intéresse au comportement autour de la solution stationnaire constante $f = \rho$. Lorsque $\rho < d$, c'est la seule solution stationnaire homogène en espace, et on sait qu'elle est stable pour l'équation homogène associée (c'est un résultat de ma thèse [F3], qui correspond au cas $\nu(|J|) = |J|$ et $\sigma(|J|) = 1$ du modèle de la section 1.1). L'équation (3.1) ne contient aucun paramètre, et on peut toujours s'y ramener par changements d'échelle (si l'intensité de l'alignement est $\nu_0 |J|$ et le coefficient de diffusion angulaire σ , le seuil de transition est alors à $\frac{\nu_0 \rho}{\sigma} = d$). À ma connaissance, peu de résultats sont disponibles pour cette équation. On montre d'abord le caractère localement bien posé en temps du problème dans L^∞ :

Théorème 3.1. *Pour une condition initiale $f_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S})$ positive, il existe une unique solution faible de (3.1) dans $C([0, T], L^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}))$ pour tout $T < \frac{1}{(d-1)\|f_0\|_\infty}$. Elle est positive et vérifie l'estimation suivante (principe du maximum) :*

$$\|f(t)\|_\infty \leq \|f_0\|_\infty + (d-1) \int_0^t \|J_f(s)\|_\infty \|f(s)\|_\infty \, ds.$$

Stratégie de preuve. On commence par résoudre l'équation linéaire en remplaçant J_f par une fonction $\mathcal{J} \in L_\infty([0, T] \times \mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ donnée, et pour $f_0 \in L^2 \cap L^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S})$, on peut procéder par exemple comme dans l'appendice de [Deg86], avec bien moins de difficulté (malgré les subtilités

3.2. Estimées d'hypocoercivité-hypoellipticité pour le mouvement brownien sphérique en vitesse

de calcul différentiel sur la sphère) puisque l'on n'a pas besoin de tronquer en vitesse. On obtient alors l'estimée suivante, provenant du principe du maximum :

$$\|f(t)\|_\infty \leq \|f_0\|_\infty + (d-1) \int_0^t \|\mathcal{J}(s)\|_\infty \|f(s)\|_\infty ds.$$

On note $\mathcal{A} = \{\mathcal{J} \in L_\infty([0, T] \times \mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d), \forall t \in [0, T], \|\mathcal{J}(t, \cdot)\|_\infty \leq \frac{1}{\|f_0\|_\infty^{d-1} - (d-1)t}\}$, on obtient alors que toute solution f de cette équation linéaire pour $\mathcal{J} \in \mathcal{A}$, vérifie $\|f(t)\|_\infty \leq \frac{1}{\|f_0\|_\infty^{d-1} - (d-1)t}$. Comme $|J_f(t, x)| \leq \|f(t)\|_{L_x^\infty(L_v^2)} \leq \|f(t)\|_\infty$, on obtient que \mathcal{A} est stable pour $\mathcal{J} \mapsto J_f$. Avec une distance appropriée, cette application est contractante et a un unique point fixe. Pour obtenir une solution dans L^∞ , on peut tronquer en espace en utilisant que l'information ne se propage qu'à vitesse finie. \square

On note bien le fait que l'estimée que l'on obtient est légèrement meilleure que quadratique en norme infinie, puisque $\|J_f\|_\infty \leq \|f - \Pi f\|_{L_x^\infty(L_v^2)}$ (où $\Pi f = \int_{\mathbb{S}} f dv$ est la masse locale de f), et ce point est crucial pour la suite, nous permettant de considérer seulement des estimées d'hypocoercivité d'ordre élevé en x mais seulement d'ordre 1 en v .

3.2 Estimées d'hypocoercivité-hypoellipticité pour le mouvement brownien sphérique en vitesse

Lorsqu'on enlève le terme $\nabla_v \cdot (\nabla_v (J_f \cdot v) f)$ d'alignement, l'équation de Vlasov–Fokker–Planck obtenue, donnée par

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \Delta_v f,$$

est celle de la loi du mouvement brownien sphérique en vitesse, qui correspond au processus stochastique suivant:

$$\begin{cases} dX = V dt, \\ dV = P_{V^\perp} \circ dB_t, \end{cases}$$

étudié par Baudoin et Tardif [BT18] (dans un cadre plus général de variété Riemannienne en espace également). À l'aide d'estimations à base de Γ -calcul généralisé, ils obtiennent une estimation quantitative de régularité hypoelliptique (non-optimale en temps). Pour pouvoir traiter le cas de l'alignement (avec sa non-linéarité), nous avons besoin d'estimées à l'ordre supérieur, et on peut en fait rester dans le cas classique de fonctionnelles quadratiques de type Sobolev, sans déployer la machinerie du Γ -calcul.

3.2.1 Première approche par hypocoercivité

Une première approche standard est la suivante, en copiant ce qui fonctionne pour l'équation de Vlasov–Fokker–Planck classique, avec vitesse dans \mathbb{R}^d [Vil09] : en notant $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le produit scalaire L^2 (pour des fonctions ou des vecteurs de \mathbb{R}^d), on prend une énergie de la forme

$$\mathcal{F} = \|f\|_2^2 + \alpha \|\nabla_v f\|_2^2 + 2\beta \langle \nabla_v f, \nabla_x f \rangle + \gamma \|\nabla_x f\|_2^2,$$

équivalente à la norme H^1 au carré pour $\beta < \alpha\gamma$. On obtient

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{F}}{dt} &= -2\|\nabla_v f\|^2 + 2\alpha \langle \nabla_v f, \nabla_v (\Delta_v f) \rangle + 2\beta \|P_{v^\perp} \nabla_x f\|_2^2 + 2\gamma \langle \nabla_x f, \nabla_x (\Delta_v f) \rangle \\ &\quad - 2\alpha \langle \nabla_v f, \nabla_x f \rangle - 2\beta [(d-1) \langle \nabla_v f, \nabla_x f \rangle - 2 \langle \nabla_v f, \nabla_x (\Delta_v f) \rangle], \end{aligned}$$

et un bon choix de coefficients permet de contrôler les termes de la deuxième ligne par ceux de la première, qui semble à première vue ne pas être exactement équivalente à une norme H^2 pour les fonctions à moyenne nulle (ce serait le cas s'il n'y avait pas le terme de projection P_{v^\perp} , c'est ce que l'on obtient classiquement pour l'équation de Vlasov–Fokker–Planck sans contrainte de vitesse). Le terme manquant à obtenir est $\|\nabla_x f\|^2 - \|P_{v^\perp} \nabla_x f\|^2 = \|v \cdot \nabla_x f\|^2$. En notant Π la projection sur les fonctions constantes en vitesse, on peut calculer $\|P_{v^\perp} \nabla_x \Pi f\|^2 = \frac{d-1}{d} \|\nabla_x(\Pi f)\|^2$, de sorte que $\|v \cdot \nabla_x \Pi f\|^2$ est contrôlé par $\|P_{v^\perp} \nabla_x(\Pi f)\|^2$ (donc par $\|P_{v^\perp} \nabla_x f\|^2$ et $\|\nabla_x(f - \Pi f)\|^2$). Par l'inégalité de Poincaré on peut également contrôler $\|\nabla_x(f - \Pi f)\|^2$ par $-\langle \nabla_x f, \nabla_x(\Delta_v f) \rangle$ (et donc on contrôle aussi $\|v \cdot \nabla_x(f - \Pi f)\|^2$). Au final on a bien que $\|v \cdot \nabla_x f\|^2$ est contrôlé par $\|P_{v^\perp} \nabla_x f\|^2$ et $-\langle \nabla_x f, \nabla_x(\Delta_v f) \rangle$. Donc de nouveau en jouant sur les coefficients, on a bien une quantité équivalente au carré de la norme H^2 (pour les fonctions à moyenne nulle) dans la dérivée de l'énergie. Cela donne la décroissance de l'énergie, et le fait que la solution converge exponentiellement vite vers une constante sur le tore, par l'inégalité de Poincaré en espace. Dans tout l'espace, c'est plus compliqué si on regarde une solution de la forme $\rho + g$, avec une petite perturbation g . On n'a pas a priori de borne L^1 sur g par exemple pour appliquer une inégalité de type Nash.

Cette méthode peut en fait fonctionner pour monter en ordre, en rajoutant des termes similaires où f est remplacée par $\Delta_x^k f$, et elle fonctionne également en incluant la linéarisation du terme d'alignement, ce qui permet ainsi d'obtenir des estimations d'hypocoercivité en norme élevée (disons $H^{s,1}$ avec s dérivations en x et une en v). On peut alors contrôler la non-linéarité, au prix d'une condition de petitesse initiale dans une norme assez contraignante (et des calculs assez fastidieux). On ne détaillera pas plus ces calculs parce que la méthode présentée aux sous-sections suivantes implique ces résultats (et donne une meilleure compréhension) avec des calculs plus facilement présentables.

Lorsqu'on veut cette fois-ci partir d'une condition de petitesse plus faible, il faut utiliser le caractère régularisant de l'équation, et si on veut le faire de manière quantitative, on peut utiliser une fonctionnelle avec des poids dépendant du temps, à la Hérou [Hé07]. Ici, le simple copier-coller des coefficients ne fonctionne plus : le contrôle de $\|v \cdot \nabla_x f\|^2$ par d'autres termes ne fait pas intervenir la bonne puissance de t . Comme noté dans [BT18], c'est en fait quelque chose d'attendu : le commutateur des opérateurs $v \cdot \nabla_x$ et ∇_v n'est pas suffisant à lui seul pour engendrer toutes les directions dans la condition d'hypoellipticité d'Hörmander [Hör67]. Ceci est dû au fait que la diffusion en vitesse n'a en fait lieu que dans le plan tangent à v , et donc ne permet d'explorer à cet ordre qu'un espace de dimension $d - 1$. Il faut donc une fonctionnelle faisant intervenir plus de commutateurs et des puissances de t plus élevées. Une méthode en ce sens est détaillée dans le mémoire de Villani [Vil09], mais se base sur des propriétés de commutation qui ne sont pas valides dans notre cas.

Pour prendre un exemple simple, en dimension 2 on réécrit l'équation en notant $v = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$, avec $\theta \in \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$. En notant $T = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \cdot \nabla_x$ et $A = \partial_\theta$, on obtient

$$\partial_t f + T f = A^2 f.$$

La chaîne de commutation de Villani consisterait à écrire $C_0 = A$, $C_{i+1} = [T, C_i]$ et espérer obtenir les directions manquantes. Mais en notant $S = [T, A] = \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \end{pmatrix} \cdot \nabla_x$, on obtiendrait alors $C_1 = S$ et $C_2 = 0$. Cette chaîne de commutateurs ne couvre pas toutes les directions requises pour la condition d'hypoellipticité d'Hörmander ; pour la satisfaire on ne doit pas considérer $[S, T]$ (qui est nul) mais $[S, A] = -T$, en commutant de nouveau avec A . En dimension plus grande que 2, les gradient, divergence et Laplacien sphériques engendrent une difficulté supplémentaire, et le paragraphe suivant offre un cadre d'opérateurs qui permet de fonctionner comme

3.2. Estimées d'hypo-coercivité-hypo-ellipticité pour le mouvement brownien sphérique en vitesse

en dimension 2, en particulier avec des opérateurs en vitesse qui commutent avec l'opérateur de Laplace–Beltrami (ce qui n'est pas le cas du gradient sur la sphère).

3.2.2 Un cadre algébrique pratique pour les opérateurs sur la sphère

On commence par un lemme permettant d'écrire le Laplacien grâce à un opérateur « vectoriel » $A = (A_{i,j})_{1 \leq i < j \leq d}$ qui se comporte comme le gradient, mais avec des meilleures propriétés de commutation.

Lemme 3.1. *Pour $1 \leq i < j \leq d$, on note $A_{i,j} = [e_i \cdot \nabla_v, e_j \cdot \nabla_v]$. C'est un opérateur différentiel de degré 1 sur la sphère (en tant que commutateur de deux tels opérateurs) qui correspond au générateur infinitésimal de la rotation dans le plan engendré par e_i et e_j , envoyant e_i sur e_j . On note $v_i = e_i \cdot v$ et on a les propriétés suivantes, en notant $A^2 = \sum_{i < j} A_{i,j}^2$:*

- (i) *L'opérateur $A_{i,j}$ est antiadjoint sur \mathbb{S} .*
- (ii) *Pour $1 \leq k \leq d$, on a $[A_{i,j}, v_k] = \delta_{jk}v_i - \delta_{ik}v_j$.*
- (iii) *Si $F \in C^1(\mathbb{R}^d)$, $A_{i,j}F(v_1, \dots, v_n) = -v_j \partial_i F(v_1, \dots, v_n) + v_i \partial_j F(v_1, \dots, v_n)$.*
- (iv) *Si $f, g \in C^1(\mathbb{S})$, alors $\nabla_v f \cdot \nabla_v g = \sum_{i < j} A_{i,j} f A_{i,j} g$. En conséquence si $f \in C^2(\mathbb{S})$, alors $\Delta_v f = A^2 f$.*
- (v) *Pour $1 \leq k < \ell \leq d$, si $k \notin \{i, j\}$ et $\ell \notin \{i, j\}$, alors $[A_{i,j}, A_{k,\ell}] = 0$. Et pour $1 \leq k \leq d$, si $k \notin \{i, j\}$, alors $[A_{i,k}, A_{j,k}] = A_{i,j}$. Et on a donc $[A_{i,j}, A^2] = 0$.*

Outils de preuve. La formule d'intégration par parties sur la sphère

$$\int_{\mathbb{S}} f \nabla_v g dv = \int_{\mathbb{S}} g [(d-1)vf - \nabla_v f] dv,$$

donne $(e_i \cdot \nabla_v)^* = -e_i \cdot \nabla_v + (d-1)v_i$, et permet de montrer que $A_{i,j}$ est antiadjoint. Pour les autres identités, on utilise la formule $e_i \cdot \nabla_v v_k = e_i P_{v^\perp} e_k = \delta_{ik} - v_i v_k$, qui donne (ii) et (iii) en utilisant $\nabla_v F = \sum_i P_{v^\perp} e_i \partial_i F$, ce qui permet alors d'obtenir (iv). De (iii), on obtient alors par calcul le dernier (et très utile) résultat. \square

D'après (iii), on peut donc voir A comme le produit extérieur $v \wedge \nabla_v$ (en identifiant les produits extérieurs comme des matrices antisymétriques). On parlera d'opérateurs « vectoriels » pour de tels opérateurs indexés par $i < j$. Comme précédemment on note $T = v \cdot \nabla_x$ et l'équation s'écrit donc

$$\partial_t f + T f = A^2 f. \tag{3.2}$$

Pour un opérateur linéaire X et une fonction C^∞ à support compact f de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}$ dans \mathbb{R} on définit la quantité quadratique

$$Q_X(f) = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} f X f,$$

que l'on notera simplement Q_X si le contexte est clair (et qui ne dépend donc que de la partie autoadjointe de X). Si f est une solution C^∞ de (3.2), on a

$$\frac{d}{dt} Q_X(f) = Q_{\Phi(X)}(f),$$

où on a noté

$$\Phi(X) = A^2 X + X A^2 + [T, X] = 2AXA + [A[A, X]] + [T, X]. \tag{3.3}$$

On voit donc apparaître naturellement les commutateurs qui nous intéresseront par la suite. De manière générale, on travaille essentiellement avec des opérateurs scalaires, mais souvent écrits sous forme condensée : si on a des opérateurs vectoriels $B = (B_{i,j})_{i < j}$ et $C = (C_{i,j})_{i < j}$ on écrit BC pour l'opérateur $\sum_{i < j} B_{i,j}C_{i,j}$, en utilisant des parenthèses pour supprimer d'éventuelles ambiguïtés. Ainsi $(BC)(CB) = BC(CB) = (BC)CB \neq BC^2B$, et la forme $[A[A, X]]$ de la deuxième expression de Φ est bien définie comme un opérateur scalaire sans ambiguïté, lorsque X est un opérateur scalaire. Lorsqu'un opérateur (vectoriel) commute avec son « carré » (scalaire), comme A , on peut donc définir sa puissance k -ième sans ambiguïté (scalaire ou vectorielle selon la parité de k).

On introduit donc $S = [T, A]$. Et on obtient grâce au Lemme 3.1 (ii), que $S_{i,j} = -v_i \partial_{x_j} + v_j \partial_{x_i}$, que l'on peut écrire $S = v \wedge \nabla_x = v \wedge P_{v^\perp} \nabla_x$. Par un calcul direct, on obtient :

$$S^2 + T^2 = \Delta_x, \quad (3.4)$$

ce qui donne que $S^2 = \Delta_x - (v \cdot \nabla_x)^2 = \nabla_x \cdot (P_{v^\perp} \nabla_x)$. Comme S , A , et T sont antiadjoints, on a que $TA^2 = (S + AT)A$ a la même partie autoadjointe que SA (et que AS), dont on obtient une formule simple par intégration. En effet, on a

$$\begin{aligned} Q_{SA}(f) &= Q_{AS}(f) = Q_{TA^2}(f) = - \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} v \cdot \nabla_x f \Delta_v f = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} \nabla_v (v \cdot \nabla_x f) \cdot \nabla_v f \\ &= \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} \nabla_v f \cdot \nabla_x f + \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} \nabla_v \cdot (P_{v^\perp} \nabla_x f) v \cdot \nabla_v f \\ &= - \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} f \nabla_v (P_{v^\perp} \nabla_x f) = - \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} \nabla_x \cdot (\nabla_v f) f, \end{aligned}$$

de sorte que par polarisation, on obtient que $(SA + AS)f = -\nabla_x \cdot (\nabla_v f) - \nabla_v \cdot (P_{v^\perp} \nabla_x f)$. Toutes les quantités de la forme $Q_X(f)$, où X est un opérateur scalaire autoadjoint constitué de A , S et T , auront une telle formulation simple sous forme intégrée mettant en jeu les opérateurs v , ∇_x , ∇_v , Δ_x et Δ_v seulement, mais on garde cette notation avec A , S et T qui sera bien plus légère.

Les opérateurs S et T commutent, mais on a $[A_{i,j}, S_{i,j}] = v_i \partial_{x_i} + v_j \partial_{x_j}$ et en sommant sur $i < j$ on trouve que $[A, S] = (d-1)T$. En utilisant (3.4), la condition d'hypoellipticité de Hörmander est donc bien satisfaite, et on cherche à obtenir des estimations quantitatives de régularisation en temps.

On associe des poids de Hörmander aux différents opérateurs : à A on attribue le poids $\frac{1}{2}$, à S le poids $\frac{3}{2}$ et à T le poids 2. À un opérateur X composé comme un produit des A, S, T on associe le poids total w_X correspondant à la somme des poids de chaque opérateur élémentaire le composant, et à $\Delta_x = T^2 + S^2$ on associe le poids 4, comme T^2 . Le lemme suivant, qui se démontre par récurrence sur le nombre de facteurs dans X permet de comprendre le comportement de ces poids après commutation avec T .

Lemme 3.2. *Si X est un opérateur de poids total w_X , composé comme produit d'opérateurs A , S et T , alors $[T, X]$ (et donc également $\Phi(X)$) peut s'écrire comme une somme de tels opérateurs ayant chacun un poids total au plus $w_X + 1$.*

La stratégie générale est alors la suivante.

— On écrit une fonctionnelle d'énergie sous la forme

$$\mathcal{F}(\tau, f) = \sum_{X \in \mathcal{F}} a_X \tau^{w_X} Q_X,$$

3.2. Estimées d'hypo-coercivité-hypo-ellipticité pour le mouvement brownien sphérique en vitesse

avec \mathcal{F} équivalent au carré d'une norme de Sobolev (dépendant du paramètre τ), avec des opérateurs X étant seulement composés comme produits de A , S et Δ_x (ce qui fait que $\Phi(X)$ est également de cette forme).

- Sa dissipation (à τ fixé) étant donnée par $a_X \tau^{w_X} Q_{\Phi(X)}$, on l'écrit sous la forme $-2\mathcal{D} + \mathcal{B}$, où $\mathcal{D} \geq 0$ regroupe des termes dans les termes de plus haut poids dans les $\Phi(X)$ (donc de poids $w_X + 1$ à chaque fois).
- Le premier « mauvais » terme \mathcal{B} consiste en les autres termes dans les $\Phi(X)$, et s'écrivant tous de la forme $\tau^\omega Q_Z$, avec une puissance de τ au plus égale à $w_Y - 1$, et que l'on contrôle par $\varepsilon \mathcal{D}$ pour un $\varepsilon > 0$ (indépendant de τ) et par un choix judicieux des coefficients a_X .
- Le deuxième « mauvais » terme apparaît dans le calcul de la dissipation de l'énergie à poids dépendants du temps $\mathcal{F}(t, f(t, \cdot))$: on obtient les termes de la forme $w_X a_X \tau^{w_X - 1} Q_X$. On peut également choisir les coefficients (toujours indépendamment de τ) de telle sorte qu'on contrôle ce mauvais terme par $\varepsilon \mathcal{D}$, et ceci pour tout $\tau \leq 1$. On obtient alors la décroissance de l'énergie $\mathcal{F}(\min(t, 1), f(t, \cdot))$ (et la décroissance exponentielle si une inégalité de Poincaré est disponible entre \mathcal{F} et \mathcal{D} par exemple).

En pratique, comme on a besoin d'une seule dérivée en vitesse on utilisera uniquement des opérateurs X ayant une forme assez simple²³ :

Définition 3.1. On définit $\mathcal{F}_0 = Q_{\text{Id}} = \|f\|_2^2$ et

$$\mathcal{F}_1(\tau, f) = \alpha \tau Q_{-A^2} + \beta \tau^2 Q_{SA+AS} + \gamma \tau^3 Q_{-S^2} + \delta \tau^4 Q_{-\Delta_x},$$

qui s'écrit aussi $\mathcal{F}_1(\tau, f) = \alpha \tau \|\nabla_v f\|_2^2 + 2\beta \tau^2 \langle \nabla_v f \cdot \nabla_x f \rangle + \gamma \tau^3 \|P_{v^\perp} \nabla_x(f)\|_2^2 + \delta \tau^4 \|\nabla_x f\|_2^2$. Pour $k \geq 1$, on pose alors

$$\mathcal{F}_k(\tau, f) = \nu_k \tau^{4(k-1)} \mathcal{F}_1(\tau, (-\Delta_x)^{\frac{k-1}{2}} f) = \nu_k \tau^{4(k-1)} \sum_{|m|=k-1} \binom{k-1}{m} \mathcal{F}_1(\tau, \partial_x^m f),$$

où on note $|m| = \sum_{i=1}^d m_i$ le degré d'un multi-indice $m = (m_i)_{1 \leq i \leq d}$ (on écrit $\partial_x^m = \partial_{x_1}^{m_1} \dots \partial_{x_d}^{m_d}$, et $\binom{|m|}{m} = \frac{|m|!}{m_1! \dots m_d!}$). On définit alors l'énergie totale

$$\mathcal{F}(\tau, f) = \sum_{k=0}^s \mathcal{F}_k(\tau, f).$$

On définit également, pour les mêmes coefficients, $\mathcal{D}_0 = Q_{-A^2} = \|\nabla_v f\|_2^2$ et

$$\mathcal{D}_1(\tau, f) = \alpha \tau Q_{A^4} + \beta \tau^2 Q_{A^2 SA + A S A^2} + \beta \tau^2 Q_{-S^2} + \gamma \tau^3 Q_{AS^2 A} + \delta \tau^4 Q_{A \Delta_x A},$$

puis comme précédemment

$$\mathcal{D}_k(\tau, f) = \nu_k \tau^{4(k-1)} \mathcal{D}_1(\tau, (-\Delta_x)^{\frac{k-1}{2}} f) = \nu_k \tau^{4(k-1)} \sum_{|m|=k-1} \binom{k-1}{m} \mathcal{D}_1(\tau, \partial_x^m f),$$

et enfin $\mathcal{D}(\tau, f) = \sum_{k=0}^s \mathcal{D}_k(\tau, f)$.

²³. Dans une première version de ce travail, on considérait n'importe quel opérateur X sous la forme d'un mot composé de A , S et T , avec un code (buggé...) pour calculer $\Phi(X)$, il s'avère qu'il n'y avait pas besoin de faire aussi compliqué!

Une première étape est le calcul des $\Phi(X)$ pour les opérateurs qui nous intéressent.

Proposition 3.1. *On a*

$$\Phi(\text{Id}) = 2A^2, \quad (3.5)$$

$$\Phi(-A^2) = -2A^4 - (AS + SA), \quad (3.6)$$

$$\Phi(AS + SA) = 2S^2 + 2(A^2SA + ASA^2) - (d-1)(AS + SA), \quad (3.7)$$

$$\Phi(-S^2) = -2AS^2A - 2(d-1)\Delta_x + 2dS^2. \quad (3.8)$$

On note $\mathcal{B}_0(\tau, f) = 0$ et

$$\mathcal{B}_1(\tau, f) = -(\alpha\tau + \beta(d-1)\tau^2)Q_{AS+SA} + 2\gamma\tau^3[(d-1)Q_{-\Delta_x} - dQ_{-S^2}], \quad (3.9)$$

et comme précédemment

$$\mathcal{B}_k(\tau, f) = \nu_k \tau^{4(k-1)} \mathcal{B}_1(\tau, (-\Delta_x)^{\frac{k-1}{2}} f).$$

Pour toute solution f de l'équation (3.2) qui soit C^∞ à support compact (ce qui est le cas si f^0 est à support compact), et pour tout $k \geq 0$, on a donc

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}_k(\tau, f(t, \cdot)) = -2\mathcal{D}_k(\tau, f(t, \cdot)) + \mathcal{B}_k(\tau, f(t, \cdot)).$$

Démonstration. On utilise $[A, T] = -S$ pour obtenir (3.6). Avec la première expression de Φ dans (3.3), on vérifie que l'on a

$$\Phi(AS + SA) = 2S^2 + 2(A^2SA + ASA^2) + A[A, [A, S]] + [A, [A, S]]A,$$

et on utilise $[A, S] = (d-1)T$ pour obtenir (3.7). Enfin on a $[T, S^2] = 0$ et $[A, S^2] = 2TS$ (attention à la non associativité ici, on a $[A, S^2] \neq [A, S]S + S[A, S]$, mais on utilise le fait que $[A, T^2] = T[A, T] + [A, T]T = -2TS$ et que A commute avec $\Delta_x = T^2 + S^2$, pour conclure). On a ensuite

$$[A, TS] = [A, T]S - T[A, S] = -S^2 + (d-1)T^2 = (d-1)\Delta_x - dS^2, \quad (3.10)$$

et avec la deuxième expression de Φ dans (3.3), cela donne (3.8). Comme Δ_x commute avec A, S et T , les expressions (3.5)-(3.8) permettent de calculer $\Phi(X)$ pour tous les opérateurs qui nous concernent, ce qui permet d'obtenir la dérivée de $\mathcal{F}_k(\tau, f(t, \cdot))$ pour tout k . \square

On peut alors énoncer le théorème principal de ce paragraphe.

Théorème 3.2. *On note $\|f\|_{\dot{H}^{s,m}} = \|(-\Delta_v)^{\frac{m}{2}}(-\Delta_x)^{\frac{s}{2}}f\|_2$ la semi-norme de Sobolev ayant s dérivées en espaces et m dérivées en vitesse. Si $\beta^2 < \alpha\gamma$, alors $\mathcal{F}_k(\tau, \cdot)$ est équivalente au carré d'une semi-norme de type Sobolev, plus précisément il existe des constantes c et C telles que pour tout $\tau > 0$ et pour toute fonction $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S})$,*

$$c\nu_k\tau^{4k-2}(\|f\|_{\dot{H}^{k-1,1}}^2 + \tau^2\|f\|_{\dot{H}^{k,0}}^2) \leq \mathcal{F}_k \leq C\nu_k\tau^{4k-2}(\|f\|_{\dot{H}^{k-1,1}}^2 + (\tau + \tau^2)\|f\|_{\dot{H}^{k,0}}^2). \quad (3.11)$$

De même $\mathcal{D}_k(\tau, \cdot)$ est équivalente au carré d'une semi-norme de type Sobolev à travers les estimations suivantes (avec des constantes $\tilde{c}, \tilde{C} > 0$ indépendantes de $\tau \geq 0$):

$$\forall \tau > 0, \quad \mathcal{D}_k \leq \tilde{C}\nu_k\tau^{4k-2}(\|f\|_{\dot{H}^{k-1,2}} + \tau\|f\|_{\dot{H}^{k,0}} + (\tau + \tau^2)\|f\|_{\dot{H}^{k,1}}), \quad (3.12)$$

$$\forall \tau \leq 1, \quad \mathcal{D}_k \geq \tilde{c}\nu_k\tau^{4k-2}(\|f\|_{\dot{H}^{k-1,2}} + \tau\|f\|_{\dot{H}^{k,0}} + \tau^2\|f\|_{\dot{H}^{k,1}}). \quad (3.13)$$

3.2. Estimées d'hypo-coercivité-hypo-ellipticité pour le mouvement brownien sphérique en vitesse

Enfin, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe des coefficients α, β, γ (avec $\beta^2 < \alpha\gamma$) et ν_k tels que pour tout $\tau \leq 1$ et pour toute fonction $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S})$,

$$\begin{aligned} |\mathcal{B}(\tau, f)| &\leq \varepsilon \mathcal{D}(\tau, f), \\ |\partial_\tau \mathcal{F}(\tau, f)| &\leq \varepsilon \mathcal{D}(\tau, f), \end{aligned}$$

où $\mathcal{B}(\tau, f)$ est donné par la proposition 3.1.

Démonstration. Il suffit de montrer les équivalences de semi-normes pour $k = 1$, au vu des définitions de \mathcal{F}_k et \mathcal{D}_k .

On note $\|Bf\|_2^2 = \sum_{\ell < m} \|B_{\ell, m} f\|_2^2$ lorsque $B = (B_{\ell, m})_{\ell < m}$ est un opérateur vectoriel, et on a donc

$$Q_{-S^2} = \|Sf\|_2^2, \quad Q_{-A^2} = \|Af\|_2^2.$$

On observe par Cauchy-Schwarz que $|Q_{SA+AS}| \leq 2\sqrt{Q_{-A^2}Q_{-S^2}}$, ce qui permet d'assurer la positivité de \mathcal{F} dès que $\beta < \sqrt{\alpha\gamma}$. On obtient en fait que

$$\left(1 - \frac{\beta}{\sqrt{\alpha\gamma}}\right) \tilde{\mathcal{F}}_1 \leq \mathcal{F}_1 \leq \left(1 + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha\gamma}}\right) \tilde{\mathcal{F}}_1,$$

où $\tilde{\mathcal{F}}_1$ correspond à \mathcal{F}_1 où on a retiré le terme « croisé » Q_{AS+SA} :

$$\tilde{\mathcal{F}}_1 = \alpha\tau Q_{-(\Delta_x)^k A^2} + \gamma\tau^3 Q_{-S^2} + \delta\tau^4 Q_{-\Delta_x}.$$

De la même manière on obtient que $|Q_{A^2 SA}| = |Q_{ASA^2}| \leq \sqrt{Q_{A^4} Q_{(AS)(SA)}}$ par Cauchy-Schwarz, et en faisant attention aux subtilités de parenthésages (et en utilisant le fait que $S_{i,j}$ et $S_{k,\ell}$ commutent, et de nouveau Cauchy-Schwarz et Young), on obtient que

$$\begin{aligned} Q_{(AS)(SA)} &= \sum_{i < j} \sum_{k < \ell} Q_{A_{i,j} S_{i,j} S_{k,\ell} A_{k,\ell}} = \sum_{i < j} \sum_{k < \ell} Q_{A_{i,j} S_{k,\ell} S_{i,j} A_{k,\ell}} \\ &\leq \sum_{i < j} \sum_{k < \ell} \sqrt{Q_{A_{i,j} S_{k,\ell}^2 A_{i,j}}} \sqrt{Q_{A_{k,\ell} S_{i,j}^2 A_{k,\ell}}}, \\ &\leq \sum_{i < j} \sum_{k < \ell} \frac{1}{2} (Q_{A_{i,j} S_{k,\ell}^2 A_{i,j}} + Q_{A_{k,\ell} S_{i,j}^2 A_{k,\ell}}) = Q_{AS^2 A}, \end{aligned} \tag{3.14}$$

et on a donc aussi

$$\left(1 - \frac{\beta}{\sqrt{\alpha\gamma}}\right) \tilde{\mathcal{D}}_1 \leq \mathcal{D}_1 \leq \left(1 + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha\gamma}}\right) \tilde{\mathcal{D}}_1,$$

avec

$$\tilde{\mathcal{D}}_1 = \alpha\tau Q_{A^4} + \beta\tau^2 Q_{-S^2} + \gamma\tau^3 Q_{AS^2 A} + \delta\tau^4 Q_{A\Delta_x A}.$$

Comme $S^2 + T^2 = \Delta_x$, on a alors $Q_{-S^2} \leq Q_{-\Delta_x}$. Ceci permet d'obtenir les estimations (3.11) sur \mathcal{F}_1 et la majoration de \mathcal{D}_1 donnée par (3.12), mais pas tout à fait la minoration (3.13), puisqu'on aurait besoin du terme $Q_{-\Delta_x}$ avec un facteur τ^3 , alors qu'on a seulement Q_{-S^2} dans $\tilde{\mathcal{D}}_1$. C'est là le point crucial qui correspond à ce qui avait été fait pour contrôler $\|v \cdot \nabla_x f\|^2$ par $\|P_{v^\perp} \nabla_x f\|^2$ et $-\langle \nabla_x f, \nabla_x(\Delta_v f) \rangle$ dans le paragraphe précédent²⁴. L'astuce est d'utiliser le commutateur calculé précédemment en (3.10) :

$$ATS - STA = (d-1)\Delta_x - dS^2.$$

²⁴. C'est à dire dans notre formalisme contrôler Q_{-T^2} par $Q_{-S^2} + Q_{A\Delta_x A}$. Cela ne suffisait pas pour obtenir la bonne puissance de τ , alors qu'en contrôlant comme on le fera en (3.15) par Q_{-S^2} et $\sqrt{Q_{A\Delta_x A} Q_{-S^2}}$ on obtient la bonne puissance.

