

Alignement de corps rigides : transition de phase et liens avec les quaternions et les suspensions de polymères en forme de bâtonnets.

Amic Frouvelle – CEREMADE (Université Paris-Dauphine) & LMA
(accueil en délégation)

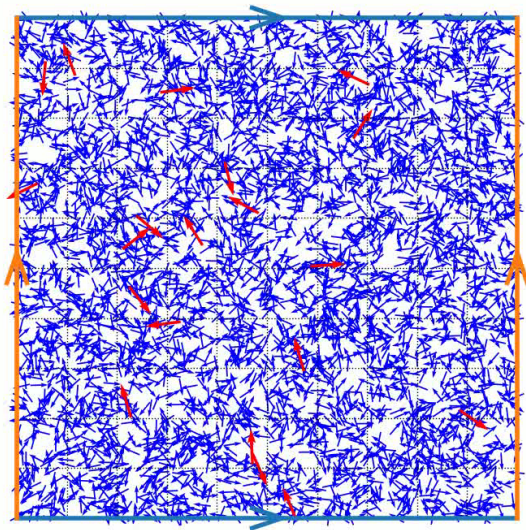
Séminaire EDPA
Poitiers, 10 juin 2021

Basé sur des collaborations avec Pierre Degond (Toulouse), Antoine Diez (Londres), Sara Merino-Aceituno (Vienne), Ariane Trescases (Toulouse) [DFMA17, DFMAT18, DFMAT19, DDFMA20]

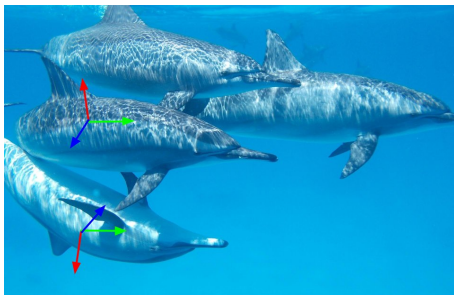


Motivation : « matière active »

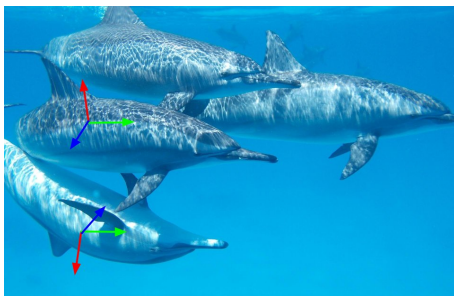
Modèle de Vicsek (1995) : autopropulsion, alignement, bruit angulaire.



Motivation : alignement de corps rigides



Motivation : alignement de corps rigides

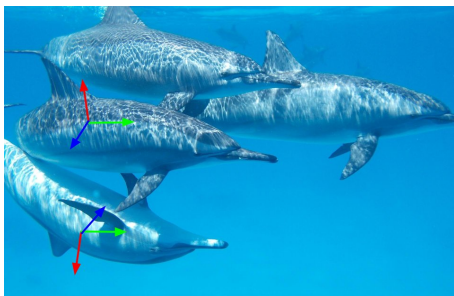


Particules autopropulsées avec alignement de corps rigides [DFMA17]

Positions $X_k \in \mathbb{R}^3$, orientations $A_k \in SO_3(\mathbb{R})$.

$$\begin{cases} dX_k = A_k e_1 dt \\ dA_k = - \sum_{j \sim k} \nu_{j,k} \nabla_A \left(\frac{1}{2} \|A_k - A_j\|^2 \right) dt + 2\sqrt{\tau} P_{T_{A_k}} \circ dB_{t,k} \end{cases}$$

Motivation : alignement de corps rigides



Particules autopropulsées avec alignement de corps rigides [DFMA17]

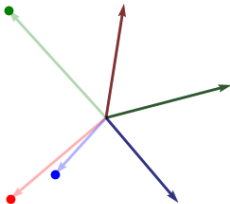
Positions $X_k \in \mathbb{R}^3$, orientations $A_k \in SO_3(\mathbb{R})$.

$$\begin{cases} dX_k = A_k e_1 dt \\ dA_k = - \sum_{j \sim k} \nu_{j,k} \nabla_A (\frac{1}{2} \|A_k - A_j\|^2) dt + 2\sqrt{\tau} P_{T_{A_k}} \circ dB_{t,k} \end{cases}$$

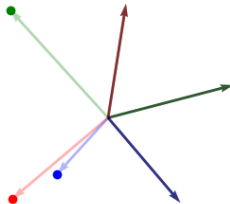
Cadre de cet exposé : modèle spatialement homogène.

