

Université de Paris
École Doctorale “Physique en Île-de-France”

THÈSE DE DOCTORAT

Discipline : Physique théorique

présentée par

Jérémie O’Byrne

Matière active et irréversibilité : des modèles microscopiques aux théories des champs

dirigée par Julien TAILLEUR

Soutenue le 04 février 2022 devant le jury composé de

Julien BARRÉ	rapporteur
Giulio BIROLI	examinateur
Thierry BODINEAU	examinateur
Léonie CANET	rapportrice
Jorge KURCHAN	examinateur
Vivien LECOMTE	examinateur
Julien TAILLEUR	directeur de thèse
Éric VANDEN EIJNDEN	examinateur

Table des matières

Table des matières	3
1 Introduction	7
1.1 La physique statistique	7
1.1.1 Thermodynamique : observables et macro-états	9
1.1.2 Physique statistique d'équilibre : mesure de probabilité et micro-états	12
1.1.3 Séparation d'échelle et équation de Langevin	14
1.1.4 La théorie des champs	17
1.2 La matière active	20
1.2.1 L'omniprésence des systèmes actifs	21
1.2.2 Modèles de la dynamique individuelle d'une particule active	25
1.2.3 Particules actives en interaction	28
1.2.4 Modèle macroscopique de systèmes actifs et (pseudo-) équilibre macroscopique	30
1.3 Organisation de la thèse	35
2 Symétrie Temporelle et Réversibilité	37
2.1 Renversement du temps de systèmes passifs simples	39
2.1.1 Renversement du temps dans l'équation de Langevin sur-amortie.	39
2.1.2 Renversement du temps dans l'équation de Langevin sous-amortie.	41
2.1.3 Renversement du temps en présence d'une force qui ne travaille pas.	43
2.2 Formalisation mathématique de la symétrie temporelle des équations stochastiques	47
2.2.1 Contexte général	47
2.2.2 (P)T-symétrie	50

2.2.3	EPT-symétrie : PT-symétrie étendue	55
2.3	Réversibilité et courants de probabilité	58
2.3.1	T-symétrie des systèmes sur-amortis & courants de probabilité	58
2.3.2	PT-symétrie : bilan détaillé & courants projetés dans l'espace invariant	61
2.4	Irréversibilité et matière active	63
3	Coarse-graining des Systèmes Actifs	69
3.1	Tenseurs harmoniques : rappels et notations	72
3.1.1	Décomposition de la densité à une particule, tenseurs harmoniques et produit tensoriel symétrique	72
3.1.2	Décomposition de la densité à N particules, moments à une particule et moments conditionnés	74
3.2	Limite diffusive d'une ABP dont les paramètres dépendent de l'espace	76
3.3	Limite diffusive d'un gaz parfait de particules actives	81
3.4	Limite diffusive d'un grand nombre de particules en interaction	85
3.4.1	Hypothèses de travail	85
3.4.2	Moments harmoniques d'ordre 1	87
3.4.3	Comportement asymptotique du terme résiduel Υ_1^k à la limite thermodynamique	88
3.4.4	Limite diffusive	90
3.5	De la limite diffusive à l'hydrodynamique fluctuante	92
3.5.1	Méthode générale	92
3.5.2	Application aux ABPs interagissant par quorum-sensing	93
4	Mapping et pseudo-mapping macroscopiques vers l'équilibre	97
4.1	Réversibilité, intégrabilité, condition de Schwarz et dérivée extérieure fonctionnelle	99
4.1.1	Équation de Fokker–Planck fonctionnelle et réversibilité	99
4.1.2	Théorème de Schwarz généralisé	101
4.1.3	Dérivée extérieure fonctionnelle	103
4.2	Particules actives interagissant par quorum-sensing ou taxie : Mapping vers l'équilibre	105
4.2.1	QSAPS, bilan détaillé macroscopique et MIPS	105
4.2.2	TAPS et mapping vers l'équilibre	109
4.3	Intégrabilité d'un champ scalaire	117
4.4	Intégrabilité d'un champ vectoriel	121
4.4.1	Généralité dans le cas où la dimension de E est quelconque	121
4.4.2	CNS d'intégrabilité, sous forme d'EDP, quand $\dim(E) = 1$	123
4.5	Pseudo-mapping vers l'équilibre	126
4.5.1	Exemple d'un développement à l'ordre 2 en gradients	126

4.5.2	Généralisation à un champ vectoriel	129
4.5.3	Exemples d'application	130
Appendices		135
A	Approche de Jaynes, multiplicateurs de Lagrange et variables thermodynamiques	137
B	Décroissance de la production d'entropie sous coarse-graining	139
C	Actions de groupe	141
D	PT-symétrie	145
D.1	Mesure à deux points et mesure stationnaire	145
D.2	Opérateur adjoint – expression formelle	145
D.3	Opérateur adjoint – expression explicite	146
E	Irréversibilité globale et existence d'une trajectoire irréversible	149
F	Réversibilité de l'équation de Langevin sous-amortie et force gradient	151
G	Matière active et chaleur dissipée	153
H	Opérateur d'évolution PT-dual : généralisation aux bruits multiplicatifs	155
I	Mouvement brownien biaisé en espace courbe, T-réversibilité et descente de gradient	157
J	Limite diffusive d'ABPs et RTPs en interaction quorum-sensing et taxie	161
K	Limite diffusive AOUPs en interaction quorum-sensing et taxie	169
L	De la limite diffusive à l'hydrodynamique fluctuante	173
L.1	Passage d'une fonction à une fonctionnelle	174
L.1.1	De fonctions de $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ à fonctionnelles de $\hat{\rho}$	174
L.1.2	De gradient de fonction de $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ à fonctionnelle de $\hat{\rho}$	175
L.2	Retour à la méthode de Dean généralisée	176

M Factorisation des opérateurs Ω_k	179
M.1 Factorisation polynomiale	180
M.2 Algèbre d'opérateurs et isomorphisme d'algèbres	183
N D'une intégrale nulle à un systèmes d'EDP	187
Liste des publications	191
Bibliographie	191

Chapitre 1

Introduction

1.1 La physique statistique

La physique statistique a pour objet d'étude les systèmes composés d'un grand nombre "d'agents" ou de "particules" élémentaires. Ces agents peuvent être de natures et de tailles très diverses, allant des atomes ou des molécules aux acteurs économiques d'un marché donné, en passant par des grains de sable, des cellules ou des organismes biologiques en général. Dans ce cadre, l'objectif de la physique statistique est de prédire le comportement collectif de ces agents élémentaires.

Pour étudier un système physique, la science a souvent recourt à une démarche réductionniste : elle décompose ce système en sous-systèmes élémentaires, *a priori* plus simples, qu'elle analyse en détails, avant de tenter de comprendre le comportement de l'ensemble du système. Si l'on suppose déjà avoir connaissance du comportement d'un sous-système (i.e. d'un agent) élémentaire, sous la forme d'une équation dynamique décrivant (de manière "satisfaisante") l'évolution d'un agent isolé¹ dans son espace d'état Γ , il peut déjà être compliqué de déduire le comportement d'un nombre restreint d'agents élémentaires interagissant entre eux. Sur le plan analytique, la résolution des équations dynamiques est souvent difficile voire impossible [82], à l'instar du problème à trois corps de la mécanique classique pour lequel il n'existe pas de "solution explicite" générale [49]. Sur le plan numérique, on peut espérer pouvoir "résoudre" l'ensemble des équations dynamiques, c'est à dire, pour un ensemble de conditions initiales données, prédire l'état du système dans le futur avec une précision que l'on s'est donnée au préalable. Cependant, la dynamique de nos quelques agents élémentaires en interaction peut être chaotique,

1. Ce qui est loin d'être toujours facile si l'on pense, par exemple, au cas d'un agent économique.

comme c'est le cas, par exemple, du problème à trois corps. Dans ce cas nos prédictions numériques n'auront la précision fixée qu'à un certain horizon temporel fini. L'élargissement de cet horizon se fait alors au prix d'une plus grande précision dans la connaissance de l'état initial du système, et éventuellement d'une discrétisation numérique plus fine de la variable temporelle.