En écrivant, par Cauchy–Schwarz :

$$|Q_{ATS}| = |Q_{STA}| \leq \sqrt{Q_{AT^2A}Q_{-S^2}} \leq \sqrt{Q_{A\Delta_x A}Q_{-S^2}},$$

on obtient ainsi

$$(d-1)Q_{-\Delta_x} \leq dQ_{-S^2} + 2\sqrt{Q_{A\Delta_x A}Q_{-S^2}} \leq \frac{d\tilde{\mathcal{D}}_1}{\tau^2\beta} + \frac{\tilde{\mathcal{D}}_1}{\tau^3\sqrt{\beta\delta}}. \quad (3.15)$$

On obtient donc bien que $\tau^3 Q_{-\Delta_x}$ est contrôlé par \mathcal{D}_1 , uniformément en $\tau \in [0, 1]$, ce qui termine la preuve de l'estimation (3.13).

Pour contrôler \mathcal{B} et $\partial_\tau \mathcal{F}$, on contrôle les termes un par un. On a, pour $k \geq 1$:

$$\begin{aligned} Q_{(-\Delta_x)^{k-1}A^2} &= Q_{A(-\Delta_x)^{k-1}A} \leq \frac{\tilde{\mathcal{D}}_{k-1}}{\tau^{4(k-1)}\delta\nu_{k-1}}, \quad (\text{ou } \leq \tilde{\mathcal{D}}_0 \text{ pour } k=1) \\ |Q_{(-\Delta_x)^{k-1}(AS+SA)}| &\leq 2\sqrt{Q_{(-\Delta_x)^{k-1}A^2}Q_{(-\Delta_x)^{k-1}S^2}} \leq \frac{2\sqrt{\tilde{\mathcal{D}}_{k-1}\tilde{\mathcal{D}}_k}}{\tau^{4k-3}\sqrt{\beta\delta}\nu_{k-1}\nu_k}, \\ Q_{(-\Delta_x)^{k-1}S^2} &\leq \frac{\tilde{\mathcal{D}}_k}{\tau^{4k-2}\beta\nu_k}, \end{aligned}$$

et on contrôle $Q_{(-\Delta_x)^k}$ comme en (3.15) :

$$(d-1)Q_{(-\Delta_x)^k} \leq dQ_{(-\Delta_x)^{k-1}S^2} + 2\sqrt{Q_{A(-\Delta_x)^k A}Q_{(-\Delta_x)^{k-1}S^2}} \leq \frac{d\tilde{\mathcal{D}}_k}{\tau^{4k-2}\beta\nu_k} + \frac{\tilde{\mathcal{D}}_k}{\tau^{4k-1}\sqrt{\beta\delta}\nu_k}.$$

On obtient que des conditions suffisantes sur les coefficients pour avoir $\partial_\tau \mathcal{F}_k \ll \tilde{\mathcal{D}}_k + \tilde{\mathcal{D}}_{k-1}$ sont alors

$$\alpha\nu_1 \ll 1, \quad \alpha\nu_k \ll \delta\nu_{k-1}, \quad \beta\nu_1 \ll 1, \quad \beta\nu_k \ll \delta\nu_{k-1}, \quad \gamma \ll \beta, \quad \delta \ll \beta.$$

De même, avec la définition (3.9), des conditions suffisantes pour avoir $\mathcal{B}_k \ll \tilde{\mathcal{D}}_k + \tilde{\mathcal{D}}_{k-1}$ sont

$$(\alpha + \beta)\sqrt{\nu_1} \ll \sqrt{\beta}, \quad (\alpha + \beta)\sqrt{\nu_k} \ll \sqrt{\beta\delta\nu_{k-1}}, \quad \gamma \ll \min(\beta, \sqrt{\delta\beta}).$$

En résumé, on veut donc

$$\delta \ll \beta, \quad \gamma \ll \sqrt{\delta\beta}, \quad \nu_1 \ll \min\left(\frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\beta}, \frac{\beta}{(\alpha + \beta)^2}\right), \quad \frac{\nu_k}{\nu_{k-1}} \ll \min\left(\frac{\delta}{\alpha}, \frac{\delta}{\beta}, \frac{\beta\delta}{(\alpha + \beta)^2}\right).$$

Ces conditions peuvent être vérifiées tout en gardant $\beta < \sqrt{\alpha\gamma}$, il suffit de construire pas à pas, on peut prendre par exemple $(\alpha, \beta, \gamma, \delta) = (1, \beta, 2\beta^2, \beta^2)$ et $\nu_k = \beta^{4k-2}$ avec $\beta \ll 1$, et cela termine la preuve. \square

On peut donc obtenir la décroissance de l'énergie, pour $\tau = \min(t, 1)$.

Corollaire 3.1. *Pour $\varepsilon < \frac{1}{2}$, et des coefficients $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ et ν_k judicieusement choisis, si f est une solution de l'équation (3.2) avec condition initiale $f_0 \in L^2$, alors l'énergie $\mathcal{F}(\min(t, 1), f(t, \cdot))$ est décroissante. Sur le tore, il existe alors une constante $\lambda > 0$ (indépendante de f_0) telle que si f_0 est de moyenne nulle, alors pour $t \geq 1$, $\mathcal{F}(1, f(t, \cdot)) \leq \|f_0\|_2^2 e^{-\lambda(t-1)}$.*

3.3. Stabilité non-linéaire de l'équilibre isotrope jusqu'au seuil de transition de phase

La preuve dans le cas du tore est une application directe de l'inégalité de Poincaré en espace et des estimations fournies par le Théorème 3.2.

Dans le cas de \mathbb{R}^d , on peut appliquer une inégalité de type Nash dans le cas où $f_0 \geq 0$, grâce à la conservation de la masse (la norme L^1) pour avoir un résultat similaire. Ce n'est cependant pas le cas qui nous intéresse : par la suite on considérera $f = \rho + g$, où la perturbation g n'a pas de signe (il n'y a alors aucune raison que la norme L^1 de g soit conservée).

Remarque 3.1. *Ces estimations auraient également pu s'obtenir en ne faisant que la comparaison L^2 - H^1 (en prenant $s = 1$), et en itérant plusieurs fois. On verra par la suite que le contrôle de tous les termes en même temps est utile pour traiter la non-linéarité. On n'a cependant pas traité tous les termes possibles, on peut par exemple montrer qu'en temps court, des termes de la forme $Q_{(-1)^k S^{2k} (-\Delta_x)^\ell}$ décroissent comme $t^{-3k-4\ell}$ par rapport à la norme L^2 initiale (ces termes n'apparaissent pas dans \mathcal{D} , on peut les contrôler grâce à $Q_{(-\Delta_x)^{k+\ell}}$, mais pas avec la même puissance de t en temps court).*

Remarque 3.2. *Pour obtenir les estimations de régularité dans [BT18], si on retraduisait leur approche de Γ -calcul généralisé dans notre cadre, cela reviendrait à utiliser la fonctionnelle suivante:*

$$Q_{\text{Id}} + at^2 Q_{-A^2} + 2bt^4 Q_{SA} + ct^6 Q_{-S^2} + \hat{a}t^4 Q_{A^4} + 2\hat{b}t^6 Q_{TA^2} + \hat{c}t^8 Q_{-T^2}.$$

Cela correspond à un choix de poids t , t^3 et t^4 pour les opérateurs A , S , et T . On a vu ici que l'on pouvait prendre des poids $t^{\frac{1}{2}}$, $t^{\frac{3}{2}}$ and t^2 à la place, et notre fonctionnelle dans le cas $s = 1$ s'écrit avec moins de termes:

$$Q_{\text{Id}} + \alpha t Q_{-A^2} + 2\beta t^2 Q_{SA} + \gamma t^3 Q_{-S^2} + \delta t^4 Q_{-T^2-S^2}.$$

D'après ce que je comprends, la présence du terme Q_{A^4} est là dans [BT18] simplement pour assurer que la fonctionnelle est positive en prenant comme critère $\hat{b}^2 < \hat{a}\hat{c}$. Mais on a en fait vu que $Q_{TA^2} = Q_{SA}$, donc on n'a pas besoin de ce terme (qui est le même qu'un terme déjà existant, avec un poids plus faible). Je ne sais pas si dans le cadre d'une variété Riemannienne également en espace, ce qui est le cas dans [BT18], notre simple approche fonctionnerait (il se peut qu'il y ait plus de termes avec la courbure de la variété, dans notre cas on a par exemple utilisé que Δ_v et Δ_x commutent).

3.3 Stabilité non-linéaire de l'équilibre isotrope jusqu'au seuil de transition de phase

On étudie maintenant l'équation complète (3.1) sur une perturbation $g = f - \rho$ où $0 \leq \rho < d$. L'équation s'écrit

$$\partial_t g + v \cdot \nabla_x g - (\rho + g)(d-1)v \cdot J_g + J_g \cdot \nabla_v g = \Delta_v g, \quad J_g = \int_{\mathbb{S}} v g \, dv. \quad (3.16)$$

Pour garder le cadre algébrique précédent, on définit l'opérateur U par $Ug = dv \wedge J_g$. C'est un opérateur « vectoriel » au sens où on le notera $(U_{i,j})_{i < j}$, avec $U_{i,j}g = -dv_j e_i \cdot J_g + dv_i e_j \cdot J_g$ mais ce n'est plus un opérateur différentiel. On a $\int_{\mathbb{S}} v_i^2 \, dv = \frac{1}{d}$, donc $J_{U_{i,j}g} = -e_j e_i \cdot J_g + e_i e_j \cdot J_g$, de sorte que l'on obtient $U_{i,j}^2 g = -d(v_i e_i \cdot J_g + v_j e_j \cdot J_g)$, donc on trouve $U^2 g = -(d-1)dv \cdot J_g$ en sommant sur $i < j$. On observe donc que cet opérateur U^2 se comporte comme la composée de la projection sur les harmoniques sphériques de degré 1 (qui à g associe $dv \cdot J_g$) et du Laplacien A^2 (dont la valeur propre associée aux harmoniques sphériques de degré 1 vaut $-(d-1)$).

En fait, par le Lemme 3.1 on a également $A_{i,j}U_{i,j}g = -d(v_i e_i \cdot J_g + v_j e_j \cdot J_g)$, donc on obtient aussi $AU = U^2$. On vérifie que U est antiadjoint et on a donc aussi $UA = AU = U^2$, ce qui permet par exemple d'avoir $A^2 - U^2 = (A - U)^2$. Enfin, on a

$$AU^2 = U^2A = A^2U = UA^2 = U^3 = -(d-1)U. \quad (3.17)$$

Dans ce cadre on peut également écrire $J_g \cdot \nabla_v g = (v \wedge J_g)(v \wedge \nabla_v g) = \frac{1}{d} \sum_{i < j} U_{i,j} g A_{i,j} g$ et donc le terme non-linéaire de l'équation (3.16) peut aussi s'écrire sous forme condensée :

$$\begin{aligned} \partial_t g + Tg &= A^2 g - \frac{\rho + g}{d} U^2 g - \frac{1}{d} U g A g \\ &= (A^2 - \frac{\rho}{d} U^2) g - \frac{1}{d} (A(gUg)). \end{aligned}$$

Pour alléger les notations, on note $L = A - (1 - \sqrt{1 - \frac{\rho}{d}})U$, de sorte que $L^2 = A^2 - \frac{\rho}{d} U^2$. L'opérateur L^2 a les mêmes propriétés spectrales que A^2 dès que $\rho < d$: il a en fait les mêmes vecteurs propres (les harmoniques sphériques) et valeurs propres (qui valent $-\ell(\ell + d - 2)$ lorsque $\ell \neq 1$ est le degré de l'harmonique sphérique), sauf la valeur propre associée aux harmoniques sphériques de degré 1, qui vaut $-(d-1)$ pour A^2 et $-(d-1)(1 - \frac{\rho}{d})$ pour L^2 . Par contre les propriétés de commutation avec les opérateurs T et S ne sont plus tout à fait les mêmes. Cependant, en plus de (3.17), on a que U (et donc L) commute avec toute dérivée en x .

Lorsqu'on étudie la même fonctionnelle $\mathcal{F}(\tau, g(t, \cdot))$ que dans la section précédente, de nouveaux termes apparaissent dans la dissipation. De façon générique, on a pour un opérateur X autoadjoint composé comme précédemment, en notant toujours $Q_X(g) = \int g X g dv$ (et en omettant la dépendance en g si le contexte est clair) :

$$\frac{d}{dt} Q_X = Q_{\Phi^\rho(X)} + R_X,$$

où cette fois-ci

$$\Phi^\rho(X) = A^2 X + X A^2 - \frac{\rho}{d} (U^2 X + X U^2) + [T, X] = L^2 X + X L^2 + [T, X],$$

et où le terme non-linéaire est

$$R_X(g) = \frac{1}{d} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (A X g)(U g) g dv dx.$$

Il faut tout d'abord adapter l'étude de la partie linéaire avec ces termes supplémentaires, puis ensuite contrôler le terme non-linéaire. On calcule donc, grâce à la Proposition 3.1 :

$$\begin{aligned} \Phi^\rho(\text{Id}) &= 2L^2 \\ \Phi^\rho(-A^2) &= -2A^2 L^2 - (SA + AS) \\ \Phi^\rho(AS + SA) &= \Phi(AS + SA) - \frac{\rho}{d} (U^2(AS + SA) + (AS + SA)U^2) \\ &= \Phi(AS + SA) - \frac{\rho}{d} (U^2 SA + AS U^2) + \frac{\rho(d-1)}{d} (US + SU) \\ &= 2S^2 + (A^2 + L^2)SA + AS(A^2 + L^2) - (d-1)[(AS + SA) - \frac{\rho}{d}(US + SU)], \\ \Phi^\rho(-S^2) &= \Phi(-S^2) - \frac{\rho}{d} (U^2 S^2 + S^2 U^2) \\ &= -2AS^2 A - 2(d-1)\Delta_x + 2d S^2 - \frac{\rho}{d} (U^2 S^2 + S^2 U^2). \end{aligned}$$

3.3. Stabilité non-linéaire de l'équilibre isotrope jusqu'au seuil de transition de phase

On voit donc qu'on obtient essentiellement les mêmes termes, et que les propriétés spectrales de L^2 joueront le même rôle que celles de A^2 dans la section précédente. On peut donc prendre une fonctionnelle similaire pour \mathcal{F} , mais une première modification que l'on fait, qui rendra l'étude du terme non-linéaire plus simple, est de prendre $\sum_i (-1)^{k-1} \partial_{x_i}^{2k-2}$ à la place de $(-\Delta_x)^{k-1}$ pour les termes d'ordre plus élevé (ce qui est équivalent en terme de semi-normes de Sobolev que l'on considère) :

Définition 3.2. On définit l'énergie totale $\mathcal{F}^\rho(\tau, g) = \sum_{k=0}^s \mathcal{F}_k^\rho(\tau, g)$, avec $\mathcal{F}_0^\rho = Q_{\text{Id}} = \|g\|_2^2$ et où pour $k \geq 1$ on a posé

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_k^\rho(\tau, g) = \nu_k \sum_{i=1}^d \alpha \tau^{4k-3} Q_{(-1)^k \partial_{x_i}^{2k-2} A^2} + \beta \tau^{4k-2} Q_{(-1)^{k-1} \partial_{x_i}^{2k-2} (SA+AS)} \\ + \gamma \tau^{4k-1} Q_{(-1)^k \partial_{x_i}^{2k-2} S^2} + \delta \tau^{4k} Q_{(-1)^k \partial_{x_i}^{2k}}. \end{aligned}$$

On définit également, pour les mêmes coefficients, $\mathcal{D}^\rho(\tau, g) = \sum_{k=0}^s \mathcal{D}_k(\tau, g)$, avec $\mathcal{D}_0^\rho = Q_{-A^2 + \frac{\rho}{d} U^2}$ et pour $k \geq 1$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_k^\rho(\tau, g) = \nu_k \sum_{i=1}^d \alpha \tau^{4k-3} Q_{(-1)^{k-1} \partial_{x_i}^{2k-2} A^2 L^2} + \beta \tau^{4k-2} Q_{(-1)^k \partial_{x_i}^{2k-2} \frac{1}{2} [(A^2+L^2)SA+AS(A^2+L^2)]} \\ + \beta \tau^2 Q_{(-1)^k \partial_{x_i}^{2k-2} S^2} + \gamma \tau^{4k-1} Q_{(-1)^{k-1} \partial_{x_i}^{2k-2} AS^2 A} + \delta \tau^{4k} Q_{(-1)^{k-1} \partial_{x_i}^{2k} L^2}. \end{aligned}$$

Le résumé des calculs précédents de $\Phi^\rho(X)$ pour les opérateurs qui nous intéressent permet donc d'écrire la dissipation sous une forme similaire, en modifiant légèrement le « mauvais » terme \mathcal{B} et incluant le terme non-linéaire :

Proposition 3.2. On note $\mathcal{B}_0^\rho(\tau, g) = 0$ et pour $k \geq 1$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_k^\rho(\tau, g) = (-1)^k \nu_k \sum_{i=1}^d \alpha \tau^{4k-3} Q_{\partial_{x_i}^{2k-2} (AS+SA)} + \beta \tau^{4k-2} (d-1) Q_{\partial_{x_i}^{2k-2} [(AS+SA) - \frac{\rho}{d} (US+SU)]} \\ + \gamma \tau^{4k-1} [2(d-1) Q_{\partial_{x_i}^{2k-2} \Delta_x} - 2d Q_{\partial_{x_i}^{2k-2} S^2} + \frac{\rho}{d} Q_{\partial_{x_i}^{2k-2} (U^2 S^2 + S^2 U^2)}], \end{aligned}$$

et on pose également $\mathcal{R}_0^\rho = R_{\text{Id}}$ et, pour $k \geq 1$,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_k^\rho(\tau, g) = \nu_k \sum_{i=1}^d \alpha \tau^{4k-3} R_{(-1)^k \partial_{x_i}^{2k-2} A^2} + \beta \tau^{4k-2} R_{(-1)^{k-1} \partial_{x_i}^{2k-2} (SA+AS)} \\ + \gamma \tau^{4k-1} R_{(-1)^k \partial_{x_i}^{2k-2} S^2} + \delta \tau^{4k} R_{(-1)^k \partial_{x_i}^{2k}}. \end{aligned}$$

Alors, pour toute solution g de l'équation (3.16) qui soit C^∞ à support compact (ce qui est le cas si g^0 est à support compact), et pour tout $k \geq 0$, on a

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}_k^\rho(\tau, g) = -2\mathcal{D}_k^\rho(\tau, g) + \mathcal{B}_k^\rho(\tau, g) + \mathcal{R}_k^\rho(\tau, g).$$

On peut donc effectuer les mêmes calculs que dans la preuve du Théorème 3.2 pour contrôler $\mathcal{B}_k^\rho(\tau, g)$. La condition pour que \mathcal{D}_k^ρ contrôle (le carré de) la bonne semi-norme de Sobolev est cette fois-ci $\beta^2 Q_{\frac{1}{4}(A^2+L^2)^2} < Q_{A^2 L^2} \alpha \gamma$ ce qui équivaut à $\beta^2 < \frac{1-\frac{\rho}{d}}{(1-\frac{\rho}{2d})^2} \alpha \gamma$ (on peut peut-être légèrement améliorer ce critère au prix de l'inclusion d'autres termes dans $\mathcal{B}_k^\rho(\tau, g)$ si on veut être un peu plus fin sur les constantes).

Proposition 3.3. *Si $\frac{\rho}{d} < 1$ et si $\beta^2 < \alpha\gamma$, il existe des constantes $c, C > 0$ telles que pour tout $\tau > 0$ et pour toute fonction $g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S})$, on a*

$$c\nu_k\tau^{4k-2}(\|g\|_{\dot{H}^{k-1,1}}^2 + \tau^2\|g\|_{\dot{H}^{k,0}}^2) \leq \mathcal{F}_k^\rho \leq C\nu_k\tau^{4k-2}(\|g\|_{\dot{H}^{k-1,1}}^2 + (\tau + \tau^2)\|g\|_{\dot{H}^{k,0}}^2).$$

De même, si $\beta^2 < \frac{1-\frac{\rho}{d}}{(1-\frac{\rho}{2d})^2}\alpha\gamma$, il existe des constantes $\tilde{c}, \tilde{C} > 0$ telles que

$$\begin{aligned} \forall \tau > 0, \quad \mathcal{D}_k^\rho &\leq \tilde{C}\nu_k\tau^{4k-2}(\|g\|_{\dot{H}^{k-1,2}} + \tau\|g\|_{\dot{H}^{k,0}} + (\tau + \tau^2)\|g\|_{\dot{H}^{k,1}}), \\ \forall \tau \leq 1, \quad \mathcal{D}_k^\rho &\geq \tilde{c}\nu_k\tau^{4k-2}(\|g\|_{\dot{H}^{k-1,2}} + \tau\|g\|_{\dot{H}^{k,0}} + \tau^2\|g\|_{\dot{H}^{k,1}}). \end{aligned}$$

Enfin, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe des coefficients $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ (avec $\beta^2 < \frac{1-\frac{\rho}{d}}{(1-\frac{\rho}{2d})^2}\alpha\gamma$) et ν_k tels que pour tout $\tau \leq 1$ et pour toute fonction $g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S})$,

$$\begin{aligned} |\mathcal{B}^\rho(\tau, g)| &\leq \varepsilon \mathcal{D}^\rho(\tau, f), \\ |\partial_\tau \mathcal{F}^\rho(\tau, g)| &\leq \varepsilon \mathcal{D}^\rho(\tau, f), \end{aligned}$$

où $\mathcal{B}^\rho(\tau, f)$ est donné par la proposition 3.2.

Démonstration. On procède exactement de la même manière que dans la preuve du Théorème 3.2. Les termes rajoutés dans $\mathcal{B}_k^\rho(\tau, g)$ ne fournissent pas de difficulté supplémentaire. En effet, le terme $|Q_{SU+US}| \leq 2\sqrt{Q_{-S^2}}\sqrt{Q_{-U^2}}$ peut se contrôler de la même manière que Q_{AS+SA} qui était déjà présent, et on a

$$|Q_{S^2U^2+U^2S^2}| \leq 2\sqrt{Q_{-S^2}}\sqrt{Q_{-U^2S^2U^2}} \leq 2\sqrt{Q_{-S^2}}\sqrt{Q_{-U^2\Delta_x^2U^2}} \leq 2(d-1)\sqrt{Q_{-S^2}}\sqrt{Q_{-\Delta_x^2}}.$$

Donc comme on devait déjà contrôler $|Q_{(-1)^{k-1}\partial_{x_i}^{2k-2}\Delta_x^2}|$ et $|Q_{(-1)^{k-1}\partial_{x_i}^{2k-2}S^2}|$ pour la même puissance de τ ($4k-1$) et le même coefficient $\gamma\nu_k$, on obtient les mêmes conditions suffisantes sur les coefficients, que l'on peut satisfaire de la même manière tout en ayant $\beta^2 < \frac{1-\frac{\rho}{d}}{(1-\frac{\rho}{2d})^2}\alpha\gamma$. \square

On peut donc maintenant contrôler le terme cubique, provenant de la non-linéarité de l'équation (3.16). L'idée est de réussir à contrôler chaque terme par $\sqrt{\mathcal{F}\mathcal{D}}$, pour avoir décroissance de l'énergie \mathcal{F} si elle est initialement petite. On verra qu'on ne peut pas forcément cette fois-ci contrôler la régularité en prenant $\tau = t$ (sauf dans un cas très particulier), mais on garde la dépendance en τ dans les estimations pour illustrer le problème. On commence par des estimations faisant entrer en jeu les normes $L_x^\infty(L_v^2)$ de g et de ses dérivées :

Proposition 3.4. *On suppose que les coefficients vérifient $\beta^2 < \frac{1-\frac{\rho}{d}}{(1-\frac{\rho}{2d})^2}\alpha\gamma$, et que les ν_k sont fixés. On note $\|g\|_{\infty,2} = \sup_x \|g(x, \cdot)\|_{L_v^2}$, et on a les estimations suivantes (où C désigne une constante générique, variant de ligne à ligne, dépendant des coefficients mais pas de $\tau \leq 1$) :*

$$\mathcal{R}_0^\rho(\tau, g) \leq C(\|J_g\|_\infty + \|\Pi g\|_\infty)\mathcal{D},$$

et pour tout $k \geq 1$:

$$\mathcal{R}_k^\rho(\tau, g) \leq C\left(\sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{2m} \|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty,2} + \sum_{m=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} (\tau^{2m-1} \|\partial_{x_i}^{m-1} A g\|_{\infty,2} + \tau^{2m} \sum_{j=1}^d \|\partial_{x_i}^{m-1} \partial_{x_j} g\|_{\infty,2})\right)\mathcal{D}.$$

3.3. Stabilité non-linéaire de l'équilibre isotrope jusqu'au seuil de transition de phase

Démonstration. On a les contrôles suivants :

$$\begin{aligned}
\|\partial_{x_i}^k Ag\|_2 &\leq C\tau^{-2k}\sqrt{\mathcal{D}} && \text{pour } 0 \leq k \leq s, \\
\|\partial_{x_i}^{k-1} S_{j,\ell} Ag\|_2 &\leq C\tau^{-2k+\frac{1}{2}}\sqrt{\mathcal{D}} && \text{pour } 1 \leq k \leq s, \\
\|\partial_{x_i}^k g\|_2 &\leq C\tau^{-2k+\frac{1}{2}}\sqrt{\mathcal{D}} && \text{pour } 1 \leq k \leq s, \\
\|\partial_{x_i}^{k-1} Sg\|_2 &\leq C\tau^{-2k+1}\sqrt{\mathcal{D}} && \text{pour } 1 \leq k \leq s, \\
\|\partial_{x_i}^{k-1} A^2 g\|_2 &\leq C\tau^{-2k+\frac{3}{2}}\sqrt{\mathcal{D}} && \text{pour } 1 \leq k \leq s.
\end{aligned}$$

On va également utiliser les contrôles suivants

$$|\partial_{x_i}^m Ug(x, \cdot)| \leq C |J_{\partial_{x_i}^m g}(x)| \leq \begin{cases} C \|Ag(x, \cdot)\|_{L_v^2} \leq C\sqrt{\mathcal{D}} & \text{pour } m = 0, \\ C \|\partial_{x_i}^m g(x, \cdot)\|_{L_v^2} \leq C\tau^{-2m+\frac{1}{2}}\sqrt{\mathcal{D}} & \text{pour } 1 \leq m \leq s, \end{cases} \quad (3.18)$$

ainsi que, pour $m \geq 1$:

$$\begin{aligned}
|\partial_{x_i}^{m-1} S_{j,\ell} Ug(x, \cdot)| &\leq C(|J_{\partial_{x_i}^{m-1} \partial_{x_j} g}(x)| + |J_{\partial_{x_i}^{m-1} \partial_{x_\ell} g}(x)|) \leq C\tau^{-2m+\frac{1}{2}}\sqrt{\mathcal{D}}, \\
|\partial_{x_i}^{m-1} AUg(x, \cdot)| &\leq C |J_{\partial_{x_i}^{m-1} g}(x)| \leq C\tau^{-2m+2}\sqrt{\mathcal{D}}.
\end{aligned}$$

On a même un facteur $\tau^{-2m+\frac{5}{2}}$ lorsque $m \geq 2$ mais on n'en aura pas besoin.

Pour le cas $k = 0$ on obtient, en utilisant l'inégalité de Poincaré sur \mathbb{S} :

$$\begin{aligned}
|R_{\text{Id}}| &= \frac{1}{d} \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (Ag)(Ug)g \right| \leq C \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (Ag)(Ug)(g - \Pi g) \right| + C \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (Ag)(Ug)\Pi g \right| \\
&\leq C \int_{\mathbb{R}^d} \|J_g\|_\infty \int_{\mathbb{S}} |Ag(x, v)| |g(x, v) - \Pi g| dv dx + C \left| \int_{\mathbb{R}^d} \Pi_g \int_{\mathbb{S}} g AUg dx \right| \\
&\leq C \|Ag\|_2^2 \|J_g\|_\infty + C \left| \int_{\mathbb{R}^d} \Pi_g |J_g|^2 dx \right| \leq C(\|J_g\|_\infty + \|\Pi_g\|_\infty) \mathcal{D}.
\end{aligned}$$

Pour le cas $k \geq 1$, on commence par traiter le cas de $R_{\partial_{x_i}^{2k}}$, en utilisant la formule de Leibniz, et le fait que si $0 \leq m \leq k$, soit m soit $k - m$ est inférieur à $\frac{k}{2}$ et alors l'autre est supérieur ou égal à 1, ce qui permet d'utiliser (3.18) (avec $m \geq 1$):

$$\begin{aligned}
|R_{\partial_{x_i}^{2k}}| &= \frac{1}{d} \left| \sum_{m=0}^k \binom{k}{m} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^k Ag) (\partial_{x_i}^m Ug) \partial_{x_i}^{k-m} g \, dv dx \right| \\
&\leq C \sum_{m=0}^k \int_{\mathbb{R}^d} \|\partial_{x_i}^m g(x, \cdot)\|_{L_v^2} \|\partial_{x_i}^k Ag(x, \cdot)\|_{L_v^2} \|\partial_{x_i}^{k-m} g(x, \cdot)\|_{L_v^2} dx \\
&\leq C \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-4k+2m+\frac{1}{2}} \|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty, 2} \mathcal{D}.
\end{aligned}$$

Puis, en utilisant que $AS^2 = S^2A + 2TS$, on a de la même manière

$$\begin{aligned}
|R_{\partial_{x_i}^{2k-2}S^2}| &= \frac{1}{d} \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^{2k-2} AS^2 g)(Ug)g \right| \\
&\leq C \left(\left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^{2k-2} TSg)(Ug)g \right| + \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} \sum_{j < \ell} \partial_{x_i}^{2k-2} S_{j,\ell} Ag(S_{j,\ell}(Ug)g + UgS_{j,\ell}g) \right| \right) \\
&\leq C \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^{k-1} Tg) \sum_{m=1}^k (\partial_{x_i}^{m-1}(SUG) \partial_{x_i}^{k-m} g + \partial_{x_i}^{k-m} Ug \partial_{x_i}^{m-1} Sg) \right| \\
&\quad + C \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} \sum_{j < \ell} \partial_{x_i}^{k-1} S_{j,\ell} Ag \sum_{m=1}^k (\partial_{x_i}^{m-1} S_{j,\ell}(Ug) \partial_{x_i}^{k-m} g + \partial_{x_i}^{k-m} Ug \partial_{x_i}^{m-1} S_{j,\ell}g) \right|.
\end{aligned}$$

Et en utilisant que $\|Tg\|_{L_v^2} \leq \|\nabla_x g\|_{L_v^2}$, on obtient pour $\tau \leq 1$

$$\begin{aligned}
|R_{\partial_{x_i}^{2k-2}S^2}| &\leq C \tau^{-2k+\frac{1}{2}} \left(\sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-2(k-m)+\frac{1}{2}} \|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty,2} + \sum_{m=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-2(k-m)+\frac{1}{2}} \sum_j \|\partial_{x_i}^{m-1} J_{\partial_{x_j} g}\|_{\infty} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-2(k-m)+\frac{1}{2}} \|\partial_{x_i}^{m-1} Sg\|_{\infty,2} + \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-2(k-m)+1} \|\partial_{x_i}^m J_g\|_{\infty} \right) \mathcal{D} \\
&\leq C \left(\sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-4k+2m+1} \|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty,2} + \sum_{m=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-4k+2m+1} \sum_j \|\partial_{x_i}^{m-1} \partial_{x_j} g\|_{\infty,2} \right) \mathcal{D}.
\end{aligned}$$

On procède de même pour $R_{\partial_{x_i}^{2k-2}(AS+SA)}$, en utilisant que $AS + SA = 2SA + (d-1)T$:

$$\begin{aligned}
|R_{\partial_{x_i}^{2k-2}(AS+SA)}| &= \frac{1}{d} \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^{2k-2} (2SA + (d-1)T)g) A((Ug)g) \right| \\
&\leq C \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^{k-1} SA)g \sum_{m=1}^k (\partial_{x_i}^{m-1}(AUG) \partial_{x_i}^{k-m} g + \partial_{x_i}^{k-m} Ug \partial_{x_i}^{m-1} Ag) \right| \\
&\quad + C \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^{k-1} Tg) \sum_{m=1}^k (\partial_{x_i}^{m-1}(AUG) \partial_{x_i}^{k-m} g + \partial_{x_i}^{k-m} Ug \partial_{x_i}^{m-1} Ag) \right|.
\end{aligned}$$

En faisant de nouveau attention aux parenthésages comme en (3.14), on obtient pour $\tau \leq 1$:

$$\begin{aligned}
|R_{\partial_{x_i}^{2k-2}(AS+SA)}| &\leq C \tau^{-2k+\frac{1}{2}} \left(\sum_{m=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-2(k-m)+\frac{1}{2}} \|J_{\partial_{x_i}^{m-1} g}\|_{\infty} + \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-2(k-m)+2} \|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty,2} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-2(k-m)+\frac{1}{2}} \|\partial_{x_i}^{m-1} Ag\|_{\infty} + \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-2(k-m-1)} \|J_{\partial_{x_i}^m g}\|_{\infty} \right) \\
&\leq C \left(\sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-4k+2m+\frac{5}{2}} \|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty,2} + \sum_{m=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-4k+2m+1} \|\partial_{x_i}^{m-1} Ag\|_{\infty,2} \right) \mathcal{D}.
\end{aligned}$$

3.3. Stabilité non-linéaire de l'équilibre isotrope jusqu'au seuil de transition de phase

Le dernier terme à traiter est $R_{\partial_{x_i}^{2k-2}A^2}$, qui est très similaire.

$$\begin{aligned}
|R_{\partial_{x_i}^{2k-2}A^2}| &= \frac{1}{d} \left| \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^{2k-2} A^2 g) A((Ug)g) \right| \\
&\leq C \left| \sum_{m=0}^{k-1} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (\partial_{x_i}^{k-1} A^2 g) \sum_{m=1}^k (\partial_{x_i}^{m-1} (AUg)) \partial_{x_i}^{k-m} g + \partial_{x_i}^{k-m} Ug \partial_{x_i}^{m-1} Ag \right| \\
&\leq C \left(\sum_{m=0}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-4k+2m+\frac{7}{2}} \|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty,2} + \sum_{m=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} \tau^{-4k+2m+2} \|\partial_{x_i}^{m-1} Ag\|_{\infty,2} \right) \mathcal{D}.
\end{aligned}$$

En sommant toutes ces estimations avec les puissances de τ associées, on obtient le résultat voulu. On remarque que dans tous les termes sauf $R_{\partial_{x_i}^{2k-2}S^2}$, on obtient au moins un facteur $\tau^{\frac{1}{2}}$ supplémentaire pour les termes de type $\|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty,2}$. Les termes $(SU)g$ sont estimés par $\|\nabla_x J_g\|$ dans tous les cas (que ce soit pour l'intégrer à une norme $L_x^\infty(L_v^2)$ ou à une norme L^2), et ce sont seulement ces cas qui empêchent d'obtenir ce facteur $\tau^{\frac{1}{2}}$ additionnel. \square

On veut maintenant transformer ces estimations à l'aide de l'énergie \mathcal{F} . On a les contrôles suivants :

$$\begin{aligned}
\|\partial_{x_i}^k g\|_2 &\leq C \tau^{-2k} \sqrt{\mathcal{F}} && \text{pour } 0 \leq k \leq s \\
\|\partial_{x_i}^{k-1} Ag\|_2 &\leq C \tau^{-2k+\frac{3}{2}} \sqrt{\mathcal{F}} && \text{pour } 1 \leq k \leq s.
\end{aligned}$$

En particulier, pour $m \geq 0$, et $m \leq k \leq s$, on a pour $\tau \leq 1$

$$\begin{aligned}
\|\partial_{x_i}^m g\|_{H^{k-m,0}} &\leq C \tau^{-2k} \sqrt{\mathcal{F}}, \\
\|\partial_{x_i}^{m-1} Ag\|_{H^{k-m,0}} &\leq C \tau^{-2k+\frac{3}{2}} \sqrt{\mathcal{F}}.
\end{aligned}$$

On utilise $|\partial_{x_i} g(x, \cdot)|_{L_v^2} \leq \|\partial_{x_i} g(x, \cdot)\|_{L_v^2}$ et les injections et interpolations de Sobolev pour obtenir, pour $0 \leq m < s - \frac{d}{2}$

$$\begin{aligned}
\|\partial_{x_i}^m g\|_{\infty,2} &\leq C \|\partial_{x_i}^m g\|_{H^{\frac{d}{2}+\varepsilon,0}} \leq C \|\partial_{x_i}^m g\|_{H^{s-m,0}}^{\frac{\frac{d}{2}+\varepsilon}{s-m}} \|\partial_{x_i}^m g\|_{H^{0,0}}^{\frac{s-m-\frac{d}{2}+\varepsilon}{s-m}} \\
&\leq C \tau^{-2m \frac{s-m-\frac{d}{2}+\varepsilon}{s-m} - 2s \frac{\frac{d}{2}+\varepsilon}{s-m}} \sqrt{\mathcal{F}} = C \tau^{-2m-d-2\varepsilon} \sqrt{\mathcal{F}},
\end{aligned} \tag{3.19}$$

et de même pour $1 \leq m < s - \frac{d}{2}$:

$$\|\partial_{x_i}^{m-1} Ag\|_{\infty,2} \leq C \tau^{-2m+\frac{3}{2}-d-2\varepsilon} \sqrt{\mathcal{F}}. \tag{3.20}$$

$$\|\partial_{x_i}^{m-1} \partial_{x_j} g\|_{\infty,2} \leq C \tau^{-2m-d-2\varepsilon} \sqrt{\mathcal{F}}. \tag{3.21}$$

On peut donc obtenir la stabilité de l'équilibre homogène isotrope, en norme $H^{s,1}$ suffisamment élevée.