Mécanismes individuels : alignement et bruit

$$dA = \rho \nabla(A \cdot A_0) dt + 2 P_{T_A} \circ dB_t, \quad \rho = 1$$

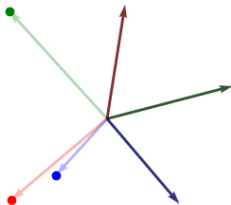


$$dA = \rho \nabla(A \cdot A_0) dt + 2 P_{T_A} \circ dB_t, \quad \rho = 10$$

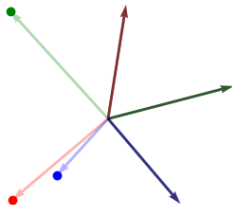


Mécanismes individuels : alignement et bruit

$$dA = \rho \nabla(A \cdot A_0) dt + 2 P_{T_A} \circ dB_t, \quad \rho = 1$$



$$dA = \rho \nabla(A \cdot A_0) dt + 2 P_{T_A} \circ dB_t, \quad \rho = 10$$

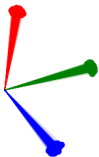


Particules en interaction (champ moyen : force $\frac{\rho}{N}$)

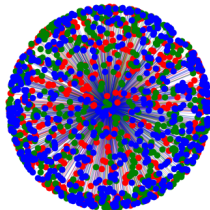
$$\begin{cases} dA_k = \nabla_{A_k}(A_k \cdot J) dt + 2 P_{T_{A_k}} \circ dB_{t,k} \\ J = \rho \langle A \rangle = \frac{\rho}{N} \sum_k A_k \end{cases}$$

Comment mesurer l'alignement ?

$$dA_n = \nabla(A_n \cdot J) dt + 2 P_{T_{A_n}} \circ dB_{t,n}, \quad \rho = 1$$

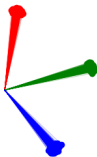


$$dA_n = \nabla(A_n \cdot J) dt + 2 P_{T_{A_n}} \circ dB_{t,n}, \quad \rho = 10$$

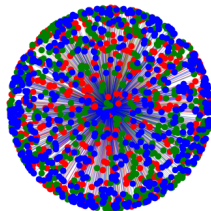


Comment mesurer l'alignement ?

$$dA_n = \nabla(A_n \cdot J) dt + 2 P_{T_{A_n}} \circ dB_{t,n}, \quad \rho = 1$$



$$dA_n = \nabla(A_n \cdot J) dt + 2 P_{T_{A_n}} \circ dB_{t,n}, \quad \rho = 10$$

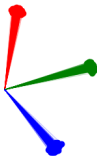


Variance : $\langle \|A\|^2 \rangle - \|\langle A \rangle\|^2 = \frac{3}{2} - \left(\frac{\|J\|}{\rho}\right)^2 \in [0, \frac{3}{2}]$.

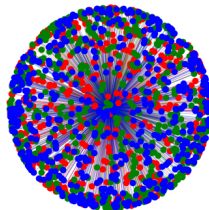
Donc $c = \sqrt{\frac{2}{3} \text{Tr}(\langle A \rangle \langle A \rangle^T)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}\rho} \|J\|$ est un paramètre d'ordre ($c \in [0, 1]$, $c = 1$: concentration, $c = 0$ pour désordre).

Mesurer l'alignement ? $c = \sqrt{\frac{2}{3} \text{Tr}(\langle A \rangle \langle A \rangle^T)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3\rho}} \|J\|$

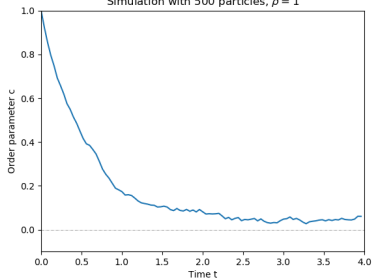
$$dA_n = \nabla(A_n \cdot J) dt + 2 P_{T_{A_n}} \circ dB_{t,n}, \quad \rho = 1$$



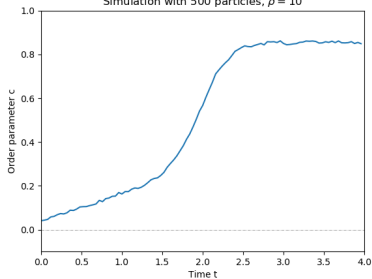
$$dA_n = \nabla(A_n \cdot J) dt + 2 P_{T_{A_n}} \circ dB_{t,n}, \quad \rho = 10$$