La physique statistique s'inscrit dans cette démarche scientifique réductionniste, qui consiste à tenter de "déduire" le comportement du tout à partir de celui de ses parties. Mais la physique statistique a ceci de particulier qu'elle s'intéresse à des systèmes généralement composés d'un "très grand" nombre d'agents élémentaires. Pour l'étude d'un volume macroscopique d'un gaz par exemple, ce nombre N est typiquement de l'ordre du nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_A \simeq 6.02 \times 10^{23}$. Pour un tel nombre de particules élémentaires, on ne peut espérer prédire le comportement de l'ensemble du système simplement en simulant la réunion des équations dynamiques de chacun des agents en interaction. En effet, les performances numériques actuelles dans ce domaine permettent de simuler la dynamique (newtonnienne) d'environ 100 millions de particules, sur 10 nanosecondes de temps réel, en une journée de simulation [103, 1, 88]. Autrement dit, pour simuler le comportement de 100 millions de particules sur un temps macroscopique, de l'ordre d'une seconde par exemple, il faudrait effectuer une simulation d'environ 100 millions de jours, c'est à dire 300 milles ans. On peut donc estimer que la simulation de l'évolution de 10^{23} particules sur 1 seconde prendrait environ 1 milliard de milliards d'années, soit bien plus que l'âge de l'univers ! De plus, pour prédire l'évolution d'un système réel sur un temps macroscopique, il faudrait être en mesure de connaître, à un instant donné, l'état de l'ensemble de ses particules élémentaires avec une bonne précision, ce qui est évidemment illusoire si l'on cherche à étudier un volume macroscopique de gaz (à pression atmosphérique par exemple). Enfin, en plus du temps de calcul et de la précision de la mesure des conditions initiales, la capacité de mémoire de stockage serait également un problème majeur si l'on cherchait à prédire numériquement l'évolution d'un trop grand nombre de particules.

Ainsi on ne peut espérer atteindre l'objectif de la physique statistique qu'en remplaçant la dynamique "microscopique" sur l'espace d'état total Γ^N par une approche mathématique différente, plus à même de décrire le comportement collectif des particules, typiquement sur des échelles d'espace et de temps grandes devant les temps et longueurs caractéristiques d'évolution des particules elles-mêmes. La suite de la présente section consiste en un rapide tour d'horizon des différents points de vue élaborés (essentiellement) au fil des deux derniers siècles pour tenter de décrire les comportements collectifs de ces grands ensembles de particules élémentaires. Loin d'être exhaustive, cette section rétrospective a pour but d'introduire les idées et concepts essentiels sur lesquels se fonde la physique statistique de la matière active, thématique sur laquelle portent les travaux de thèse présentés

dans ce manuscrit.

1.1.1 Thermodynamique : observables et macro-états

La Thermodynamique est une théorie essentiellement fondée entre la seconde moitié du XVIII^e siècle et la première moitié du XIX^e siècle² pour répondre aux défis de la première révolution industrielle. Son objectif initial était de pouvoir discerner les machines thermiques physiquement impossibles de celles réalisables [21] et d'optimiser le rendement de ces dernières. Par la suite la thermodynamique s'est peu à peu imposée non seulement comme la science des transferts et conversions d'énergies mais également dans l'étude des changements d'état.

Sur le plan théorique, la thermodynamique conjecture en premier lieu l'existence d'états particuliers des systèmes simples³, appelés *états d'équilibre thermodynamique*, et définis comme suit [21] : un système simple est dans un état dit d'équilibre thermodynamique lorsqu'il est entièrement caractérisé, à l'échelle macroscopique, par son énergie interne U , son volume V ainsi que par la composition N_1, \dots, N_r des agents chimiques qui le constituent⁴.

Bien que la définition de l'équilibre thermodynamique donnée ci-dessus soit primordiale pour axiomatiser le formalisme thermodynamique, il est expérimentalement impossible de l'utiliser comme telle pour vérifier si un système est à l'équilibre ou non. En pratique, “un système sera considéré à l'équilibre thermodynamique si ses propriétés sont décrites de manière consistante par la théorie de la thermodynamique”(traduit de [21]).

Le premier principe de la thermodynamique consiste ensuite à postuler la conservation de l'énergie⁵, exploitant de manière avant-gardiste une caractéristique commune à toutes les théories physiques “fondamentales” : l'invariance par translation dans le temps⁶. Cette conservation implique que la variation de l'énergie d'un système résulte d'échanges énergétiques avec l'extérieur. Ces échanges peuvent être de deux natures différentes : travail W ou chaleur Q , si bien que la

2. Certains travaux importants ont été réalisés antérieurement, comme ceux de Robert Boyle qui démontrent expérimentalement qu'un gaz maintenu à température constante voit le produit de son volume par sa pression inchangé.

3. Un système est dit simple s'il est macroscopiquement homogène, isotrope, non chargé, non soumis à des champs électromagnétique ou gravitationnel, et s'il est suffisamment grand pour que tout effet de bord soit négligeable [21].

4. On ne parlera pas ici des généralisations de la thermodynamique, considérant par exemple des effets électriques ou mécaniques plus complexes

5. On confondra dans cette section énergie globale et énergie interne du système, supposant ainsi que l'énergie cinétique et potentielle du centre de masse du système est la même au début et à la fin des transformations considérées.

6. qui implique la conservation de l'énergie d'après le célèbre théorème d'Emmy Noether

variation infinitésimale de l'énergie interne s'écrit, selon le premier principe :

$$dU = \delta W + \delta Q . \quad (1.1)$$

Notons que cette théorie fût développée à une époque où la nature atomique de la matière n'était qu'une hypothèse, de surcroît largement critiquée, jusqu'au célèbre article de synthèse publié par Jean Perrin en 1909 [86]. Malgré cela, dans la distinction entre travail et chaleur qu'opère la thermodynamique, se dessine déjà une des caractéristiques fondamentales de la physique statistique — théorie qui s'inscrit dans le prolongement direct de la thermodynamique — l'existence de *plusieurs échelles spatio-temporelles distinctes*. En effet le terme “travail” désigne tous les échanges d'énergie se situant à l'échelle spatio-temporelle macroscopique, à laquelle on observe le système ; tandis que la “chaleur” regroupe tous les modes de transfert d'énergie se situant à des échelles d'espaces et de temps plus petites, caractéristiques des constituants élémentaires du système [21].