Théorème 3.3. *On fixe $\tau = 1$, et on prend $s \geq d$ si d impair ou $s \geq d+1$ si d pair, ainsi que des coefficients donnés par la Proposition 3.3. Alors il existe $\eta > 0$ telle que pour toute condition initiale $g_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}) \cap H^{s,1}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{S})$ vérifiant $\mathcal{F}(1, g_0) < \eta$, la solution f de l'équation (3.1) avec condition initiale $f_0 = \rho + g_0$ est globale, et l'énergie $\mathcal{F}(1, f - \rho)$ est décroissante en temps. Sur le tore, si ρ est la moyenne de f_0 , alors l'énergie est exponentiellement décroissante.*

Démonstration. On a $\lfloor \frac{s}{2} \rfloor < s - \frac{d}{2}$, donc d'après les estimations (3.19)-(3.21) et celles de la proposition 3.4, on obtient pour $\tau = 1$

$$\mathcal{R}_k^\rho(\tau, g) \leq C\sqrt{\mathcal{F}}\mathcal{D}.$$

On a donc d'après les Propositions 3.2 et 3.3, on a

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F} \leq -(2 - \varepsilon - C\sqrt{\mathcal{F}})\mathcal{D},$$

ce qui assure la décroissance de l'énergie si elle est initialement assez petite. Ceci donne alors une borne sur \mathcal{F} et ainsi sur $\|J_g(t, \cdot)\| = \|J_f(t, \cdot)\|_\infty$ par injections de Sobolev, ce qui fait que la norme infinie de f ne peut pas exploser en temps fini, par l'estimation du théorème 3.1. La convergence exponentielle sur le tore découle de l'inégalité de Poincaré en espace. \square

Sur \mathbb{R}^d , on n'a pour l'instant pas de critère pour obtenir une vitesse de convergence vers l'équilibre : sans contrôle de la norme L^1 de g , on ne peut pas appliquer l'inégalité de Nash pour obtenir une décroissance en $t^{-\frac{d}{2}}$ comme on pourrait s'y attendre.

On n'a pas non plus utilisé ici la régularisation en temps court : les injections de Sobolev font apparaître des puissances de τ qui ne sont pas intégrables. Cependant, on peut, dans le cas où la condition initiale ne dépend que d'une variable, obtenir une régularité H^1 à partir de condition initiale $L^\infty \cap L^2$ suffisamment petite :

Théorème 3.4. *Si f_0 ne dépend que d'une dimension d'espace, alors il existe $\eta > 0$ telle que si $\|f_0 - \rho\|_2$ et $\|f_0 - \rho\|_\infty$ sont suffisamment petites, alors la solution de l'équation (3.1) avec condition initiale f_0 est globale, et l'énergie $\mathcal{F}(\min(t, 1), f(t, \cdot) - \rho)$ est décroissante en temps. Sur le tore, si ρ est la moyenne de f_0 , alors l'énergie est exponentiellement décroissante pour $t \geq 1$.*

Idée de la preuve. La première chose à faire est d'obtenir des estimations en norme L^∞ directement pour $g = f_0 - \rho$, en utilisant le principe du maximum pour (3.16). On obtient alors que pour $\|g_0\|_\infty$ suffisamment petit, alors $\|g\|_\infty$ reste petit pour tout $t \in [0, 1]$. Comme les estimations sur \mathcal{R}_0 et \mathcal{R}_1 sont contrôlées par $\|g\|_{L_x^\infty(L_v^2)}\mathcal{D}$, c'est suffisant pour avoir la décroissance de \mathcal{F} pour $t \in [0, 1]$. Et alors à partir de $t = 1$, on a que $\|g\|_{L_x^\infty(L_v^2)}$ est contrôlée par \mathcal{F} (par injections de Sobolev). Si initialement \mathcal{F} est suffisamment petite (c'est-à-dire $\|g\|_2$ petite), ce contrôle suffit pour assurer également la décroissance de \mathcal{F} pour $t \geq 1$ sans avoir besoin de borne sur $\|g\|_\infty$. Et à partir de $t \geq 1$ cela donne donc une borne sur $\|J_g\|_\infty$ uniforme en temps, ce qui suffit pour obtenir l'existence globale d'une solution (pas forcément uniformément bornée en temps pour la norme infinie). Si on a accès à une inégalité de Poincaré, alors l'énergie est exponentiellement décroissante (et donc $\|J_g\|_\infty$ aussi), ce qui assure également que $\|g\|_\infty$ reste bornée uniformément en temps. \square

Perspectives Ce travail est une première approche pour la compréhension du comportement en temps long du modèle inhomogène. L'objectif était d'obtenir des résultats de convergence vers l'équilibre pour un modèle d'alignement purement local. Lorsque J_f est remplacé par $K * J_f$ où K est un noyau d'observation (ce qui correspond à une limite de champ moyen pour le système de particules), on peut utiliser la régularité de K pour obtenir des estimations sur $K * J_f$, et ainsi obtenir directement l'existence globale de solutions (et alors également leur régularité instantanée en temps court, par les estimations d'hypoellipticité). On peut alors se demander ce qui se passe dans le cas intermédiaire, en fonction de la singularité de K . On peut comparer notre travail avec l'article [KS21], où l'alignement est également local (mais avec un autre mécanisme correspondant

3.3. Stabilité non-linéaire de l'équilibre isotrope jusqu'au seuil de transition de phase

à ceux étudiés dans les sections 7.1 et 8.1, sans terme de gradient en v). Si j'ai bien compris, leur analyse nécessite d'être suffisamment loin du seuil de transition et est traitée avec une norme H^2 en dimension $d = 2$. Dans notre cas, on aurait a priori besoin de $H^{3,1}$, avec trois dérivées en x et une seule en v , et on traite le cas de tous les équilibres uniformes jusqu'au seuil de transition. Plusieurs axes sont possibles pour améliorer les estimations que nous obtenons. On peut probablement obtenir une amélioration par régularisation comme on l'a fait pour le cas du théorème 3.4, dans des dimensions plus grandes que 1, en considérant des poids variables à partir seulement d'un certain degré (et en partant d'une solution plus régulière que $L^2 \cap L^\infty$). On a également cherché, sans succès pour l'instant, à inclure des effets de type lemmes de moyennes cinétiques (notre cadre de vitesses contraintes sur la sphère est parfaitement adapté pour cela) qui ont vraisemblablement des chances de donner de meilleures estimations pour J_f par exemple.

La question naturelle suivante est de comprendre ce qui se passe au voisinage de solutions de type von Mises. On a alors toujours le même problème de la non-unicité de l'équilibre. Lorsqu'on est sur le tore, il y a également des effets dûs à la géométrie (on n'a pas invariance par rotation par exemple). La présence de structures périodiques en temps long dans les simulations numériques (voir la figure 3.1, voir aussi [CGGR08, GM19]), pour des conditions initiales plus concentrées, ou une densité supérieure au seuil critique, est également une indication de la difficulté supplémentaire lorsqu'on cherche à étendre ce travail au voisinage de solutions de type von Mises. Des travaux en cours en collaboration avec Anton Arnold, Sara Merino-Aceituno, Christian Schmeiser et Raphaël Winter visent comprendre les mêmes phénomènes d'hypocoercivité pour l'équation d'alignement de type BGK, on s'intéresse en particulier à la bifurcation au voisinage du seuil critique.

Le modèle étudié dans ce chapitre, dans le cas de la dimension 2, est également lié au modèle de Kuramoto (la version homogène en espace est la même) pour lequel des approches de type amortissement Landau ont été récemment proposées [DFGV18]. Des discussions ont eu lieu avec Helge Dietert, Bastien Fernandez et David Gérard-Varet à ce sujet, et il est probable que ces approches pourraient être fructueuses dans ces modèles de particules autopropulsées. J'ai aussi commencé à travailler dans cette direction avec Daniel Han-Kwan et Ning Jiang pour le modèle d'alignement de type BGK avec normalisation.

En règle générale, les phénomènes en temps long dans une équation cinétique de ce type sont encore très mal compris, et en pratique on n'a pas encore un panorama de solutions numériques permettant au moins de distinguer les différents types de comportements en temps long que l'on peut espérer obtenir. Nous travaillons actuellement avec Émeric Bouin, Quentin Griette et Sébastien Motsch à obtenir des simulations numériques typiques, en particulier en dimension 1 d'espace sur \mathbb{R} (avec par exemple deux équilibres lorsque $x \rightarrow -\infty$ et $x \rightarrow +\infty$). La difficulté est que les comportements peuvent changer avec des petites modifications du modèle (comme on va le voir dans la section 5.1 pour l'hyperbolicité des modèles macroscopiques associés), et nous espérons pouvoir avoir un panorama des comportements différents pour une classe raisonnable de modèles (comme ceux présentés dans la section 1.1 pour différentes fonctions ν et σ). Deux cas qui ont l'air d'avoir un comportement assez stable sont les suivants :

- un équilibre uniforme (de masse $\rho_L < \rho_c$) en $x \rightarrow -\infty$, et de même lorsque $x \rightarrow +\infty$ (de masse $\rho_R < \rho_c$); on s'attend à ce que la solution converge vers un profil autosimilaire en échelle diffusive,
- un équilibre uniforme (de masse $\rho_L < \rho_c$) en $x \rightarrow -\infty$, et un équilibre de von Mises, dont la direction de concentration est dirigée vers les x positifs; dans ce cas on observe un profil asymptotique se propageant à vitesse fixe et laissant derrière lui une densité constante $\rho_B < \rho_c$, a priori pas reliée à ρ_c .

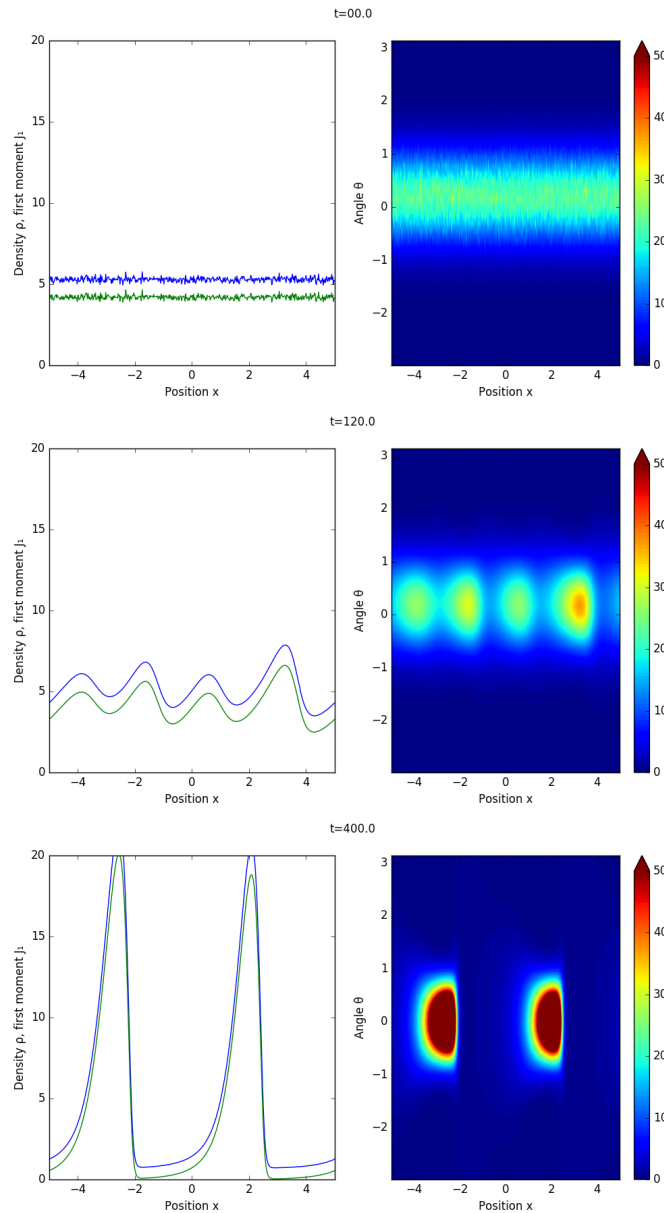


FIGURE 3.1 – Illustration d'un phénomène d'apparition de solutions périodiques. Le modèle présenté dans ce chapitre est simulé (par différences finies) pour une distribution initiale proche d'une distribution de von Mises (modérément concentrée, on a $\kappa = 3$ ici, autour d'un angle proche de 0) constante en espace, qui est un équilibre stable pour le modèle homogène en espace. On suppose ici que la solution ne dépend que d'une variable d'espace $x \in [-5, 5]$ avec conditions périodiques au bord. Après une première phase de régularisation en temps très court, on observe l'apparition d'instabilités qui prennent la forme de « bandes » concentrées se déplaçant sur une zone de densité inférieure à ρ_c (et pour laquelle la distribution est proche de l'uniforme). Les bandes finissent souvent par se regrouper en une seule. En bleu, on trace la densité ρ_f , en vert la première coordonnée de $J_f \in \mathbb{R}^2$. Le graphique de droite représente la densité en x, θ où $\theta \in [-\pi, \pi]$. Les bandes se propagent environ à vitesse 1, le deuxième graphique correspond donc à l'état après une douzaine de « traversées » du domaine, le troisième après une quarantaine.

Deuxième partie

Dérivation et étude de modèles
macroscopiques

Chapitre 4

Méthodes de moments pour la dérivation de modèles fluides avec contraintes géométriques

Contenu

4.1	Invariants collisionnels généralisés pour les modèles de type Vicsek	59
4.2	Modèles macroscopiques pour l'alignement de corps rigides . .	61
4.2.1	Le modèle SOHB et son interprétation via les quaternions	61
4.2.2	Dérivation à partir de BGK, et dimensions supérieures	63
4.3	Méthode de moments pour des modèles de cristaux liquides . .	67

4.1 Invariants collisionnels généralisés pour les modèles de type Vicsek

Commençons par présenter la méthode de moments via les invariants collisionnels généralisés dans le cadre de l'article [F8] (qui est très similaire à [F4] qui avait été fait dans le cadre de ma thèse). On considère l'équation de Vlasov–Fokker–Planck suivante :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nu(|J_f^K|) \nabla_v \cdot (\nabla_v(\Omega_f^K \cdot v) f) = \sigma(|J_f^K|) \Delta_v f,$$

modélisant l'alignement de particules autopropulsés en position $x \in \mathbb{R}^d$, avec vitesse $v \in \mathbb{S}$, s'alignant (avec une intensité $\nu(|J_f^K(t, x)|)$) sur l'orientation moyenne $\Omega_f^K(t, x) = \frac{J^K(t, x)}{|J^K(t, x)|}$ de leurs voisines et soumises à une diffusion en vitesse d'intensité $\sigma(|J_f^K(t, x)|)$. La fonction f représente la densité de particules en x, v au temps t , le « flux moyen » est donné par $J_f^K(t, x) = (K * J_f)(t, x)$ où $J_f(t, x) = \int_{\mathbb{S}} v f(t, x, v) dv$, et le « noyau d'observation » K est une fonction lisse, paire, positive, d'intégrale 1 (avec second moment fini) représentant la façon de pondérer les vitesses des particules voisines pour obtenir l'orientation moyenne en un point $x \in \mathbb{R}^d$. Lorsque l'on prend K constant (par exemple sur le tore), ou lorsque f ne dépend pas de x , on obtient le modèle étudié dans la section 1.1.

Après changement d'échelle $(t, x) \rightsquigarrow (\varepsilon t, \varepsilon x)$ on considère alors l'équation

$$\begin{aligned} \partial_t f^\varepsilon + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon &= \frac{1}{\varepsilon} (-\nu(|J_{f^\varepsilon}|) \nabla_v \cdot (\nabla_v (\Omega_{f^\varepsilon} \cdot v) f^\varepsilon) + \sigma(|J_{f^\varepsilon}|) \Delta_v f^\varepsilon) + O(\varepsilon) \\ &= \frac{\sigma(|J_{f^\varepsilon}|)}{\varepsilon} \nabla_v \cdot \left(M_{k(|J_{f^\varepsilon}|)\Omega_{f^\varepsilon}} \nabla_v \left(\frac{f}{M_{k(|J_{f^\varepsilon}|)\Omega_{f^\varepsilon}}} \right) \right) + O(\varepsilon), \end{aligned} \quad (4.1)$$

où $\Omega_{f^\varepsilon} = \frac{J_{f^\varepsilon}}{|J_{f^\varepsilon}|}$, $k(|J_{f^\varepsilon}|) = \frac{\nu(|J_{f^\varepsilon}|)}{\sigma(|J_{f^\varepsilon}|)}$, et le terme en $O(\varepsilon)$ provient du second moment de K (et du fait que son premier moment est nul) : à l'ordre principal, l'opérateur de collision est local en espace (c'est celui que l'on a étudié dans la section 1.1) et on connaît ses équilibres. Ce sont des fonctions de la forme $\rho M_{\kappa(\rho)\Omega}$, où $\kappa(\rho)$ est une solution de l'équation de compatibilité scalaire $j(\kappa) = \rho c(\kappa)$ présentée dans la section 1.1. On cherche donc, en supposant que la fonction f^ε converge vers une telle fonction $f^0 = \rho M_{\kappa(\rho)\Omega}$ avec ρ et Ω dépendant de t et x , à déterminer les équations d'évolution de ρ et Ω . On a un invariant collisionnel naturel (la conservation de la masse) qui donne l'évolution de ρ :

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho c(\kappa(\rho)) \Omega) = 0. \quad (4.2)$$

On n'a par contre pas d'autre invariant qui donnerait l'évolution de Ω . On procède alors similairement à l'article [DM08] dans lequel les invariants collisionnels généralisés (GCI) ont été introduits (ou plus précisément, comme dans [F2] où dans le cadre de ma thèse, j'avais adapté la méthode au cas de paramètres dépendant de ρ). On définit, pour $\kappa > 0$ et $\Omega \in \mathbb{S}$ (avec les notations de la section 1.1) l'opérateur linéaire $\mathcal{L}_{\kappa\Omega}$ par la formule

$$\mathcal{L}_{\kappa\Omega}(f) = -\nu(j(\kappa)) \nabla_v \cdot (f \nabla_v (\Omega \cdot v)) + \sigma(j(\kappa)) \Delta_v f = \sigma(j(\kappa)) \nabla_v \cdot \left(M_{\kappa\Omega} \nabla_v \left(\frac{f}{M_{\kappa\Omega}} \right) \right)$$

(qui correspond à l'opérateur de collision lorsque $\kappa = k(|J_f|)$ et $\Omega = \Omega_f$) et l'ensemble $\mathcal{C}_{\kappa\Omega}$ des GCI associés à κ et Ω :

$$\mathcal{C}_{\kappa\Omega} = \left\{ \psi \mid \int_{\mathbb{S}} \mathcal{L}_{\kappa\Omega}(f) \psi \, dv = 0, \forall f \text{ telle que } P_{\Omega^\perp} J_f = 0 \right\}. \quad (4.3)$$

Ainsi, si ψ est un GCI pour κ et Ω , alors pour toute fonction f telle que $k(|J_f|) = \kappa$ et $\Omega_f = \Omega$, l'intégrale de ψ contre l'opérateur de collision est nulle. On obtient que les GCI sont de la forme $C + h_\kappa(v \cdot \Omega) v \cdot A$ où h_κ est la solution d'une équation elliptique, et A est un vecteur arbitraire orthogonal à Ω (on obtient bien un espace de même dimension que le nombre de paramètres macroscopiques dont on recherche l'évolution). En écrivant $\psi_{\kappa\Omega}(v) = h_\kappa(v \cdot \Omega) P_{\Omega^\perp} v$, on obtient que l'intégrale de $\psi_{k(|J_{f^\varepsilon}|)\Omega_{f^\varepsilon}}$ contre l'opérateur de collision est nulle, ce qui donne

$$\int_{\mathbb{S}} (\partial_t f^\varepsilon + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon) \psi_{k(|J_{f^\varepsilon}|)\Omega_{f^\varepsilon}} \, dv = O(\varepsilon).$$

En supposant que $f^\varepsilon \rightarrow \rho M_{\kappa(\rho)\Omega}$, on obtient formellement à la limite l'équation d'évolution pour Ω , qui s'écrit

$$\rho (\partial_t \Omega + \tilde{c}(\Omega \cdot \nabla_x) \Omega) + \Theta P_{\Omega^\perp} \nabla_x \rho = 0, \quad (4.4)$$

où \tilde{c} et Θ sont des fonctions (définies à l'aide de la fonction h_κ) qui dépendent uniquement de $\kappa(\rho)$. Le modèle (4.2)-(4.4) est appelé modèle SOH (pour « Self-Organized Hydrodynamics ») et correspond au modèle dérivé initialement dans [DM08], avec des coefficients dépendants de ρ . Cette méthode fonctionne pour une branche d'équilibres pour lesquels $\kappa > 0$. Pour l'équilibre isotrope, il n'y a qu'un paramètre ρ , dont l'équation d'évolution à la limite est $\partial_t \rho = 0$. Pour avoir plus d'informations, on peut pousser le développement à l'ordre supérieur, et on obtient que la correction d'ordre ε est une diffusion (non-linéaire) de coefficient $\frac{\varepsilon \rho_c}{(d-1) d \sigma'(0) (\rho_c - \rho)}$ (qui n'est de signe positif qu'en dessous du seuil critique ρ_c).

4.2 Modèles macroscopiques pour l'alignement de corps rigides

4.2.1 Le modèle SOHB et son interprétation via les quaternions

Dans l'article [F9], en collaboration avec Pierre Degond et Sara Merino-Aceituno, nous introduisons un nouveau modèle d'alignement de corps rigides, avec pour but de pouvoir faire fonctionner la machinerie des GCI afin de dériver un modèle macroscopique. Un corps rigide autpropulsé est décrit par sa vitesse (unitaire) mais également par son orientation dans l'espace. On décrit donc un tel corps par une matrice de rotation $A \in SO(3)$ dont le premier vecteur $A\mathbf{e}_1$ est également sa vitesse. L'équation cinétique décrit l'évolution en temps d'une densité $f(t, x, A)$ où la position x est dans \mathbb{R}^3 et l'orientation A est une matrice de rotation $SO(3)$:

$$\partial_t f + A\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_x f + \nu \nabla_A \cdot (f \nabla_A (A \cdot \text{PD}(J_f^K))) = \sigma \Delta_A f,$$

où comme précédemment $J_f^K = K * J_f$ avec K un noyau d'observation et $J_f = \int_{SO(3)} A f dA$ le « flux local » des orientations. Comme dans [DM08], on normalise le terme d'alignement, au sens où chaque individu aligne son orientation avec une « orientation moyenne » qui est elle-même dans $SO(3)$ et non en sommant des forces d'alignement pour chacune des interactions binaires. C'est pour cela qu'on fait apparaître $\text{PD}(J_f^K)$, la décomposition polaire de J_f^K , qui est une matrice de rotation lorsque $\det(J_f^K) > 0$, qui maximise la quantité $J_f^K \cdot A$ (c'est en quelque sorte la matrice de rotation la plus « alignée » avec J_f^K). Le principal intérêt de cette normalisation (en dépit de sa singularité) est qu'elle supprime le phénomène de transition de phase, il n'y a qu'une famille d'équilibres de la forme $M_{\kappa\Lambda}$ avec $\Lambda \in SO(3)$ et $\kappa = \frac{\nu}{\sigma}$, (pas d'équation de compatibilité). Au moment de la rédaction de cet article, nous n'avions en effet aucune idée de la solution du calcul des équilibres décrit dans la section 1.2. Pour être complet, dans [F9] on permet à ν de dépendre de $A \cdot \text{PD}(J_f^K)$ (toujours dans l'esprit de [DM08]), ce qui permet d'avoir des forces d'alignement un peu plus génériques, mais complexifie légèrement les calculs. On présentera ici seulement les résultats dans le cas où ν est constant.

Comme dans la section précédente, on fait un changement d'échelle hydrodynamique et on étudie donc

$$\partial_t f^\varepsilon + A\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_x f^\varepsilon = \frac{\sigma}{\varepsilon} \nabla_A \cdot \left(M_{\kappa\Lambda_{f^\varepsilon}} \nabla_A \left(\frac{f^\varepsilon}{M_{\kappa\Lambda_{f^\varepsilon}}} \right) \right) + O(\varepsilon),$$

où $\Lambda_{f^\varepsilon} \in SO(3)$ est la décomposition polaire de J_{f^ε} (que l'on suppose de déterminant positif), qui joue le rôle du Ω_{f^ε} de la section précédente. Le fait qu'il n'y ait pas d'équation de compatibilité vient du fait que $\Lambda_{\rho M_{\kappa\Lambda_{f^\varepsilon}}} = \Lambda_{f^\varepsilon}$ dans tous les cas. On a même en fait $J_{M_{\kappa\Lambda}} = c_1(\kappa)\Lambda$ dès que $\Lambda \in SO(3)$ (où le coefficient c_1 est le même que dans la section 1.2). On procède donc comme précédemment, en supposant que $f^\varepsilon \rightarrow f^0 = \rho M_{\kappa\Lambda}$ avec $\rho(t, x) \geq 0$ et $\Lambda(t, x) \in SO(3)$ des quantités macroscopiques dont on veut connaître l'évolution. On définit alors, pour $\Lambda \in SO(3)$ l'opérateur \mathcal{L}_Λ par la formule

$$\mathcal{L}_\Lambda(f) = \sigma \nabla_A \cdot \left(M_{\kappa\Lambda} \nabla_A \left(\frac{f}{M_{\kappa\Lambda}} \right) \right),$$

(de sorte que l'opérateur de collision appliqué à f^ε correspond à \mathcal{L}_Λ lorsque $\Lambda_{f^\varepsilon} = \Lambda$) et l'ensemble \mathcal{C}_Λ des GCI associés à Λ :

$$\mathcal{C}_\Lambda = \left\{ \psi \mid \int_{SO(3)} \mathcal{L}_\Lambda(f) \psi dA = 0, \forall f \text{ telle que } P_{T_\Lambda} J_f = 0 \right\}, \quad (4.5)$$

où P_{T_Λ} est la projection orthogonale (dans l'ensemble des matrices 3×3) sur l'espace tangent de $SO(3)$ en Λ . De nouveau, si ψ est un GCI pour Λ , alors pour toute fonction f telle que $\Lambda_f = \Lambda$, l'intégrale de ψ contre l'opérateur de collision est nulle.

On obtient alors que les GCI sont de la forme $C + h_\kappa(\Lambda \cdot A)(\Lambda P) \cdot A$ où P est une matrice antisymétrique arbitraire et h_κ est encore une fois une solution d'une équation elliptique. On a donc un espace d'invariants de dimension $1 + 3$, ce qui correspond au nombre de paramètres macroscopiques ($SO(3)$ est de dimension 3) dont on veut connaître l'équation d'évolution. On applique donc la même méthode en écrivant que pour tout P antisymétrique

$$\int_{SO(3)} (\partial_t f^\varepsilon + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon) h_\kappa(\Lambda_{f^\varepsilon} \cdot A)(\Lambda_{f^\varepsilon} P) \cdot AdA = O(\varepsilon),$$

puis en passant à la limite en supposant que $f^\varepsilon \rightarrow \rho M_{\kappa\Lambda}$. Après quelques calculs assez techniques (en utilisant la formule de la mesure de Haar sur $SO(3)$ provenant de la décomposition axe-angle), on obtient l'équation d'évolution de Λ .

Pour obtenir la forme du modèle tel qu'énoncé dans [F9], on a besoin de quelques notations. Pour un vecteur $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$, on note $[\mathbf{u}]_\times$ la matrice antisymétrique correspondant au produit vectoriel avec \mathbf{u} : pour $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$, $[\mathbf{u}]_\times = \mathbf{u} \times \mathbf{v}$. Le produit scalaire que l'on a choisi sur les matrices (avec coefficient $\frac{1}{2}$, comme dans la section 1.2) a ceci de pratique que $[\mathbf{u}]_\times \cdot [\mathbf{v}]_\times = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$. Pour une fonction $\Lambda \in C^1(\mathbb{R}^3, SO(3))$, il existe une (unique) matrice $\mathcal{D}_x(\Lambda)$ telle que pour tout vecteur $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$, on ait

$$(\mathbf{w} \cdot \nabla_x) \Lambda = [\mathcal{D}_x(\Lambda) \mathbf{w}]_\times \Lambda.$$

On définit alors les opérateurs différentiels $\delta_x(\Lambda) = \text{Tr}(\mathcal{D}_x(\Lambda))$ (lié à une sorte de divergence) et $\mathbf{r}_x(\Lambda) = \mathcal{D}_x(\Lambda) - \mathcal{D}_x(\Lambda)^\top$ (une sorte de rotationnel).

