

Transitions de phase de différents types pour un modèle d'alignement de particules orientées

Amic Frouvelle
Université Paris Dauphine

En collaboration avec Jian-Guo Liu (Duke University)
et Pierre Degond (Institut de Mathématiques de Toulouse)

Séminaire du GM3N, Caen
4 février 2013

But : description macroscopique de comportements collectifs



- Interactions locales sans la présence de « leader »
- Émergence de structures macroscopiques, transitions de phase

Images  Benson Kua (flickr) et 

Modélisation de particules autopropulsées en interaction

- Modèle de Vicsek *et al.* (1995), discret en temps, alignement synchrone uniquement (+ bruit angulaire).
→ Simulations : transition de phase, émergence de structures cohérentes.
- Degond-Motsch (2008).
Version continue en temps, dérivation formelle de limite hydrodynamique : pas de transition de phase.
- Degond-F-Liu (2012) : relaxation plus générale, coefficients (alignement et bruit) dépendant de la quantité de mouvement des voisins.
→ Transition de phase bien décrite théoriquement.

Plan de l'exposé

- 1 **Modèle de Vicsek continu en temps avec transition de phase**
 - Présentation du modèle
 - Modèle cinétique – Cadre homogène
 - Stabilité
- 2 **Exemples de différents types de transitions de phase**
 - Transition du second ordre (continue)
 - Transition du premier ordre (discontinue) – Hystérésis
- 3 **Limites macroscopiques**
 - Changements d'échelle
 - Phase ordonnée, modèle hydrodynamique
 - Phase désordonnée, diffusion

Dynamique individuelle

Positions des particules : X_1, \dots, X_N dans \mathbb{R}^n .

Orientations $\omega_1, \dots, \omega_N$ dans \mathbb{S} (sphère unité).

$$\begin{cases} dX_k = \omega_k dt \\ d\omega_k = \nu P_{\omega_k^\perp} \bar{\omega}_k dt + \sqrt{2\tau} P_{\omega_k^\perp} \circ dB_t^k \end{cases}$$

Direction cible :

$$\bar{\omega}_k = \frac{J_k}{|J_k|}, \quad J_k = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N K(|X_j - X_k|) \omega_j.$$

Si $\nu = \nu(|J_k|)$ et $\tau = \tau(|J_k|)$, pas de singularité si $\frac{\nu(|J|)}{|J|}$ est Lipschitz.

Description cinétique

Hypothèses : K avec second moment fini, et $K, |J| \mapsto \frac{\nu(|J|)}{|J|}$ et τ Lipschitz et bornées.

Théorème (suivant Bolley, Cañizo, Carrillo, 2012)

Densité de probabilité $f(x, \omega, t)$, quand $N \rightarrow \infty$:

$$\partial_t f + \omega \cdot \nabla_x f + \nu(|\mathcal{J}_f|) \nabla_\omega \cdot (P_{\omega^\perp} \bar{\omega}_f f) = \tau(|\mathcal{J}_f|) \Delta_\omega f$$

$$\bar{\omega}_f = \frac{\mathcal{J}_f}{|\mathcal{J}_f|}, \quad \mathcal{J}_f = K * J_f, \quad J_f = \int_{\omega \in \mathbb{S}} \omega f(x, \omega, t) d\omega.$$

Outil principal : processus de couplage + estimations.

$$\begin{cases} d\bar{X}_k = \bar{\omega}_k dt \\ d\bar{\omega}_k = \nu(|\mathcal{J}_{f_t^N}|) P_{\omega_k^\perp} \bar{\omega}_{f_t^N} dt + \sqrt{2\tau(|\mathcal{J}_{f_t^N}|)} P_{\omega_k^\perp} \circ dB_t^k \\ f_t^N = \text{loi}(\bar{X}_1, \bar{\omega}_1) = \text{loi}(\bar{X}_k, \bar{\omega}_k) \end{cases}$$

Version homogène en espace

Équation réduite, pour une fonction $f(\omega, t)$

$$\begin{aligned}\partial_t f &= Q(f), \\ Q(f) &= -\nu(|J_f|) \nabla_\omega \cdot (P_{\omega^\perp} \Omega_f f) + \tau(|J_f|) \Delta_\omega f, \\ \Omega_f &= \frac{J_f}{|J_f|}, \quad J_f(t) = \int_{\mathbb{S}} f(\omega, t) \omega \, d\omega.\end{aligned}$$

Paramètre clé : la quantité $\rho = \int_{\mathbb{S}} f$ (conservée).