Le second principe de la thermodynamique constitue, quant à lui, l'autre grand pilier de la théorie. L'une de ses formulations les plus répandues dans les manuels scolaires modernes [94] consiste à postuler l'existence d'une fonction d'état extensive S , appelée *entropie* du système, dont la différentielle vérifie :

$$dS = \frac{\delta Q}{T} + \delta S^c , \quad \delta S^c \geq 0 . \quad (1.2)$$

δS^c est l'entropie créée au cours de la transformation (infinitésimale). Lorsque celle-ci s'annule, la transformation est dite *réversible*. La formulation (1.2) du second principe, bien que très concise, a le mérite de faire apparaître clairement les deux “miracles” contenus dans le second principe, qui sont à la base du succès de la théorie thermodynamique :

- (i) Pour deux états d'équilibre A et B donnés, le rapport du flux de chaleur sur la température est le même pour toute transformation réversible allant de l'état A à l'état B. Autrement dit, “le long de toute transformation réversible”, $\delta Q/T$ est une différentielle exacte. C'est donc la différentielle d'une fonction⁷ appelée *entropie du système* et notée S . C'est l'existence de ce fait expérimental a priori surprenant qui permet de réaliser des calculs de transfert d'énergie (par exemple de calculer une borne supérieure au travail récupérable) bien que l'on ne connaisse quasiment rien des circonstances (ni même, historiquement, de la nature) du transfère énergétique sous forme de flux de chaleur.

7. Pour toute constante réelle c , $S + c$ est également une fonction qui convient. C'est le troisième principe de la thermodynamique, ou “principe de Nernst”, qui fixe cette constante en exigeant que l'entropie s'annule au zéro absolu.

- (ii) L'entropie d'un système isolé ne peut que croître. Sa variation au cours d'une transformation thermodynamique est nulle si et seulement si ladite transformation est réversible. C'est ce principe de croissance de l'entropie d'un système isolé qui fournit le sens "naturel" d'évolution des échanges énergétiques. Ce faisant il permet aussi de répondre à un des objectifs originels de la thermodynamique : distinguer les machines thermiques réalisables de celle physiquement interdites (selon que l'entropie totale croisse ou décroisse au cours d'un cycle).

Notons que (ii) est souvent qualifié de "flèche du temps" thermodynamique, ce qui peut paraître paradoxalement donné que le temps n'apparaît pas explicitement dans la formulation théorique de la thermodynamique. L'absence de la variable temporelle dans le formalisme thermodynamique est essentiellement une conséquence du point (i) : "l'information maximale" sur une transformation – i.e. la valeur de toutes les variables thermodynamiques au cours de la transformation – est obtenue seulement quand celle-ci est réversible, donc infiniment lente, ce qui implique qu'on se place implicitement dans la limite de temps de transformation infini lorsqu'on manipule les différentielles des fonctions d'état.

Enfin, signalons que la fonction $S(U, V, N_1, \dots, N_r)$ contient toute l'information thermodynamique sur un système donné, à l'équilibre thermodynamique. Elle est ainsi nommée *fonction fondamentale*⁸. En vertu de l'extensivité de S et de ses variables, on peut aisément obtenir l'équation fondamentale d'un système composite⁹ en fonction de celles des systèmes simples qui le composent. Ensuite, le second principe affirme que, de tous les états d'équilibre intérieurement contraints de ce système composite, l'état d'équilibre sans contrainte interne est celui d'entropie maximale. Selon les circonstances de la transformation effectuée (qui consiste formellement à relâcher des contraintes internes), il peut être judicieux de remplacer l'entropie par l'une ou l'autre de ses transformées de Legendre (partielle ou totale). Ces transformées de Legendre sont appelés *potentiels thermodynamiques* et sont aussi extrémalisées lors du relâchement des contraintes appropriées. Dans la pratique, ces potentiels jouent un rôle majeur en thermodynamique, et nous verrons que leurs généralisations "variationnelles" sont d'une grande importance également en physique statistique.

8. C'est plus précisément la formulation entropique de l'équation fondamentale. La connaissance de la fonction $U(S, V, N_1, \dots, N_r)$ est quant à elle appelée "formulation énergétique" de l'équation fondamentale.

9. Un système composite est défini comme la réunion de systèmes simples.

1.1.2 Physique statistique d'équilibre : mesure de probabilité et micro-états

La physique statistique à proprement parler naît de la volonté d'ancrer la thermodynamique sur des bases plus “fondamentales”. Elle voit le jour dans la seconde moitié du XIXe siècle, Boltzmann, Maxwell et Gibbs étant souvent considérés comme ses principaux fondateurs. Bien que formulée en partie avant l'établissement du consensus scientifique autour de la nature atomique de la matière, cette approche met au premier plan l'espace Γ^N des *micro-états* puisqu'elle affirme que les grandeurs thermodynamiques \bar{A} sont des moyennes temporelles (à temps “long”) d’observables A sur Γ^N :

$$\bar{A} \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau A(\mathbf{x}(t)) dt , \quad (1.3)$$

où $(\mathbf{x}(t))_{t \geq 0}$ est la trajectoire du système dans l'espace Γ^N au cours de la mesure de \bar{A} . Mais cette nouvelle approche propose de remplacer dans les calculs la dynamique sur Γ^N par une mesure de probabilité ν sur ce même espace, laissée invariante par la dynamique. C'est le *principe ergodique* selon lequel, pour un système à l'équilibre thermodynamique, la moyenne temporelle sur A peut être remplacée par la moyenne d'ensemble associée à ν :

$$\bar{A} = \langle A \rangle \equiv \int_{\Gamma^N} A(\mathbf{x}) \nu(d\mathbf{x}) . \quad (1.4)$$

Le second postulat, sur lequel se fonde cette physique statistique des systèmes d'équilibre, affirme que, pour un système isolé, cette mesure ν coïncide avec la mesure uniforme sur le sous-ensemble de Γ^N d'énergie constante, égale à celle du système. Ce second postulat permet ensuite de déduire la mesure ν dans des situations plus générales, quand le système est en contact avec divers “réservoirs” (énergie, particules,...). Les mesures ainsi obtenues sont les *mesures de Gibbs*. Par exemple, dans le cas d'un système en contact avec un thermostat à température T , ν est appelée mesure *canonique*, et a pour densité

$$p_{\text{Gibbs}}(\mathbf{x}) = Z^{-1} e^{-\beta H(\mathbf{x})} \quad (1.5)$$

où H est l'Hamiltonien du système, $\beta = (k_B T)^{-1}$ est l'inverse de la température, et $Z(\beta)$ est la constante de normalisation, aussi appelée *fonction de partition*. C'est justement cette fonction de partition qui permet de retrouver toute la thermodynamique du système, puisque $F \equiv -\beta^{-1} \ln Z(\beta)$ coïncide avec l'énergie libre de Gibbs de la thermodynamique¹⁰.

10. Certains ouvrages nomment cette énergie libre : “l'énergie libre de Helmholtz” et réservent le qualificatif “énergie libre de Gibbs” à l'enthalpie libre.

Notons de même que l'entropie thermodynamique S_{th} coïncide (à k_B près) avec *l'entropie de Shannon* associée à la probabilité de Gibbs p_{Gibbs} de l'ensemble approprié :

$$S_{\text{th}} = k_B S_{\text{Sh}}[p_{\text{Gibbs}}] , \quad \text{où} \quad S_{\text{Sh}}[p] \equiv - \int_{\Gamma^N} p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.6)$$

Ce résultat, *a priori* étonnant, est la partie émergée d'un lien profond entre physique statistique, thermodynamique et théorie de l'information, mise au jour par Jaynes dans un article datant de 1957 [53]. Dans cet article, Jaynes montre que les mesures de Gibbs maximisent l'entropie de Shannon — vue comme fonctionnelle de probabilités — sous contrainte de moyenne des observables appropriées. Par exemple, la mesure canonique (1.5) maximise $S_{\text{Sh}}[p]$ à $\langle H \rangle$ fixé.