Théorème 4.1. *Si $f^\varepsilon \rightarrow \rho M_{\kappa\Lambda}$ lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, avec Λ et ρ suffisamment régulières (et une convergence suffisamment forte), alors elles satisfont le système suivant d'équations aux dérivées partielles d'ordre un (appelé SOHB, pour « Self-Organized Hydrodynamics of Body attitude ») :*

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (c_1 \rho \Lambda \mathbf{e}_1) = 0, \quad (4.6)$$

$$\rho \left(\partial_t \Lambda + c_2 ((\Lambda \mathbf{e}_1) \cdot \nabla_x) \Lambda \right) + [(\Lambda \mathbf{e}_1) \times (c_3 \nabla_x \rho + c_4 \rho \mathbf{r}_x(\Lambda)) + c_4 \rho \delta_x(\Lambda) \Lambda \mathbf{e}_1]_\times \Lambda = 0, \quad (4.7)$$

où c_1 est donnée dans la section 1.2, et les coefficients c_2, c_3, c_4 s'écrivent au moyen d'expressions similaires, faisant intervenir la fonction h_κ .

On peut exprimer l'évolution de Λ sous une forme différente :

Proposition 4.1. *En écrivant $\Omega = \Lambda \mathbf{e}_1$, $\mathbf{u} = \Lambda \mathbf{e}_2$, $\mathbf{v} = \Lambda \mathbf{e}_3$, on a*

$$\delta_x(\Lambda) = [(\Omega \cdot \nabla_x) \mathbf{u}] \cdot \mathbf{v} + [(\mathbf{u} \cdot \nabla_x) \mathbf{v}] \cdot \Omega + [(\mathbf{v} \cdot \nabla_x) \Omega] \cdot \mathbf{u}, \quad (4.8)$$

$$\mathbf{r}_x(\Lambda) = (\nabla_x \cdot \Omega) \Omega + (\nabla_x \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + (\nabla_x \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v}. \quad (4.9)$$

Par conséquent, on obtient les équations d'évolution suivantes pour Ω , \mathbf{u} , et \mathbf{v} , correspondant à l'équation d'évolution de Λ donnée en (4.7) :

$$\rho D_t \Omega + P_{\Omega^\perp} \left(c_3 \nabla_x \rho + c_4 \rho ((\nabla_x \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + (\nabla_x \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v}) \right) = 0,$$

$$\rho D_t \mathbf{u} - (c_3 \mathbf{u} \cdot \nabla_x \rho + c_4 \rho \nabla_x \cdot \mathbf{u}) \Omega + c_4 \rho \delta_x(\Omega, \mathbf{u}, \mathbf{v}) \mathbf{v} = 0,$$

$$\rho D_t \mathbf{v} - (c_3 \mathbf{v} \cdot \nabla_x \rho + c_4 \rho \nabla_x \cdot \mathbf{v}) \Omega - c_4 \rho \delta_x(\Omega, \mathbf{u}, \mathbf{v}) \mathbf{u} = 0,$$

ou $D_t := \partial_t + c_2(\Omega \cdot \nabla_x)$, et $\delta_x(\Omega, \mathbf{u}, \mathbf{v})$ est l'expression $\delta_x(\Lambda)$ donnée par (4.8).

4.2. Modèles macroscopiques pour l'alignement de corps rigides

Ces expressions permettent d'interpréter les différents mécanismes du modèle macroscopique et le comparer par exemple au modèle SOH. On remarque (et c'est attendu) que ces équations préservent le fait que $\Lambda \in SO(3)$.

Le terme correspondant au coefficient c_3 donne l'influence du gradient de pression $\nabla_x \rho$ sur l'orientation Λ . Il a l'effet de la faire tourner autour du vecteur dirigé par $(\Lambda \mathbf{e}_1) \times \nabla_x \rho$ à une vitesse angulaire $\frac{c_3}{\rho} \|(\Lambda \mathbf{e}_1) \times \nabla_x \rho\|$, de sorte à aligner Ω (la direction du mouvement) avec $-\nabla_x \rho$. L'influence de ce gradient de pression sur \mathbf{u} et \mathbf{v} est aussi une rotation, simplement de manière à garder le repère $(\Omega, \mathbf{u}, \mathbf{v})$ orthonormal.

De même, le terme correspondant au coefficient c_4 dans l'équation de Ω a pour effet de relaxer la direction du mouvement Ω vers le vecteur $-\mathbf{r}_x(\Lambda)$ (on a $c_4 > 0$). Sans ce terme, on obtiendrait un découplage de Ω et \mathbf{u}, \mathbf{v} , et le modèle correspondrait alors au modèle SOH dérivé dans la précédente section (à coefficients constants).

Enfin les derniers termes dans les équations sur \mathbf{u} et \mathbf{v} ont pour effet de les faire tourner autour du flot donné par D_t à une vitesse angulaire $c_4 \delta_x(\Lambda)$.

Dans l'article [F10], en collaboration avec Pierre Degond, Sara Merino-Aceituno et Ariane Trescases, la motivation initiale était la perspective future de simulations numériques de ce type de modèles. Nous voulions obtenir un modèle similaire en utilisant les quaternions unitaires pour représenter les rotations plutôt que des matrices (pour des raisons de simplicité d'implémentation). Comme nous voulions aligner des quaternions sans tenir compte de leur direction, nous avons élaboré un modèle d'alignement nématique similaire aux modèles de suspensions de polymères. Et encore une fois, pour éviter les phénomènes de transition de phase, l'idée était de normaliser le Q -tenseur moyen pour obtenir un Q -tenseur uniaxial (correspondant donc à une unique matrice de rotation).

Nous avons pu mettre en œuvre la même méthode, et ainsi obtenir un modèle hydrodynamique similaire, qui faisait également intervenir des coefficients c_1, c_2, c_3 et c_4 . Nous avons alors compris que les modèles étaient en fait équivalents, et on peut en fait remonter l'équivalence jusqu'au système de particules associés. Finalement, le fait de ne pas avoir réussi à créer de nouveau modèle a été le point de départ de la compréhension du lien fin entre modèles de polymères de dimension 4 et modèles d'alignement sur $SO(3)$, ouvrant la voie à la résolution de l'équation de compatibilité présentée dans la section 1.2.

4.2.2 Dérivation à partir de BGK, et dimensions supérieures

Dans les notes de cours [F11], rédigées en collaboration avec Pierre Degond, Sara Merino-Aceituno et Ariane Trescases à l'occasion du programme thématique *Stochastic Dynamics Out of Equilibrium* (IHP, 2017), nous avons voulu présenter la méthode, ainsi que le lien entre rotations et quaternions unitaires, en incluant un cadre plus simple pour les calculs : le cas où l'opérateur de collision est de type BGK. Il avait déjà été noté [DM16] que ce cadre simplifiait grandement les calculs pour le modèle de type Vicsek : en effet les invariants collisionnels généralisés sont alors de la forme $A \cdot v$ avec $A \perp \Omega$, il n'y a plus de fonction h_κ . On obtient presque un invariant collisionnel : on multiplie l'équation par v et on intègre, on n'obtient pas 0, mais quelque chose de proportionnel à Ω , et comme on n'est intéressé que par la dynamique tangentielle puisque Ω est contraint sur la sphère, on a bien l'évolution voulue. D'autre part, les modèles de type BGK correspondent dans une certaine manière à une version plus proche du modèle de Vicsek original [VCBJ⁺95] dans lequel les sauts en vitesse synchrones à intervalle de temps Δt fixé²⁵ sont remplacés par des sauts asynchrones à taux constant ν .

25. et n'ayant rien à voir avec une discrétisation en temps, on a plutôt $\Delta t = 1$ que $\Delta t \rightarrow 0$.

Dans [F11], on présente la dérivation du modèle de BGK à partir d'un système de N particules sous forme de Processus de Markov Déterministe Par-morceaux (PDMP) : chaque particule, de position X_k est liée à une horloge Poissonnienne, et entre deux sonneries, la particule suit une ligne droite à vitesse constante, donnée par $A_k \mathbf{e}_1$ (resp. $q_k \mathbf{e}_1 q_k^*$) où $A_k \in SO(3)$ est l'orientation (resp. q_k le quaternion unitaire) associée à la particule. Lors d'un saut, la nouvelle orientation (resp. quaternion unitaire) de la particule est tirée selon une distribution de von Mises $M_{\kappa \bar{A}_k}$ (avec $\kappa > 0$ fixé) autour de l'orientation moyenne $\bar{A}_k = PD(J_k^K)$: la décomposition polaire de la moyenne $J_k^K = \frac{1}{N} \sum_i K(X_i - X_k) A_i$ (cela correspond à l'expression $J_{\mu^N}^K(X_k)$ de la sous-section précédente où μ^N est la distribution empirique des particules, on a une formule similaire dans le cas des quaternions). Le modèle cinétique associé est le suivant

$$\partial_t f + A \mathbf{e}_1 \cdot \nabla_x f = \rho_f M_{\kappa \Lambda_f^K} - f,$$

où Λ_f^K est la décomposition polaire $PD(J_f^K)$ du « flux d'orientations » (ou plus précisément le maximiseur de $A \cdot J_f^K$, unique et correspondant à la décomposition polaire dès que $\det(J_f^K) > 0$). On a le même genre d'équation pour les quaternions, où ici le Q -tenseur uniaxial jouant le rôle de Λ_f^K est celui qui maximise $(q \otimes q - \frac{1}{4} \mathbf{I}_4) \cdot J_f^K$ où cette fois-ci J_f^K est la moyenne pondérée des Q -tenseurs des particules voisines (une matrice symétrique de trace nulle, le quaternion q maximisant ce produit scalaire est alors un vecteur propre relié à la plus grande valeur propre de cette matrice). Et on montre que ces modèles sont équivalents, essentiellement par la proposition 1.2 que l'on a déjà rencontrée dans la section 1.2. Lorsqu'on fait le changement d'échelle hydrodynamique, on obtient le même modèle localisé :

$$\partial_t f^\varepsilon + A \mathbf{e}_1 \cdot \nabla_x f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} (\rho_{f^\varepsilon} M_{\kappa \Lambda_{f^\varepsilon}} - f^\varepsilon) + O(\varepsilon). \quad (4.10)$$

On définit alors les GCI comme en (4.5), avec cette fois-ci $\mathcal{L}_\Lambda(f) = \rho_f M_\Lambda - f$. La détermination en est grandement simplifiée : un GCI est simplement une fonction de la forme $C + \Lambda P \cdot A$, où P est une matrice antisymétrique. On obtient alors les mêmes modèles macroscopiques que ceux dérivés dans [F9, F10], à définition des constantes c_2 , c_3 et c_4 près (il suffit de remplacer h_κ par 1 dans les formules).

Dans le cadre du doctorat d'Antoine Diez, coencadré avec Pierre Degond et Sara Merino-Aceituno, nous l'avons fait travailler sur la dérivation rigoureuse du modèle de BGK à partir du système de PDMP. Je lui ai en particulier proposé d'adapter les résultats de type « interaction modérée » [Oel85, JM98] dans ce cadre. On a besoin, pour pouvoir passer à la limite, d'enlever la singularité induite par la décomposition polaire. On considère alors plutôt le modèle avec transition de phase, où les orientations sont distribuées à chaque saut comme $M_{J_f^K}$ (avec éventuellement K dépendant de N pour traiter le cas de l'interaction modérée). Les résultats d'Antoine font l'objet de l'article [Die20] dans lequel il montre qu'on peut à la limite obtenir directement l'équation localisée en espace :

$$\partial_t f + A \mathbf{e}_1 \cdot \nabla_x f = \rho_f M_{J_f^K} - f.$$

Dans l'article [F13], toujours dans le cadre de sa thèse, en plus de déterminer les solutions de l'équation de compatibilité présentées dans la section 1.2, nous appliquons également la méthode de moments pour dériver un modèle SOHB au voisinage de la variété d'équilibres de von Mises stables. Il y a peu de différences avec la version présentée dans cette sous-section, si ce n'est que l'on doit prendre en compte, comme dans la section 4.1, le fait que le coefficient κ de concentration dépend de la densité ρ . On obtient la même expression pour les coefficients c_2 et c_4 (qui dépendent

4.2. Modèles macroscopiques pour l'alignement de corps rigides

de κ , donc de ρ). Pour l'expression de c_3 , un nouveau terme apparaît, faisant apparaître la dérivée de κ par rapport à ρ . C'est à travers ce terme que l'on voit l'influence du phénomène de transition de phase. Au voisinage de la distribution uniforme, comme dans la section 4.1, il n'y a qu'un paramètre macroscopique ρ , et à l'ordre principal on obtient $\partial_t \rho = 0$. On peut donc également regarder l'ordre supérieur et obtenir que formellement l'équation d'évolution de ρ est une diffusion (non-linéaire) de coefficient $\frac{\varepsilon \rho_c}{3(\rho_c - \rho)}$.

Enfin, la considération de l'équation de BGK dans les notes [F11] avait également pour but caché de pouvoir dériver un modèle de type SOHB en dimension supérieure à 3 (en particulier pour comprendre quels termes sont spécifiques à la dimension 3, avec le produit vectoriel et la formule de Rodrigues de représentation des rotations qui n'est plus généralisable en dimension supérieure, et parce que parfois le cadre de la dimension supérieure permet d'apporter un éclairage sur la structure géométrique du modèle). C'est ce que nous avons récemment fait dans [F17], en collaboration avec Pierre Degond et Antoine Diez. Le modèle cinétique peut être défini exactement de la même manière (dans le cas du modèle sans transition de phase, avec normalisation par la décomposition polaire), par contre si on regarde l'expression du modèle macroscopique, l'expression $\mathbf{r}_x(\Lambda)$ donnée en (4.9) semble se généraliser immédiatement en dimension supérieure, alors que celle pour $\delta_x(\Lambda)$ donnée en (4.8) a l'air spécifique de la dimension 3. De même, l'expression (4.7) ne semble pas se généraliser simplement à première vue.

La formule essentielle que l'on utilise est la formule d'intégration de Weyl²⁶ : pour $p \geq 0$, on définit u_{2p} and u_{2p+1} , de \mathbb{R}^p dans \mathbb{R} par

$$u_{2p}(\theta_1, \dots, \theta_p) = \frac{2^{(p-1)^2}}{p!} \prod_{1 \leq j < k \leq p} (\cos \theta_j - \cos \theta_k)^2, \quad (4.11)$$

$$u_{2p+1}(\theta_1, \dots, \theta_p) = \frac{2^{p(p-1)}}{p!} \prod_{1 \leq j < k \leq p} (\cos \theta_j - \cos \theta_k)^2 \prod_{j=1}^p (1 - \cos \theta_j), \quad (4.12)$$

et on a alors la proposition qui suit (sans rentrer dans les détails de ce qu'est une « fonction de classe », mais essentiellement c'est une fonction qui ne dépend que de la classe de conjugaison, comme par exemple la trace).

Proposition 4.2 (Formule d'intégration de Weyl [Sim96], Théorèmes IX.9.4 & IX.9.5, une fois la typo corrigée dans le cas $n = 2p + 1$). *Soit $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 3$. Soit $p \in \mathbb{N}$ tel que $n = 2p$ ou $n = 2p + 1$. Pour toute « fonction de classe » f , intégrable sur $SO(n)$, on a*

$$\int_{SO(n)} f(A) \, dA = \frac{1}{(2\pi)^p} \int_{[0, 2\pi]^p} f(R_{\theta_1 \dots \theta_p}) u_n(\theta_1, \dots, \theta_p) \, d\theta_1 \dots d\theta_p,$$

où $u_n: \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ est définie par (4.11) (dans le cas $n = 2p$) ou (4.12) (si $n = 2p + 1$), et $R_{\theta_1 \dots \theta_p}$ représente la matrice diagonale par blocs représentant des rotations d'angle $\theta_1, \dots, \theta_p$ dans \mathbb{R}^2 (avec un dernier coefficient diagonal 1 si n est impair).

On utilise l'identification du produit extérieur $X \wedge Y$ avec la matrice $(X_i Y_j - Y_j X_i)$. On note ainsi $\nabla_x \wedge X = (\partial_{x_i} X_j - \partial_{x_j} X_i)_{1 \leq i, j \leq n}$ (correspondant à la dérivée extérieure de X , vue comme une 1-forme). On dérive alors le modèle suivant :

Théorème 4.2. *Si la solution de (4.10) vérifie $f^\varepsilon \rightarrow \rho M_{\kappa \Lambda}$ lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, où $\rho = \rho(x, t)$ et $\Lambda = \Lambda(x, t)$ sont des fonctions suffisamment régulières de $\mathbb{R}^n \times (0, \infty)$ vers $(0, \infty)$ et $SO(n)$*

²⁶. Il y a même un peu de théorie des représentations dans l'article, comme quoi on trouve de tout dans les maths « appliquées » !

respectivement (avec une convergence suffisamment forte), alors elles sont solutions du système suivant, où on a noté $\Omega_k = \Lambda \mathbf{e}_k$:

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (c_1 \rho \Omega_1) = 0, \quad (4.13)$$

$$\rho(\partial_t + c_2 \Omega_1 \cdot \nabla_x) \Lambda = \mathbb{W} \Lambda, \quad (4.14)$$

où

$$\mathbb{W} = F \wedge \Omega_1 - c_4 \rho \nabla_x \wedge \Omega_1, \quad (4.15)$$

$$F = -c_3 \nabla_x \rho - c_4 \rho \mathbf{r}, \quad (4.16)$$

$$\mathbf{r} = \sum_{k=1}^n (\nabla_x \cdot \Omega_k) \Omega_k, \quad (4.17)$$

On a $c_3 = \frac{1}{2\kappa}$, et les constantes c_1 , c_2 et c_4 sont exprimées (comme fonctions de κ) via des moyennes de fonctions sur $[0, 2\pi]^p$ (des polynômes en $(\cos \theta_i)_{1 \leq i \leq p}$) pour $n = 2p$ ou $n = 2p + 1$, pondérées par $\exp(\kappa \sum_p \cos \theta_p) u_n(\theta_1, \dots, \theta_p)$, où u_n est donné par (4.11) ou (4.12).

De plus, la fonction c_1 est croissante de \mathbb{R}_+ dans $[0, 1[$, avec $c_1(0) = 0$ et $\lim_{\kappa \rightarrow \infty} c_1(\kappa) = 1$.

On ne voit plus directement dans ce modèle un terme correspondant à $\delta_x(\Lambda)$. On peut le faire réapparaître en transformant l'expression du modèle : si on note Δ_{ijk} la formule (4.8) où on a remplacé Ω , \mathbf{u} , \mathbf{v} par $\Omega_i, \Omega_j, \Omega_k$, on peut définir la matrice antisymétrique \mathbb{A} par

$$\mathbb{A} = \sum_{k, \ell=1}^n \Delta_{1k\ell} \Omega_k \otimes \Omega_\ell,$$

et enfin la modification $\widetilde{\mathbb{W}}$ de la matrice \mathbb{W} comme suit :

$$\widetilde{\mathbb{W}} = F \wedge \Omega_1 + c_4 \rho \mathbb{A}.$$

On a alors la proposition suivante :

Proposition 4.3. *L'équation d'évolution (4.14) est équivalente à*

$$\rho(\partial_t + (c_2 - c_4) \Omega_1 \cdot \nabla_x) \Lambda = \widetilde{\mathbb{W}} \Lambda. \quad (4.18)$$

On peut donc retrouver une expression similaire à la sous-section précédente, en réexprimant (4.18) comme des équations pour $\Omega_1, \dots, \Omega_n$:

$$\begin{aligned} \rho(\partial_t + (c_2 - c_4) \Omega_1 \cdot \nabla_x) \Omega_1 &= -c_3 P_{\Omega_1^\perp} \nabla_x \rho - c_4 \rho \sum_{k \neq 1} (\nabla_x \cdot \Omega_k) \Omega_k, \\ \rho(\partial_t + (c_2 - c_4) \Omega_1 \cdot \nabla_x) \Omega_j &= (c_3 (\Omega_j \cdot \nabla_x) \rho + c_4 \rho (\nabla_x \cdot \Omega_j)) \Omega_1 \\ &\quad - c_4 \rho \sum_{k \notin \{1, j\}} \delta(\Omega_1, \Omega_j, \Omega_k) \Omega_k, \quad j = 2, \dots, n. \end{aligned}$$

On obtient donc pour $n = 3$ la même équation que dans [F9], où le coefficient d'advection c_2 correspond à $c_2 - c_4$ dans [F17]. La formulation en toute dimension a donc donné une autre formulation, qui donne un éclairage différent sur la structure de l'équation. On étudiera ce modèle dans cette nouvelle formulation dans la section 5.2.

4.3 Méthode de moments pour des modèles de cristaux liquides

Dans cette section, on présente l'article [F15] dans lequel on dérive le modèle de cristaux liquides nématiques d'Ericksen–Leslie à partir du modèle de Doi–Navier–Stokes. Le modèle de Doi, dans un régime semi-dilué [Doi81, KD83, EZ06, WZZ15] décrit l'évolution de molécules de polymères en forme de sphéroïdes allongées, sous la forme d'une densité $f(t, x, \omega)$ de particules de position $x \in \mathbb{R}^d$, et d'orientation $\omega \in \mathbb{S}/\{\pm 1\}$ — ou, de façon équivalente, en prenant $\omega \in \mathbb{S}$ et en imposant $f(t, x, \omega) = f(t, x, -\omega)$. Ces particules sont diluées dans un solvant fluide (modélisé par les équations de Navier–Stokes) qui les transporte et exerce sur elles des forces de rotation (dues aux gradients du fluide). En retour, les molécules en suspension ont une influence sur le fluide à travers des termes additionnels dans le tenseur des contraintes, dont l'expression dépend de la densité f . En passant rapidement sur la modélisation, lorsqu'on adimensionne le modèle, on obtient :

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (uf) + \nabla_\omega \cdot (f(\Lambda P_{\omega^\perp} E - W)\omega) = \frac{1}{\text{De}} \nabla_\omega \cdot (\nabla_\omega f + f \nabla_\omega U_f^K), \quad (4.19)$$

avec $U_f^K = K * U_f$, où K est un noyau de pondération (positif, de masse 1) décrivant l'influence des molécules voisines (suivant [EZ06, WELZ02]), lié au potentiel de Maier–Saupe

$$U_f = \alpha \rho_f \left[-(\omega \cdot Q_f \omega) + \frac{d-1}{d} \right],$$

où on a noté

$$\rho_f = \int_{\mathbb{S}} f(t, x, \omega) d\omega \quad \rho_f Q_f = \int_{\mathbb{S}} (\omega \otimes \omega - \frac{1}{d} \text{Id}) d\omega.$$

La matrice symétrique Q_f , de trace nulle, est appelée Q -tenseur, et a ses valeurs propres λ dans $[\frac{-1}{d}, \frac{d-1}{d}]$, on a ainsi $U_f \in [0, \rho_f]$. Le vecteur $u(t, x) \in \mathbb{R}^d$ est la vitesse locale du fluide, les tenseurs E et W sont les parties symétriques et antisymétriques du gradient de vitesse:

$$E = \frac{1}{2}(\nabla_x u + \nabla_x u^\top), \quad W = \frac{1}{2}(\nabla_x u - \nabla_x u^\top).$$

Les trois quantités sans dimension dans (4.19) sont donc $\alpha > 0$ (le coefficient d'alignement relativement à la diffusion angulaire), $\Lambda \in [-1, 1]$ (un paramètre dépendant de la forme des particules, valant -1 pour des disques, 0 pour des sphères, et 1 pour des bâtonnets), et De , le nombre de Deborah.

Le fluide u est alors décrit par les équations de Navier–Stokes

$$\begin{cases} \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x p = \frac{1}{\text{Re}} \nabla_x \cdot (\tau_u + \frac{1}{\text{Er}} \mathcal{T}_{f,u}) + \frac{1}{\text{Re Er De}} (\nabla_x \cdot \sigma_f^K + F_f^K), \\ \nabla_x \cdot u = 0, \\ \tau_u = 2E, \quad \mathcal{T}_{f,u} = \zeta \int_{\mathbb{S}} \omega^{\otimes 4} f d\omega : E, \end{cases}$$

où « : » désigne la contraction des tenseurs par rapport à deux indices (peu importe quels indices au vu de la symétrie, $\mathcal{T}_{f,u}$ est donc une matrice symétrique). Pour une matrice S (un tenseur $d \times d$), on note $\nabla_x \cdot S$ le vecteur $(\sum_i \partial_{x_i} S_{i,j})_{1 \leq j \leq d}$.

Le tenseur des contraintes additionnel σ_f^K est donné par

$$\begin{aligned} \sigma_f^K &= d\Lambda \rho_f Q_f + \int_{\mathbb{S}} \left[\frac{\Lambda+1}{2} \omega \otimes \nabla_\omega U_f^K + \frac{\Lambda-1}{2} \nabla_\omega U_f^K \otimes \omega \right] f d\omega. \\ &= \text{De} \frac{\Lambda}{2} \rho_f \left[\Lambda(EQ_f + Q_f E) + Q_f W - WQ_f + \frac{2\Lambda}{d} E - 2\Lambda \mathbb{T}_f : E - D_t Q_f \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{S}} (\omega \otimes \nabla_\omega U_f^K - \nabla_\omega U_f^K \otimes \omega) f d\omega, \end{aligned}$$

la deuxième équation provenant de l'équation de Doi (4.19) intégrée contre $\omega \otimes \omega - \frac{1}{d}\mathbb{I}_d$, où on a noté $D_t = \partial_t + u \cdot \nabla_x$ la dérivée matérielle.

Le terme de force F_f^K est donné, en notant $\mu_f^K = \ln f + U_f^K$ (appelé potentiel chimique), par

$$F_f^K = - \int_{\mathbb{S}} \nabla_x \mu_f^K d\omega.$$

Les trois paramètres supplémentaires sans dimension²⁷ apportés par l'équation de Navier–Stokes sont donc les coefficients ζ , Re et Er , ces deux derniers étant les nombres de Reynolds et d'Ericksen.

L'introduction des termes σ_f^K et F_f^K dans le couplage entre les équations de Navier–Stokes et l'équation de Doi suit en fait un raisonnement de consistance thermodynamique. En effet, on a une identité de dissipation d'énergie libre totale $\frac{d}{dt}\mathcal{E}^K + \mathcal{D}^K = 0$, où l'énergie libre totale (celle du fluide et celle des polymères) est

$$\mathcal{E}^K = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} |u|^2 dx + \frac{1}{\text{Re Er De}} \mathcal{A}^K,$$

avec l'énergie libre des polymères donnée par

$$\mathcal{A}^K = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} (f \log f - f + \frac{1}{2} U_f^K f) dx d\omega.$$

La dissipation est alors donnée par

$$\mathcal{D}^K = \frac{1}{\text{Re}} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_x u|^2 dx + \frac{1}{\text{Re Er}} \zeta \int_{\mathbb{R}^d} \rho_f \mathbb{T}_f : (E \otimes E) dx + \frac{1}{\text{Re Er De}^2} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}} f |\nabla_\omega \mu_f^K|^2 dx d\omega,$$

où la contraction « : » est faite ici sur les 4 indices, et avec la norme de Frobenius pour les tenseurs $d \times d$: $|S|^2 = \text{Tr}(S^\top S)$.

L'objectif est donc d'obtenir la limite de ce modèle lorsque le nombre de Deborah, que l'on notera désormais ε , est petit (les autres paramètres restant fixes). Un dernier paramètre caché est l'échelle spatiale du noyau de moyennisation K . On choisit de prendre ce noyau dépendant de ε , en posant $K^\varepsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}^d} K(\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}})$ pour un noyau K donné (suivant [EZ06, WZZ15], ce qui correspond au changement d'échelle faiblement non-local du modèle de Vicsek proposé dans [DLMP13] que l'on rencontrera également dans le chapitre 5). Si l'on note $\beta = \frac{1}{2d} \int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 K(x) dx$ (et qu'on suppose K radial), après développement en ε , on cherche donc à étudier la limite du système suivant lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$T_{u^\varepsilon}(f^\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} C(f^\varepsilon), \quad (4.20)$$

$$\partial_t u^\varepsilon + u^\varepsilon \cdot \nabla_x u^\varepsilon + \nabla p^\varepsilon = \frac{1}{\text{Re}} \left\{ \Delta_x u^\varepsilon + \frac{1}{\text{Er}} \left[\zeta \nabla_x \cdot (\rho_{f^\varepsilon} \mathbb{T}_{f^\varepsilon} : E^\varepsilon) + \nabla_x \cdot \sigma_{f^\varepsilon}^1 + F_{f^\varepsilon}^1 \right] \right\}, \quad (4.21)$$

$$\nabla_x \cdot u^\varepsilon = 0, \quad (4.22)$$

où on a défini l'opérateur de transport $T_u(f)$ (pour un champ de vecteurs dépendant du temps u donné) et l'opérateur de collision $C(f)$ par

$$T_u(f) = \partial_t f + \nabla_x \cdot (u f) + \nabla_\omega \cdot (f (\Lambda P_{\omega^\perp} E - W)\omega) + 2\alpha \beta \nabla_\omega \cdot (f P_{\omega^\perp} \Delta_x (\rho_f Q_f) \omega), \quad (4.23)$$

$$C(f) = \nabla_\omega \cdot (\nabla_\omega f + f \nabla_\omega U_f) = \nabla_\omega \cdot \left(e^{\alpha \omega \cdot (\rho_f Q_f) \omega} \nabla_\omega (f e^{-\alpha \omega \cdot (\rho_f Q_f) \omega}) \right), \quad (4.24)$$

27. dans le régime dilué en dimension $d = 3$, le coefficient ζ vaut $\frac{1}{2}$ [DE99], mais dans le régime semi-dilué que l'on considère ici, sa valeur peut être différente de $\frac{1}{2}$, d'autre part la dérivation nécessite d'utiliser le tenseur d'Oseen qui a une dépendance en la dimension, on considère donc ici ζ comme un paramètre libre sans dimension.

4.3. Méthode de moments pour des modèles de cristaux liquides

et les termes supplémentaires $\sigma_{f^\varepsilon}^1$ et $F_{f^\varepsilon}^1$, dont on ne détaillera pas l'expression, sont d'ordre 0 en ε . Lorsque l'on suppose que la densité f^ε converge vers un équilibre local, le calcul de la limite formelle $\varepsilon \rightarrow 0$ dans (4.21)-(4.22) ne pose donc pas de problème, et on a simplement besoin de comprendre le modèle macroscopique correspondant à l'équation cinétique (4.20).

On reconnaît dans l'opérateur de collision (4.24) le modèle décrit dans l'introduction du chapitre 1 correspondant aux polymères avec potentiel de Maier–Saupe. On connaît la forme des équilibres locaux, de la forme ρM_Y où Y est une matrice symétrique de trace nulle, avec

$$M_Y(\omega) = \frac{\exp(\omega \cdot Y \omega)}{\mathcal{Z}(Y)} \quad \mathcal{Z}(Y) = \int_{\mathbb{S}} \exp(\omega \cdot Y \omega) d\omega.$$

Il est conjecturé (et vrai en dimension 2, 3, 4) que les seuls équilibres (non-isotropes) stables pour le modèle homogène en espace sont de la forme ρM_Y , pour $\rho > \rho_*$ et $Y = \eta A_\Omega$ un tenseur uniaxial ($A_\Omega = (\Omega \otimes \Omega - \frac{1}{d} I_d)$ pour $\Omega \in \mathbb{S}$), où η est la plus grande solution positive d'une équation de compatibilité scalaire de la forme $\eta = \alpha \rho S_2(\eta)$ (on a $Q_{M_{\eta A_\Omega}} = S_2(\eta) A_\Omega$).

On suppose donc que f^ε converge vers $f^0 = \rho M_{\eta(\rho) A_\Omega}$ où $\rho > \rho_*$ et $\Omega \in \mathbb{S}$ (en fait on peut penser $\Omega \in \mathbb{S}/\{\pm 1\}$ puisque $A_{-\Omega} = A_\Omega$), et on veut définir un bon espace de GCI (dépendants d'un paramètre S), à l'aide d'un opérateur \mathcal{L}_S et de contraintes linéaires sur les moments de f , comme précédemment dans (4.3) ou (4.5) :

$$\mathcal{C}_S = \left\{ \psi \text{ (paire)} \mid \int_{\mathbb{S}} \mathcal{L}_S(f) \psi d\omega = 0, \forall f \text{ satisfaisant les contraintes} \right\},$$

de telle sorte qu'on ait les propriétés suivantes (qui sont satisfaites et utiles pour appliquer la méthode des GCI dans les cas considérés précédemment) :

- l'opérateur $\mathcal{L}_{S_f}(f)$ doit correspondre à $C(f)$ pour un paramètre S_f défini à partir de f , qui satisfait alors les contraintes pour ce paramètre,
- l'espace des GCI associés au paramètre S est de dimension $1 + (d - 1)$ (et bien défini dans un voisinage de $S_{\rho M_{\eta(\rho) A_\Omega}}$),
- lorsque $f^\varepsilon \rightarrow \rho M_{\eta(\rho) A_\Omega}$ alors les GCI associés au paramètre S_{f^ε} défini à partir de f^ε convergent vers des fonctions « faciles à caractériser ».

Le dernier point (qui correspond à dire que l'on connaît bien la forme des GCI pour $S_{\rho M_{\eta A_\Omega}}$) est celui qui permet d'obtenir des expressions tractables pour la limite.

Il n'y a pas, à notre connaissance, de méthode systématique (même si on s'en approche) pour savoir comment choisir le bon paramètre S , le bon opérateur \mathcal{L}_S et les bonnes contraintes de sorte à avoir ces bonnes propriétés. Dans l'article [F15], on montre qu'on peut prendre, pour S une matrice symétrique de trace nulle, l'opérateur donné par $\mathcal{L}_S(f) = \nabla_\omega \cdot \left(M_S \nabla_\omega \left(\frac{f}{M_S} \right) \right)$, et comme contrainte sur f le fait que, en notant Ω_S le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de S (en supposant qu'elle soit simple), on ait $P_{\Omega_S^\perp} Q_f \Omega_S = 0$. Si on prend alors $S_f = \alpha \rho_f Q_f$, on obtient bien les propriétés demandées.