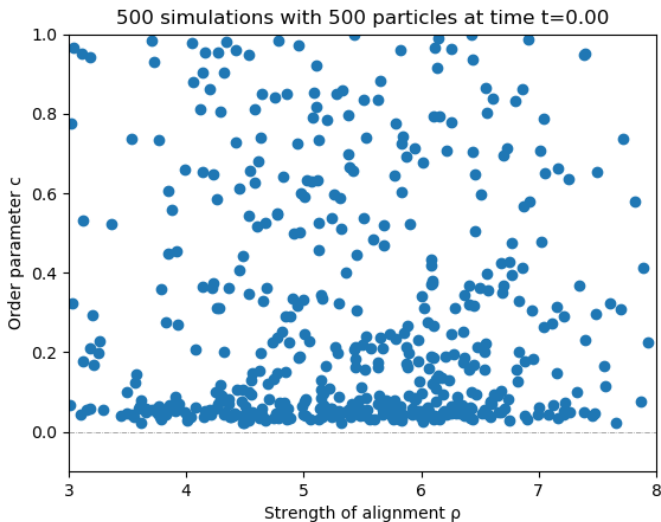
Simulation with 500 particles, $\rho = 1$



Simulation with 500 particles, $\rho = 10$



Mise en évidence numérique d'une transition de phase de premier ordre (ou « discontinue »)



Limite de champ moyen : propagation du chaos

Si $J(t) \in M_3(\mathbb{R})$ est donnée, la loi μ de $dA = \nabla_A(A \cdot J)dt + 2P_{T_A} \circ dB_t$ suit l'équation de Fokker–Planck :

$$\partial_t \mu + \nabla_A \cdot [\nabla_A(A \cdot J)\mu] = \Delta_A \mu.$$

Limite de champ moyen : propagation du chaos

Si $J(t) \in M_3(\mathbb{R})$ est donnée, la loi μ de $dA = \nabla_A(A \cdot J)dt + 2P_{T_A} \circ dB_t$ suit l'équation de Fokker–Planck :

$$\partial_t \mu + \nabla_A \cdot [\nabla_A(A \cdot J)\mu] = \Delta_A \mu.$$

LGN : si (A_k) suivent l'EDS (+ indépendance des bruits et conditions initiales), alors $\frac{1}{N} \sum_k \delta_{A_k}$ converge faiblement vers μ .

Limite de champ moyen : propagation du chaos

Si $J(t) \in M_3(\mathbb{R})$ est donnée, la loi μ de $dA = \nabla_A(A \cdot J)dt + 2P_{T_A} \circ dB_t$ suit l'équation de Fokker–Planck :

$$\partial_t \mu + \nabla_A \cdot [\nabla_A(A \cdot J)\mu] = \Delta_A \mu.$$

LGN : si (A_k) suivent l'EDS (+ indépendance des bruits et conditions initiales), alors $\frac{1}{N} \sum_k \delta_{A_k}$ converge faiblement vers μ .

Si maintenant $J = \frac{\rho}{N} \sum_k A_k$, perte d'indépendance, mais dans la limite $N \rightarrow +\infty$, on retrouve l'indépendance asymptotique : propagation du chaos [Szn91].

Agrégation-Diffusion sur $SO_3(\mathbb{R})$ dans la limite de champ moyen

Si $f^N = \frac{\rho}{N} \sum_k \delta_{A_k}$, où (A_k) est la solution du système d'EDS couplées, alors pour $T > 0$ fixé, $f^N \rightharpoonup f$ sur $[0, T]$, où :

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_A \cdot [\nabla_A(A \cdot J_f)f] = \Delta_A f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \text{ (constant !)}, J_f = \rho \langle A \rangle = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA \end{cases}$$

Agrégation-Diffusion sur $SO_3(\mathbb{R})$ pour $f(t, A)$

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_A \cdot [\nabla_A(A \cdot J_f)f] = \Delta_A f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \text{ (constant!)}, J_f = \rho \langle A \rangle = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA \end{cases}$$

Agrégation-Diffusion sur $SO_3(\mathbb{R})$ pour $f(t, A)$

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_A \cdot [\nabla_A(A \cdot J_f)f] = \Delta_A f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \text{ (constant!)}, J_f = \rho \langle A \rangle = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA \end{cases}$$

« von Mises » associée à $J \in M_3(\mathbb{R})$: $M_J(A) = \frac{1}{Z(J)} \exp(J \cdot A)$.

Formulation à la Fokker-Planck : $\partial_t f = \nabla_A \left[M_{J_f} \nabla_A \cdot \left(\frac{f}{M_{J_f}} \right) \right]$.