Si l'on applique la méthode de Lagrange pour maximiser l'entropie de Shannon, en fixant la valeur moyenne de n observables $(A_i)_{i=1\dots n}$, il apparaît que les coefficients de Lagrange $(\lambda_i)_{i=1\dots n}$ correspondent aux variables thermodynamiques conjuguées aux $\langle A_i \rangle$. Ainsi pour des réservoirs donnés, on peut considérer les λ_i comme étant fixés (température, potentiels chimiques,...), et la méthode de Lagrange revient alors simplement à minimiser le *potentiel variationnel* :

$$\Psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}[p] \equiv \sum_{i=1}^n \lambda_i \langle A_i \rangle_p - S_{\text{Sh}}[p] , \quad \text{où} \quad \langle A_i \rangle_p \equiv \int_{\Gamma^N} A_i(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} . \quad (1.7)$$

La résolution de ce problème donne les fameuses mesures de Gibbs :

$$p_{\text{Gibbs}}(\mathbf{x}) = e^{-\sum_i \lambda_i A_i(\mathbf{x}) + \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)} \quad (1.8)$$

où $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ est l'opposée de l'exponentielle de la fonction de partition associée à la mesure. Autrement dit c'est le potentiel thermodynamique de l'ensemble statistique considéré¹¹. A l'équilibre le potentiel variationnel coïncide avec ce potentiel thermodynamique $\Psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}[p_{\text{Gibbs}}] = \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$.

Ainsi l'extrémalisation des potentiels variationnels remplace, au niveau statistique, celle des potentiels thermodynamiques. On verra dans la section suivante, ainsi qu'au chapitre 2, que l'évolution d'un processus stochastique d'équilibre présente généralement une structure de descente de gradient pour un potentiel variationnel.

Par ailleurs, notons que l'application des méthodes mentionnées dans ce paragraphe est conditionnée au fait que le système étudié soit à l'équilibre thermodynamique. Mais la définition de l'équilibre au sens thermodynamique est difficilement

11. Pour être tout à fait précis, les λ_i ne coïncident pas totalement avec les grandeurs intensives thermodynamiques “usuelles” T, μ, \dots , et, dans l'équation (1.8), ψ est un potentiel de Massieu (transformées de Legendre de l'entropie) plutôt qu'un potentiel thermodynamique (transformées de Legendre de l'énergie). On explique ces différences dans l'appendice A.

vérifiable directement en pratique, comme nous l'avons discuté dans la section précédente. C'est sans doute pour cette raison que bon nombre d'ouvrages de physique statistique [46, 34] définissent l'état d'équilibre lui-même par les mesures de Gibbs : *un système est dit à l'équilibre thermodynamique si sa distribution dans l'état stationnaire est une mesure de Gibbs.* Nous verrons par la suite qu'il existe encore une autre définition de l'équilibre, sans doute mieux adaptée à l'approche, plus dynamique, des processus stochastiques — approche que nous avons systématiquement adoptée au cours de cette thèse — et qui a trait à la réversibilité temporelle.

Finalement, la physique des ensembles statistiques, présentée brièvement dans cette section, propose d'étudier un système à l'équilibre par le programme suivant : trouver l'ensemble statistique adapté au système que l'on souhaite étudier (c'est à dire, notamment, trouver un Hamiltonien idoine) ; puis calculer la fonction de partition, celle-ci contenant toute l'information thermodynamique du système. Ce programme général, formellement bien compris, peut laisser entendre que l'étude statistique des systèmes à l'équilibre est un problème “résolu” de manière générale. Or, dans les faits, le calcul de la fonction de partition est souvent extraordinairement complexe. On peut alors tenter d'estimer la mesure d'équilibre numériquement, par exemple par des méthodes de type Monte-Carlo. Mais, à nouveau, ces méthodes numériques ne peuvent fonctionner que si le nombre N de particules considérées n'est pas trop grand. En effet, il semble illusoire d'espérer estimer une mesure sur un espace Γ^N dont la dimension est de l'ordre du nombre d'Avogadro. Lorsque N est de l'ordre de \mathcal{N}_A , si on peut négliger les interactions entre les particules, i.e. si l'ensemble des particules constitue un gaz parfait, la mesure se factorise et on est alors ramené à l'étude, considérablement plus simple, d'une mesure sur Γ . Lorsque ce n'est pas le cas, il est nécessaire de réduire encore la complexité de la modélisation mathématique pour décrire le problème. On présente deux autres méthodes de “réduction de complexité” (applicable dans certains contextes) dans les deux sections suivantes.

1.1.3 Séparation d'échelle et équation de Langevin

En 1827, le naturaliste écossais Robert Brown observe et décrit le mouvement erratique de particules issues de grains de pollen de la plante *Clarkia pulchella*, ces particules étant plongées dans de l'eau. Par la suite il reproduit l'expérience avec des particules inorganiques et conclut que l'explication vitaliste – selon laquelle ce serait “l'énergie vitale” présente dans les particules de pollen qui leur conférerait un tel mouvement – ne peut pas être exacte [18]. Bien que Robert Brown ne soit

pas le premier à réaliser de telles expériences¹², et ne propose pas de théorie pour expliquer ses observations, ce mouvement erratique sera par la suite baptisé, en son honneur, mouvement brownien.

A la suite notamment des travaux d’Einstein, Smoluchovski, Perrin et Langevin¹³, il apparaît clairement que ce sont les chocs de ces particules mésoscopiques avec les particules microscopiques du solvant qui sont à l’origine de ce mouvement aléatoire. Pour modéliser de tels types de mouvements, Paul Langevin introduit en 1908 [61] une équation différentielle d’un genre nouveau, contenant une partie stochastique :

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla V(\mathbf{r}) - \gamma\dot{\mathbf{r}} + \boldsymbol{\eta} \quad (1.9)$$

où m est la masse de la particule, \mathbf{r} est sa position, V est un potentiel extérieur dans lequel la particule évolue, γ est le coefficient de friction, et $\boldsymbol{\eta}$ est un processus aléatoire gaussien, centré, et dont les corrélations satisfont $\langle \eta^i(t)\eta^j(s) \rangle = 2\gamma k_B T \delta^{ij} \delta(t-s)$, T étant la température du bain. L’interaction d’une particule mésoscopique avec son bain microscopique environnant est ainsi décomposée en une force moyenne $-\gamma\dot{\mathbf{r}}$ correspondant à un frottement fluide, à laquelle s’ajoute une force aléatoire, de moyenne nulle, représentée par $\boldsymbol{\eta}$.

L’équation (1.9), appelée *équation de Langevin* (sous-amortie), opère une formidable réduction des degrés de liberté du système total {particule mésoscopique + solvant} puisque l’on passe d’une dynamique sur Γ^{N+1} , où le nombre de particule du bain N est grand devant 1, à une dynamique aléatoire sur Γ ; le prix à payer étant que le déterminisme des équations de Newton est remplacé par une dynamique stochastique. De plus, cette méthode se généralise aux cas de plusieurs particules mésoscopiques interagissant les unes avec les autres.