On montre que les GCI pour les équilibres (lorsque $S = \alpha \rho S_2(\eta(\rho)) A_\Omega = \eta A_\Omega$) sont de la forme $C + h_\eta(\omega \cdot \Omega) V \cdot \Omega$ pour $V \perp \Omega$, avec de nouveau une fonction h_η solution d'une équation elliptique. On peut alors appliquer la méthode et obtenir l'équation limite pour l'évolution de Ω (ainsi que l'équation de conservation de masse, qui est elle associée à l'invariant collisionnel constant):

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho u) &= 0, \\ \partial_t \Omega + u \cdot \nabla_x \Omega + W \Omega - c P_{\Omega^\perp} \left(E \Omega + \frac{2\beta}{\Lambda} \Delta_x (\eta \Omega) \right) &= 0, \end{aligned}$$

où le coefficient c est défini (dépendant de $\eta(\rho)$) comme une moyenne faisant intervenir la fonction h_η . La limite de l'équation de Navier–Stokes (pour laquelle on n'a pas besoin des GCI) prend la forme suivante

$$\begin{cases} \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla p = \frac{1}{\text{Re}}(\Delta_x u + \frac{1}{\text{Er}} \nabla_x \cdot \sigma), \\ \nabla_x \cdot u = 0, \end{cases}$$

où le tenseur des contraintes supplémentaires $\sigma = \sigma_L + \sigma_E$ dépend des paramètres macroscopiques ρ et Ω (via seulement la dérivée matérielle de Ω pour le tenseur de Leslie σ_L , avec des coefficients dépendant de η , et via les gradients propres en espace de Ω et ρ pour le tenseur d'Ericksen σ_E). Le système obtenu est appelé modèle d'Ericksen–Leslie.

On établit également dans [F15] un lien entre les GCI et le noyau de l'adjoint du linéarisé de l'opérateur de collision, mais seulement sur la variété des équilibres, et qu'en général ce n'est pas le cas en dehors de cette variété.

Perspectives La dérivation de modèles macroscopiques permet d'obtenir un éclairage intéressant sur les modèles microscopiques sous-jacents. Dans le cas du modèle SOHB, dans un travail récent [DDN22] les auteurs montrent que des solutions particulières du modèle SOHB avec conditions périodiques sont spécifiques de ce modèle d'orientation de corps rigides : on ne pourrait pas les obtenir avec le modèle simple d'alignement de Vicsek. Et à partir de ce modèle macroscopique, les simulations numériques du modèle de particules mettent en évidence des phénomènes de stabilité / métastabilité de structures correspondant aux solutions particulières du modèle SOHB.

Dans le cadre des modèles avec transition de phase, on a également obtenu formellement au voisinage de l'état isotrope (sous le seuil de la transition de phase) des équations de diffusion (non-linéaires). Avec les résultats d'hypocoercivité décrits dans le chapitre 3, on peut s'attendre à dériver plus rigoureusement ces limites de diffusion, dans un changement d'échelle approprié.

Quelques travaux (voir par exemple [JXZ16]) se sont attaqués à la dérivation rigoureuse des modèles de type SOH. Le genre de résultats obtenus est le suivant : on montre l'existence d'une famille particulière de solutions de l'équation cinétique pour f^ε qui convergent vers f^0 , en partant d'une solution régulière de l'équation macroscopique (il faut donc pour cela bien comprendre l'équation macroscopique, et c'est l'objet du chapitre suivant). Ces méthodes sont souvent faites à partir de développements de Hilbert. Il serait intéressant de voir à quel point on peut obtenir des résultats similaires par méthodes de moments.

Une question qui se pose également est la dérivation du modèle SOHB avec transition de phase (pour Fokker–Planck, en dimension $d \geq 3$ et pour BGK en dimension $d \geq 4$). Pour les modèles de type BGK, la combinaison de [F17] et [F13] devrait pouvoir se faire sans problème. Pour le modèle de Fokker–Planck, c'est en fait beaucoup plus compliqué (excepté en dimension 3 où on peut espérer adapter les résultats de [F9]): la détermination des GCI est bien plus subtile. Nous avons commencé à y réfléchir avec Pierre Degond et Antoine Diez, mais pour l'instant nous n'avons pas réussi à obtenir des expressions tractables.

Chapitre 5

Hyperbolicité des systèmes de type SOH

Contenu

5.1	Lien entre hyperbolicité et paramètres de la transition de phase	71
5.2	Hyperbolicité du modèle SOHB	73

Les modèles macroscopiques de type SOH (« Self-Organized Hydrodynamics ») que l'on a obtenus au chapitre précédent prennent la forme de systèmes d'équations aux dérivées partielles (non-linéaires) d'ordre un, et la première question que l'on se pose pour obtenir leur caractère bien posé est celle de leur hyperbolicité. Il a par exemple été montré, pour le modèle SOH original, que lorsque le modèle est hyperbolique, le système d'EDP est localement bien posé en dimension 2 et 3 sous certaines conditions [DLMP13]. Dans ce chapitre, on étudie l'hyperbolicité des modèles dérivés dans les sections 4.1 et 4.2.

5.1 Lien entre hyperbolicité et paramètres de la transition de phase

Dans cette section, on présente une partie de l'article [F8], en collaboration avec Pierre Degond et Jian-Guo Liu, dans lequel nous décrivons des liens forts entre hyperbolicité du modèle SOH et paramètres de la transition de phase (ordre de transition, exposant critique dans le cas d'une transition de phase continue). J'avais déjà obtenu dans le cadre de ma thèse [F2] que le modèle SOH à coefficients variables $c(\rho)$, $\tilde{c}(\rho)$, $\Theta(\rho)$ suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho c \Omega) = 0 \\ \rho (\partial_t \Omega + \tilde{c} (\Omega \cdot \nabla_x) \Omega) + \Theta P_{\Omega^\perp} \nabla_x \rho = 0, \end{cases}$$

est hyperbolique si et seulement si le coefficient Θ (correspondant à une sorte de dérivée de pression par rapport à ρ) est strictement positif. Le modèle générique de type Vicsek avec transition de phase (4.2)-(4.4) dérivé dans la section 4.1 a exactement cette forme. La dépendance des coefficients c et \tilde{c} est alors due au fait que ces coefficients sont définis en fonction du paramètre de concentration κ , qui lui-même dépend de ρ via l'équation de compatibilité $j(\kappa) = \rho c(\kappa)$.

Pour le coefficient Θ , dont une expression est donnée par

$$\Theta(\rho) = \frac{1}{\kappa} + (\tilde{c} - c) \frac{\rho}{\kappa} \frac{d\kappa}{d\rho},$$

on observe que ce n'est donc plus seulement le paramètre de concentration κ qui entre en jeu, mais bien la forme globale du diagramme de phase (via la dérivée de la fonction $\kappa(\rho)$). On a la conjecture suivante (numériquement claire dans tous les cas testés, en particulier en dimensions 2 et 3, ainsi que théoriquement en toute dimension lorsque $\kappa \rightarrow 0$ et $\kappa \rightarrow \infty$) :

Conjecture 5.1. *Pour tout $\kappa > 0$, on a $0 < \tilde{c}(\kappa) < c(\kappa)$.*

On voit donc que le signe de Θ n'est a priori pas connu. Dans [F8], nous étudions le comportement de Θ dans les deux cas typiques : transition de phase continue (où $\frac{\dot{}}{c}$ est une bijection croissante de $[0, \kappa_{\max}[$ dans $[\rho_c, +\infty[$, avec κ_{\max} pouvant valoir $+\infty$) et transition de phase discontinue (la fonction étant régulière, décroissante sur $[0, \kappa_*]$ et croissante sur $[\kappa_*, \kappa_{\max}[$). Lorsque la transition est discontinue, avec $\kappa_* = \kappa(\rho_*)$ la dérivée de κ au voisinage de ρ_* tend vers l'infini, et la conjecture nous donne donc que le modèle n'est pas hyperbolique.

Pour la transition de phase continue, on peut développer les coefficients lorsque $\kappa \rightarrow 0$, ce qui correspond au voisinage du seuil critique ρ_c , et on obtient un lien entre l'exposant critique et l'hyperbolicité du modèle.

Proposition 5.1. *On suppose que la transition de phase est continue au voisinage du seuil critique ρ_c , et qu'on a $c(\kappa(\rho)) \sim \alpha(\rho - \rho_c)^\beta$ lorsque $\rho \xrightarrow{\geq} \rho_c$ (et qu'on a également l'estimation correspondante pour la dérivée). Alors*

- (i) *Si $\beta < \frac{1}{2}$, alors $\Theta(\rho) < 0$ pour ρ proche de ρ_c . Le modèle SOH n'est pas hyperbolique.*
- (ii) *Si $\beta > \frac{1}{2}$, alors $\Theta(\rho) > 0$ pour ρ proche de ρ_c . Le modèle SOH est hyperbolique.*
- (iii) *Si $\beta = \frac{1}{2}$ et $\alpha \neq \sqrt{\frac{4(d+2)}{5d\rho_c}}$, alors $\Theta(\rho)$ est du signe de $\sqrt{\frac{4(d+2)}{5d\rho_c}} - \alpha$, au voisinage de ρ_c .*

On caractérise également l'hyperbolicité lorsque $\rho \rightarrow +\infty$ (les équilibres stables sont alors proches de masses de Dirac). Il y a une coquille dans [F8, Proposition 5.6] (inversion de b et $\frac{1}{b}$), on donne la version corrigée ici :

Proposition 5.2. *On suppose $k(|J|) \sim a|J|^b$ lorsque $|J| \rightarrow \infty$ (avec $a, b > 0$, ainsi que l'estimation correspondante au niveau de la dérivée). On considère le modèle SOH associé à une branche d'équilibres stables.*

- (i) *Si $0 < b < 1$, alors pour ρ suffisamment grand, $\Theta(\rho) > 0$ et le modèle SOH est hyperbolique.*
- (ii) *Si $b > 1$, alors pour ρ suffisamment grand, $\Theta(\rho) < 0$ et le modèle SOH n'est pas hyperbolique.*
- (iii) *Si $b = 1$, si on suppose que $k(|J|) = a|J| + r + o(1)$ et $k'(|J|) = a + o(|J|^{-1})$ lorsque $|J| \rightarrow \infty$, avec $r \neq \frac{d+1}{6}$, alors pour ρ grand, $\Theta(\rho)$ est du signe de $r - \frac{d+1}{6}$.*

On peut déjà avec ces propositions avoir une idée des plages de densité ρ pour lesquelles le modèle est ou n'est pas hyperbolique. Par exemple le modèle le plus simple avec transition de phase où $\nu(|J|) = |J|$ et $\sigma = 1$ étudié dans [F4], dont la version localisée en espace est celle que nous avons traitée dans le chapitre 3 (pour l'hypocoercivité au voisinage des équilibres isotropes), se trouve à chaque fois dans les cas limite (iii) des deux propositions précédente (et n'est pas hyperbolique). Une très légère modification du modèle peut donc conduire à un modèle hyperbolique. Et pour le modèle avec bruit extrinsèque $\sigma = \frac{1}{1+|J|}$ dont on sait qu'il n'est pas hyperbolique au voisinage de la discontinuité en ρ_* , on obtient aussi qu'il n'est pas hyperbolique pour $\rho \rightarrow +\infty$. Dans [F8], on donne des exemples où on peut quand même obtenir des modèles intéressants avec transition de phase, qui soient hyperboliques pour toutes les plages de densité ρ .

On y présente également un changement d'échelle approprié (dans l'esprit de [DLMP13]) pour le noyau d'observation permettant d'obtenir des termes diffusifs dans le modèle macroscopique, et ainsi pouvoir espérer contourner le problème de perte d'hyperbolicité : l'idée est de considérer, comme dans la section 4.3, que le noyau d'observation est radial avec une échelle spatiale d'ordre $\sqrt{\varepsilon}$ (au lieu de ε dans le changement d'échelle hyperbolique classique), et alors le terme en $O(\varepsilon)$ dans (4.1) devient un terme d'ordre 0 faisant apparaître un Laplacien en x . On obtient alors un terme supplémentaire de la forme $P_{\Omega^\perp} \Delta_x (\rho c \Omega)$ dans l'équation d'évolution de Ω .

5.2 Hyperbolicité du modèle SOHB

Dans cette section, on présente l'article récent [F16], en collaboration avec Pierre Degond, Sara Merino-Aceituno et Ariane Trescases. Nous y démontrons l'hyperbolicité du modèle SOHB en toute dimension, dont on rappelle l'expression (4.13)-(4.17) ici :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla_x \cdot (c_1 \rho \Omega_1) = 0, \\ \rho (\partial_t + c_2 \Omega_1 \cdot \nabla_x) \Lambda = \mathbb{W} \Lambda, \\ \mathbb{W} = F \wedge \Omega_1 - c_4 \rho \nabla_x \wedge \Omega_1, \\ F = -c_3 \nabla_x \rho - c_4 \rho \mathbf{r}, \\ \mathbf{r} = \sum_{k=1}^n (\nabla_x \cdot \Omega_k) \Omega_k. \end{cases}$$

Encore une fois, l'utilisation d'une dimension quelconque a permis de dégager la structure propre au modèle et de comprendre comment montrer l'hyperbolicité, ce que nous n'arrivions pas à faire simplement en dimension 3 (en utilisant par exemple la décomposition axe-angle d'une rotation quelconque, les calculs prennent vite de la place). La clé est d'observer les invariances suivantes (on renvoie à [F16] pour la signification précise de ces invariances) :

Proposition 5.3. *Le modèle SOHB est invariant par changement orthonormal de repères, à la fois pour le repère définissant la rotation Λ , que l'on notera $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$, et pour celui définissant les coordonnées spatiales, noté $(\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_n)$.*

On linéarise alors le système SOHB au voisinage d'un état ρ_0, Λ_0 , constant en espace. En changeant de repère, on se ramène donc au cas $\Lambda_0 = \mathbf{I}_n$. En écrivant $\rho = \rho_0 + \delta\sigma$ et $\Lambda = \exp(\delta A)$ avec une matrice A antisymétrique (pour δ petit), on obtient, en écrivant $\omega_k = A \mathbf{e}_k$, le système SOHB linéarisé suivant

$$\begin{cases} \partial_t \sigma + c_1 (\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_x) \sigma + c_1 \rho_0 (\nabla_x \cdot \omega_1) = 0, \\ \rho_0 (\partial_t A + c_2 (\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_x) A) = -c_3 \nabla_x \sigma \wedge \mathbf{e}_1 - c_4 \rho_0 \sum_{k=2}^n (\nabla_x \cdot \omega_k) \mathbf{e}_k \wedge \mathbf{e}_1 - c_4 \rho_0 \nabla_x \wedge \omega_1. \end{cases}$$

Ce système linéarisé présente en fait moins d'invariances que le système non-linéaire, mais il reste quand même invariant par changement de repère, de $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$ vers $(\mathbf{e}'_1, \dots, \mathbf{e}'_n)$ dès lors que $\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}'_1$.

Lorsqu'on écrit ce système linéarisé en variable ξ de Fourier, en notant $\nu = \frac{\xi}{|\xi|}$, on obtient un système de la forme

$$\frac{1}{i|\xi|} \partial_t U + \mathbb{M} U = 0,$$

où $U = (\hat{\sigma}, (\hat{A}_{ij})_{1 \leq i < j \leq n})^\top$ est le vecteur des inconnues et la matrice \mathbb{M} dépend de ν (et des différents paramètres ρ_0 et c_1 à c_4). On rappelle que le système SOHB est hyperbolique si et seulement si \mathbb{M} est diagonalisable dans \mathbb{R} pour tout $\nu \in \mathbb{S}$ et tout $\rho_0 \geq 0$ (et tout Λ_0 , mais

le changement de repère a fait qu'on a seulement besoin de le montrer pour $\Lambda_0 = \mathbf{I}_n$). On dit également qu'il est strictement hyperbolique si toutes les valeurs propres sont simples.

En utilisant l'invariance, on peut faire tourner le repère $(\mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n)$ de façon à ce que \mathbf{e}_2 soit dans le plan engendré par \mathbf{e}_1 et ν . On écrit alors $\nu = \cos \theta \mathbf{e}_1 + \sin \theta \mathbf{e}_2$ et la matrice \mathbb{M} du système linéarisé devient diagonale par blocs de taille au plus 2, le système se découple. On obtient les systèmes suivants :

- un système²⁸ pour la paire $(\hat{\sigma}, \hat{A}_{12})$, dont les valeurs propres correspondantes pour \mathbb{M} sont données par

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ (c_1 + c_2 - 2c_4) \cos \theta \pm \left((c_1 - (c_2 - 2c_4))^2 \cos^2 \theta + 4c_1 c_3 \sin^2 \theta \right)^{1/2} \right\},$$

- des systèmes pour les paires $(\hat{A}_{1k}, \hat{A}_{2k})$ où $3 \leq k \leq n$, avec valeurs propres

$$\mu_{\pm} = (c_2 - c_4) \cos \theta \pm c_4,$$

- des équations scalaires pour $\hat{A}_{k\ell}$ lorsque $3 \leq k < \ell < n$, avec valeur propre $\beta = c_2 \cos \theta$.

On a en fait c_1 et c_3 strictement positifs (dans la dérivation de la section 4.2, version normalisée en prenant la décomposition polaire). Et donc les valeurs propres λ_{\pm} sont réelles, et distinctes (à moins que $c_1 = c_2 - 2c_4$ et $\theta = 0$, dans ce cas le système concerné est diagonal). Les valeurs propres μ_{\pm} sont également distinctes (à moins que $c_4 = 0$, pour lequel le système concerné est aussi diagonal). Ces deux valeurs propres sont alors de multiplicité $n - 2$. Enfin la valeur propre β est de multiplicité $\frac{1}{2}(n - 2)(n - 3)$.

On obtient donc le théorème suivant :

Théorème 5.1. *Le système SOHB (4.13)-(4.17) est hyperbolique. En dimension $n \geq 4$ il n'est pas strictement hyperbolique.*

Dans le cas $n = 3$ les valeurs propres λ_{\pm} , μ_{\pm} sont distinctes deux à deux sauf pour des combinaisons spéciales des coefficients, et pour un ensemble discret d'angles θ .

Dans [F16], nous discutons également du fait que le modèle SOHB, tout comme le modèle SOH, est par essence non-conservatif. En particulier, d'éventuelles ondes de choc ne sont pas définies de manière unique (il manque donc des informations provenant du modèle cinétique, qui ont été perdues au passage à la limite), et nous proposons deux pistes pour traiter ce problème. À la manière du cas de SOH, nous montrons que l'on peut écrire le modèle SOHB comme limite de relaxation d'un modèle conservatif, dont les inconnues sont dans un espace plus grand (l'ensemble des matrices plutôt qu'uniquement les matrices de rotation, le terme de relaxation étant de la forme $-\frac{\rho}{\alpha}(MM^{\top} - \mathbf{I}_n)M$, qui relaxe la matrice M vers sa décomposition polaire). En effet, il a été observé dans le cadre du modèle SOH [MN11] qu'une telle approximation peut donner des résultats numériquement assez proches de ceux donnés par le modèle de particules initial. Avec des arguments de réduction de dimension, nous montrons que le modèle de relaxation obtenu peut être utilisé pour obtenir plusieurs telles approximations pour le modèle SOHB en dimension 2 (qui correspond à un modèle SOH). La deuxième piste que nous proposons est la même que dans la section précédente : on fait un changement d'échelle différent pour le noyau d'observation lors de la dérivation du modèle macroscopique, ce qui fait apparaître un terme de diffusion dans l'équation, de la forme $\alpha P_{T\Lambda} \Delta_x(\rho\Lambda)$ (où $P_{T\Lambda}$ est la projection sur l'espace tangent de $SO(n)$ au point Λ).

28. ce système est le seul qui fait intervenir ρ_0 , mais les valeurs propres correspondantes n'en dépendent pas.

Perspectives Le phénomène de perte d’hyperbolicité dans le modèle SOH à coefficients variables ouvre de nombreuses questions ouvertes, qui à ma connaissance n’ont pas encore été étudiées. La première chose à faire serait un panorama des comportements des modèles de particules (ou cinétiques) pour ces modèles à coefficients variables, pour comprendre si le fait que le modèle correspondant au niveau macroscopique est hyperbolique ou non a de l’influence sur ces comportements. Je suspecte que c’est en effet le cas, et des simulations numériques de l’équation cinétique sont en cours avec Émeric Bouin, Quentin Griette et Sébastien Motsch (suite à leur étude [GM19]) pour obtenir une vue d’ensemble des comportements typiques. On n’a également pas fait les calculs déterminant le caractère hyperbolique dans le cadre du modèle BGK plutôt que Fokker–Planck. Il se trouve que dans le cas simple où l’opérateur est $\rho M_{J_f} - f$, le calcul donne que le terme de pression vaut exactement zéro. C’est probablement une simple coïncidence, mais les implications de l’absence de ce terme de pression n’ont pas été étudiées à ma connaissance.

Dans le cadre du modèle SOHB, on a vu que l’hyperbolicité dépend du signe du coefficient c_3 , qui est variable dans le cas du modèle avec transition de phase dérivé dans [F13], et on s’attend probablement, comme dans le cas du modèle avec transition du premier ordre, que le modèle ne soit pas hyperbolique au voisinage du seuil critique. Je ne sais pas s’il l’est lorsque $\rho \rightarrow +\infty$, c’est encore à explorer.

Enfin, comme on l’a vu, on peut obtenir un modèle avec diffusion sur l’équation d’évolution de l’orientation. Est-ce que ce terme pourrait compenser la perte d’hyperbolicité dans le cadre de l’étude du problème de Cauchy associé? À ma connaissance, il n’y a pas de résultat connu dans cette direction.

Troisième partie

Modèles d'alignement sans bruit avec contraintes géométriques

Chapitre 6

Agrégation simple sur la sphère

Contenu

6.1	Un modèle cinétique d'alignement sur la sphère	80
6.2	Le système de particules associé	82

On s'intéresse au modèle d'alignement de vitesses sur la sphère \mathbb{S} de \mathbb{R}^d , sans bruit angulaire. Pour le système de particules, il s'agit donc de N équations différentielles couplées pour les vitesses $(v_i)_{1 \leq i \leq N}$:

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \nabla_v (v \cdot v_j)|_{v=v_i} = P_{v_i^\perp} J, \quad \text{avec } J = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N v_j. \quad (6.1)$$

Comme décrit dans les chapitres précédents, ces équations expriment le fait que chaque particule v_i tend à s'aligner avec la direction de leur vitesse moyenne J . Au niveau cinétique, on étudie l'équation d'agrégation correspondante, décrivant l'évolution d'une mesure de probabilité $f(t, \cdot)$:

$$\partial_t f + \nabla_v \cdot (P_{v^\perp} J_f f) = 0, \quad \text{avec } J_f = \int_{\mathbb{S}} v f dv. \quad (6.2)$$

Ces deux équations sont liées dans le sens où si $\mu^N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{v_i(t)}$ est une mesure empirique de particules, alors μ^N est une solution faible de (6.2) si et seulement si (v_i) est une solution du système (6.1). Le modèle dans le cas $d = 2$ correspond au modèle de Kuramoto avec phases identiques, et une partie des résultats que l'on présente a été indépendamment décrite dans [BCM15] dans ce cadre²⁹. De tels genres de modèles ont été proposés comme modèles de formation d'opinion [AMPD17, CLP15, MTG18]. On peut également noter les travaux sur la généralisation des oscillateurs de Kuramoto en dimension supérieure (les oscillateurs de Löhe) pour lesquels des résultats similaires peuvent être obtenus [HKR18].

Dans ce chapitre, basé sur l'article [F12] en collaboration avec Jian-Guo Liu, on décrit le comportement en temps long des modèles (6.2) et (6.1).

29. Pour être précis, leur résultat a été publié avant le nôtre, même si notre travail avait été fait durant mon postdoctorat en 2012, et présenté à diverses reprises. Ma légendaire efficacité de finalisation de rédaction nous a fait perdre la primeur du résultat pour le cas $d = 2$, mais le reste de nos estimations constituait bien de nouveaux résultats.

6.1 Un modèle cinétique d'alignement sur la sphère

On commence par observer que le modèle (6.2) est bien posé dans l'espace des mesures de probabilité.

Proposition 6.1. *Pour $T > 0$ et $f_0 \in \mathcal{P}(\mathbb{S})$, il existe une unique $f \in C([0, T], \mathcal{P}(\mathbb{S}))$ qui soit solution faible de l'équation (6.2) avec condition initiale f_0 .*

Démonstration. Cela se fait par exemple en se donnant une fonction $\mathcal{J} \in C([0, T], \mathbb{R}^d)$ et en résolvant l'équation linéaire $\partial_t f + \nabla_v(P_{v^\perp} \mathcal{J} f) = 0$, dont la solution est donnée par $\Phi_t^{\mathcal{J}} \# f_0$, où $\Phi^{\mathcal{J}}$ est le flot associé à l'équation différentielle $\frac{d}{dt} v = P_{v^\perp} \mathcal{J}(t)$. Si on note $\Psi(\mathcal{J}) = J_{\Phi_t^{\mathcal{J}} \# f_0}$, rechercher une solution de (6.2) revient à trouver un point fixe de Ψ . Pour une distance appropriée on obtient que Ψ est contractante sur $C([0, T], \mathbb{R}^d)$. \square

On peut également montrer que l'équation est bien posée dans n'importe quel espace de Sobolev par des méthodes standard de Galerkin, en utilisant la décomposition en harmoniques sphériques, c'est ce que nous avons fait avec Jian-Guo Liu pendant ma thèse [F3].

Remarquons que si $J_{f_0} = 0$, alors f_0 est une solution stationnaire de (6.2), donc on supposera désormais $J_{f_0} \neq 0$. Lorsqu'on calcule la dérivée en temps de $J_f(t)$, en écrivant $M_f = \int_{\mathbb{S}} P_{v^\perp} f dv$, qui est une matrice symétriques dont les valeurs propres sont dans $[0, 1]$, on obtient

$$\frac{1}{2} \frac{d|J_f|^2}{dt} = J_f \cdot M_f J_f \geq 0,$$

ce qui montre que $|J_f|$ est croissante au cours du temps, et que donc on peut définir l'orientation moyenne $\Omega(t) = \frac{J_f}{|J_f|}$ pour tout temps. Comme $|J_f|^2$ est bornée, et que sa dérivée seconde est également bornée, on obtient que sa dérivée tend vers 0, c'est à dire $|J_f| \Omega \cdot M_f \Omega \rightarrow 0$. On obtient alors

$$\dot{\Omega} = P_{\Omega^\perp}(M_f \Omega) \rightarrow 0.$$

Cependant, ceci ne dit pas que l'orientation moyenne converge vers une valeur fixe (on a seulement que $\dot{\Omega} \in L^2(\mathbb{R}_+)$, on aimerait avoir $L^1(\mathbb{R}_+)$). C'est l'objet du théorème suivant, qui caractérise également la convergence de f en temps long.

Théorème 6.1. *Soit f_0 une mesure de probabilité sur \mathbb{S} , et $f \in C(\mathbb{R}_+, \mathcal{P}(\mathbb{S}))$ la solution de (6.2) avec condition initiale f_0 telle que $J_{f_0} \neq 0$. Alors il existe $\Omega_\infty \in \mathbb{S}$ tel que $\Omega(t) = \frac{J_f(t, \cdot)}{|J_f(t, \cdot)|}$ converge vers Ω_∞ lorsque $t \rightarrow +\infty$.*

Enfin, il existe alors une unique vitesse $v_{\text{back}} \in \mathbb{S}$ telle que la solution de l'équation différentielle $\frac{dv}{dt} = P_{v^\perp} J_f(t)$ avec condition initiale $v(0) = v_{\text{back}}$ vérifie que $v(t) \rightarrow -\Omega_\infty$ lorsque t tend vers $+\infty$. Alors, si on note m la masse du singleton $\{v_{\text{back}}\}$ pour la mesure f_0 , on a $m < \frac{1}{2}$ (on ne peut pas avoir trop de masse à « l'arrière ») et $f(t, \cdot)$ converge faiblement vers la mesure $f_\infty = (1 - m)\delta_{\Omega_\infty} + m\delta_{-\Omega_\infty}$ lorsque $t \rightarrow \infty$.

Stratégie de la démonstration. On calcule en fait la dérivée seconde de Ω en temps. Et en posant $y = |\dot{\Omega}|$, on arrive à montrer que $y' = y + g$ où $g \in L^1(\mathbb{R}_+)$ et où y est bornée. Ceci donne alors grâce à la formule de Duhamel qu'il n'existe qu'une condition initiale y_0 telle que y soit bornée et dans ce cas on obtient alors $y \in L^1(\mathbb{R}_+)$ (en fait comme $y \geq 0$, on peut également le montrer directement, mais la version avec la formule de Duhamel permet de l'obtenir même si $y = O(e^{(1-\varepsilon)t})$, pas seulement pour y bornée, et on utilisera ce genre d'argument par la suite).

Pour la deuxième partie, on étudie le flot Φ de l'équation différentielle $\frac{d}{dt} v = P_{v^\perp} J_f(t, \cdot)$, sachant que $J_f(t, \cdot)$ converge vers $\lambda \Omega_\infty$. On montre que toute solution $v(t)$ converge soit vers $-\Omega_\infty$

6.1. Un modèle cinétique d'alignement sur la sphère

soit vers Ω_∞ et que dans ce cas la convergence est uniforme en temps dans un petit voisinage de v_0 . En définissant v_{back}^n comme la condition initiale telle que la solution vaut $-\Omega_\infty$ au temps t_n (on renverse le temps dans l'équation différentielle), on montre que v_{back}^n a une sous-suite convergente, et dont la limite v_{back} est telle que la solution de l'équation différentielle avec condition initiale v_{back} converge vers $-\Omega_\infty$. Pour montrer qu'un tel v_{back} est unique, on utilise un phénomène de répulsion entre deux solutions v et \tilde{v} qui convergeraient vers $-\Omega_\infty$:

$$\frac{d}{dt} \|v - \tilde{v}\|^2 = \gamma(t) \|v - \tilde{v}\|^2,$$

avec $\gamma(t) \rightarrow 2\lambda > 0$ lorsque $t \rightarrow \infty$. Comme $\|v - \tilde{v}\|$ est bornée, la seule solution est $\|v - \tilde{v}\| = 0$. Pour le comportement de f en temps long, on utilise la formulation $f = \Phi_t \# f_0$, et on obtient en fait

$$W_1(f(t, \cdot), f_\infty) \leq m |\Phi_t(v_{\text{back}}) + \Omega_\infty| + \int_{\mathbb{S}} \mathbf{1}_{v \neq v_{\text{back}}} |\Phi_t(v) - \Omega_\infty| f_0(v) dv.$$

et comme on connaît le comportement du flot Φ , cela se traduit directement sur $W_1(f(t, \cdot), f_\infty)$ par convergence dominée. On obtient également que $J_f \rightarrow (1 - 2m)\Omega_\infty = \lambda\Omega_\infty$ avec $\lambda > 0$, ce qui montre que $m < \frac{1}{2}$. \square

Le théorème 6.1 ne dit rien du taux de convergence. En fait on peut montrer qu'il n'y a pas d'espoir d'obtenir un taux de convergence en distance W_1 sans supposer une certaine régularité de la condition initiale, en s'appuyant sur des calculs dans le cas où on a une certaine symétrie faisant que $\Omega(t)$ reste constant au cours du temps :

Proposition 6.2. *Étant donnée une fonction continue et décroissante $t \mapsto g(t)$ convergeant vers 0 (lentement) lorsque $t \mapsto +\infty$, et telle que $g(0) < \frac{1}{2}$, il existe une densité de probabilité f_0 (donc sans atome) telle que la solution $f(t, \cdot)$ associée converge faiblement vers δ_{Ω_∞} , mais telle que $W_1(f(t, \cdot), \delta_{\Omega_\infty}) \geq g(t)$ pour tout $t \geq 0$.*

D'autre part si f_0 a une densité par rapport à la mesure de Lebesgue avec $m \leq f_0(v) \leq M$ pour tout v (où $0 < m < M$), avec $J_{f_0} \neq 0$ et telle que $\Omega(t) = \Omega_\infty$ soit constant au cours du temps, alors on a

$$W_1(f(t, \cdot), \delta_{\Omega_\infty}) \asymp \begin{cases} (1+t)e^{-t} & \text{si } d = 2, \\ e^{-t} & \text{si } d \geq 3, \end{cases}$$

$$W_2(f(t, \cdot), \delta_{\Omega_\infty}) \asymp \begin{cases} e^{-\frac{1}{2}t} & \text{si } d = 2, \\ \sqrt{1+t} e^{-t} & \text{si } d = 3, \\ e^{-t} & \text{si } d \geq 4. \end{cases}$$

Ces calculs s'appuient sur la projection stéréographique par rapport à Ω , qui fournit des calculs quasi-explicites (ne dépendant que de la donnée de $|J_f|(t)$) si Ω est constant³⁰. De façon intéressante, les taux de convergence dépendent de la dimension de l'espace, et de la distance de Wasserstein considérée. En fait, toute la vitesse de convergence est gérée par la répartition de la densité autour de v_{back} . On peut s'attendre à ce que ces estimations de convergence soient toujours valides lorsque Ω n'est plus constant. Et dans ce cas, comme on va le voir dans la section suivante, on s'attend même à ce que le taux de convergence de Ω soit plus grand que le taux de convergence vers la distribution f_∞ .

30. En fait, l'équation $\frac{d}{dt} v = P_{v^\perp} \Omega$ s'écrit $z' = -z$ si z est la projection stéréographique de v par rapport à Ω .