On note $h(|J|) = \frac{\nu(|J|)}{\tau(|J|)}$, et on obtient

$$Q(f) = \tau(|J_f|) \nabla_\omega \cdot (e^{h(|J_f|)\omega \cdot \Omega_f} \nabla_\omega (e^{-h(|J_f|)\omega \cdot \Omega_f} f)).$$

Hypothèse principale

$|J| \mapsto h(|J|)$ strictement croissante.

Son inverse, notée σ , joue un rôle essentiel par la suite.

Équilibres

Définitions : distribution de von Mises–Fisher

$$M_{\kappa\Omega}(\omega) = \frac{e^{\kappa\omega\cdot\Omega}}{\int_{\mathbb{S}} e^{\kappa v\cdot\Omega} d\nu}.$$

Orientation $\Omega \in \mathbb{S}$, concentration $\kappa \geq 0$.

Paramètre d'ordre : $c(\kappa) = |J_{M_{\kappa\Omega}}| = \frac{\int_0^\pi \cos\theta e^{\kappa\cos\theta} \sin^{n-2}\theta d\theta}{\int_0^\pi e^{\kappa\cos\theta} \sin^{n-2}\theta d\theta}$.

Pour $\kappa_f = h(|J_f|)$, on peut écrire Q sous la forme :

$$Q(f) = \tau(|J_f|) \nabla_\omega \cdot \left[M_{\kappa_f \Omega_f} \nabla_\omega \left(\frac{f}{M_{\kappa_f \Omega_f}} \right) \right].$$

Équilibres : $f_{eq} = \rho M_{\kappa\Omega}$, pour un $\Omega \in \mathbb{S}$.

Alors $|J_{f_{eq}}| = \rho |J_{M_{\kappa\Omega}}| = \rho c(\kappa)$, et $\kappa = \kappa_{f_{eq}} = h(|J_{f_{eq}}|)$.

Condition de compatibilité : $\kappa = h(\rho c(\kappa))$, i.e. $\sigma(\kappa) = \rho c(\kappa)$.

Solutions de l'équation de compatibilité $\sigma(\kappa) = \rho c(\kappa)$

Distribution uniforme $f = \rho$: toujours un équilibre.

Autres solutions : on étudie la fonction $\kappa \mapsto \frac{\sigma(\kappa)}{c(\kappa)} (= \rho)$.

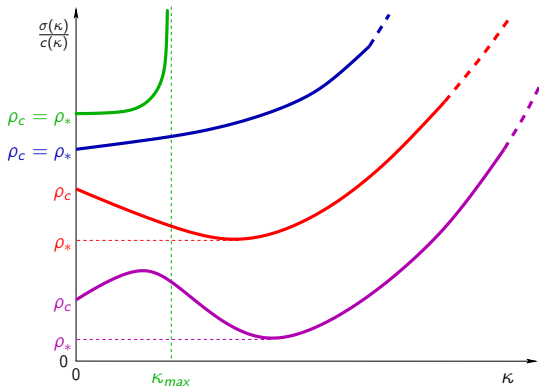
Seuils critiques :

$$\rho_* = \min_{\kappa} \frac{\sigma(\kappa)}{c(\kappa)}.$$

Si $\rho < \rho_*$, équilibre uniforme seulement.

$$\rho_c = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\sigma(\kappa)}{c(\kappa)}.$$