Notons que, dans certains cas, il est possible de procéder analytiquement à une telle opération. Par exemple, en une dimension d’espace, en modélisant les particules du bain par un grand nombre d’oscillateurs harmoniques, couplés à la particule mésoscopique par une interaction elle aussi harmonique, on obtient l’équation suivante pour la dynamique de la particule mésoscopique [135] :

$$m\ddot{r}(t) = -\nabla V(r) - \int_0^t K(t-s)\dot{r}(s)ds + \xi. \quad (1.10)$$

Si la mesure initiale sur l’état des oscillateurs correspond à celle de l’ensemble canonique, ξ est un processus gaussien centré, tel que $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = k_B T K(t-s)$. L’équation obtenue est en tout point similaire à celle de Langevin (1.9), excepté le

12. Par exemple, en 1785, Jan Ingenhousz observe que des particules de charbon flottant dans de l’alcool présentent un mouvement de nature en apparence aléatoire.

13. Louis Bachelier décrit un mouvement similaire au mouvement brownien dans sa thèse, dès 1900. Il avait pour but de décrire les fluctuations du prix des actions boursières, mais ses travaux ne seront re-découverts que plus tard.

fait qu'elle possède *une mémoire* : la force de frottement fluide ainsi que les corrélations du terme stochastique — donc la dynamique de la particule mésoscopique — dépendent de l'état du système à des temps antérieurs, via le noyau de mémoire K . On dit qu'une telle dynamique est *non markovienne*. Notons que ce n'était pas le cas de la dynamique initiale portant sur l'ensemble des couples position-vitesse (r_i, v_i) qui, elle, était bien markovienne. Ainsi la projection de degrés de libertés déterministes et markoviens se fait au prix, non seulement du caractère déterministe, mais également du caractère markovien de la dynamique. Cependant en prenant la limite de "mémoire infiniment courte" $K(t-s) \rightarrow 2\gamma\delta(t-s)$ de l'équation (1.10), on retrouve (la version unidimensionnelle de) l'équation de Langevin (1.9). Celle-ci apparaît ainsi comme une situation limite, valide quand le temps typique de relaxation de la particule mésoscopique (donné par sa masse m divisée par l'amplitude typique de K) est grand devant le temps caractéristique de "mémoire du bain" (le temps typique de décroissance de K).

Par ailleurs, l'équation de Langevin (1.9) elle-même présente une situation limite intéressante. Celle-ci s'applique lorsque le système étudié évolue dans des conditions telles que l'inertie de la particule est négligeable devant le frottement fluide, i.e quand le nombre de Reynolds est très petit devant 1. L'équation (1.9) peut alors être approximée par *l'équation de Langevin sur-amortie* :

$$\dot{\mathbf{r}} = -\gamma^{-1} \nabla V(\mathbf{r}) + \gamma^{-1} \boldsymbol{\eta} . \quad (1.11)$$

Toutes les situations étudiées durant cette thèse rentrent dans cette catégorie. C'est pourquoi on s'intéressera dans la suite essentiellement aux propriétés de tel systèmes "sur-amortis".

A toute équation différentielle stochastique markovienne, telle que les équations (1.9) et (1.11), on peut associer une équation aux dérivées partielles (déterministe), dite de Fokker–Planck, donnant l'évolution de la mesure de probabilité du système au cours du temps. Notons que pour le cas sur-amorti, cette équation de Fokker–Planck prend une forme bien particulière :

$$\partial_t p_t(\mathbf{r}) = \gamma^{-1} \nabla \cdot \left[p_t(\mathbf{r}) \nabla \frac{\delta \mathcal{F}[p_t]}{\delta p(\mathbf{r})} \right] , \quad (1.12)$$

où

$$\mathcal{F}[p] = \int p(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \beta^{-1} \int p(\mathbf{r}') \log p(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' . \quad (1.13)$$

Nous verrons au chapitre 5 qu'un espace tel que celui des densités de probabilité sur Γ peut être muni d'une structure riemannienne permettant d'interpréter l'équation (1.12) comme une descente de gradient de la fonctionnelle \mathcal{F} , qui n'est rien d'autre que l'énergie libre variationnelle. Ainsi, il n'est pas surprenant que la mesure stationnaire associée à la particule sur-amortie soit la mesure de Gibbs

de l'ensemble canonique (1.5) avec l'énergie $H = V$. Notons que, bien que l'équation de Fokker–Planck associée à l'équation de Langevin sous-amortie (1.9) soit un peu plus compliquée à interpréter géométriquement que celle (1.12) associée à une équation de Langevin sur–amortie (descente de gradient fonctionnelle), sa mesure stationnaire est également une mesure de Gibbs canonique (1.5) d'hamiltonien $H = V + m|\mathbf{v}|^2/2$. Ainsi une particule dont le comportement est décrit par l'équation (1.9) ou (1.11) constitue bien un système à l'équilibre thermodynamique, selon la définition donnée à la section 1.1.2.

Cependant, dans de tels contextes, où l'on modélise l'évolution (de certains degrés de liberté) du système par une équation différentielle stochastique, il existe une autre définition, plus dynamique, de l'équilibre : celle du *bilan détaillé*. Un système est à l'équilibre au sens du bilan détaillé (ou “vérifie le bilan détaillé”) si et seulement si, dans son état stationnaire, toute trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in [0; T]}$ (dans l'espace Γ d'états de la particule et sur un intervalle temporel $[0; T]$) est aussi probable que sa trajectoire “renversée en temps” $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in [0; T]}$. Pour l'équation de Langevin, le réversement temporelle d'une trajectoire $(\mathbf{r}_t)_{t \in [0; T]}$ consiste simplement à parcourir la trajectoire en sens inverse $(\bar{\mathbf{r}}_t)_{t \in [0; T]} \equiv (\mathbf{r}_{T-t})_{t \in [0; T]}$. Nous verrons au chapitre 2 que l'équation de Langevin (sous–amortie (1.9) comme sur–amortie(1.11) est également réversible au sens du bilan détaillé. Dans des situations plus générales, telles que celle d'une particule colloïdale chargée soumise à un champ magnétique, ou celle d'une simple particule active, la notion de “trajectoire renversée en temps” peut être plus subtile et sera discutée en détails au chapitre 2.

1.1.4 La théorie des champs

Une autre limite de l'approche de la physique statistique classique, qui met au premier plan l'étude d'une mesure sur Γ^N , est la difficulté de faire le lien entre les propriétés du système en différents points de l'espace “réel” et ce qu'il se passe dans l'espace des états Γ^N (du moins quand les calculs exactes sont hors d'atteinte). En effet, caractériser un système par une mesure sur l'espace des micro-états Γ^N met structurellement au premier plan des “informations” sur le comportement de chacune des particules. Tandis que pour étudier les comportements collectifs de telles particules, se déployant dans l'espace réel, on aimerait plutôt une approche mathématique structurant l'information — sur le comportement du système — au voisinage de chaque point de l'espace, *i.e.* une description du système via des fonctions (en autres) de la variable spatiale. Cette dernière approche, qui met l'espace réel au premier plan, est celle de la théorie des champs¹⁴.

14. Notons que ces deux types d'approche mathématique coïncident seulement lorsque les particules sont fixes, sur un réseau par exemple. D'où la pertinence de l'approche des ensembles statistiques aux modèles tels que ceux d'Ising ou d'Heisenberg par exemples, pour étudier les transitions de phase. En effet, le modèle d'Ising en dimension d , par exemple, a pour espace des

Dans la suite, on note de manière générique E l'espace “réel” ou “physique” du contexte étudié. Par exemple, dans la plupart des conditions expérimentales auxquelles nous allons nous intéresser, les particules évoluent dans un espace euclidien, de telle sorte $E \subseteq \mathbb{R}^d$. Ou encore, pour des simulations numériques en 2D avec conditions aux bords périodiques, E est le tore de dimension 2 — conditions dans lesquelles toutes les simulations de cette thèse ont été réalisées.