6.2 Le système de particules associé

Lorsque deux particules sont initialement au même endroit, elles le restent indéfiniment. On peut donc en fait associer des poids à chaque particule et considérer qu'elles sont initialement à des positions distinctes. On considère donc le système

$$\frac{dv_i}{dt} = P_{v_i^\perp} J, \text{ avec } J(t) = \sum_{i=1}^N m_i v_i(t), \quad (6.3)$$

où les masses m_i sont N réels strictement positifs tels que $\sum_{i=1}^N m_i = 1$, et où les conditions initiales $v_i^0 \in \mathbb{S}$ (pour $1 \leq i \leq N$) sont telles que $v_i^0 \neq v_j^0$ pour tout $i \neq j$. Alors la mesure empirique $\mu = \sum_{i=1}^N m_i \delta_{v_i(t)}$ est solution de l'équation d'agrégation (6.2) si et seulement si les v_i satisfont le système (6.3). On connaît donc le comportement d'après la section précédente, mais on peut en fait raffiner et obtenir des taux de convergence précis (et même un développement asymptotique lorsque $t \rightarrow \infty$). Comme précédemment, on suppose $J(0) \neq 0$, et on a une dichotomie suivant le cas où v_{back} est une des positions initiales des particules ou pas. Dans tous les cas, le taux de convergence de Ω vers Ω_∞ est trois fois celui de chaque particule qui converge vers Ω_∞ (et si une particule converge vers « l'arrière », son taux est également de trois fois le taux de chacune des autres particules).

Théorème 6.2. *Si $J(0) \neq 0$, il existe Ω_∞ tel que $\Omega(t) = \frac{J(t)}{|J(t)|}$ converge vers Ω_∞ lorsque $t \rightarrow +\infty$, et on a uniquement deux types de régimes asymptotiques possibles, décrits ci-dessous.*

- (i) *Tous les vecteurs unitaires v_i convergent vers Ω_∞ . Alors la convergence a lieu à taux exponentiel 1, et Ω converge vers Ω_∞ à un taux exponentiel 3. Plus précisément, pour $1 \leq i \leq N$, il existe des $a_i \in \{\Omega_\infty\}^\perp \subset \mathbb{R}^n$ tels que $\sum_{i=1}^N m_i a_i = 0$, et tels que l'on ait les développements suivants, lorsque $t \rightarrow +\infty$:*

$$\begin{aligned} v_i(t) &= (1 - |a_i|^2 e^{-2t}) \Omega_\infty + e^{-t} a_i + O(e^{-3t}) \quad \text{pour } 1 \leq i \leq N, \\ \Omega(t) &= \Omega_\infty + O(e^{-3t}). \end{aligned}$$

- (ii) *Il existe i_0 tel que v_{i_0} converge vers $-\Omega_\infty$. Dans ce cas on a $m_{i_0} < \frac{1}{2}$ (une fois de plus, on ne peut pas avoir trop de masse « à l'arrière ») et en notant $\lambda = 1 - 2m_{i_0}$, le vecteur v_{i_0} converge exponentiellement vite vers $-\Omega_\infty$ à un taux 3λ . De plus, tous les autres vecteurs v_i pour $i \neq i_0$ convergent vers Ω_∞ à un taux λ , et Ω converge vers Ω_∞ à un taux 3λ . Plus précisément, pour $i \neq i_0$, il existe des $a_i \in \{\Omega_\infty\}^\perp \subset \mathbb{R}^n$, tels que $\sum_{i \neq i_0} m_i a_i = 0$ et tels que l'on ait les développements suivants, lorsque $t \rightarrow +\infty$:*

$$\begin{aligned} v_i(t) &= (1 - |a_i|^2 e^{-2\lambda t}) \Omega_\infty + e^{-\lambda t} a_i + O(e^{-3\lambda t}) \quad \text{pour } i \neq i_0, \\ v_{i_0}(t) &= -\Omega_\infty + O(e^{-3\lambda t}), \\ \Omega(t) &= \Omega_\infty + O(e^{-3\lambda t}). \end{aligned}$$

Éléments de démonstration. Ces développements asymptotiques reposent sur une première estimation pour obtenir un taux de convergence de $|J|^2$ vers λ , puis de réutiliser cette information dans l'équation d'évolution de Ω et de chaque v_i , plus précisément en calculant la dérivée seconde de v_i . Pour le cas de v_{i_0} dans la deuxième situation, il faut faire un peu différemment, en montrant d'abord que $-v_{i_0}$ est dans le cône convexe engendré par les autres v_i (pour contrôler sa distance à $-\Omega_\infty$), puis en utilisant la même astuce que dans la section précédente : si $y' = y + O(e^{-\beta t})$ et que d'autre part y est bornée, alors on doit avoir $y = O(e^{-\beta t})$. \square

Perspectives Une extension naturelle de ces résultats serait de les généraliser pour les autres modèles étudiés dans les deux premières parties : les alignements de corps rigides ou de polymères en forme de bâtonnets (en remplaçant \mathbb{S} par $SO(n)$ ou $\mathbb{S}/\{\pm 1\}$). Une manière de voir les choses est de considérer ces variétés comme des sous-variétés de sphères de dimensions plus grande (dans les matrices pour $SO(n)$, dans les matrices symétriques à trace nulle pour $\mathbb{S}/\{\pm 1\}$). On peut alors voir le modèle comme le flot-gradient de l'énergie $-\frac{1}{2} \sum_{i,j} m_i m_j \|v_i - v_j\|^2$ (réminiscent du fait que l'équation d'agrégation (6.2) est également un flot-gradient de la fonctionnelle $-\frac{1}{2} |J_f|^2$ pour la distance de Wasserstein W_2), donc on a convergence de l'énergie vers un minimum local. La première difficulté est que l'on n'a pas $J_f = \lambda \Omega$ où Ω est un élément de la variété qui nous intéresse, donc même si J converge, il ne converge pas forcément vers un élément pour lequel le flot de l'équation différentielle est facile à comprendre. En particulier les points « arrière » correspondant à v_{back} ne sont plus uniques. On n'a plus également ce phénomène de « répulsion » à l'arrière. Une approche intéressante serait d'abord de mieux comprendre le cas de la sphère à l'aide de vocabulaire de systèmes dynamiques, il est en effet probable que des théorèmes généraux déjà existant puissent s'appliquer !

Un autre axe de développement concernant ces modèles avec alignement sans bruit concerne la dérivation de modèles fluides pour les modèles inhomogènes en espace. Cette thématique a récemment été l'objet de beaucoup d'attention pour les modèles de type Cucker–Smale [KMT15, DKRT18, FK19], et à ma connaissance il y a peu de résultats pour des modèles avec contrainte géométrique. Lorsqu'on cherche des solutions monocinétiques de la forme $f(t, x, \cdot) = \delta_{u(t,x)}$, on obtient des dynamiques proches de gaz sans pression. Lorsqu'on suppose que le noyau d'observation converge vers un Dirac, on obtient même formellement un découplage entre la densité et l'orientation, qui satisfait une équation de Burgers sur la sphère. Des discussions sont en cours avec Thomas Rey dans cette thématique³¹.

31. Thomas, si tu lis ce mémoire, cette note de bas de page est pour toi !

Chapitre 7

Modèles de point-milieu

Contenu

7.1	Modèles de point-milieu sur la sphère et au-delà	86
7.2	Le modèle infinitésimal de Fisher sans variabilité	90
7.2.1	Stabilité locale de certaines masses de Dirac	91
7.2.2	Amélioration des taux de convergence des moments	93
7.2.3	Convergence en temps long vers un profil auto-similaire	94

Le point de départ de ce chapitre³² est le modèle d’alignement de particules autopropulsées de Bertin, Droz et Grégoire [BDG06] : des particules, aux positions x_i et avec vitesses $v_i \in \mathbb{S}$ interagissent par paires. Lorsque deux particules i et j interagissent, leur vitesse devient $\frac{v_i+v_j}{|v_i+v_j|}$ avec un bruit angulaire. Le modèle et sa limite cinétique ont été étudiés dans [CDW13, CCDW13, CCDW15]. La détermination des équilibres locaux pour un bruit quelconque, et ainsi la dérivation formelle de limites hydrodynamiques, comme dans les deux premières parties de ce mémoire est à ma connaissance encore un problème ouvert. Cependant, lorsqu’il n’y a pas de bruit angulaire, pour le modèle homogène en espace, on peut s’attendre comme dans le chapitre précédent à la convergence vers une masse de Dirac. C’est l’objet de la première section de ce chapitre, basée sur l’article [F7], en collaboration avec Pierre Degond et Gaël Raoul.

En notant \mathcal{M} l’espace des configurations (typiquement $\mathcal{M} = \mathbb{S}$, l’ensemble des vitesses, mais on notera x les éléments de \mathcal{M}), on considère un modèle cinétique où deux particules x_*, x'_* tirées uniformément au hasard à taux constant interagissent et se retrouvent à une position donnée par le tirage d’un $x \in \mathcal{M}$ selon une loi de probabilité $K(\cdot, x_*, x'_*)$ (que l’on peut supposer symétrique en ses deux dernières variables par échangeabilité). L’équation cinétique correspondante est la suivante, pour une mesure de probabilité ρ dépendant du temps, notée abusivement $\rho(t, x)dx$ même si elle n’a pas de densité :

$$\partial_t \rho(t, x) = \int_{\mathcal{M} \times \mathcal{M}} K(x, x_*, x'_*) \rho(t, x_*) \rho(t, x'_*) dx_* dx'_* - \rho(t, x). \quad (7.1)$$

Cette équation sous forme générique recouvre de multiples modèles. Lorsque $\mathcal{M} = \mathbb{R}^d$ (vu comme un espace de vitesses), elle peut par exemple être reliée à de nombreux modèles collisionnels apparaissant en physique (Boltzmann inélastique [BCG00, CCT09, MM09], Kac inélastique [BLM11, GR12, PT04]), dans des modèles de formation d’opinion [BS09, GGS82] ou

32. La traduction française de « midpoint models » n’est pas de la meilleure sonorité, mais je ne pouvais pas sincèrement traduire « modèles du milieu » malgré l’attachement que j’ai à la Terre du même nom.

des modèles économiques de redistribution de richesse [PT06, MT08, BST09, Che11, CJM21], ou en biologie (échange de protéines entre cellules [HLFMW09, PGBL⁺12], ou effet de recombinaison dans les modèles de reproduction sexuée, en particulier le modèle dit « infinitésimal » de Fisher [BEV17, Bul80, Fis19, TB94]). Dans la plupart de ces cas, la loi de probabilité $K(\cdot, x_*, x'_*)$ conserve le centre de masse, et on peut alors définir une énergie adaptée qui décroît pour toute condition initiale. Il est même possible d'utiliser des méthodes de Fourier pour obtenir une description précise du comportement en temps long (on peut renvoyer aux notes de cours [CT07] pour une description de ces méthodes). Dans le cas de la sphère, il n'y a plus de conservation de tel moment, et l'objectif est de réussir à obtenir une énergie décroissante au moins localement au voisinage de masses de Dirac. Un autre cadre qui nous intéresse est le cas où la masse totale n'est pas conservée, comme dans les modèles de biologie où l'opérateur de collision K représente les naissances d'individus et où le taux de mortalité n'est pas constant en espace. Par exemple lorsque K est une gaussienne centrée au milieu de x_*, x'_* , on obtient le modèle infinitésimal de Fisher avec sélection, où les x représentent les traits, transmis par reproduction sexuée [CGP19, Pat20]. Lorsque la variabilité est nulle, on retombe sur un modèle de point-milieu pour le terme de reproduction, avec un taux de mortalité dépendant du trait. C'est ce modèle, que nous avons étudié dans l'article en cours de finalisation [F19], en collaboration avec Cécile Taing, qui est présenté dans la deuxième section de ce chapitre.

7.1 Modèles de point-milieu sur la sphère et au-delà

On travaille avec la distance de Wasserstein W_2 et on note $\mathcal{P}_2(\mathcal{M})$ l'ensemble des mesures de probabilité ρ telles que $\int_{\mathcal{M}} d(x_0, x)^2 d\rho(x) < +\infty$. Alors si $x'_* \mapsto K(\cdot, x_*, x'_*)$ est une application k -Lipschitzienne de \mathcal{M} dans $\mathcal{P}_2(\mathcal{M})$, pour un k indépendant de $x_* \in \mathcal{M}$, le problème (7.1) est bien posé dans $C([0, T], \mathcal{P}_2(\mathcal{M}))$. Ceci se montre par l'équivalence entre une solution et un point fixe de l'application $(\rho_t)_{t \in [0, T]} \mapsto (\rho_0 e^t + \int_0^t e^{s-t} \int_{\mathcal{M} \times \mathcal{M}} K(\cdot, x_*, x'_*) d\rho_s(x_*) d\rho_s(x'_*) ds)_{t \in [0, T]}$.

Lorsque $\mathcal{M} = \mathbb{R}^d$ et $K(\cdot, x_*, x'_*) = \delta_{\frac{1}{2}(x_* + x'_*)}$, on obtient un modèle très simple dont la version unidimensionnelle est étudiée dans [PT06, HLFMW09] dans différents contextes. L'utilisation de la distance W_2 n'est pas nouvelle ici [CT07], et avec la préservation du centre de masse \bar{x} , comme $W_2(\rho, \delta_{\bar{x}})^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |x - \bar{x}|^2 d\rho(x)$, on obtient facilement $\frac{d}{dt} W_2(\rho, \delta_{\bar{x}}) = -\frac{1}{4} W_2(\rho_0, \delta_{\bar{x}})$ ce qui donne la convergence exponentielle vers $\delta_{\bar{x}}$ dans tous les cas.

Le modèle qui nous intéresse est celui où $\mathcal{M} = \mathbb{S}$ et $K(\cdot, x_*, x'_*) = \delta_{x_m}$ où $x_m = \frac{x_* + x'_*}{|x_* + x'_*|}$ est le milieu de la géodésique joignant x_* et x'_* lorsque $x_* \neq -x'_*$. On suppose que le support de $K(\cdot, x_*, x'_*)$ est inclus dans « l'équateur » $x \cdot x_* = 0$ lorsque $x_* = -x'_*$.

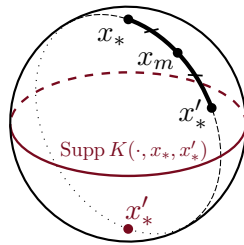


FIGURE 7.1 – Modèle de point-milieu sur la sphère.

La première difficulté qui apparaît est que le modèle n'est pas bien posé. En fait, une petite perturbation de points proche d'être diamétralement opposés initialement permet de construire

des solutions qui sont aussi proches que l'on veut l'une de l'autre initialement mais dont la distance au temps $t = 4$ est bornée par en-dessous par exemple. On peut modifier le modèle de telle sorte que l'interaction soit régulière tout en gardant la propriété que la mesure $K(\cdot, x_*, x'_*)$ est concentrée au milieu de (x_*, x'_*) lorsque x_* et $-x'_*$ sont suffisamment éloignés. On décrira de telles généralisations en fin de section, mais on peut quand même obtenir des résultats sur les solutions du modèle initial, en supposant qu'elles existent.

La deuxième difficulté est l'absence de conservation d'un moment autour duquel on peut définir une énergie. Par exemple, pour le cas du cercle, on peut regarder l'angle de la vitesse moyenne, et on s'aperçoit qu'il n'est pas conservé.

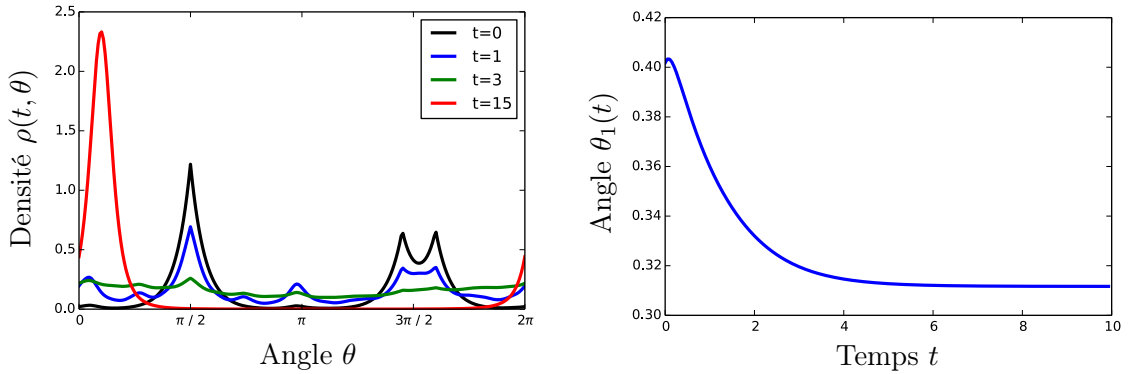


FIGURE 7.2 – Simulation numérique du modèle de point milieu sur le cercle. À gauche, la solution $x \mapsto \rho(t, x)$ à divers temps (ici $x = e^{i\theta}$). À droite, l'argument $\theta_1(t)$ du centre de masse $\int_{x \in \mathbb{S}^1 \subset \mathbb{C}} x \rho(t, x) dx$, en fonction du temps t .

Pour s'en sortir, on observe ceci : sur \mathbb{R}^d , on a

$$\int_{\mathbb{R}^d} |x - \bar{x}|^2 d\rho(x) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |x - y|^2 d\rho(x) d\rho(y),$$

et le terme de droite de cette égalité peut être défini de la même manière sur un espace métrique, et donne un contrôle sur la distance de la probabilité ρ à l'ensemble des masses de Dirac.

Lemme 7.1. *On définit*

$$E(\rho) = \int_{\mathbb{S} \times \mathbb{S}} d(x, y)^2 d\rho(x) d\rho(y),$$

Si $\rho \in \mathcal{P}(\mathbb{S})$, on a pour tout $x \in \mathbb{S}$,

$$E(\rho) \leq 4 W_2(\rho, \delta_x)^2,$$

et il existe $\bar{x} \in \mathbb{S}$ tel que

$$W_2(\rho, \delta_{\bar{x}})^2 \leq E(\rho). \quad (7.2)$$

Dans ce cas, pour tout $\kappa > 0$, on a les inégalités de type Markov suivantes :

$$\int_{\{x \in \mathbb{S}; d(x, \bar{x}) \geq \kappa\}} d\rho(x) \leq \frac{1}{\kappa^2} E(\rho), \quad \text{et} \quad \int_{\{x \in \mathbb{S}; d(x, \bar{x}) \geq \kappa\}} d(x, \bar{x}) d\rho(x) \leq \frac{1}{\kappa} E(\rho).$$

L'idée est alors de calculer la dérivée de E en espérant avoir une estimation de type Grönwall lorsque la solution est proche d'une masse de Dirac en distance W_2 , ce qui est équivalent au fait que E est petit. L'énergie E est donc une fonction de Lyapunov au voisinage de toute masse de Dirac. Le résultat principal de [F7] est le théorème suivant :

Théorème 7.1. *Il existe $C_1 > 0$ et $\eta > 0$ tels que pour toute solution $\rho \in C(\mathbb{R}_+, \mathcal{P}(\mathbb{S}))$ de (7.1) avec condition initiale ρ_0 satisfaisant $W_2(\rho_0, \delta_{x_0}) < \eta$ pour un $x_0 \in \mathbb{S}$, alors il existe $x_\infty \in \mathbb{S}$ tel que*

$$W_2(\rho_t, \delta_{x_\infty}) \leq C_1 W_2(\rho_0, \delta_{x_0}) e^{-t/4}.$$

Ce taux de convergence, le même que dans \mathbb{R}^d , est optimal au sens où si on prend une condition initiale supportée sur une géodésique de longueur strictement inférieure à π , on peut se ramener à un modèle de point-milieu sur un segment de \mathbb{R} . Avant de donner la stratégie de la démonstration, on peut observer sur la simulation numérique de la solution donnée dans la Figure 7.2 que la décroissance exponentielle n'est pas immédiate. Il existe même des configurations où l'énergie croît initialement (par exemple si on démarre avec une perturbation de trois distributions de Dirac de même masse aux sommets d'un triangle équilatéral, la solution s'approche d'abord d'un état proche de l'uniforme, pour lequel l'énergie est strictement supérieure).

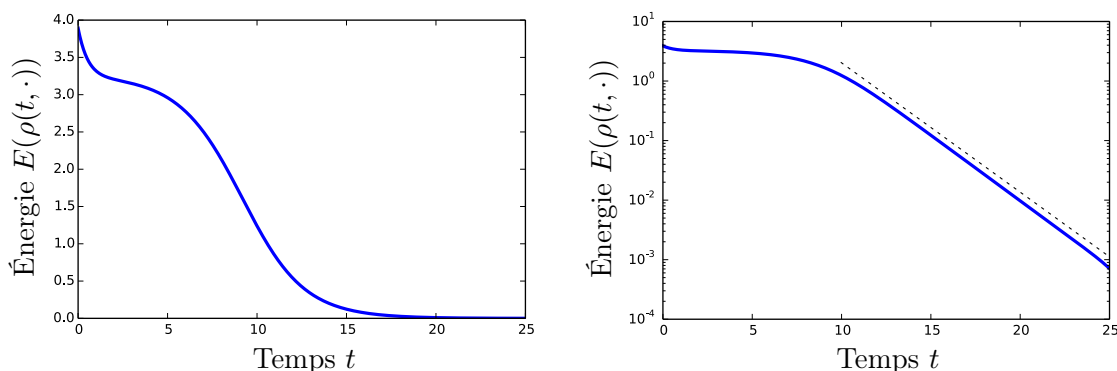


FIGURE 7.3 – Énergie $E(\rho(t, \cdot))$ pour la simulation numérique présentée en Figure 7.2 (en échelle semi-logarithmique à droite). On observe que l'énergie décroît lentement lorsque la densité est proche de la distribution uniforme (pour $t \sim 3$, cf. Figure 7.2). Pour $t \gtrsim 10$, l'énergie semble décroître exponentiellement comme $t \mapsto e^{-t/2}$ (ligne pointillée), comme prévu par le Théorème 7.1.

Ingrédients de la preuve du Théorème 7.1. On a

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} E(\rho) = \int_{\mathbb{S} \times \mathbb{S} \times \mathbb{S}} \alpha(x_*, x'_*, y) d\rho(x_*) d\rho(x'_*) d\rho(y).$$

où

$$\alpha(x_*, x'_*, y) = \int_{\mathbb{S}} d(x, y)^2 K(x, x_*, x'_*) dx - \frac{d(x_*, y)^2 + d(x'_*, y)^2}{2},$$

correspond à la variation locale en y de l'énergie provenant de la collision entre deux particules situées en x_* et x'_* . La clé pour obtenir une décroissance de l'énergie est d'obtenir de bonnes estimations sur cette quantité α . En particulier, si on veut obtenir un taux $\frac{1}{4}$, on espère montrer que $\alpha(x_*, x'_*, y)$ est proche de $-\frac{1}{4}d(x_*, x'_*)^2$. Il se trouve que si on était sur \mathbb{R}^d , on a exactement $\alpha(x_*, x'_*, y) = -\frac{1}{4}d(x_*, x'_*)^2$: c'est le théorème de la médiane (ou théorème d'Apollonius) dans le triangle (x_*, x'_*, y) (voir Figure 7.4) !

On veut donc comprendre à quel point on est loin de cela. On a en fait les deux estimations suivantes (une « locale » qui estime l'erreur par rapport à la formule d'Apollonius lorsque les trois points sont proches, que donc le triangle est proche d'être plan, et une globale, qui utilise

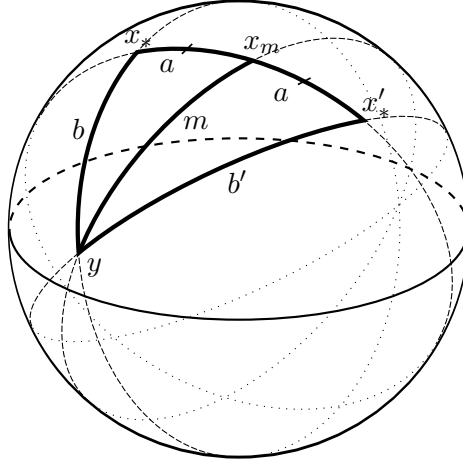


FIGURE 7.4 – $\alpha(x_*, x'_*, y) = m^2 - \frac{1}{2}(b^2 + b'^2)$, proche de $-a^2 = -\frac{1}{4}d(x_*, x'_*)^2$ lorsque les points sont proches.

simplement des inégalités triangulaires) :

$$\alpha(x_*, x'_*, y) \leq -\frac{1}{4}d(x_*, x'_*)^2 + \begin{cases} C_1 \kappa^2 d(x_*, x'_*)^2, & \text{si } \max(d(x_*, y), d(x'_*, y), d(x_*, x'_*)) \leq \kappa, \\ 2d(x_*, x'_*) \min(d(x_*, y), d(x'_*, y)), & \forall x_*, x'_*, y \in \mathbb{S}. \end{cases}$$

L'estimation locale est uniforme en $\kappa \leq \kappa_1 < \frac{2\pi}{3}$. On coupe alors l'intégrale triple que l'on veut estimer en différents morceaux dans lesquels on applique l'une ou l'autre des estimations, et en utilisant les inégalités de type Markov et Cauchy–Schwarz pour $\kappa = E(\rho)^{\frac{1}{6}}$, on obtient au final

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} E(\rho) \leq -\frac{1}{4} E(\rho) + C_0 E(\rho)^{\frac{4}{3}},$$

pour une constante C_0 explicite, ce qui donne le résultat de décroissance de E . Pour passer en distance de Wasserstein, il faut contrôler le déplacement de \bar{x} donné par (7.2), pour cela on montre que $d(\bar{x}(t), \bar{x}(t'))^2$ converge vers 0 à un taux exponentiel lié au taux de convergence de E , et on obtient bien le résultat voulu. \square

On étend ensuite ces résultats à une variété Riemannienne quelconque par des théorèmes de comparaison, qui permettent d'obtenir de nouveau ces estimations locales de α , à partir du moment où la variété a un rayon d'injectivité strictement positif et une courbure sectionnelle bornée par en-dessus, en transférant les résultats d'une sphère de courbure constante \mathcal{K}_{\max} vers la variété.

L'hypothèse que l'on fait sur le noyau de collision est que dans tous les cas, le support de $K(\cdot, x_*, x'_*)$ est inclus dans les milieux des segments de toutes les géodésiques de longueur minimale joignant x_* et x'_* .

Enfin, dans une dernière partie de l'article [F7], avec des calculs plus techniques, on étend le résultat (sous conditions de courbure sectionnelle cette fois-ci bornée par en-dessous) à des modèles laissant un peu plus de liberté que les points milieux stricts, mais qui permet quand même d'obtenir convergence vers un Dirac. La propriété de contraction par un facteur $\beta < 1$ dont on a besoin est la suivante : lorsque une particule x'_* interagit avec une particule x_* pour se retrouver en x , alors la moyenne de $d(x, x_*)^2$ est inférieure à $\frac{1}{4}(1 + \beta)d(x_*, x'_*)^2$. On peut montrer

que pour $\beta = 0$ c'est équivalent à être au milieu d'une géodésique minimale joignant x_* et x'_* . Prendre $\beta > 0$ permet de se laisser un peu de marge et en particulier considérer des modèles plus réguliers. Par exemple le processus de « bruit extrinsèque » qui consiste, pour une particule située en x_* , de d'abord bruiteur la position x'_* de la particule avec laquelle elle interagit, d'un (petit) facteur proportionnel à $d(x_*, x'_*)$ (cela peut modéliser l'influence de l'environnement, et la difficulté de localiser une particule située loin), puis à prendre le point milieu avec cette particule fictive bruitée. Sur la sphère cela donne un modèle bien posé au sens de la distance W_2 . On obtient alors (sous des hypothèses additionnelles, techniques mais pas trop restrictives, comme la symétrie de l'interaction par rapport au point milieu lorsque les particules sont proches, ainsi qu'un contrôle d'un moment de K d'ordre $p > 2$) que le même théorème est valable, mais cette fois-ci avec un taux de convergence $\frac{1}{4}(1 - \beta)$.

7.2 Le modèle infinitésimal de Fisher sans variabilité

Dans cette section, basée sur l'article en cours de finalisation [F19], en collaboration avec Cécile Taing, on étudie un modèle de populations sexuées structurées par un trait phénotypique $x \in \mathbb{R}$. Si $f(t, \cdot)$ est la densité de population au temps t , le modèle est le suivant

$$\partial_t f(t, x) = B_0[f(t, \cdot)](x) - m(x)f(t, x), \quad (7.3)$$

où B_0 est l'opérateur de transmission du trait par les parents :

$$B_0[f](x) := \iint_{\mathbb{R}^2} \delta_0 \left(x - \frac{z_1 + z_2}{2} \right) f(z_1) \frac{f(z_2)}{\int_{\mathbb{R}} f(z') dz'} dz_1 dz_2, \quad (7.4)$$

que l'on interprète comme le nombre de descendants avec trait x par unité de temps. L'opérateur B_0 traduit l'hypothèse qu'un descendant hérite exactement du trait moyen de ses deux parents $\frac{1}{2}(z_1 + z_2)$, et inclut une normalisation par la densité totale, pour illustrer le fait que le trait d'un partenaire est choisi uniformément parmi toute la population. Le modèle (7.3) est donc un modèle où chaque individu se reproduit avec un taux 1 et meurt avec un taux de mortalité $m(x)$. On ne suppose pas a priori que $m(x)$ est positif (ce qui pourrait traduire le fait que certains individus se reproduisent également de façon asexuée), mais on suppose que m est bornée par en-dessous (on verra que cela revient au même lorsqu'on s'intéresse à la densité normalisée pour laquelle ajouter une constante à m ne change pas l'évolution).

Lorsqu'on remplace δ_0 dans (7.4) par une gaussienne centrée de variance ε^2 , on obtient l'opérateur qui apparaît dans le modèle infinitésimal de Fisher [Fis19, Bul80, BEV17], où les descendants héritent du trait moyen de leurs parents avec une certaine variabilité. D'un point de vue de l'étude mathématique de problèmes similaires à (7.3), l'opérateur infinitésimal de Fisher apparaît dans différents travaux [MR13, Rao17, Dek22, Rao21, CLP21], et notre modèle correspond au cas $\varepsilon = 0$ des articles [CGP19, Pat20], dans lesquels le régime de petite variance est étudié.

Dans le cas où $m = 1$, on retrouve exactement le modèle de point-milieu de la section précédente sur \mathbb{R} : les particules se reproduisant et mourant au même taux 1, cela revient à remplacer deux particules tirées uniformément au hasard par leurs deux descendants avec un trait correspondant au milieu des traits des parents. On peut alors ici préciser un peu les résultats connus [PT06, CT07, MT08] :

- le centre de masse \bar{x} est conservé,
- le second moment $m_2 = \int_{\mathbb{R}} |x - \bar{x}|^2 f(t, x) dx$ est donné par $m_2(0)e^{-\frac{t}{2}}$, donc la solution converge vers la masse de Dirac au point \bar{x} (en distance W_2),

- si on passe en échelle auto-similaire en posant $\gamma(t, x) = \sqrt{m_2(0)}e^{-\frac{t}{4}}f(t, \sqrt{m_2(0)}e^{-\frac{t}{4}}x + \bar{x})$, alors γ est une densité centrée et de variance 1 qui converge vers l'unique profil auto-similaire $\gamma_\infty(x) = \frac{2}{\pi(1+x^2)^2}$, qui a seulement des moments d'ordre s pour $s < 3$.

La convergence vers le profil auto-similaire a lieu dans l'ensemble des mesures de probabilité, centrées, de variance 1 et avec moment d'ordre s fini pour $s \in]2, 3[$ et pour la distance de Fourier $d_s(\gamma_1, \gamma_2) = \sup_{\xi \neq 0} \frac{|\widehat{\gamma_1}(\xi) - \widehat{\gamma_2}(\xi)|}{|\xi|^s}$ (qui rend cet espace complet).

Travailler en Fourier est particulièrement adapté, en effet on a $\widehat{B_0[\gamma]}(\xi) = \widehat{\gamma}(\frac{\xi}{2})^2$, et l'opérateur B_0 est une contraction d'un facteur 2^{1-s} dans cet espace: $d_s(B_0[\gamma_1], B_0[\gamma_2]) = 2^{1-s}d_s(\gamma_1, \gamma_2)$. Lorsque $s > 2$, on obtient donc une contraction légèrement meilleure que $\frac{1}{2}$ (qui est par exemple le taux de contraction de B_0 dans la distance W_2). Et ceci se traduit dans l'équation d'évolution par un taux de contraction $e^{-\lambda_s t}$ entre deux solutions, avec $\lambda_s = 1 - \frac{s}{4} - 2^{1-s} > 0$ pour $s \in]2, 3[$ (le coefficient λ_s est une fonction strictement concave de s qui vaut 0 en 2 et en 3).

L'objectif principal de notre article [F19] est d'étendre ces résultats au cas d'un taux de mortalité variable.

7.2.1 Stabilité locale de certaines masses de Dirac

On commence à montrer que le problème est bien posé au sens des mesures. On note \mathcal{M}_+ l'ensemble des mesures (positives) finies (on notera par abus de notation $f(x)dx$ même si f n'a pas de densité) et on a :

Théorème 7.2. *Si m est mesurable et bornée par en-dessous, alors pour toute mesure $f^0 \in \mathcal{M}_+$, il existe une unique solution faible $f \in C(\mathbb{R}_+, \mathcal{M}_+)$ au modèle (7.3), au sens où pour tout borélien $A \subset \mathbb{R}$, on a pour tout $t \geq 0$*

$$\int_A f(t, x)dx = \int_A e^{-m(x)t} f^0(x)dx + \int_0^t \int_A e^{-m(x)(t-s)} B_0[f(s, \cdot)](x)dx ds.$$

De plus si on a pour un certain $k \in \mathbb{N}$, $\int_{\mathbb{R}} |x|^k f^0(x)dx < +\infty$, alors pour tout $t \geq 0$, f a aussi un moment d'ordre k fini. Plus précisément, si $m \geq -K$ on a

$$\int_{\mathbb{R}} |x|^k f(t, x)dx \leq e^{(K+1)t} \int_{\mathbb{R}} |x|^k f^0(x)dx.$$

Enfin, si $\rho_0 = \int_{\mathbb{R}} f^0(x)dx > 0$, alors pour tout temps on a $\rho = \int_{\mathbb{R}} f(t, x)dx > 0$.