Si $\rho > \rho_c$, au moins un équilibre nonisotrope (von Mises–Fisher)



Existence, unicité, régularité, positivité, bornes

Théorème

Pour une mesure finie initiale $f_0 \in H^s(\mathbb{S})$, (s arbitraire) :

- Existence et unicité d'une solution faible f .
- Solution globale, dans $C^\infty(\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{S})$, et $f > 0$ pour $t > 0$.
- Estimations de régularité instantanée et bornes uniformes :

$$\|f(t)\|_{H^{s+m}}^2 \leq C \left(1 + \frac{1}{t^m}\right) \|f_0\|_{H^s}^2.$$

Outil : décomposition en harmoniques sphériques.
Nonlinéarité : nombre fini de coefficients.

Outil principal : énergie libre d'Onsager

Énergie libre : $\mathcal{F}(f) = \int_{\mathbb{S}} f \ln f - \Phi(|J_f|)$, avec $\frac{d\Phi}{d|J|} = h(|J|)$.

Dissipation : $\mathcal{D}(f) = \tau(|J_f|) \int_{\mathbb{S}} f |\nabla_{\omega} (\ln f - h(|J_f|) \omega \cdot \Omega_f)|^2 \geq 0$.

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F} + \mathcal{D} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{F}(f) \text{ décroissante vers } \mathcal{F}_{\infty}.$$

Principe de LaSalle

Ensemble ω -limite : $\mathcal{E}_{\infty} = \{f \in C^{\infty}(\mathbb{S}) \mid \mathcal{D}(f) = 0 \text{ et } \mathcal{F}(f) = \mathcal{F}_{\infty}\}$.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \inf_{g \in \mathcal{E}_{\infty}} \|f(t) - g\|_{H^s} = 0.$$

Raffinement : si les racines de $\sigma(\kappa) = \rho c(\kappa)$ sont isolées, il existe une solution κ_{∞} telle que :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |J_f(t)| = \rho c(\kappa_{\infty}) \quad \text{et} \quad \forall s \in \mathbb{R}, \lim_{t \rightarrow \infty} \|f(t) - \rho M_{\kappa_{\infty} \Omega_f(t)}\|_{H^s} = 0.$$

Analyse au voisinage de l'équilibre uniforme

Valeur critique : $\rho_c = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\sigma(\kappa)}{c(\kappa)} \in (0, +\infty]$.

Théorème : Instabilité forte – Stabilité exponentielle

- $\rho > \rho_c$: si $J_{f_0} \neq 0$, alors f ne converge jamais vers l'équilibre uniforme.
- $\rho < \rho_c$: il existe une constante universelle δ telle que si $\|f_0 - \rho\|_{H^s} < \delta$, alors pour tout $t \geq 0$

$$\|f(t) - \rho\|_{H^s} \leq \frac{\|f_0 - \rho\|_{H^s} e^{-\lambda t}}{1 - \frac{1}{\delta} \|f_0 - \rho\|_{H^s}}, \text{ avec } \lambda = (n-1)\tau_0 \left(1 - \frac{\rho}{\rho_c}\right).$$

Outils : linéarisation pour l'évolution de J_f , et estimées d'énergie pour l'équation complète.

Analyse au voisinage d'un équilibre non isotrope $\rho M_{\kappa\Omega}$

Proposition : stabilité/instabilité faible

On note \mathcal{F}_κ la valeur de $\mathcal{F}(\rho M_{\kappa\Omega})$ (indépendant de $\Omega \in \mathbb{S}$).