Un *champ* sur E est alors une application de E dans un espace \mathcal{A} — qui est généralement muni d'une structure d'espace vectoriel. Une *théorie des champs* est alors une description dynamique et/ou statistique d'un ensemble de champs $\phi_k : E \rightarrow \mathcal{A}_k$ censés caractériser un système physique à une échelle donnée.

La théorie de l'hydrodynamique nous enseigne que, pour décrire un système (classique) à de grandes échelles d'espace et de temps, il suffit d'établir la dynamique de ses champs ϕ_k dits “hydrodynamiques”. Ces champs sont les modes lents du système, i.e. ceux dont le temps typique de relaxation diverge avec la taille du système. Ces champs peuvent être de natures distinctes, par exemple :

- des champs associés à des quantités conservées. On parle encore de “modes hydrodynamiques fondamentaux”. Ce sont : la densité de matière (en masse ou en nombre), la densité d'énergie, ainsi que la densité d'impulsion¹⁵.
- des champs associés à des symétries continues spontanément brisées, encore appelés modes de Nambu-Goldstone.
- des champs associés à modes “critiques”, tels que la polarisation dans le modèle A par exemple.

Mathématiquement, le passage à une théorie des champs commence par l'identification des observables $\varphi_k^i : \Gamma^N \rightarrow \mathcal{A}_k$, permettant d'attribuer à chaque particule i des grandeurs physiques dont les ϕ_k sont les densités spatiales. Ce sont, par exemple, les observables d'énergie, ou d'impulsion de chacune des particules. Ensuite on définit les *champs empiriques* :

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_k^{(N)} &: \Gamma^N \longrightarrow \mathbb{A}_k \\ \mathbf{x} &\longmapsto \hat{\phi}_k^{(N)}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=1 \dots N} \varphi_k^i(\mathbf{x}) \delta_{\mathbf{r}_i} \end{aligned}$$

où on a noté \mathbb{A}_k l'espace des champs sur E à valeur dans \mathcal{A}_k ¹⁶, $\mathbf{x} \in \Gamma^N$ le micro-état, \mathbf{r}_i la position de la i ème particule dans le micro-état \mathbf{x} , et $\delta_{\mathbf{r}}$ le delta de Dirac en $\mathbf{r} \in E$. Par exemple, si on part de la description microscopique d'un système hamiltonien de particules de masse m interagissant via un potentiel de paires V

d'état $\Gamma^N = \{-1; 1\}^N$. Si les spins sont disposés sur un réseau $R \subset \mathbb{R}^d$, l'état du système dans Γ^N est équivalent à la valeur d'une fonction de R dans $\{-1; 1\}$, i.e. à l'état d'un champ.

15. La conservation du moment angulaire des systèmes microscopiques hamiltoniens est particulière et ne donne généralement pas lieu à un mode hydrodynamique [43]

16. qui ne sont en fait pas vraiment des fonctions sur E , mais des distributions à valeur dans \mathcal{A}_k .

alors $\mathbf{x} = (\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)_{i=1,\dots,N}$ et si ϕ_k est, par exemple, la densité d'énergie, alors

$$\varphi_k^i(\mathbf{x}) = \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (1.14)$$

Enfin, si $\mathbf{x}(t)$ est une solution de la dynamique sur Γ^N , dériver par rapport au temps les $\hat{\phi}_k^{(N)}(\mathbf{x}(t))$ donne un système d'équations dynamiques sur les $\hat{\phi}_k^{(N)}$, ce système n'étant pas nécessairement fermé¹⁷. Un problème ouvert est alors de calculer la limite de ce système d'équations quand $N \rightarrow \infty$ et de déterminer si celle-ci correspond à un ensemble fermé d'équations sur les $\phi_k = \lim_{N \rightarrow \infty} \hat{\phi}_k^{(N)}$.

Les calculs étant très difficiles à mener en général, il faut faire des approximations. Tout d'abord on peut par exemple faire un développement en gradients des équations génériques sur ϕ_k . Ensuite, en hydrodynamique des systèmes passifs (comme pour l'équation de Navier-Stokes classique par exemple), on fait généralement une hypothèse d'équilibre local¹⁸ qui permet d'obtenir notamment les coefficients de réponse en fonction d'observables microscopiques du système (via les relations de Green-Kubo).

Une autre approche consiste à se contenter d'une forme phénoménologique des équations dynamiques des ϕ_k , en prenant des développements en gradients aux ordres "les plus bas possibles" (mais rendant toujours compte de la phénoménologie), en respectant les symétries du système microscopique sous-jacent. On étudiera de telles équations phénoménologiques de champs notamment au chapitre 5.

Dans le cadre des systèmes actifs, où aucune hypothèse d'équilibre local ne peut être faite *a priori*, nous adopterons une méthode légèrement différente pour réaliser des coarse-graining de manière explicite au chapitre 3. Celle-ci consistera à prendre une limite diffusive de grande taille et de grand temps, explicitement au niveau de Γ^N , pour se ramener à un espace d'état réduit à E^N . Puis nous prendrons simplement le pushforward de la dynamique effective obtenue sur E^N pour se ramener à une dynamique stochastique sur les sommes de N masses de Dirac sur E . Enfin, nous utiliserons le calcul stochastique [28, 109] pour étendre cette équation stochastique aux champs continus sur E , ce qui sera suffisant dans le cas de la "matière active scalaire sèche" qui est l'objet d'étude cette thèse et que nous présentons à présent.

17. Cet opération de transport de la dynamique de Γ^N à un système d'équations hydrodynamiques correspond moralement au pushforward (au sens géométrique) du champ de vecteur sur Γ^N par $\hat{\Phi}^{(N)} : \mathbf{x} \in \Gamma^N \mapsto (\hat{\phi}_k^{(N)}(\mathbf{x}))_k \in \mathbb{A}$, où \mathbb{A} est l'espace des application de E dans $\prod_k \mathcal{A}_k$.

18. Qui consiste à supposer que le pushforward de la mesure sur Γ^N par $\hat{\Phi}^{(N)}$ est une mesure de Gibbs généralisée, dans laquelle les produits $\lambda_i A_i$ de (1.8) sont remplacés par les intégrales $\int_E \lambda_i(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ [67].

1.2 La matière active

Les théories de la thermodynamique et de la physique statistique des systèmes d'équilibre ont non seulement constitué de formidables avancées en terme de compréhension des “lois de la nature”, mais elles ont également permis d'incroyables progrès technologiques tels que la conception et l'optimisation de machines thermiques (chauffage ; conservation alimentaire ; propulsion des véhicules thermiques ; production d'électricité à partir de la combustion d'énergie fossile où de la désintégration d'éléments radioactifs, via des turbines), l'essor des industries pharmaceutiques et cosmétiques (*via* le développement de la chimie thermodynamique et cinétique notamment), ou également la fabrication des écrans LCD (“liquid crystal display”) qui se partagent le marché de l'affichage des appareils électroniques avec la technologie OLED (“organic light emitting diode”).