Ce théorème découle du fait que B_0 est 3-Lipschitzienne pour la norme en variation totale des mesures, et préserve les bornes sur les moments: $\int_{\mathbb{R}} |x|^k B_0[f](t, x)dx \leq \int_{\mathbb{R}} |x|^k f(x)dx$.

On écrit donc $g = \frac{f}{\rho}$ et on s'intéresse à l'évolution de la mesure de probabilité g . L'objectif est de pouvoir décrire le comportement en temps long de g si g_0 est suffisamment proche d'une masse de Dirac (qui est alors un état stationnaire). On se donne alors une certaine hypothèse de régularité sur m pour pouvoir estimer l'évolution des moments de g .

Hypothèse 7.1. *On suppose qu'il existe une fonction continue et positive α et un $\beta \geq 0$ tels que pour tout $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, on ait*

$$|m(x) - m(y)| \leq \alpha(y)|x - y| + \beta|x - y|^2.$$

Cette hypothèse est par exemple valide dès que m est Lipschitz ou C^2 avec une dérivée seconde bornée. Ceci permet d'inclure dans nos résultats le cas quadratique $m(x) = x^2$.

Cette supposition permet alors de calculer l'évolution des moments de g , lorsque g_0 a initialement un moment d'ordre 4 (pour pouvoir calculer l'évolution du centre de masse \bar{x} , on a besoin d'un moment d'ordre 3 seulement, mais on ne calcule au final que l'évolution des moments impair).

On note $\bar{x} = \int_{\mathbb{R}} xg(t, x)dx$ le centre de masse, et on définit les quantités suivantes (les moments centrés de g , et des moments pondérés par m , qui sont nuls si m est constant) :

$$\begin{aligned} M_k(t) &= \int_{\mathbb{R}} (x - \bar{x}(t))^k g(x) dx, \\ S_k(t) &= \int_{\mathbb{R}} (x - \bar{x}(t))^k (m(x) - m(\bar{x}(t))) g(x) dx. \end{aligned}$$

On note également $M_k^0 = M_k(0)$ les moments de g_0 . On a alors $M_0 = 1$, $M_1 = 0$ et $\frac{d}{dt}\bar{x} = -S_1$. Et pour tout $k \geq 0$, si g_0 a un moment d'ordre $k + 2$, l'évolution de M_k s'écrit:

$$\frac{d}{dt}M_k = -\left(1 - \frac{1}{2^{k-1}}\right)M_k + \frac{1}{2^k} \sum_{i=2}^{k-2} \binom{k}{i} M_{k-i} M_i - S_k + S_0 M_k + k S_1 M_{k-1}.$$

En pratique, pour $k \geq 4$ pair, on peut même utiliser cette équation d'évolution pour obtenir une inégalité dans le cas où g_0 a seulement un moment d'ordre k , le seul terme éventuellement mal défini étant $-S_k$, qui peut valoir $-\infty$. Comme on s'intéresse à des majorations, c'est suffisant. L'évolution des moments d'ordre 2 et 4 s'écrit donc

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}M_2 &= -\frac{1}{2}M_2 - S_2 + S_0 M_2, \\ \frac{d}{dt}M_4 &= -\frac{7}{8}M_4 + \frac{3}{8}M_2^2 + 4S_1 M_3 - S_4 + S_0 M_4. \end{aligned} \tag{7.5}$$

On voit donc que si on démarre suffisamment proche d'un Dirac, on peut espérer avoir $S_0 \ll 1$, mais pour avoir $S_2 \ll M_2$ et ainsi obtenir une convergence exponentielle de taux $\frac{1}{2}$ comme dans le cas m constant, ce n'est pas aussi simple. La seule estimation que l'on peut faire en utilisant la borne de m par en-dessous, c'est $-S_2 \leq (m(\bar{x}) - \inf_{\mathbb{R}} m)M_2$. On peut donc s'attendre à de la convergence exponentielle lorsque $m(\bar{x}) - \inf_{\mathbb{R}} m < \frac{1}{2}$, et c'est effectivement avec ce critère que l'on va montrer tous nos résultats de stabilité et de convergence. On note

$$\eta(x) = \inf_{\mathbb{R}} m + \frac{1}{2} - m(x),$$

qui est une quantité dans $]0, \frac{1}{2}[$. On montre alors que les masses de Dirac en \bar{x}_0 pour lesquelles $\eta(\bar{x}_0) > 0$ sont stables :

Proposition 7.1. *Si initialement $\eta(\bar{x}_0) > 0$, alors pour tous δ, δ_0 tels que $0 < \delta < \delta_0 < \eta(\bar{x}_0)$, si M_4^0 est suffisamment petit, on a pour tout $t > 0$:*

$$\begin{aligned} \eta(\bar{x}(t)) &\geq \delta_0, \\ M_2(t) &\leq M_2^0 e^{-\delta t}, \\ M_4(t) &\leq M_4^0 e^{-\delta t}. \end{aligned}$$

De plus, dans ce cas, $\bar{x}(t)$ converge exponentiellement vite vers un $\bar{x}_\infty \in \mathbb{R}$. Par conséquent, cela signifie que si g est initialement suffisamment proche d'une masse de Dirac en \bar{x}_0 (pour W_4), alors elle converge exponentiellement vite vers une masse de Dirac en un point \bar{x}_∞ .

La preuve consiste à regarder les équations d'évolution de M_2 , M_4 au voisinage de 0 en utilisant le fait que $S_2 \geq (\eta(\bar{x}) - \frac{1}{2})M_2$ et $S_4 \geq (\eta(\bar{x}) - \frac{1}{2})M_4$, puis en les combinant avec celle du centre de masse $\bar{x}(t)$ pour contrôler son déplacement, et ainsi rester dans un voisinage dans lequel $\eta(\bar{x}(t)) \geq \delta_0$.

Les taux de convergence ne semblent pas optimaux comparés au cas où m est constant, mais on voit que le taux obtenu s'approche de $\frac{1}{2}$ lorsque la mortalité associée à la position initiale \bar{x}_0 du centre de masse est proche de la mortalité minimale. On peut remarquer également que si on suppose que m est globalement Lipschitz, on a seulement besoin d'un moment d'ordre deux initialement, ainsi que seulement de l'évolution de M_2 , pour obtenir donc une stabilité locale pour la distance W_2 . Si on suppose moins de contrôle de m (par exemple une croissance polynomiale), il faudrait alors considérer plus de moments, au prix d'une technicité plus élevée, mais la méthode peut fonctionner de la même manière.

7.2.2 Amélioration des taux de convergence des moments

Lorsqu'on cherche à établir la convergence vers un profil autosimilaire, on verra dans la prochaine sous-section qu'on a besoin d'estimations précises sur les taux de convergence des moments M_2 , M_4 , et M_6 . Celles obtenues dans la Proposition 7.1 ne sont pas suffisantes, et on peut d'ailleurs voir qu'elles ne sont pas optimales en observant que le contrôle que l'on utilisait pour S_2 (qui utilisait une borne globale sur m) peut maintenant être raffiné avec la connaissance du fait que M_4 converge exponentiellement vers 0. On a en effet par Cauchy-Schwarz $|S_2| \leq \alpha(\bar{x})\sqrt{M_2 M_4} + \beta M_4$. Et ceci montre que si on a un taux de convergence amélioré λ_4 pour M_4 , alors $\min(\frac{1}{2}, \lambda_4)$ est un taux de convergence pour M_2 . Mais comme on a aussi un taux de convergence, disons λ_2 pour M_2 , le terme en M_2^2 dans (7.5) peut également être estimé grâce à cela. Et on obtient que $\min(\frac{3}{8} + \delta_0, 2\lambda_2)$ est également un taux de convergence pour M_4 . En itérant ce processus on obtient des taux de convergence nettement améliorés pour M_2 et M_4 . Pour être précis on aura besoin de contrôler les constantes dans les estimations de convergence, qui sont également souvent de la forme « pour tout $\tilde{\lambda} < \lambda$, on a décroissance à taux $\tilde{\lambda}$ ». On adopte alors la définition suivante :

Définition 7.1. *On dit qu'une quantité positive y (qui peut dépendre de plusieurs paramètres) a une décroissance contrôlée par un paramètre σ avec un taux presque λ si pour tout $\tilde{\lambda} < \lambda$, il existe une constante $C(\sigma)$ convergeant vers 0 lorsque $\sigma \rightarrow 0$, et telle que pour tout $t > 0$ on ait $y(t) \leq C(\sigma)e^{-\tilde{\lambda}t}$.*

Proposition 7.2. *Sous les mêmes hypothèses que 7.1, M_2 and M_4 ont des décroissances contrôlées par M_4^0 et avec des taux presque $\min(\frac{1}{2}, \frac{3}{8} + \delta_0)$ et presque $(\frac{3}{8} + \delta_0)$.*

Ces taux sont considérablement améliorés par rapport à la proposition 7.1, en particulier ils ne convergent pas vers 0 lorsque l'on est proche de la limite au-delà de laquelle on ne sait pas si les masses de Dirac sont stables (on suspecte en fait qu'elles ne le sont pas génériquement, mais par exemple on sait qu'elles sont stables par perturbation à support compact, puisqu'à ce moment-là comme le modèle conserve le support, il suffit de modifier le minimum de m sans changer sa valeur dans le support, et ainsi retrouver le résultat de stabilité de la proposition (7.1)).

Mais encore une fois, on s'aperçoit que ces taux ne sont pas suffisants pour l'étude de la convergence vers le profil auto-similaire. Comme on ne désespère pas, on regarde alors les moments d'ordre supérieur (on verra de toute façon qu'on a besoin de contrôler M_6), et on s'aperçoit que la technique d'amélioration entre M_2 et M_4 fonctionne aussi entre M_4 et M_6 , puisqu'on peut alors contrôler S_4 grâce à M_6 : $|S_4| \leq \alpha(\bar{x})\sqrt{M_4 M_6} + \beta M_6$. Une fois qu'on a amélioré le taux

pour M_4 , alors cela améliore également le taux pour M_2 . On peut ensuite faire marcher ceci entre M_6 et M_8 et ainsi de suite. La bonne manière est d'abord d'obtenir un taux amélioré pour M_{2k} à partir simplement de la proposition (7.2) par récurrence montante sur k , puis lorsqu'on arrive à un $2k_0$ suffisant, de faire une récurrence descendante pour revenir à M_2 . Et on voit alors bien ici quels sont les taux optimaux que l'on peut espérer :

Proposition 7.3. *Sous les mêmes hypothèses, si $M_{2k_0}^0$ est fini, alors pour tout $k \leq k_0$, M_{2k} a une décroissance contrôlée par $M_{2k_0}^0$ et avec un taux presque $\min(1 - \frac{1}{2^{2k-1}}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2^{2k_0-1}} + \delta_0)$.*

On sait que l'on ne peut pas avoir mieux que $1 - \frac{1}{2^{2k-1}}$ pour le taux de convergence de M_{2k} , ce qui correspond au cas où m est constant. Cependant, on voit que si on accède à un moment k_0 assez grand, le taux que l'on obtient est en fait proche de $\min(1 - \frac{1}{2^{2k-1}}, \frac{1}{2} + \delta_0)$. En particulier pour M_2 on obtient le taux $\frac{1}{2}$ correspondant au cas où m est constant !

C'est donc sur les moments d'ordre supérieur, si δ_0 est petit (c'est à dire que l'on n'est pas proche du minimum de m), que l'on voit qu'on n'a pas un taux correspondant au taux du cas où m est constant. Cependant on obtient quand même un taux de convergence strictement supérieur à $\frac{1}{2}$ pour les moments à partir de M_4 , et c'est essentiel pour la suite.

Le dernier petit problème que l'on a, c'est qu'en fait on aura besoin de contrôler $\frac{M_4}{M_2} \dots$. Donc on n'a pas seulement besoin de montrer que le taux de M_4 est strictement supérieur à $\frac{1}{2}$ mais aussi que M_2 se comporte asymptotiquement comme $e^{-\frac{t}{2}}$, comme dans le cas où m est constant. Pour cela on a besoin d'une hypothèse supplémentaire : qu'initialement un des moments M_{2k_0} soit petit devant M_2 .

Proposition 7.4. *Sous les mêmes hypothèses, si $\frac{1}{2^{2k_0-1}} < \delta_0$ et si $\frac{M_{2k_0}^0}{M_2^0}$ est suffisamment petit, alors $\frac{M_{2k_0}}{M_2}$ a une décroissance contrôlée par $\frac{M_{2k_0}^0}{M_2^0}$ et avec un taux presque $(\delta_0 - \frac{1}{2^{2k_0-1}})$.*

De plus, dans ce cas, il existe $C_{k_0}(\frac{M_{2k_0}^0}{M_2^0})$, convergeant vers 1 lorsque $\frac{M_{2k_0}^0}{M_2^0} \rightarrow 0$, et tel que

$$M_2(t) \geq C_{k_0} \left(\frac{M_{2k_0}^0}{M_2^0} \right) M_2^0 e^{-\frac{t}{2}}.$$

Par conséquent, pour tout $k \geq 2$ (avec $k \leq k_0$), $\frac{M_{2k}}{M_2}$ a une décroissance contrôlée par $\frac{M_{2k_0}^0}{M_2^0}$ et avec un taux presque $\min(\frac{1}{2} - \frac{1}{2^{2k-1}}, \delta_0 - \frac{1}{2^{2k_0-1}})$.

Cette proposition se démontre également en utilisant la Proposition 7.3, mais on a besoin de raffiner un lemme d'inégalités différentielles (linéaires) que l'on utilisait de nombreuses fois, en le remplaçant par un lemme non-linéaire, et c'est ici que la condition « $\frac{M_{2k_0}}{M_2}$ suffisamment petit » apparaît.

Cette condition n'est pas forcément satisfaite pour toute solution suffisamment proche en distance de Wasserstein d'une masse de Dirac. Mais c'est le cas si on se donne un profil arbitraire et qu'on le change d'échelle autour de \bar{x}_0 par un facteur ε petit : tout moment M_{2k} est alors multiplié par un facteur ε^{2k} . Au prix d'une notion de stabilité un peu plus faible, cela permet quand même d'obtenir une convergence vers un profil auto-similaire, comme on va le voir dans la sous-section suivante.

7.2.3 Convergence en temps long vers un profil auto-similaire

On s'intéresse maintenant au comportement en échelle auto-similaire, en posant

$$\gamma(t, x) = \sqrt{M_2} g(t, \sqrt{M_2} x + \bar{x}).$$

7.2. Le modèle infinitésimal de Fisher sans variabilité

On a donc une probabilité centrée, avec une variance 1. Et on travaille donc avec la distance de Fourier $d_s(\gamma_1, \gamma_2) = \sup_{\xi \neq 0} \frac{|\widehat{\gamma}_1(\xi) - \widehat{\gamma}_2(\xi)|}{|\xi|^s}$, pour $s \in]2, 3[$.

Après manipulations, on obtient l'équation suivante pour γ :

$$\partial_t \gamma = Q(\gamma) + R(t, \gamma).$$

où, en posant $\varepsilon(t, x) = m(\sqrt{M_2}x + \bar{x}(t)) - m(\bar{x}(t))$ (qui est petit si M_2 l'est), on a noté

$$\begin{aligned} Q(\gamma) &= B_0[\gamma] - \gamma - \frac{1}{4}(\gamma + x\partial_x \gamma), \\ R(t, \gamma) &= (S_0 - \varepsilon)\gamma + \frac{1}{2}\left(S_0 - \frac{S_2}{M_2}\right)(\gamma + x\partial_x \gamma) - \frac{S_1}{\sqrt{M_2}}\partial_x \gamma. \end{aligned}$$

Le terme de reste R vaut 0 lorsque m est constant, c'est ce terme qu'on espère contrôler. On sait que le terme Q donne de la contraction pour la distance d_s lorsque $s \in]2, 3[$. Comme on connaît a priori le profil autosimilaire γ_∞ (c'est l'unique solution de $Q(\gamma) = 0$), on a simplement besoin d'estimer la distance entre γ et γ_∞ , et pour faire marcher l'estimation de type Grönwall, on a simplement besoin de contrôler $\sup_{\xi \neq 0} \frac{|\widehat{R(t, \gamma)}(\xi)|}{|\xi|^s}$:

Proposition 7.5. *On pose $\gamma_\infty(x) = \frac{2}{\pi(1+x^2)^2}$, donné également par $\widehat{\gamma}_\infty(\xi) = (1 + |\xi|)e^{-|\xi|}$, qui vérifie $Q(\gamma_\infty) = 0$. On prend $s \in]2, 3[$ et on pose $\lambda_s = 1 - \frac{s}{4} - 2^{1-s}$ (on a $\lambda_s > 0$ par stricte concavité). On suppose qu'il existe $K > 0$ and $c > 0$ tels que $|\widehat{R(t, \gamma)}(\xi)| \leq |\xi|^s K e^{-ct}$ pour tout $\xi \in \mathbb{R}$ et tout $t \geq 0$ (on suppose sans perte de généralité que $c < \lambda_s$).*

Alors pour tout temps, on a

$$d_s(\gamma, \gamma_\infty)(t) \leq d_s(\gamma_0, \gamma_\infty)e^{-\lambda_s t} + \widetilde{K}e^{-ct},$$

avec $\widetilde{K} = \left(\frac{1}{\lambda_s - c + 2^{1-s}} + \frac{2^{1-s}}{(\lambda_s - c + 2^{1-s})(\lambda_s - c)}\right)K$.

Démonstration. On écrit tout en Fourier, en une formulation de type Duhamel (et en repassant avec les variables « presque » originales, on remet $e^{-\frac{t}{4}}$ à la place de $\sqrt{M_2}$) :

$$e^t \widehat{\gamma}(t, e^{-\frac{t}{4}}\xi) = \widehat{\gamma}_0 + \int_0^t e^\tau \widehat{\gamma}(\tau, e^{-\frac{\tau}{4}}\frac{\xi}{2})^2 d\tau + \int_0^t e^\tau R(\tau, \widehat{\gamma}(\tau, \cdot))(e^{-\frac{\tau}{4}}\xi) d\tau.$$

En l'écrivant pour le profil autosimilaire (avec $R = 0$), on a aussi

$$e^t \widehat{\gamma}_\infty(e^{-\frac{t}{4}}\xi) = \widehat{\gamma}_\infty + \int_0^t e^\tau \widehat{\gamma}_\infty(e^{-\frac{\tau}{4}}\frac{\xi}{2})^2 d\tau.$$

Après manipulations, on arrive à l'estimation de Grönwall suivante (ne faisant plus apparaître les variables originales ici à l'intérieur de γ , puisqu'on a pris un supremum sur les ξ) :

$$e^{(1-\frac{s}{4})t} d_s(\gamma, \gamma_\infty)(t) \leq d_s(\gamma_0, \gamma_\infty) + 2^{1-s} \int_0^t e^{(1-\frac{s}{4})\tau} d_s(\gamma, \gamma_\infty)(\tau) d\tau + K' e^{(1-\frac{s}{4}-c)t}.$$

avec $K' = \frac{K}{1-\frac{s}{4}-c} = \frac{K}{\lambda_s - c + 2^{1-s}}$. La résolution de cette inégalité de Grönwall donne bien le résultat attendu. \square

Il reste donc à obtenir une estimation de $\widehat{R}(t, \gamma)$. En écrivant les dérivées successives (par rapport à ξ) en 0, et en remarquant que $\widehat{R}(t, \gamma)(0) = \widehat{R}(t, \gamma)'(0) = \widehat{R}(t, \gamma)''(0)$, on obtient des estimations suivantes

$$\begin{aligned} |\widehat{R}\gamma(\xi)| &\leq (\tfrac{1}{2}\|\widehat{\varepsilon}\gamma\|_\infty + \|\widehat{\varepsilon}\gamma'\|_\infty + \|\widehat{\varepsilon}\gamma''\|_\infty)|\xi|^2, \\ |\widehat{R}\gamma(\xi)| &\leq (\tfrac{1}{12}(\|\widehat{\varepsilon}\gamma\|_\infty + 3\|\widehat{\varepsilon}\gamma''\|_\infty)\|\widehat{\gamma}'''\|_\infty + \tfrac{1}{2}\|\widehat{\varepsilon}\gamma'\|_\infty + \tfrac{1}{6}\|\widehat{\varepsilon}\gamma'''\|_\infty)|\xi|^3, \end{aligned}$$

Et on montre qu'on peut borner les normes infinies par des expressions en fonction des différents moments :

$$\begin{aligned} |\widehat{R}\gamma(\xi)| &\leq \tfrac{5}{2} \left(\alpha(\bar{x}) \sqrt{\frac{M_4}{M_2}} + \beta \frac{M_4}{M_2} \right) |\xi|^2, \\ |\widehat{R}\gamma(\xi)| &\leq \left(\alpha(\bar{x}) \frac{M_4}{M_2^{\frac{3}{2}}} + \beta \frac{\sqrt{M_4 M_6}}{M_2^{\frac{3}{2}}} \right) |\xi|^3. \end{aligned}$$

On peut alors y intégrer les résultats de la sous-section précédente : si $\frac{M_{2k_0}}{M_2}$ est suffisamment petit initialement pour k_0 assez grand, on a pour tout $\delta < \min(\frac{3}{8}, \delta_0 - \frac{1}{2^{2k_0-1}})$, l'existence de constantes C_2 et C_3 telles que

$$\begin{aligned} |\widehat{R}\gamma(\xi)| &\leq C_2 e^{-\frac{\delta}{2}t} |\xi|^2 \\ |\widehat{R}\gamma(\xi)| &\leq C_3 e^{(\frac{1}{4}-\delta)t} |\xi|^3. \end{aligned}$$

Et donc pour $s \in]2, 3[$ en posant $c = (3-s)\frac{\delta}{2} - (s-2)(\frac{1}{4} - \delta)$ on obtient

$$|\widehat{R}\gamma(\xi)| = |\widehat{R}\gamma(\xi)|^{(3-s)+(s-2)} \leq C_2^{3-s} C_3^{s-2} e^{-ct} |\xi|^s.$$

Donc pour $s < 2 + \frac{\delta}{\frac{1}{2}-\delta}$, on a bien $c > 0$ et la Proposition 7.5 s'applique. On a donc bien convergence vers le profil auto-similaire, à taux exponentiel. Lorsque $\delta \geq \frac{1}{4}$, on a cette convergence pour toutes les distances d_s avec $s \in]2, 3[$, alors que si $\delta < \frac{1}{4}$, on l'a seulement pour $s \in]2, 2 + \frac{\delta}{\frac{1}{2}-\delta}[$ (donc de moins en moins de s si δ devient petit, ce qui revient à dire pour la distance de Fourier, que l'on contrôle de moins en moins de moments).

Perspectives Lorsque nous avons écrit l'article [F7] sur les modèles de point-milieu sur la sphère, nous n'avions pas exploré la convergence vers un profil auto-similaire. Au vu de l'étude sur le modèle infinitésimal sans variabilité, il apparaît naturel d'essayer d'appliquer ces techniques de distances de Fourier même dans des cas où le centre de masse n'est pas conservé, et on s'attend à obtenir les mêmes types de profils autosimilaires à queue lourde. Une question toujours ouverte à ma connaissance pour le modèle de point-milieu sur le cercle consiste à comprendre globalement le comportement dans toutes les situations. En particulier on observe dans toutes les simulations numériques une première phase d'homogénéisation où toutes les irrégularités sont gommées pour obtenir une distribution unimodale (pouvant être très proche de l'uniforme si la condition initiale est proche d'être symétrique), puis ce mode est amplifié et on a alors convergence vers un Dirac. Peut-on montrer que dans tous les cas on converge soit vers un Dirac soit vers la distribution uniforme? Ce n'est pas très clair étant donné que le problème n'est pas forcément bien posé, mais on peut se poser la question pour un modèle légèrement bruité (avec l'intensité du bruit décroissant linéairement avec la distance des particules interagissant). En particulier, avec un tel

bruit, on peut imaginer que l'équilibre uniforme soit stable, mais à ma connaissance ce sont des directions qui n'ont pas encore été explorées.

La question se pose également de la dérivation de modèles fluides pour ces modèles d'alignement sans bruit, lorsque l'on considère une version inhomogène en espace, comme décrit dans les perspectives du chapitre 6.

Pour ce qui est du modèle de populations sexuées, la question naturelle est d'essayer de comprendre ce qui se passe au voisinage de masses de Dirac situées dans des régions de mortalité strictement supérieure à la mortalité minimale plus un demi. Voit-on émerger des masses de Dirac dans la zone de mortalité faible? En pratique, le comportement générique pour des taux de mortalité simples comme $|x|$ ou x^2 reste une question peu explorée pour ce modèle sans variabilité, même numériquement.

Chapitre 8

Modèles de retournement de bactéries

Contenu

8.1 Un modèle abstrait de retournement de particules	99
--	----

Le point de départ de ce chapitre est le modèle cinétique d’alignement-retournement de myxobactéries proposé dans [HKMS21]. La motivation biologique est l’étude du phénomène d’ondulation [IMW⁺01] dans ces colonies de bactéries de forme allongée. Le modèle est un modèle cinétique décrivant des particules (dans \mathbb{R}^2) dont la vitesse est constante (sur \mathbb{S}^1) et qui interagissent par paires lors de collisions (les particules sont modélisées comme des segments de longueur constante ne se recoupant pas). Lorsque les deux particules ont des vitesses dont l’angle est inférieur à $\frac{\pi}{2}$, elles s’alignent comme dans le modèle de point-milieu présenté au chapitre 7. Et lorsque l’angle est supérieur à $\frac{\pi}{2}$, elles effectuent un retournement : chaque particule garde la même orientation mais change de sens de déplacement. Une limite de type Boltzmann–Grad permet d’obtenir un modèle cinétique collisionnel. Dans [HKMS21], la version spatialement homogène de ce modèle est étudiée, et la convergence vers l’équilibre (consistant en deux masses de Dirac diamétralement opposées, possiblement de masses différentes) est obtenue pour certaines conditions initiales (avec des supports dans deux quarts de cercles opposés). La compréhension du mélange des opérateurs d’alignement et de retournement pour une condition initiale quelconque représente un défi intéressant : on pourrait s’attendre à une convergence telle que celle pour le modèle de point-milieu, mais un phénomène de type hypocoercivité apparaît : l’opérateur d’alignement aurait tendance à concentrer exponentiellement vite autour de deux masses de Dirac, sans qu’elles soient parfaitement diamétralement opposées. C’est l’opérateur de retournement (jouant le même rôle que la partie transport dans les cas classiques d’hypocoercivité) qui impose alors cette condition en temps long.

Dans ce chapitre, on décrit les résultats obtenus dans [F18], en collaboration avec Laura Kanzler et Christian Schmeiser sur un modèle où on étudie le retournement seul, dans un cadre et pour des conditions initiales génériques.

8.1 Un modèle abstrait de retournement de particules

On considère un espace métrique compact \mathcal{S} représentant les configurations x des particules (penser au cercle unité, représentant les vitesses des myxobactéries, mais l’objectif initial était de pouvoir l’étendre à la sphère pour des bactéries allongées en dimension 3). On travaillera avec des solutions mesure (pour la tribu Borélienne de \mathcal{S}).

On se donne alors une involution (mesurable) $x \mapsto x^\downarrow$ représentant le retournement (par

exemple $\varphi \mapsto \varphi + \pi$ dans $\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$ comme dans [HKMS21], ou $x \mapsto -x$ sur la sphère), et pour un ensemble $A \in \mathcal{S}$ on note $A^\downarrow = \{x^\downarrow, x \in A\}$ son *retourné*. De même, pour une mesure f sur \mathcal{S} , on note f^\downarrow sa *retournée* (la mesure image par l'involution).

On se donne enfin un noyau de collision $b : \mathcal{S} \times \mathcal{S}_+$ représentant le taux $b(x, x_*)$ selon lequel deux particules en x et x_* effectuent un retournement pour se retrouver en x^\downarrow et x_*^\downarrow . On considère les particules échangeables, donc on impose $b(x, x_*) = b(x_*, x)$, et on veut que la dynamique soit invariante par l'involution (vu du point de vue des particules, elles n'ont pas un état « standard » et un état « retourné » différents) donc on impose également que $b(x, x_*) = b(x^\downarrow, x_*^\downarrow)$. Pour le modèle de myxobactéries [HKMS21], cela revient à prendre $b(\varphi, \varphi_*) = 0$ lorsque $d(\varphi, \varphi_*) < \frac{\pi}{2}$, et $b(\varphi, \varphi_*) = 1$ (appelées « myxos Maxwelliennes ») ou $|\sin(\varphi - \varphi_*)|$ (correspondant à l'interaction apparaissant dans la limite de Boltzmann–Grad pour des segments rigides, ce qui est relié au potentiel de Onsager pour polymères en forme de bâtonnets) lorsque $d(\varphi, \varphi_*) > \frac{\pi}{2}$. Sur la sphère, l'objectif initial était de pouvoir traiter le cas où $b(x, x_*) = 0$ lorsque l'angle entre x et $-x_*$ est plus grand qu'un certain angle α (pas de collision si les particules ne sont pas déjà un peu opposées), et $b(x, x_*) > 0$ si l'angle est plus petit que α . On remarque que dans ces cas on a toujours $b(x, x^\downarrow) > 0$, mais on ne fera pas a priori cette hypothèse. Lorsqu'elle est vérifiée, on verra que la description du comportement en temps long est simplifiée, mais garde la même structure.

L'équation de type Boltzmann que l'on étudie est donc la suivante, pour une probabilité f (en utilisant l'abus de notation $f(t, x)dx$ même si elle n'a pas de densité) décrivant la répartition des particules sur \mathcal{S} en fonction du temps :

$$\partial_t f = \int_{\mathcal{S}} b(x, x_*) (f^\downarrow f_*^\downarrow - f f_*) dx_*,$$

où, comme il est d'usage en théorie cinétique, on a noté $f_* = f(x_*)$, et les densités pré-collisionnelles $f^\downarrow = f(x^\downarrow)$ et $f_*^\downarrow = f(x_*^\downarrow)$.

Si on note f_I la condition initiale, on obtient que pour toute solution f , la mesure $\frac{1}{2}(f + f^\downarrow)$ est constante au cours du temps, égale à $\mu = \frac{1}{2}(f_I + f_I^\downarrow)$. Et comme l'équation conserve la masse, quitte à effectuer un changement d'échelle de temps, on peut toujours considérer que f_I est une mesure de probabilité. On a d'abord que le problème est bien posé au sens des mesures (en fait on peut le ramener à un problème dans $L^\infty(\mu)$ pour h , la dérivée de Radon–Nikodym de f par rapport à μ).

Théorème 8.1. *Pour f_I une mesure de probabilité sur \mathcal{S} , on pose $\mu = \frac{1}{2}(f_I + f_I^\downarrow)$, et on suppose que le noyau de collision $b \geq 0$ est mesurable et borné sur $\mathcal{S} \times \mathcal{S}$.*

Alors il existe une unique solution mesure f sur $[0, \infty)$ avec condition initiale f_I , au sens où pour tout borélien $A \subset \mathcal{S}$, l'intégrale $\int_A df(t)$ est continue en temps avec valeur initiale $\int_A df_I$, et différentiable sur $]0, +\infty[$, satisfaisant

$$\frac{d}{dt} \int_A df = \iint_{A^\downarrow \times \mathcal{S}} b(x, x_*) df df_* - \iint_{A \times \mathcal{S}} b(x, x_*) df df_* \quad \text{sur }]0, +\infty[.$$

Cette solution s'écrit sous la forme $f = (1 + h)\mu$, où $h \in C([0, \infty), L^\infty(\mu))$ est solution de

$$\partial_t h = -2 \int_{\mathcal{S}} b(x, x_*) (h + h_*) d\mu(x_*).$$

On a de plus $-1 \leq h \leq 1$ sur $\mathcal{S} \times [0, \infty)$.

8.1. Un modèle abstrait de retournement de particules

Si on n'impose rien de plus sur b , la solution n'est pas nécessairement continue par rapport à la condition initiale pour la convergence faible (par exemple en distance de Wasserstein), mais on peut montrer que c'est le cas si b est Lipschitz.