Équilibres de l'équation cinétique

Agrégation-Diffusion sur $SO_3(\mathbb{R})$ pour $f(t, A)$

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_A \cdot [\nabla_A(A \cdot J_f)f] = \Delta_A f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \text{ (constant!)}, J_f = \rho \langle A \rangle = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA \end{cases}$$

« von Mises » associée à $J \in M_3(\mathbb{R})$: $M_J(A) = \frac{1}{Z(J)} \exp(J \cdot A)$.

Formulation à la Fokker-Planck : $\partial_t f = \nabla_A \left[M_{J_f} \nabla_A \cdot \left(\frac{f}{M_{J_f}} \right) \right]$.

Équation de compatibilité sur $M_3(\mathbb{R})$ (9-dimensionnel ?)

Les équilibres sont les fonctions de la forme $f = \rho M_J$ telles que

$$J = \rho \langle A \rangle_{M_J} \quad (= \rho \int_{SO_3(\mathbb{R})} A M_J(A) dA = \rho J_{M_J})$$

Équilibres de l'équation cinétique

Agrégation-Diffusion sur $SO_3(\mathbb{R})$ pour $f(t, A)$

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_A \cdot [\nabla_A(A \cdot J_f) f] = \Delta_A f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \text{ (constant!)}, J_f = \rho \langle A \rangle = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA \end{cases}$$

« von Mises » associée à $J \in M_3(\mathbb{R})$: $M_J(A) = \frac{1}{Z(J)} \exp(J \cdot A)$.

Formulation à la Fokker-Planck : $\partial_t f = \nabla_A \left[M_{J_f} \nabla_A \cdot \left(\frac{f}{M_{J_f}} \right) \right]$.

Équation de compatibilité sur $M_3(\mathbb{R})$ (9-dimensionnel ?)

Les équilibres sont les fonctions de la forme $f = \rho M_J$ telles que

$$J = \rho \langle A \rangle_{M_J} \quad (= \rho \int_{SO_3(\mathbb{R})} A M_J(A) dA = \rho J_{M_J})$$

En fait, 3d : $\langle A \rangle_{M_{P J Q}} = P \langle A \rangle_{M_J} Q$ pour $P, Q \in SO_3(\mathbb{R}) \dots$

Théorie de Doi-Onsager avec potentiel de Maier-Saupe

Densité $f(t, q)$, $q \in \mathbb{S}_2/\{\pm 1\}$ essayant de maximiser $(\tilde{q} \cdot q)^2$.

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_q \cdot [\nabla_q (q \cdot Q_f q)] = \Delta_q f \\ \rho = \int_{\mathbb{S}_2/\{\pm 1\}} f(q) dq, \quad Q_f = \int_{\mathbb{S}_2/\{\pm 1\}} (q \otimes q - \frac{1}{3} \text{Id}) f(q) dq \end{cases}$$

Théorie de Doi-Onsager avec potentiel de Maier-Saupe

Densité $f(t, q)$, $q \in \mathbb{S}_2/\{\pm 1\}$ essayant de maximiser $(\tilde{q} \cdot q)^2$.

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_q \cdot [\nabla_q (q \cdot Q_f q)] = \Delta_q f \\ \rho = \int_{\mathbb{S}_2/\{\pm 1\}} f(q) dq, \quad Q_f = \int_{\mathbb{S}_2/\{\pm 1\}} (q \otimes q - \frac{1}{3} \text{Id}) f(q) dq \end{cases}$$

Une isométrie et un isomorphisme (\mathbb{R}^3 : quaternions imaginaires purs)

$$\Phi(q) : \mathbf{u} \in \mathbb{R}^3 \mapsto q \mathbf{u} q^* \in \mathbb{R}^3$$

Quaternion unitaire \mapsto Matrice de rotation.

Matrice $J \in M_3(\mathbb{R}) \mapsto$ Matrice symétrique $\phi(J) \in \mathcal{S}_4^0(\mathbb{R})$ (trace nulle).

$$\frac{1}{2} J \cdot \Phi(q) = q \cdot \phi(J) q, \quad \phi(\Phi(q)) = q \otimes q - \frac{1}{4} I_4$$

Théorie de Doi-Onsager avec potentiel de Maier-Saupe

Densité $f(t, q)$, $q \in \mathbb{S}_2/\{\pm 1\}$ essayant de maximiser $(\tilde{q} \cdot q)^2$.