Cependant, la portée de ces théories reste tout de même limitée puisqu'elles ne permettent pas de décrire les systèmes qui ne sont pas à l'équilibre thermodynamique. Parmi ces systèmes hors équilibre, on peut prendre pour exemple les *systèmes vitreux*, qui restent bloqués dans certains secteurs d'un paysage d'énergie libre accidenté et n'atteignent un état d'équilibre que pour des temps infiniment longs. Ou encore les systèmes auxquels on impose des *conditions aux bords non-homogènes*, comme une barre de fer que l'on met en contact à ses extrémités avec deux thermostats à des températures différentes. Un autre exemple consiste à *imposer un champ* (non gradient) à un système diffusif. Par exemple un champ électrique “solénoïdale” (que l'on peut créer en faisant circuler un courant alternatif dans une bobine) imposé à des ions en solution, de telle sorte que, si le temps caractéristique d'évolution du champ est très grand devant le temps typique de relaxation de la solution ionique, alors on peut considérer une échelle de temps intermédiaire, sur laquelle le champ est approximativement constant. L'état du système peut alors être considéré comme stationnaire : la densité ionique ne varie plus mais il existe des courants dissipatifs de particules (les charges négatives se propageant dans un sens, et les positives dans le sens opposé).

Les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit ont eu pour but l'étude d'une autre classe de systèmes hors d'équilibre, celles des *systèmes actifs*. Dans ces systèmes les agents élémentaires transforment (et dissipent) de l'énergie pour exercer une force persistante sur leur environnement leur permettant de se propulser. Contrairement aux exemples des systèmes pilotés par les bords ou par un champ global présentés ci-dessus, la violation du bilan détaillé dans les systèmes actifs provient non pas d'une force extérieure imposée mais d'une force “interne”, qui constitue un degré de liberté propre à chaque particule : sa force d'autopropulsion.

1.2.1 L'omniprésence des systèmes actifs

Le monde du vivant constitue un extraordinaire vivier de systèmes actifs, et ce à de nombreuses échelles.

Les cellules d'un organisme vivant pluricellulaire, par exemple, possèdent un cytosquelette (Fig 1.1 (f)) qui, couplé à des protéines appelées "moteurs moléculaires", remplit un grand nombre de fonctions [99]. Par exemple, le déplacement (alimenté par l'hydrolyse de l'ATP) des kinésines et les dynéines (qui sont des familles de protéines) le long des microtubules du cytosquelette est notamment responsable du transport intra-cellulaire de vésicules. Chez les vertébrés, la contraction musculaire est, quant à elle, assurée par le déplacement (également alimenté par l'hydrolyse d'ATP) des myosines le long des filaments d'actine du cytosquelette.

Par ailleurs, toujours à l'échelle cellulaire, certaines bactéries, telles que *Escherichia Coli*, sont munies de flagelles, contrôlés par des moteurs moléculaires, grâce auxquels ces bactéries peuvent acquérir un mouvement persistant, leur permettant notamment de mieux explorer leur environnement [87, 64, 36]. De même, les spermatozoïdes [47], gamètes mâles des espèces à mode de reproduction sexué (mais aussi de certains végétaux tels que l'algue Chlamydomonas [9, 3]), sont également propulsés par des flagelles, eux-même mis en mouvement par des moteurs moléculaires "consommant" de l'ATP. Des suspensions de tels organismes constituent ainsi des systèmes actifs à part entière.

A une échelle légèrement plus grande, un tissu de cellules (rendues motiles grâce à des moteurs moléculaires, également) constitue, dans son entièreté, un système actif [99]. La morphogenèse [77, 81], la cicatrisation [105] (Fig 1.1 (d)), ou le développement tumoral [132] sont des exemples de comportement collectifs de tels systèmes actifs.

A une échelle plus macroscopique, les groupes d'animaux, tels les essaims de criquets [130, 95] (Fig 1.1(c)), les vols d'étourneaux [7, 25, 12] (Fig 1.1(a)), les bancs de maquereaux [55, 22] (Fig 1.1(b)) ou même les foules humaines [107], constituent également des systèmes actifs, capables de comportements collectifs.

Les systèmes biologiques ont été la source de motivation première qui encouragea les physiciens à étudier les propriétés des systèmes actifs. Mais, depuis une vingtaine d'années, des systèmes actifs synthétiques ont vu le jour dans les laboratoires, non seulement dans le but de mieux comprendre les systèmes biologiques, mais également dans l'espoir de créer un genre nouveau de matériaux, biomimétiques, aux propriétés inédites. De tels systèmes actifs synthétiques peuvent être alimentés par des sources d'énergie très variées. Cette source énergétique peut être, entre autres, de nature mécanique, comme dans le cas de disques à symétrie polaire déposés sur une plaque vibrante [29, 30] (Fig 1.1(g)), électrique, par exemple pour des "Quincke rollers" [15, 16] (Fig 1.1(h)), ou chimique, comme dans