- $(\frac{\sigma}{c})'(\kappa) < 0$ (instable) : dans tout voisinage de $\rho M_{\kappa\Omega}$, il existe f_0 telle que $\mathcal{F}(f_0) < \mathcal{F}_\kappa$.
- $(\frac{\sigma}{c})'(\kappa) > 0$ (stable) : si $\|f_0\|_{H^s} \leq K$, avec $s > \frac{n-1}{2}$, alors il existe $\delta > 0$ et C (dépendant de K et s seulement), tels que si $\|f_0 - \rho M_{\kappa\Omega}\|_{L^2} \leq \delta$ pour un $\Omega \in \mathbb{S}$, alors pour tout $t \geq 0$,

$$\mathcal{F}(f) \geq \mathcal{F}_\kappa, \text{ et } \|f - \rho M_{\kappa\Omega_f}\|_{L^2} \leq C \|f_0 - \rho M_{\kappa\Omega_{f_0}}\|_{L^2}.$$

Outils : développement asymptotique de $\mathcal{F} - \mathcal{F}_\kappa$, et interpolation de Sobolev.

Stabilité forte : convergence exponentielle vers un équilibre

Théorème : stabilité exponentielle dans le cas $(\frac{\sigma}{c})'(\kappa) > 0$

Pour tout $s > \frac{n-1}{2}$, il existe des constantes universelles $\delta > 0$ et $C > 0$, telles que si $\|f_0 - \rho M_{\kappa\Omega}\|_{H^s} < \delta$ pour un $\Omega \in \mathbb{S}$, alors il existe $\Omega_\infty \in \mathbb{S}$ tel que

$$\|f - \rho M_{\kappa\Omega_\infty}\|_{H^s} \leq C \|f_0 - \rho M_{\kappa\Omega_{f_0}}\|_{H^s} e^{-\lambda t},$$

avec

$$\lambda = \frac{c\tau(\sigma)}{\sigma'} \Lambda_\kappa \left(\frac{\sigma}{c}\right)',$$

où Λ_κ est la meilleure constante pour l'inégalité de Poincaré à poids suivante :

$$\langle |\nabla g|^2 \rangle_{M_{\kappa\Omega}} \geq \Lambda_\kappa \langle (g - \langle g \rangle_{M_{\kappa\Omega}})^2 \rangle_{M_{\kappa\Omega}}$$

Plan de l'exposé

- 1 **Modèle de Vicsek continu en temps avec transition de phase**
 - Présentation du modèle
 - Modèle cinétique – Cadre homogène
 - Stabilité
- 2 **Exemples de différents types de transitions de phase**
 - Transition du second ordre (continue)
 - Transition du premier ordre (discontinue) – Hystérésis
- 3 **Limites macroscopiques**
 - Changements d'échelle
 - Phase ordonnée, modèle hydrodynamique
 - Phase désordonnée, diffusion

Résultats généraux dans le cas $(\frac{\sigma}{c})' > 0$ pour tout κ

On suppose que $(\frac{\sigma}{c})' > 0$ pour tout $\kappa > 0$.

- Si $\rho < \rho_c$, la solution converge exponentiellement vers la distribution uniforme $f_\infty = \rho$.
- Si $\rho = \rho_c$, la solution converge vers la distribution uniforme.
- Si $\rho > \rho_c$ et $J_{f_0} \neq 0$, alors il existe Ω_∞ tel que f converge exponentiellement vers la distribution de von Mises $f_\infty = \rho M_{\kappa \Omega_\infty}$, où $\kappa > 0$ est l'unique solution (> 0) de l'équation $\rho c(\kappa) = \sigma(\kappa)$.

On définit alors c (paramètre d'ordre) comme une fonction de ρ , et cette fonction est continue.

Exposant critique β : lorsque $c(\rho) \asymp (\rho - \rho_c)^\beta$. Prenant a priori toutes les valeurs dans $(0, 1]$.

Critère effectif pour une transition de phase continue

Lemme

Si $\frac{h(|J|)}{|J|}$ est décroissante en $|J|$, alors on a une transition de phase continue. L'exposant critique β , s'il existe, est dans $[\frac{1}{2}, 1]$.