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_q \cdot [\nabla_q (q \cdot Q_f q)] = \Delta_q f \\ \rho = \int_{\mathbb{S}_2/\{\pm 1\}} f(q) dq, \quad Q_f = \int_{\mathbb{S}_2/\{\pm 1\}} (q \otimes q - \frac{1}{3} \text{Id}) f(q) dq \end{cases}$$

Une isométrie et un isomorphisme (\mathbb{R}^3 : quaternions imaginaires purs)

$$\Phi(q) : \mathbf{u} \in \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbf{u}q \in \mathbb{R}^3$$

Quaternion unitaire \mapsto Matrice de rotation.

Matrice $J \in M_3(\mathbb{R}) \mapsto$ Matrice symétrique $\phi(J) \in \mathcal{S}_4^0(\mathbb{R})$ (trace nulle).

$$\frac{1}{2} J \cdot \Phi(q) = q \cdot \phi(J) q, \quad \phi(\Phi(q)) = q \otimes q - \frac{1}{4} I_4$$

« Polymères » dans \mathbb{R}^4 : équivalence des modèles [DFMAT18].

Théorie de Doi-Onsager avec potentiel de Maier-Saupe

Densité $f(t, q)$, $q \in \mathbb{S}_2/\{\pm 1\}$ essayant de maximiser $(\tilde{q} \cdot q)^2$.

$$\begin{cases} \partial_t f + \nabla_q \cdot [\nabla_q (q \cdot Q_f q)] = \Delta_q f \\ \rho = \int_{\mathbb{S}_2/\{\pm 1\}} f(q) dq, \quad Q_f = \int_{\mathbb{S}_2/\{\pm 1\}} (q \otimes q - \frac{1}{3} \text{Id}) f(q) dq \end{cases}$$

Une isométrie et un isomorphisme (\mathbb{R}^3 : quaternions imaginaires purs)

$$\Phi(q) : \mathbf{u} \in \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbf{u}q \in \mathbb{R}^3$$

Quaternion unitaire \mapsto Matrice de rotation.

Matrice $J \in M_3(\mathbb{R}) \mapsto$ Matrice symétrique $\phi(J) \in \mathcal{S}_4^0(\mathbb{R})$ (trace nulle).

$$\frac{1}{2} J \cdot \Phi(q) = q \cdot \phi(J) q, \quad \phi(\Phi(q)) = q \otimes q - \frac{1}{4} I_4$$

« Polymères » dans \mathbb{R}^4 : équivalence des modèles [DFMAT18].

« Polymères » dans \mathbb{R}^d , Wang et Hoffmann [WH08] : seulement 2 valeurs propres pour les solutions de l'équation de compatibilité.

Décomposition en valeurs singulière spéciale (SSVD) [DDFMA20] :
si $J \in M_3(\mathbb{R})$, il existe (une unique) $D = \text{diag}(d_1, d_2, d_3)$
et $P, Q \in SO_3(\mathbb{R})$ (pas uniques) telles que

$$d_1 \geq d_2 \geq |d_3| \quad \text{et} \quad J = PDQ.$$

Solutions de l'équation de compatibilité

Décomposition en valeurs singulière spéciale (SSVD) [DDFMA20] :
si $J \in M_3(\mathbb{R})$, il existe (une unique) $D = \text{diag}(d_1, d_2, d_3)$
et $P, Q \in SO_3(\mathbb{R})$ (pas uniques) telles que

$$d_1 \geq d_2 \geq |d_3| \quad \text{et} \quad J = PDQ.$$

Solutions de $J = \rho \langle A \rangle_{M_J}$:

- la matrice nulle $J = 0$,
- les matrices de la forme $J = \alpha \Lambda$, avec $\Lambda \in SO_3(\mathbb{R})$ et $\alpha = \rho c_1(\alpha)$,
- les matrices de la forme $J = \sqrt{3} \alpha \mathbf{a}_0 \otimes \mathbf{b}_0$ ($\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$ vecteurs unitaires de \mathbb{R}^3) et $\alpha = \rho c_2(\alpha) > 0$.

Décomposition en valeurs singulière spéciale (SSVD) [DDFMA20] :
si $J \in M_3(\mathbb{R})$, il existe (une unique) $D = \text{diag}(d_1, d_2, d_3)$
et $P, Q \in SO_3(\mathbb{R})$ (pas uniques) telles que

$$d_1 \geq d_2 \geq |d_3| \quad \text{et} \quad J = PDQ.$$

Solutions de $J = \rho \langle A \rangle_{M_J}$:

- la matrice nulle $J = 0$,
- les matrices de la forme $J = \alpha \Lambda$, avec $\Lambda \in SO_3(\mathbb{R})$ et $\alpha = \rho c_1(\alpha)$,
- les matrices de la forme $J = \sqrt{3} \alpha \mathbf{a}_0 \otimes \mathbf{b}_0$ ($\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$ vecteurs unitaires de \mathbb{R}^3) et $\alpha = \rho c_2(\alpha) > 0$.