La fonction h , vue comme la composante antisymétrique (par rapport à μ) de la densité f , est la quantité dont on veut comprendre le comportement en temps long. Par exemple, sa norme L^2 , donnée par $\mathcal{H}[f] = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{S}} h^2 d\mu = \frac{1}{4} \iint_{\mathcal{S} \times \mathcal{S}} (h - h_*)^2 d\mu d\mu_*$ (c'est la variance de la partie antisymétrique de f) est décroissante en temps :

$$\frac{d}{dt} \mathcal{H}[f] = - \iint_{\mathcal{S} \times \mathcal{S}} b(x, x_*) (h + h_*)^2 d\mu d\mu_* =: -\mathcal{D}[f].$$

On voit alors qu'à l'équilibre, deux particules en x et x_* qui interagissent ($b(x, x_*) > 0$, on dit que x et x_* sont des partenaires de collision) doivent avoir une valeur de h opposée, et donc si deux particules ont un partenaire de collision commun, la valeur de h est la même. On considère alors le support \mathcal{K} de μ vu comme un graphe Γ , avec $x \in \mathcal{K}$ et $y \in \mathcal{K}$ adjacents si et seulement s'ils ont un partenaire de collision commun $x_* \in \mathcal{K}$. Pour une partie $\mathcal{T} \subset \mathcal{K}$, on note \mathcal{T}_* l'ensemble des partenaires de collision d'éléments de \mathcal{T} . Alors si on regarde les composantes connexes \mathcal{T} de Γ , elles sont soit constituées de points isolés (qui n'ont donc aucun partenaire de collision, $\mathcal{T}_* = \emptyset$), sur lesquels f est constante en temps, soit on a $\mathcal{T}_* \neq \emptyset$ et dans ce cas les parties \mathcal{T} , \mathcal{T}^\downarrow , \mathcal{T}_* , et $(\mathcal{T}_*)^\downarrow$ sont des composantes connexes de Γ qui sont ouvertes dans \mathcal{K} , vérifiant $(\mathcal{T}_*)_* = \mathcal{T}$ et $\mathcal{T}_*^\downarrow := (\mathcal{T}_*)^\downarrow = (\mathcal{T}^\downarrow)_*$; de plus, en notant $\mathcal{A} := \mathcal{T} \cup \mathcal{T}^\downarrow \cup \mathcal{T}_* \cup \mathcal{T}_*^\downarrow$, alors $f|_{\mathcal{A}}$ est une solution de la même équation de retournement sur \mathcal{A} . On peut donc se restreindre à l'étude sur un tel \mathcal{A} , composé de une, deux ou quatre composantes connexes selon si certaines sont confondues ou pas. On peut alors décrire les états stationnaires :

Proposition 8.1. *Si \mathcal{T} est une composante connexe du graphe Γ , et si \mathcal{T}_* est non vide, on pose $\mathcal{A} := \mathcal{T} \cup \mathcal{T}^\downarrow \cup \mathcal{T}_* \cup \mathcal{T}_*^\downarrow$. Alors*

- (i) *La masse de chacune des quatre parties composant \mathcal{A} est strictement positive, en particulier $\rho := \int_{\mathcal{T}} d\mu > 0$ et $\rho_* := \int_{\mathcal{T}_*} d\mu > 0$. Et la moyenne $\langle h \rangle_{\mathcal{T}} = \frac{1}{\rho} \int_{\mathcal{T}} h d\mu$ vérifie que la quantité*

$$\eta_{\mathcal{T}} := \frac{\rho \langle h \rangle_{\mathcal{T}} - \rho_* \langle h \rangle_{\mathcal{T}_*}}{\rho + \rho_*} = \frac{\int_{\mathcal{T} \cup \mathcal{T}_*^\downarrow} h d\mu}{\int_{\mathcal{T} \cup \mathcal{T}_*^\downarrow} d\mu} = \frac{\int_{\mathcal{T} \cup \mathcal{T}_*^\downarrow} df_I}{\int_{\mathcal{T} \cup \mathcal{T}_*^\downarrow} d\mu} - 1 \in [-1, 1]$$

est indépendante de t .

- (ii) *Les conditions suivantes sont équivalentes :*

- $f|_{\mathcal{A}}$ est un état stationnaire de la dynamique de retournement sur \mathcal{A} ,
- $\mathcal{D}_{\mathcal{T}}[f] := \iint_{\mathcal{T} \times \mathcal{T}_*} b(x, x_*) (h + h_*)^2 d\mu d\mu_* = 0$,
- $h = \eta_{\mathcal{T}}$ sur $\mathcal{T} \cup \mathcal{T}_*^\downarrow$ et $h = -\eta_{\mathcal{T}}$ sur $\mathcal{T}_* \cup \mathcal{T}^\downarrow$, μ -presque partout.

D'après cette proposition, on s'attend donc à ce qu'en temps long, f converge vers l'équilibre suivant :

$$f_\infty := (1 + h_\infty)\mu := \begin{cases} f_I & \text{sur tout } \mathcal{T} \text{ avec } \mathcal{T}_* \text{ vide,} \\ (1 + \eta_{\mathcal{T}})\mu & \text{sur tout } \mathcal{T} \text{ avec } \mathcal{T}_* \text{ non-vide,} \\ 0 & \text{sur } \mathcal{S} \setminus \mathcal{K}, \end{cases} \quad (8.1)$$

où

$$\eta_{\mathcal{T}} = \frac{\int_{\mathcal{T} \cup \mathcal{T}_*^\downarrow} df_I - \int_{\mathcal{T}_* \cup \mathcal{T}^\downarrow} df_I}{\int_{\mathcal{T} \cup \mathcal{T}_*^\downarrow} df_I + \int_{\mathcal{T}_* \cup \mathcal{T}^\downarrow} df_I}, \quad \mu = \frac{f_I + f_I^\downarrow}{2}.$$

Remarquons que dans certains cas, par exemple si $\mathcal{T} = \mathcal{T}_*$ ou $\mathcal{T} = \mathcal{T}^\downarrow$, on obtient automatiquement $\eta_{\mathcal{T}} = 0$.

On restreint l'analyse à un ensemble de la forme $\mathcal{A} = \mathcal{T} \cup \mathcal{T}^\downarrow \cup \mathcal{T}_* \cup \mathcal{T}_*^\downarrow$ comme précédemment, pour lequel on considère l'entropie relative suivante

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathcal{T}}[f] &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{T}} (h - \eta_{\mathcal{T}})^2 d\mu + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{T}_*} (h + \eta_{\mathcal{T}})^2 d\mu \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{T}} h^2 d\mu + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{T}_*} h^2 d\mu - \frac{1}{2} (\rho + \rho_*) \eta_{\mathcal{T}}^2, \end{aligned}$$

avec ρ et ρ_* comme dans la Proposition 8.1. Cette quantité contrôle la distance $L^2(\mu)$ entre $h|_{\mathcal{A}}$ et l'état stationnaire associé, et sa dérivée donne de nouveau

$$\frac{d}{dt} \mathcal{H}_{\mathcal{T}}[f] = -2 \iint_{\mathcal{T} \times \mathcal{T}_*} b(h + h_*)^2 d\mu d\mu_* =: -\mathcal{D}_{\mathcal{T}}[f].$$

L'objectif est alors de montrer que cette dissipation $\mathcal{D}_{\mathcal{T}}[f]$ contrôle l'entropie $\mathcal{H}_{\mathcal{T}}[f]$ pour obtenir la convergence exponentielle. C'est le cas lorsque b est minorée par une constante strictement positive sur $\mathcal{T} \times \mathcal{T}_*$, grâce à l'estimation suivante :

$$2 \min(\rho, \rho_*) \mathcal{H}_{\mathcal{T}}[f] \leq \iint_{\mathcal{T} \times \mathcal{T}_*} (h + h_*)^2 d\mu d\mu_*.$$

Il se trouve que cette condition de minoration de b peut être supprimée lorsque \mathcal{T} et \mathcal{T}_* sont compacts, au moyen d'une amélioration de notion de connectivité sur \mathcal{T} . On n'entre pas dans les détails ici, mais l'idée est de recouvrir \mathcal{T} et \mathcal{T}_* par des « cellules » qui forment un graphe biparti, une cellule T_i de \mathcal{T} étant adjacente à une cellule $T_{*,j}$ de \mathcal{T}_* si $b \geq \beta > 0$ sur $T_i \times T_{*,j}$. Lorsque \mathcal{T} et \mathcal{T}_* sont compacts, on peut trouver un tel $\beta > 0$ et un recouvrement par un nombre fini de telles cellules. Lorsque b est semi-continue inférieurement et bornée, si tout élément de \mathcal{K} a un partenaire de collision (qu'il n'y a donc pas de point isolé), alors toutes les composantes connexes sont compactes et en nombre fini, et on obtient donc le théorème suivant.

Théorème 8.2. *Soit f_I une mesure de probabilité sur \mathcal{S} et $\mu = \frac{1}{2}(f_I + f_I^\downarrow)$, de support \mathcal{K} . Supposons que le noyau de collision b est semi-continu inférieurement, et que $\mathcal{K} = \mathcal{K}_*$.*

Alors le graphe Γ a un nombre fini de composantes connexes, toutes compactes, et la solution $f(t)$ de la dynamique de retournement donnée par le Théorème 8.1 converge exponentiellement en distance de variation totale vers f_∞ donné par (8.1) lorsque $t \rightarrow \infty$: il existe $C, \lambda > 0$, tels que

$$\sup_{A \in \sigma(\mathcal{S})} \left| \int_A df(t) - \int_A df_\infty \right| \leq C e^{-\lambda t}, \quad t \geq 0.$$

Lorsque chaque particule interagit avec sa « retournée », c'est à dire que $b(x, x^\downarrow) > 0$, comme c'est le cas pour les modèles de myxobactéries, on a forcément $\mathcal{K} = \mathcal{K}_*$ puisque \mathcal{K} est symétrique, et donc le théorème s'applique. D'autre part on a alors toujours $\mathcal{T}_* = \mathcal{T}^\downarrow$, donc les ensembles de la forme \mathcal{A} ne peuvent prendre que deux formes : soit il s'agit d'une seule composante connexe avec $\mathcal{T} = \mathcal{T}_* = \mathcal{T}^\downarrow (= \mathcal{T}_*^\downarrow)$ (et dans ce cas on a $\eta_{\mathcal{T}} = 0$), soit de deux composantes connexes si $\mathcal{T} (= \mathcal{T}_*^\downarrow) \neq \mathcal{T}_* = \mathcal{T}^\downarrow$ (et $\eta_{\mathcal{T}}$ peut être arbitraire). Dans ce cadre on peut par exemple décrire tous les cas possible sur le modèle initial du cercle. Dans l'article [F18] on inclut également des simulations numériques pour illustrer les différents cas et la convergence vers l'équilibre. On peut montrer que le taux de convergence ne dépend pas seulement de b et du support \mathcal{K} , mais bien de toute la mesure $\mu = \frac{1}{2}(f_I + f_I^\downarrow)$ (il ne dépend pas par contre de la valeur de h_I), en construisant des conditions initiales ayant le même support mais dont le taux de convergence associé dégénère lorsqu'un petit paramètre tend vers 0.

Perspectives L'objectif est d'utiliser ces résultats pour essayer de comprendre le comportement du modèle où l'alignement est présent. Le problème est assez ouvert, et nous avons pour l'instant peu de pistes concrètes pour avancer dans cette direction. On peut également conjecturer que la solution converge en temps long vers un profil auto-similaire, comme dans le modèle de point-milieu sur \mathbb{R} . La construction d'une solution symétrique valide pour tout $t \in \mathbb{R}$, comme pour un profil auto-similaire, peut être une première étape.

Bibliographie

- [ALV09] Maximino Aldana, Hernán Larralde, and Bertha Vásquez. On the emergence of collective order in swarming systems: A recent debate. *Int. J. Mod. Phys. B*, 23(18):3459–3483, 2009.
- [AMPD17] Aylin Aydoğdu, Sean T. McQuade, and Nastassia Pouradier Duteil. Opinion dynamics on a general compact Riemannian manifold. *Netw. Heterog. Media*, 12(3):489–523, 2017.
- [BCC12] François Bolley, José A. Cañizo, and José A. Carrillo. Mean-field limit for the stochastic Vicsek model. *Appl. Math. Lett.*, 3(25):339–343, 2012.
- [BCCD16] Alethea B. T. Barbaro, José A. Cañizo, José A. Carrillo, and Pierre Degond. Phase transitions in a kinetic flocking model of cucker–smale type. *Multiscale Mod. Simul.*, 14(3):1063–1088, 2016.
- [BCG00] Alexander V. Bobylev, José A. Carrillo, and Irene M. Gamba. On some properties of kinetic and hydrodynamic equations for inelastic interactions. *J. Statist. Phys.*, 98(3-4):743–773, 2000.
- [BCM15] Dario Benedetto, Emanuele Caglioti, and Umberto Montemagno. On the complete phase synchronization for the Kuramoto model in the mean-field limit. *Commun. Math. Sci.*, 13(7):1775–1786, 2015.
- [BDG06] Eric Bertin, Michel Droz, and Guillaume Grégoire. Boltzmann and hydrodynamic description for self-propelled particles. *Phys. Rev. E*, 74:022101, 2006.
- [BDM⁺20] Émeric Bouin, Jean Dolbeault, Stéphane Mischler, Clément Mouhot, and Christian Schmeiser. Hypocoercivity without confinement. *Pure Appl. Anal.*, 2(2):203–232, 2020.
- [BEV17] Nicholas H. Barton, Alison M. Etheridge, and Amandine Véber. The infinitesimal model: definition, derivation, and implications. *Theor. Popul. Biol.*, 118:50–73, 2017.
- [BGL91] Claude Bardos, François Golse, and David Levermore. Fluid dynamic limits of kinetic equations. I. formal derivations. *Journal of statistical physics*, 63(1):323–344, 1991.

Bibliographie

- [BGL93] Claude Bardos, François Golse, and C. David Levermore. Fluid dynamic limits of kinetic equations. II: Convergence proofs for the Boltzmann equation. *Commun. Pure Appl. Math.*, 46(5):667–753, 1993.
- [BGP14] Lorenzo Bertini, Giambattista Giacomin, and Christophe Poquet. Synchronization and random long time dynamics for mean-field plane rotators. *Probab. Theory Related Fields*, 160(3-4):593–653, 2014.
- [BLM11] Federico Bassetti, Lucia Ladelli, and Daniel Matthes. Central limit theorem for a class of one-dimensional kinetic equations. *Probab. Theory Related Fields*, 150(1-2):77–109, 2011.
- [Bol72] Ludwig Boltzmann. Weitere studien über das wärmegleichgewicht unter gasmolekülen. *Wien. Ber.*, 66:275–370, 1872.
- [Bor93] Alberto Borobia. Diagonals of rotation matrices. *Linear Algebra Appl.*, 186:227–233, 1993.
- [BS09] Laurent Boudin and Francesco Salvarani. A kinetic approach to the study of opinion formation. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 43(3):507–522, 2009.
- [BST09] Marzia Bisi, Giampiero Spiga, and Giuseppe Toscani. Kinetic models of conservative economies with wealth redistribution. *Commun. Math. Sci.*, 7(4):901–916, 2009.
- [BT18] Fabrice Baudoin and Camille Tardif. Hypocoercive estimates on foliations and velocity spherical Brownian motion. *Kinet. Relat. Models*, 11(1):1–23, 2018.
- [Bul80] Michael G. Bulmer. *The mathematical theory of quantitative genetics*. Oxford science publications. Clarendon Press, 1980.
- [Caf80] Russel E. Caflisch. The fluid dynamic limit of the nonlinear Boltzmann equation. *Commun. Pure Appl. Math.*, 33:651–666, 1980.
- [CCDW13] Eric Carlen, Robin Chatelin, Pierre Degond, and Bernt Wennberg. Kinetic hierarchy and propagation of chaos in biological swarm models. *Phys. D*, 260:90–111, 2013.
- [CCDW15] Eric Carlen, Maria C. Carvalho, Pierre Degond, and Bernt Wennberg. A Boltzmann model for rod alignment and schooling fish. *Nonlinearity*, 28(6):1783–1803, 2015.
- [CCT09] José A. Carrillo, Stéphane Cordier, and Giuseppe Toscani. Over-populated tails for conservative-in-the-mean inelastic Maxwell models. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 24(1):59–81, 2009.
- [CD22] Louis-Pierre Chaintron and Antoine Diez. Propagation of chaos: a review of models, methods and applications. II: Applications. *Kinet. Relat. Models*, 15(6):1017–1173, 2022.
- [CDHJ21] Li Chen, Esther S. Daus, Alexandra Holzinger, and Ansgar Jüngel. Rigorous derivation of population cross-diffusion systems from moderately interacting particle systems. *J. Nonlinear Sci.*, 31(6):38, 2021. Id/No 94.

- [CDW13] Eric Carlen, Pierre Degond, and Bernt Wennberg. Kinetic limits for pair-interaction driven master equations and biological swarm models. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 23(7):1339–1376, 2013.
- [CGGR08] Hugues Chaté, Francesco Ginelli, Guillaume Grégoire, and Franck Raynaud. Collective motion of self-propelled particles interacting without cohesion. *Phys. Rev. E*, 77(4):046113, 2008.
- [CGP19] Vincent Calvez, Jimmy Garnier, and Florian Patout. Asymptotic analysis of a quantitative genetics model with nonlinear integral operator. *J. Éc. Polytech., Math.*, 6:537–579, 2019.
- [Cha16] Sydney Chapman. The kinetic theory of simple and composite monatomic gases: viscosity, thermal conduction, and diffusion. *Proc. Roy. Soc. London A.*, 93(646):1–20, 1916.
- [Che11] Jiahang Che. A kinetic model on portfolio in finance. *Commun. Math. Sci.*, 9(4):1073–1096, 2011.
- [CIP94] Carlo Cercignani, Reinhard Illner, and Mario Pulvirenti. *The mathematical theory of dilute gases*, volume 106 of *Appl. Math. Sci.* New York, NY: Springer-Verlag, 1994.
- [CJM21] Fei Cao, Pierre-Emmanuel Jabin, and Sebastien Motsch. Entropy dissipation and propagation of chaos for the uniform reshuffling model, 2021. arXiv:2104.01302.
- [CKT04] Peter Constantin, Ioannis G. Kevrekidis, and Edriss S. Titi. Asymptotic states of a Smoluchowski equation. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 174(3):365–384, 2004.
- [CLP15] Marco Caponigro, Anna Chiara Lai, and Benedetto Piccoli. A nonlinear model of opinion formation on the sphere. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 35(9):4241–4268, 2015.
- [CLP21] Vincent Calvez, Thomas Lepoutre, and David Poyato. Ergodicity of the fisher infinitesimal model with quadratic selection, 2021. arXiv:2107.00383.
- [CT07] José Antonio Carrillo and Giuseppe Toscani. Contractive probability metrics and asymptotic behavior of dissipative kinetic equations. *Riv. Mat. Univ. Parma*, 6:75–198, 2007.
- [DDMW15] Pierre Degond, Giacomo Dimarco, Thi Bich Ngoc Mac, and Nan Wang. Macroscopic models of collective motion with repulsion. *Commun. Math. Sci.*, 13(6):1615–1638, 2015.
- [DDN22] Pierre Degond, Antoine Diez, and Mingye Na. Bulk topological states in a new collective dynamics model. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 21(2):1455–1494, 2022.
- [DE99] Masao Doi and Samuel Frederick Edwards. *The Theory of Polymer Dynamics*, volume 73 of *International Series of Monographs on Physics*. Oxford University Press, Oxford, 1999.

Bibliographie

- [Deg86] Pierre Degond. Global existence of smooth solutions for the Vlasov-Fokker-Planck equation in 1 and 2 space dimensions. *Ann. scient. Éc. Norm. Sup. (4)*, 19(4):519–542, 1986.
- [Dek22] Léonard Dekens. Evolutionary dynamics of complex traits in sexual populations in a heterogeneous environment: how normal? *J. Math. Biol.*, 84(3):61, 2022. Id/No 15.
- [DFGV18] Helge Dietert, Bastien Fernandez, and David Gérard-Varet. Landau damping to partially locked states in the Kuramoto model. *Commun. Pure Appl. Math.*, 71(5):953–993, 2018.
- [Die20] Antoine Diez. Propagation of chaos and moderate interaction for a piecewise deterministic system of geometrically enriched particles. *Electron. J. Probab.*, 25:Paper No. 90, 38, 2020.
- [Die21] Antoine Diez. SiSyPHE: A python package for the simulation of systems of interacting mean-field particles with high efficiency. *Journal of Open Source Software*, 6(65):3653, 2021.
- [DKRT18] Tam Do, Alexander Kiselev, Lenya Ryzhik, and Changhui Tan. Global regularity for the fractional Euler alignment system. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 228(1):1–37, 2018.
- [DLMP13] Pierre Degond, Jian-Guo Liu, Sebastien Motsch, and Vladislav Panferov. Hydrodynamic models of self-organized dynamics: derivation and existence theory. *Methods Appl. Anal.*, 20(2):89–114, 2013.
- [DM08] Pierre Degond and Sébastien Motsch. Continuum limit of self-driven particles with orientation interaction. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 18:1193–1215, 2008.
- [DM11] Pierre Degond and Sébastien Motsch. A macroscopic model for a system of swarming agents using curvature control. *J. Stat. Phys.*, 143(4):685–714, 2011.
- [DM16] Giacomo Dimarco and Sébastien Motsch. Self-alignment driven by jump processes: Macroscopic limit and numerical investigation. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 26(07):1385–1410, 2016.
- [DMA20] Pierre Degond and Sara Merino-Aceituno. Nematic alignment of self-propelled particles: from particle to macroscopic dynamics. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 30(10):1935–1986, 2020.
- [DMAVY19] Pierre Degond, Sara Merino-Aceituno, Fabien Vergnet, and Hui Yu. Coupled self-organized hydrodynamics and Stokes models for suspensions of active particles. *J. Math. Fluid Mech.*, 21(1):36, 2019. Id/No 6.
- [DN15] Pierre Degond and Laurent Navoret. A multi-layer model for self-propelled disks interacting through alignment and volume exclusion. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 25(13):2439–2475, 2015.
- [Doi81] Masao Doi. Molecular dynamics and rheological properties of concentrated solutions of rodlike polymers in isotropic and liquid crystalline phases. *J. Polym. Sci.: Polym. Phys. Ed.*, 19(2):229–243, 1981.

- [Ens17] David Enskog. Kinetische Theorie der Vorgänge in mäßig verdünnten Gasen. I. Allgemeiner Teil. (Inaugural-Dissertation.). Upsala: Almqvist & Wiksells, IV u. 160 S. 8° (1917)., 1917.
- [EZ06] Weinan E and Pingwen Zhang. A molecular kinetic theory of inhomogeneous liquid crystal flow and the small Deborah number limit. *Methods Appl. Anal.*, 13(2):181–198, 2006.
- [Fis19] Ronald A. Fisher. The correlation between relatives on the supposition of Mendelian inheritance. *Transactions of the Royal Society of Edinburgh*, 52(2):399–433, 1919.
- [FK19] Alessio Figalli and Moon-Jin Kang. A rigorous derivation from the kinetic Cucker-Smale model to the pressureless Euler system with nonlocal alignment. *Anal. PDE*, 12(3):843–866, 2019.
- [FKM18] Alessio Figalli, Moon-Jin Kang, and Javier Morales. Global well-posedness of the spatially homogeneous Kolmogorov-Vicsek model as a gradient flow. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 227(3):869–896, 2018.
- [FS05] Ibrahim Fatkullin and Valeriy Slastikov. Critical points of the Onsager functional on a sphere. *Nonlinearity*, 18:2565–2580, 2005.
- [GGS82] Serge Galam, Yuval Gefen, and Yonathan Shapir. Sociophysics – A new approach of sociological collective behavior I. Mean-behaviour description of a strike. *J. Math. Sociol.*, 9(1):1–13, 1982.
- [GM19] Quentin Griette and Sebastien Motsch. Kinetic equations and self-organized band formations. In *Active particles, Volume 2. Advances in theory, models, and applications*, pages 173–199. Cham: Birkhäuser, 2019.
- [GPP12] Giambattista Giacomini, Khashayar Pakdaman, and Xavier Pellegrin. Global attractor and asymptotic dynamics in the Kuramoto model for coupled noisy phase oscillators. *Nonlinearity*, 25(5):1247–1273, 2012.
- [GR12] Ester Gabetta and Eugenio Regazzini. Complete characterization of convergence to equilibrium for an inelastic Kac model. *J. Stat. Phys.*, 147(5):1007–1019, 2012.
- [Gra49] Harold Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. *Commun. Pure Appl. Math.*, 2:331–407, 1949.
- [Hil12] David Hilbert. Begründung der kinetischen Gastheorie. *Math. Ann.*, 72:562–577, 1912.
- [HKMS21] Sabine Hittmeir, Laura Kanzler, Angelika Manhart, and Christian Schmeiser. Kinetic modelling of colonies of myxobacteria. *Kinet. Relat. Models*, 14(1):1–24, 2021.
- [HKR18] Seung-Yeal Ha, Dongnam Ko, and Sang Woo Ryoo. On the relaxation dynamics of Lohe oscillators on some Riemannian manifolds. *J. Stat. Phys.*, 172(5):1427–1478, 2018.
- [HLFMW09] Peter Hinow, Frank Le Foll, Pierre Magal, and Glenn F. Webb. Analysis of a model for transfer phenomena in biological populations. *SIAM J. Appl. Math.*, 70(1):40–62, 2009.

Bibliographie

- [Hor54] Alfred Horn. Doubly stochastic matrices and the diagonal of a rotation matrix. *Amer. J. Math.*, 76:620–630, 1954.
- [Hör67] Lars Hörmander. Hypoelliptic second order differential equations. *Acta Math.*, 119:147–171, 1967.
- [Hé07] Frédéric Hérau. Short and long time behavior of the Fokker-Planck equation in a confining potential and applications. *J. Funct. Anal.*, 244(1):95–118, 2007.
- [IMW⁺01] Oleg A. Igoshin, Alex Mogilner, Roy D. Welch, Dale Kaiser, and George Oster. Pattern formation and traveling waves in myxobacteria: theory and modeling. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 98(26):14913–14918, 2001.
- [JM98] Benjamin Jourdain and Sylvie Méléard. Propagation of chaos and fluctuations for a moderate model with smooth initial data. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Probab. Stat.*, 34(6):727–766, 1998.
- [JXZ16] Ning Jiang, Linjie Xiong, and Teng-Fei Zhang. Hydrodynamic limits of the kinetic self-organized models. *SIAM J. Math. Anal.*, 48(5):3383–3411, 2016.
- [KD83] Nobu Kuzuu and Masao Doi. Constitutive equation for nematic liquid crystals under weak velocity gradient derived from a molecular kinetic equation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 52(10):3486–3494, 1983.
- [KMT15] Trygve K. Karper, Antoine Mellet, and Konstantina Trivisa. Hydrodynamic limit of the kinetic Cucker-Smale flocking model. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 25(1):131–163, 2015.
- [KS21] Laura Kanzler and Christian Schmeiser. Kinetic model for myxobacteria with directional diffusion, 2021.
- [Lev96] C. David Levermore. Moment closure hierarchies for kinetic theories. *J. Stat. Phys.*, 83(5-6):1021–1065, 1996.
- [Li21] Xingyu Li. Phase transition and asymptotic behavior of flocking Cucker-Smale model. *Multiscale Model. Simul.*, 19(4):1760–1783, 2021.
- [LZZ05] Hailiang Liu, Hui Zhang, and Pingwen Zhang. Axial symmetry and classification of stationary solutions of Doi-Onsager equation on the sphere with Maier-Saupe potential. *Commun. Math. Sci.*, 3(2):201–218, 2005.
- [Max67] James Clerk Maxwell. On the dynamical theory of gases. *Philos. Trans. Roy. Soc. London*, 157:49–88, 1867.
- [Mel10] Antoine Mellet. Fractional diffusion limit for collisional kinetic equations: a moments method. *Indiana Univ. Math. J.*, 59(4):1333–1360, 2010.
- [MM09] Stéphane Mischler and Clément Mouhot. Stability, convergence to self-similarity and elastic limit for the Boltzmann equation for inelastic hard spheres. *Comm. Math. Phys.*, 288(2):431–502, 2009.
- [MN11] Sébastien Motsch and Laurent Navoret. Numerical simulations of a non-conservative hyperbolic system with geometric constraints describing swarming behavior. *Multiscale Mod. Simul.*, 9(3):1253–1275, 2011.

- [MR13] Sepideh Mirrahimi and Gaël Raoul. Dynamics of sexual populations structured by a space variable and a phenotypical trait. *Theor. Popul. Biol.*, 84:87–103, 2013.
- [MS58] Wilhelm Maier and Alfred Saupe. Eine einfache molekulare Theorie des nematischen kristallinflüssigen Zustandes. *Z. Naturforsch.*, 13:564–566, 1958.
- [MT08] Daniel Matthes and Giuseppe Toscani. On steady distributions of kinetic models of conservative economies. *J. Stat. Phys.*, 130(6):1087–1117, 2008.
- [MTG18] Johan Markdahl, Johan Thunberg, and Jorge Gonçalves. Almost global consensus on the n -sphere. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 63(6):1664–1675, June 2018.
- [Nav13] Laurent Navoret. A two-species hydrodynamic model of particles interacting through self-alignment. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 23(6):1067–1098, 2013.
- [Oel85] Karl Oelschläger. A law of large numbers for moderately interacting diffusion processes. *Z. Wahrscheinlichkeitstheor. Verw. Geb.*, 69(2):279–322, 1985.
- [Ons49] Lars Onsager. The effects of shape on the interaction of colloidal particles. *Ann. N. Y. Acad. Sci.*, 51(Molecular Interaction):627–659, 1949.
- [Pat20] Florian Patout. The cauchy problem for the infinitesimal model in the regime of small variance, 2020. arXiv:2001.04682.
- [PGBL⁺12] Jennifer Pasquier, Ludovic Galas, Celine Boulange-Lecomte, Damien Rioult, Florence Bultelle, Pierre Magal, Glenn Webb, and Frank Le Foll. Different modalities of intercellular membrane exchanges mediate cell-to-cell P-glycoprotein transfers in MCF-7 breast cancer cells. *J. Biol. Chem.*, 287(10):7374–7387, 2012.
- [PT04] Ada Pulvirenti and Giuseppe Toscani. Asymptotic properties of the inelastic Kac model. *J. Statist. Phys.*, 114(5-6):1453–1480, 2004.
- [PT06] Lorenzo Pareschi and Giuseppe Toscani. Self-similarity and power-like tails in nonconservative kinetic models. *J. Stat. Phys.*, 124(2-4):747–779, 2006.
- [Rao17] Gaël Raoul. Macroscopic limit from a structured population model to the Kirkpatrick-Barton model, June 2017. arXiv:1706.04094.
- [Rao21] Gaël Raoul. Exponential convergence to a steady-state for a population genetics model with sexual reproduction and selection, 2021. arXiv:2104.06089.
- [Sim96] Barry Simon. *Representations of finite and compact groups*, volume 10 of *Grad. Stud. Math.* Providence, RI: AMS, American Mathematical Society, 1996.
- [TB94] Michael Turelli and Nicholas H. Barton. Genetic and statistical analyses of strong selection on polygenic traits: what, me normal? *Genetics*, 138(3):913–941, 1994.
- [VCBJ⁺95] Tamás Vicsek, András Czirók, Eshel Ben-Jacob, Inon Cohen, and Ofer Shochet. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Phys. Rev. Lett.*, 75(6):1226–1229, 1995.
- [Vil09] Cédric Villani. *Hypocoercivity*, volume 950. Providence, RI: American Mathematical Society (AMS), 2009.

Bibliographie

- [WELZ02] Qi Wang, Weinan E, Chun Liu, and Pingwen Zhang. Kinetic theory for flows of nonhomogeneous rodlike liquid crystalline polymers with a nonlocal intermolecular potential. *Phys. Rev. E*, 65(5):051504, 2002.
- [WH08] Hongyun Wang and Patricia J. Hoffman. A unified view on the rotational symmetry of equilibria of nematic polymers, dipolar nematic polymers and polymers in higher dimensional space. *Commun. Math. Sci.*, 6(4):949–974, 2008.
- [WZZ15] Wei Wang, Pingwen Zhang, and Zhifei Zhang. The small Deborah number limit of the Doi-Onsager equation to the Ericksen-Leslie equation. *Commun. Pure Appl. Math.*, 68(8):1326–1398, 2015.
- [ZFW05] Hong Zhou, Hongyun Wang, M. Gregory Forest, and Qi Wang. A new proof on axisymmetric equilibria of a three-dimensional Smoluchowski equation. *Nonlinearity*, 18:2815–2825, 2005.
- [ZWWF07] Hong Zhou, Hongyun Wang, Qi Wang, and M. Gregory Forest. Characterization of stable kinetic equilibria of rigid, dipolar rod ensembles for coupled dipole–dipole and Maier–Saupe potentials. *Nonlinearity*, 20:277–297, 2007.

RÉSUMÉ

Ce mémoire est une synthèse des travaux de recherche effectués depuis ma thèse. Les contributions concernent des modèles cinétiques de comportements collectifs, obtenus comme limites de systèmes de grand nombre de particules autopropulsées. Une caractéristique commune de ces modèles, due aux contraintes géométriques, est l'absence de quantités conservées. On décrit en particulier de façon fine des phénomènes de transitions de phase pour des modèles d'alignement-diffusion avec contraintes géométriques, telle que l'alignement de corps rigides modélisés par des matrices de rotation. On s'intéresse également à la dérivation et l'étude de modèles macroscopiques à partir de modèles cinétiques sous-jacents (pour l'alignement de corps rigides, et les suspensions de polymères pour des modèles de cristaux liquides). Enfin on s'intéresse à l'étude de modèles d'alignement seul, toujours dans le cadre de contraintes géométriques, pour lesquels on montre la stabilité locale de masses de Dirac.

Mots-clés : Alignement, particules autopropulsées, équations cinétiques, transitions de phase, comportement en temps long, limites hydrodynamiques, contraintes géométriques

ABSTRACT

This memoir is a summary of the research work conducted since my PhD defence. The contributions concern kinetic models of collective behaviour, coming as limits of systems of large number of self-propelled particles. Due to the geometrical constraints, a common feature of these models is the absence of conserved quantities. In particular, we give a fine description of phase transition phenomena for models of alignment-diffusion with geometrical constraints, such as rigid body attitude coordination, modeled through rotation matrices. We are also interested in the derivation and study of macroscopic models from underlying kinetic models (for alignment of rigid bodies, and suspensions of rodlike molecules of polymers in liquid crystal models). Finally we study models of alignment only, still in the context of geometrical constraints, for which we show the local stability of Dirac masses.

Keywords : Alignment, self-propelled particles, kinetic equations, phase transitions, long-time behavior, hydrodynamic limits, geometrical constraints