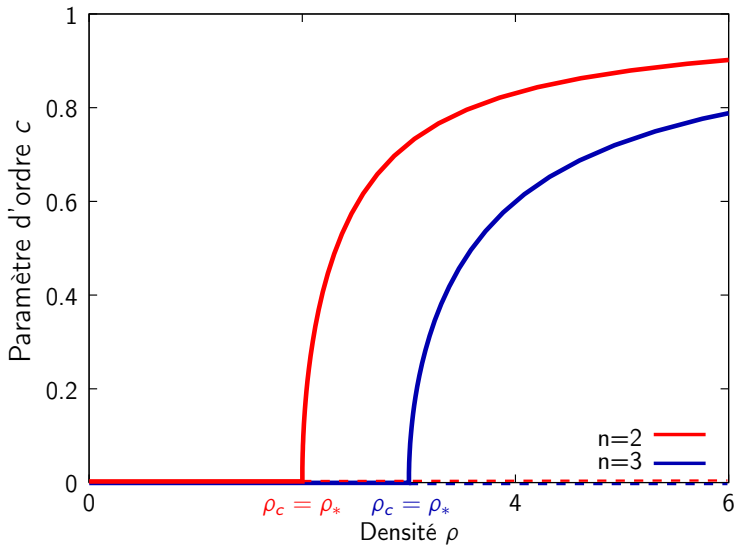
Dans ce cas, on a également une identité remarquable (liée au « Laplacien conforme »), qui donne un taux exponentiel global de convergence lorsque $\rho < \rho_c$:

Proposition

Si $\rho < \rho_c$, il existe une constante universelle C telle que pour tout $t \geq 0$

$$\|f(t) - \rho\|_{H^s} \leq C \|f_0 - \rho\|_{H^s} e^{-\lambda t}, \text{ avec } \lambda = (n-1)\tau_{\min}\left(1 - \frac{\rho}{\rho_c}\right).$$

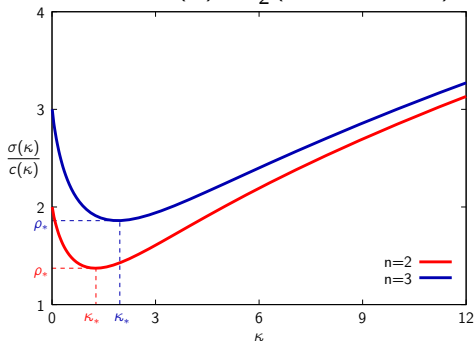
Diagramme de phase pour $\nu(|J|) = |J|$ et $\tau = 1$



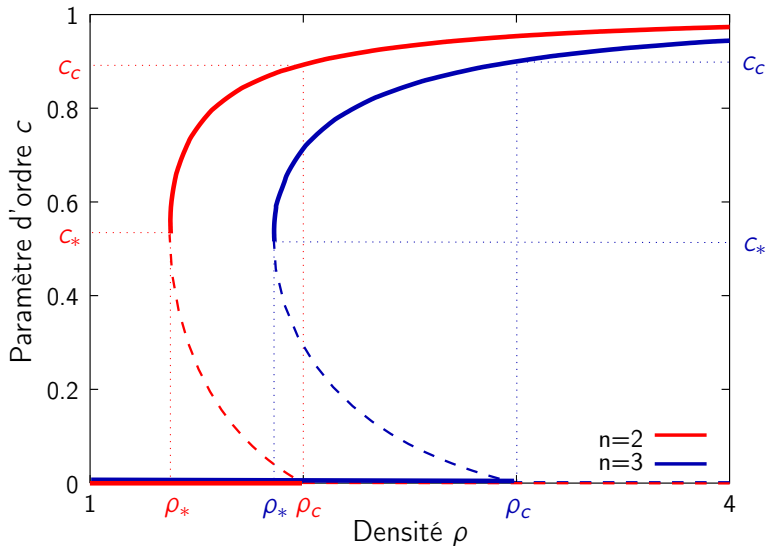
Un exemple particulier de transition du premier ordre

Cas où $\nu(|J|) = |J|$ et $\tau(|J|) = \frac{1}{1 + |J|}$ (lié à certains modèles avec « bruit extrinsèque »).