Aligné autour de $\Lambda \in SO_3(\mathbb{R})$? Deuxième cas, $\alpha > 0$ (le paramètre d'ordre de l'équilibre correspondant est $c_1(\alpha) > 0$).

Décomposition en valeurs singulière spéciale (SSVD) [DDFMA20] :
si $J \in M_3(\mathbb{R})$, il existe (une unique) $D = \text{diag}(d_1, d_2, d_3)$
et $P, Q \in SO_3(\mathbb{R})$ (pas uniques) telles que

$$d_1 \geq d_2 \geq |d_3| \quad \text{et} \quad J = PDQ.$$

Solutions de $J = \rho \langle A \rangle_{M_J}$:

- la matrice nulle $J = 0$,
- les matrices de la forme $J = \alpha \Lambda$, avec $\Lambda \in SO_3(\mathbb{R})$ et $\alpha = \rho c_1(\alpha)$,
- les matrices de la forme $J = \sqrt{3} \alpha \mathbf{a}_0 \otimes \mathbf{b}_0$ ($\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$ vecteurs unitaires de \mathbb{R}^3) et $\alpha = \rho c_2(\alpha) > 0$.

Aligné autour de $\Lambda \in SO_3(\mathbb{R})$? Deuxième cas, $\alpha > 0$ (le paramètre d'ordre de l'équilibre correspondant est $c_1(\alpha) > 0$).

Uniforme? Premier cas.

Solutions de l'équation de compatibilité

Décomposition en valeurs singulière spéciale (SSVD) [DDFMA20] :
si $J \in M_3(\mathbb{R})$, il existe (une unique) $D = \text{diag}(d_1, d_2, d_3)$
et $P, Q \in SO_3(\mathbb{R})$ (pas uniques) telles que

$$d_1 \geq d_2 \geq |d_3| \quad \text{et} \quad J = PDQ.$$

Solutions de $J = \rho \langle A \rangle_{M_J}$:

- la matrice nulle $J = 0$,
- les matrices de la forme $J = \alpha \Lambda$, avec $\Lambda \in SO_3(\mathbb{R})$ et $\alpha = \rho c_1(\alpha)$,
- les matrices de la forme $J = \sqrt{3} \alpha \mathbf{a}_0 \otimes \mathbf{b}_0$ ($\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0$ vecteurs unitaires de \mathbb{R}^3) et $\alpha = \rho c_2(\alpha) > 0$.

Aligné autour de $\Lambda \in SO_3(\mathbb{R})$? Deuxième cas, $\alpha > 0$ (le paramètre d'ordre de l'équilibre correspondant est $c_1(\alpha) > 0$).

Uniforme ? Premier cas.

Stabilité ?

Un modèle simplifié

$$\begin{cases} \partial_t f = \rho M_{J_f} - f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \quad \text{and} \quad J_f = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA. \end{cases}$$

Même équation de compatibilité : $J = \rho \langle A \rangle_{M_{J_f}}$.

Un modèle simplifié

$$\begin{cases} \partial_t f = \rho M_{J_f} - f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \quad \text{and} \quad J_f = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA. \end{cases}$$

Même équation de compatibilité : $J = \rho \langle A \rangle_{M_{J_f}}$.

EDO satisfaite par J_f :

$$\frac{d}{dt} J_f = \rho \langle A \rangle_{M_{J_f}} - J_f.$$

Un modèle simplifié

$$\begin{cases} \partial_t f = \rho M_{J_f} - f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \quad \text{and} \quad J_f = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA. \end{cases}$$

Même équation de compatibilité : $J = \rho \langle A \rangle_{M_{J_f}}$.

EDO satisfaite par J_f :

$$\frac{d}{dt} J_f = \rho \langle A \rangle_{M_{J_f}} - J_f.$$

Duhamel : si $J_f \rightarrow J_\infty$ quand $t \rightarrow +\infty$, alors $f \rightarrow \rho M_{J_\infty}$.

Un modèle simplifié

$$\begin{cases} \partial_t f = \rho M_{J_f} - f \\ \rho = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) dA \quad \text{and} \quad J_f = \int_{SO_3(\mathbb{R})} A f(A) dA. \end{cases}$$

Même équation de compatibilité : $J = \rho \langle A \rangle_{M_{J_f}}$.

EDO satisfaite par J_f :

$$\frac{d}{dt} J_f = \rho \langle A \rangle_{M_{J_f}} - J_f.$$

Duhamel : si $J_f \rightarrow J_\infty$ quand $t \rightarrow +\infty$, alors $f \rightarrow \rho M_{J_\infty}$.

Réduction et « conservation »

Si PD_0Q est la SSVD de J_0 , alors $J_{f(t)} = PD(t)Q$, avec la même EDO pour D (dans \mathbb{R}^3).

$$\frac{d}{dt} D = \rho \langle A \rangle_{M_D} - D.$$

L'équation est un flot de gradient

On pose $V(J) = \frac{1}{2}|J|^2 - \rho \ln \mathcal{Z}(J)$, où $\mathcal{Z}(J) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} e^{J \cdot A} dA$. Alors

$$\frac{d}{dt} J_f = -\nabla V(J_f) \quad (\text{ou } \frac{d}{dt} D = -\nabla V(D)).$$

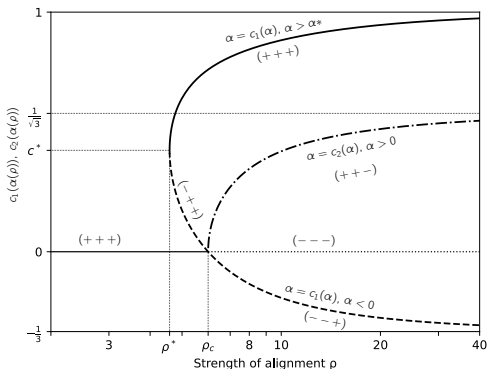
Flot-gradient et comportement en temps long, BGK

L'équation est un flot de gradient

On pose $V(J) = \frac{1}{2}|J|^2 - \rho \ln \mathcal{Z}(J)$, où $\mathcal{Z}(J) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} e^{J \cdot A} dA$. Alors

$$\frac{d}{dt} J_f = -\nabla V(J_f) \quad (\text{ou } \frac{d}{dt} D = -\nabla V(D)).$$

Bonus : on connaît la signature de la Hessienne de V (restreinte aux matrices diagonales) !



Même énergie libre : $\frac{d}{dt}\mathcal{F}[f] = -\mathcal{D}[f]$ (FP) ou $\frac{d}{dt}\mathcal{F}[f] = -\tilde{\mathcal{D}}[f]$ (BGK).

$$\mathcal{F}[f] = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) \ln f(A) dA - \frac{1}{2} \|J_f\|^2,$$

$$\mathcal{D}[f] = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) \|\nabla_A (\ln f - A \cdot J_f)\|^2 dA.$$

$$\tilde{\mathcal{D}}[f] = \int_{SO_3(\mathbb{R})} (f - \rho M_{J_f}) (\ln f - \ln(\rho M_{J_f})) dA \geq 0.$$

Même énergie libre : $\frac{d}{dt} \mathcal{F}[f] = -\mathcal{D}[f]$ (FP) ou $\frac{d}{dt} \mathcal{F}[f] = -\tilde{\mathcal{D}}[f]$ (BGK).

$$\mathcal{F}[f] = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) \ln f(A) dA - \frac{1}{2} \|J_f\|^2,$$

$$\mathcal{D}[f] = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f(A) \|\nabla_A (\ln f - A \cdot J_f)\|^2 dA.$$

$$\tilde{\mathcal{D}}[f] = \int_{SO_3(\mathbb{R})} (f - \rho M_{J_f}) (\ln f - \ln(\rho M_{J_f})) dA \geq 0.$$

On pose alors $W(J) = \mathcal{F}[\rho M_J]$ et on obtient

$\nabla W(J) = 0 \Leftrightarrow \nabla V(J) = 0 \Leftrightarrow J$ solution de l'équation de compatibilité.

De plus, les points critiques ont la même signature ! On arrive à en déduire la stabilité au sens de l'énergie libre (outil : principe de Lassalle pour FP, la solution converge vers une famille d'équilibres).

Entropie relative et information de Fisher.

$$\mathcal{H}(f|g) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f \ln \left(\frac{f}{g} \right) dA, \quad \mathcal{I}(f|g) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f \left\| \nabla \ln \left(\frac{f}{g} \right) \right\|^2 dA.$$

Entropie relative et information de Fisher.

$$\mathcal{H}(f|g) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f \ln \left(\frac{f}{g} \right) dA, \quad \mathcal{I}(f|g) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f \left\| \nabla \ln \left(\frac{f}{g} \right) \right\|^2 dA.$$

Alors $\mathcal{F}[f] - \mathcal{F}[f_{\text{eq}}] = \mathcal{H}(f|\rho M_{J_f}) + V(J_f) - V(J_{\text{eq}})$,
puis $\mathcal{H}(f|f_{\text{eq}}) = \mathcal{F}[f] - \mathcal{F}[f_{\text{eq}}] + \frac{1}{2} \|J_{\text{eq}} - J_f\|^2$, et $\mathcal{D}[f] = \mathcal{I}(f|\rho M_{J_f})$.