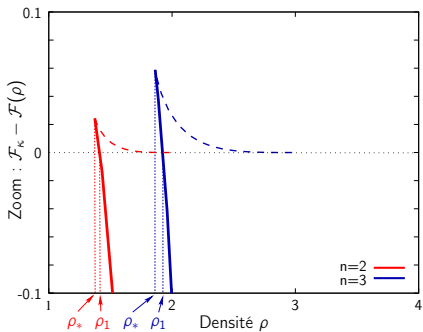
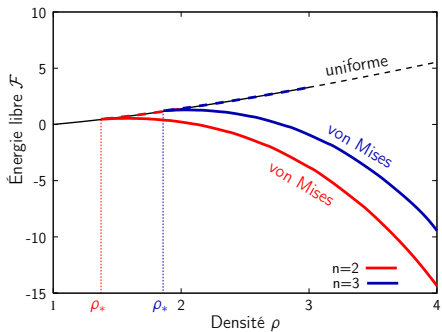
On a alors $h(|J|) = |J| + |J|^2$, donc on ne vérifie pas le lemme précédent. On obtient $\sigma(\kappa) = \frac{1}{2}(\sqrt{1 + 4\kappa} - 1)$.



Le diagramme de phase : boucle d'hystérésis



Comparaison des énergies libres



Taux de convergence

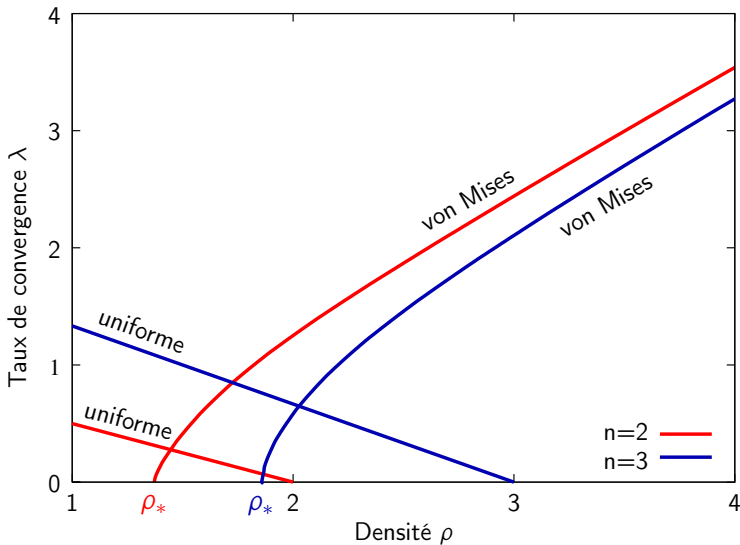
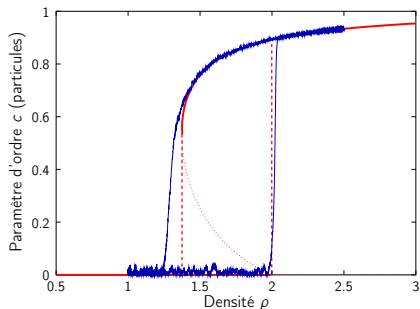
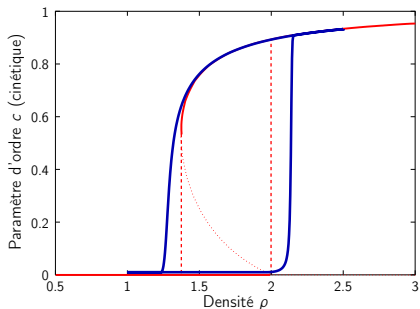


Illustration numérique du phénomène d'hystérésis

Changement d'échelle $\tilde{f} = \frac{f}{\rho}$. Le paramètre ρ est alors libre et on le fait évoluer dans le temps.