Entropie relative et information de Fisher.

$$\mathcal{H}(f|g) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f \ln \left(\frac{f}{g} \right) dA, \quad \mathcal{I}(f|g) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f \left\| \nabla \ln \left(\frac{f}{g} \right) \right\|^2 dA.$$

Alors $\mathcal{F}[f] - \mathcal{F}[f_{\text{eq}}] = \mathcal{H}(f|\rho M_{J_f}) + V(J_f) - V(J_{\text{eq}})$,
puis $\mathcal{H}(f|f_{\text{eq}}) = \mathcal{F}[f] - \mathcal{F}[f_{\text{eq}}] + \frac{1}{2} \|J_{\text{eq}} - J_f\|^2$, et $\mathcal{D}[f] = \mathcal{I}(f|\rho M_{J_f})$.

Théorème [Fro21] : stabilité exponentielle

Si \mathcal{E}_∞ est une des deux familles d'équilibres stable (au sens de l'énergie libre), alors il existe $\delta > 0$, $\tilde{\lambda} > 0$, et $C > 0$ telles que s'il existe $f_{\text{eq},0} \in \mathcal{E}_\infty$ avec $\mathcal{H}(f_0|f_{\text{eq},0}) < \delta$, alors il existe $f_\infty \in \mathcal{E}_\infty$ tel que

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

Entropie relative et information de Fisher.

$$\mathcal{H}(f|g) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f \ln \left(\frac{f}{g} \right) dA, \quad \mathcal{I}(f|g) = \int_{SO_3(\mathbb{R})} f \left\| \nabla \ln \left(\frac{f}{g} \right) \right\|^2 dA.$$

Alors $\mathcal{F}[f] - \mathcal{F}[f_{\text{eq}}] = \mathcal{H}(f|\rho M_{J_f}) + V(J_f) - V(J_{\text{eq}})$,
puis $\mathcal{H}(f|f_{\text{eq}}) = \mathcal{F}[f] - \mathcal{F}[f_{\text{eq}}] + \frac{1}{2} \|J_{\text{eq}} - J_f\|^2$, et $\mathcal{D}[f] = \mathcal{I}(f|\rho M_{J_f})$.

Théorème [Fro21] : stabilité exponentielle

Si \mathcal{E}_∞ est une des deux familles d'équilibres stable (au sens de l'énergie libre), alors il existe $\delta > 0$, $\tilde{\lambda} > 0$, et $C > 0$ telles que s'il existe $f_{\text{eq},0} \in \mathcal{E}_\infty$ avec $\mathcal{H}(f_0|f_{\text{eq},0}) < \delta$, alors il existe $f_\infty \in \mathcal{E}_\infty$ tel que

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

Outils : inégalités de log-Sobolev et Csiszár–Kullback–Pinsker sur $SO_3(\mathbb{R})$ pour obtenir un estimée de Gronwall de $\mathcal{H}(f|\rho M_{J_f})$. Puis un contrôle du déplacement de J_f .



P. Degond, A. Diez, A. Frouvelle, and S. Merino-Aceituno.
Phase transitions and macroscopic limits in a BGK model of body-attitude coordination.
J. Nonlinear Sci., 2020.



P. Degond, A. Frouvelle, and S. Merino-Aceituno.
A new flocking model through body attitude coordination.
Math. Models Methods Appl. Sci., 27(06) :1005–1049, 2017.



P. Degond, A. Frouvelle, S. Merino-Aceituno, and A. Trescases.
Quaternions in collective dynamics.
Multiscale Mod. Simul., 16(1) :28–77, 2018.



P. Degond, A. Frouvelle, S. Merino-Aceituno, and A. 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.



A. Frouvelle.
Body-attitude alignment : first order phase transition, link with rodlike polymers through quaternions, and stability.
In *Recent Advances in Kinetic Equations and Applications*, Springer INdAM Series. Springer, 2021.
to appear.



A.-S. Sznitman.
Topics in propagation of chaos.
In *École d'Été de Probabilités de Saint-Flour XIX — 1989*, volume 1464 of *Lecture Notes in Mathematics*, pages 165–251.
Springer, Berlin, 1991.



H. Wang and P. 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.