Plan de l'exposé

- 1 **Modèle de Vicsek continu en temps avec transition de phase**
 - Présentation du modèle
 - Modèle cinétique – Cadre homogène
 - Stabilité
- 2 **Exemples de différents types de transitions de phase**
 - Transition du second ordre (continue)
 - Transition du premier ordre (discontinue) – Hystérésis
- 3 **Limites macroscopiques**
 - Changements d'échelle
 - Phase ordonnée, modèle hydrodynamique
 - Phase désordonnée, diffusion

Changements d'échelle pour l'équation cinétique

2 paramètres d'échelle : ε (changement d'échelle hydrodynamique)
 et η (longueur caractéristique pour le noyau d'observation K).

Équation cinétique réduite

$$\varepsilon(\partial_t f + \omega \cdot \nabla_x f) + K_2 \eta^2 [\nabla_\omega \cdot (P_{\omega^\perp} \ell_f f) - m_f \Delta_\omega f] = Q(f) + \mathcal{O}(\eta^4),$$

avec

$$\ell_f = \frac{\nu(|J_f|)}{|J_f|} P_{\Omega_f^\perp} \Delta_x J_f + (\Omega_f \cdot \Delta_x J_f) \nu'(|J_f|) \Omega_f,$$

$$m_f = (\Omega_f \cdot \Delta_x J_f) \tau'(|J_f|),$$

Limite lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, dans les cas où $\eta = \mathcal{O}(\varepsilon)$, ou $\eta = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$?

Branche d'un équilibre nonisotrope stable

Branche stable de distributions de von Mises donnée par $\rho \mapsto \kappa(\rho)$.

Théorème (P. Degond, AF, J.-G. Liu)

Lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, dans une région où $f^\varepsilon \rightarrow f^0 = \rho(x, t) M_{\kappa(\rho)\Omega(x, t)}$, les fonctions ρ, Ω satisfont le système

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho c \Omega) = 0, \\ \rho (\partial_t \Omega + \tilde{c}(\Omega \cdot \nabla_x) \Omega) + \Theta P_{\Omega^\perp} \nabla_x \rho = \mathcal{K}_2 \delta P_{\Omega^\perp} \Delta_x (\rho c \Omega). \end{cases}$$

$$\tilde{c} = \langle \cos \theta \rangle_{\tilde{M}_\kappa}, \quad \Theta = \frac{1}{\kappa} + \frac{\rho}{\kappa} \frac{d\kappa}{d\rho} (\tilde{c} - c), \quad \delta = \frac{\nu(\sigma)}{c} \left(\frac{n-1}{\kappa} + \tilde{c} \right).$$

Paramètre d'échelle $\mathcal{K}_2 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} K_2 \frac{\eta^2}{\varepsilon}$.

Hyperbolicité liée à l'exposant critique (second ordre), ou non-hyperbolicité au voisinage de ρ_* (premier ordre).

Région où $\rho_c - \rho^\varepsilon(x, t) \gg \varepsilon$

Développement de Chapman–Enskog.

Théorème (P. Degond, AF, J.-G. Liu)

Lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, au premier ordre, f^ε est donnée (formellement) par

$$f^\varepsilon(x, \omega, t) = \rho^\varepsilon(x, t) - \varepsilon \frac{n \rho_c \omega \cdot \nabla_x \rho^\varepsilon(x, t)}{(n-1)n\tau_0(\rho_c - \rho^\varepsilon(x, t))},$$

Et la densité ρ^ε satisfait l'équation de diffusion suivante :

$$\partial_t \rho^\varepsilon = \frac{\varepsilon \rho_c}{(n-1)n\tau_0} \nabla_x \cdot \left(\frac{1}{\rho_c - \rho^\varepsilon} \nabla_x \rho^\varepsilon \right).$$

Transition du second ordre : région “ frontière ” où
 $\rho^\varepsilon(x, t) - \rho_c = O(\varepsilon)$? Comment connecter les deux modèles ?