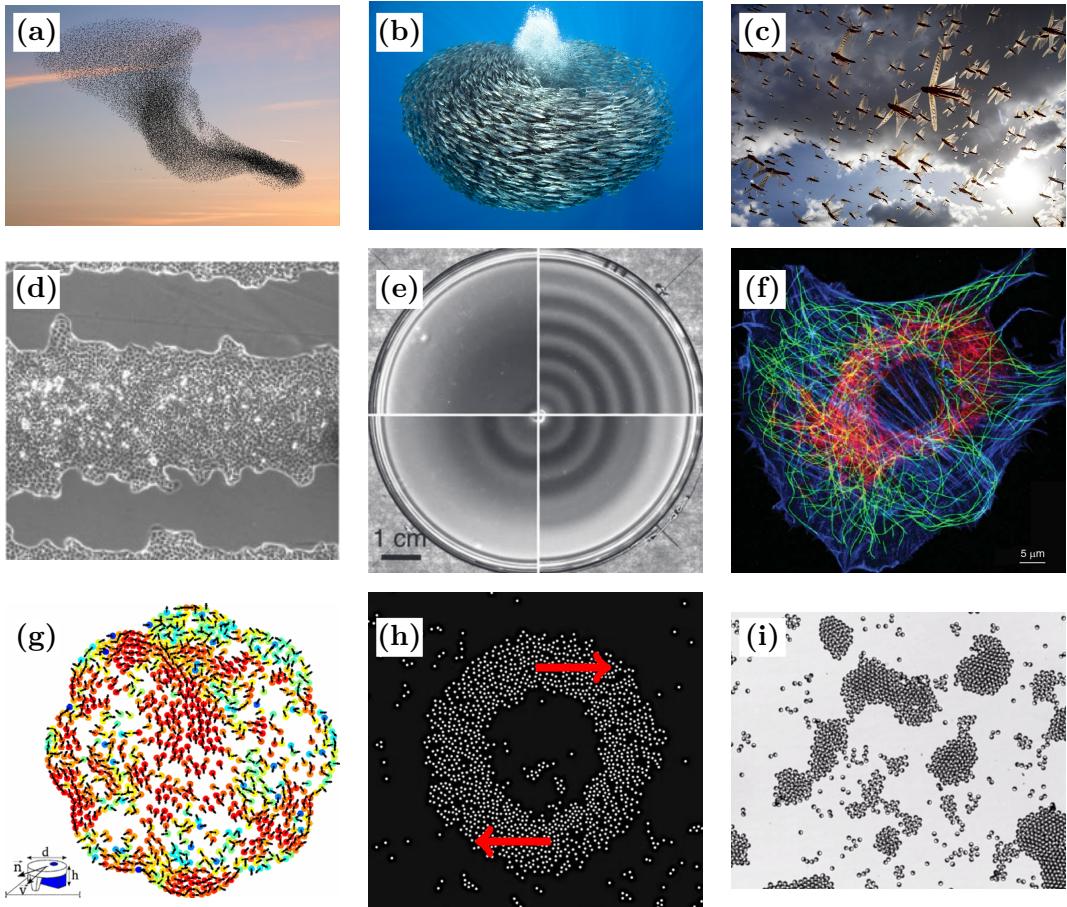


Figure 1.1 – (a) Vol d’étourneaux. (b) Banc de maquereaux. (c) Nuée de criquets. (d) Cicatrisation d’un tissu épithérial [93]. (e) Colonies de bactéries formant des motifs en anneaux concentriques [64]. (f) Microscopie à fluorescence du cytosquelette d’un fibroblaste. Les filaments d’actine sont en bleu, les filaments intermédiaires en rouge et les microtubules en vert [91]. (g) Mouvement collectif de disques polaires vibrés [29]. (h) Anneau de “Quincke rollers” en rotation (les flèches rouges indiquant le sens de rotation) [66]. (i) Clusters de colloïdes Janus [124].

le cas de colloïdes Janus propulsés par diffusiophorèse [52, 122, 85] (Fig 1.1(i)).

Un domaine connexe est celui de la “robotique en essaim” qui consiste à étudier les propriétés d’ensembles de robots ou de drones (autopropulsés) en interaction. Le fait que ces robots soient munis d’une forme d’autonomie et interagissent entre eux et avec leur environnement *via* des règles simples — plutôt que leurs com-

portements et leur trajectoires soient imposés de manière déterministe par des programmes informatiques — peut permettre d'améliorer leur adaptabilité à un environnement complexe [35, 126, 125, 59]. Ce domaine de recherche, qui se situe à l'interface entre la robotique et la physique de la matière active, porte de grands espoirs en terme d'applications. On peut prendre pour exemple : les essaims de drones que certains espèrent un jour capable d'effectuer des tâches de contrôle ou de maintenance de structures agricoles par exemple ; ou de nano-robots qui seront peut être un jour employés pour des traitements médicaux ciblés à petite échelle [35].

Au niveau phénoménologique, les systèmes actifs peuvent faire montre de comportements collectifs nouveaux, inaccessibles aux systèmes à l'équilibre thermodynamique. Un premier exemple paradigmique de tels comportement émergents est le mouvement collectif de particules actives (Fig 1.1 (a–d),(g) et (h)) qui correspond au déplacement de ces particules selon une direction corrélée sur des échelles de longueur grandes devant la distance typique entre les particules [123, 127, 51, 19, 78, 73]. Un second exemple de comportement émergent, paradigmatic de la matière active scalaire (que nous avons étudiée au cours de cette thèse), est la séparation de phase induite par la motilité (figure 1.1(e), (h), (i) et figure 1.2) qui fait l'objet d'un chapitre d'ouvrage à la rédaction duquel j'ai participé [P1]. MIPS consiste en la possible coexistence (à l'état stationnaire) de deux phases scalaires homogènes de densités différentes. Bien que MIPS et la séparation liquide-gaz d'un système à l'équilibre soient phénoménologiquement très similaires, les mécanismes microscopiques qui sous-tendent ces deux comportements émergents sont pourtant très différents. Tandis qu'une séparation liquide-gaz d'équilibre nécessite que l'interaction entre les particules soit attractive dans un certain intervalle de distance, MIPS peut avoir lieu dès que les interactions entre particules actives provoquent leur ralentissement lorsque la densité locale de particules augmente : ce phénomène peut en effet engendrer un boucle de rétroaction dans laquelle un agrégat de particule entraîne le ralentissement des particules dans son voisinage, ces dernières s'accumulant alors dans l'agrégat pour faire croître sa taille et donc sa région “d'influence”, menant *in fine* à une séparation de phase [23, 24, 96, 41]. Il a été montré (voir figure 1.2) que MIPS peut avoir lieu notamment dans deux types différents de systèmes actifs : le premier correspondant à des particules activent interagissant via des interactions répulsives de paires, et le second à des particules interagissant *via* “quorum-sensing”, un mode d'interaction que l'on présente à la section 1.2.3 et que nous avons étudié au cours de cette thèse.

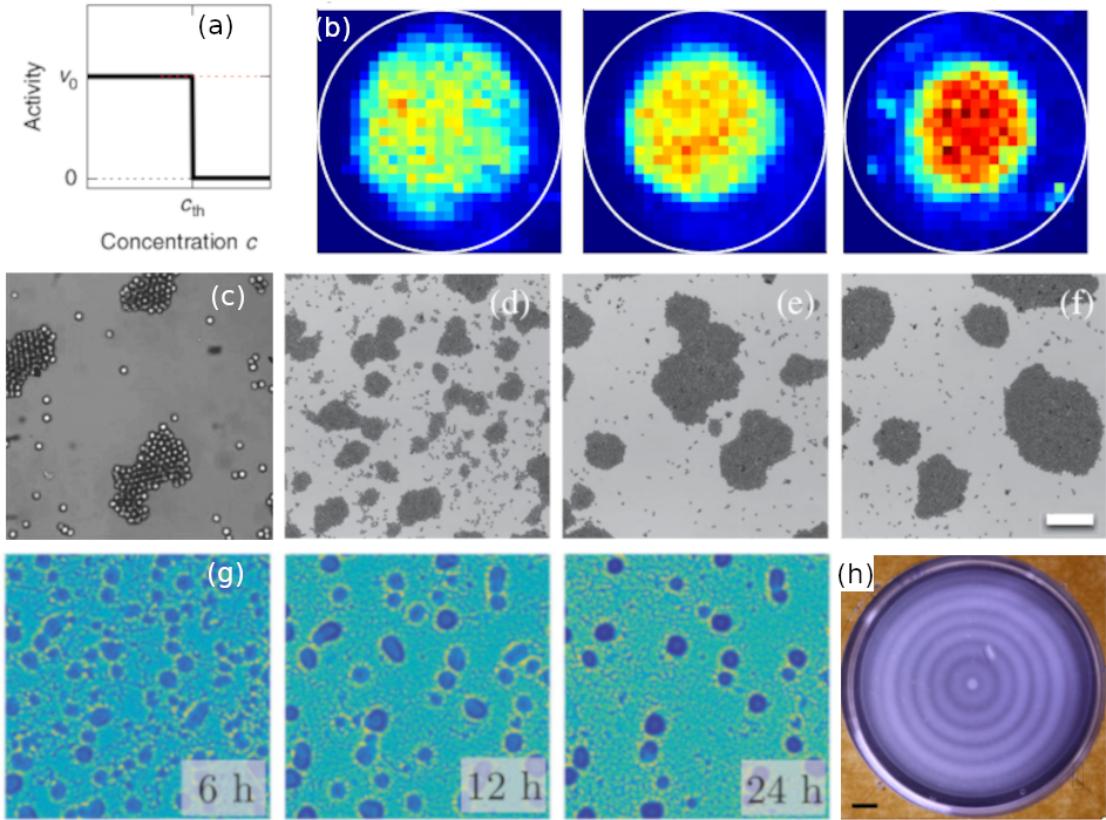


Figure 1.2 – Réalisations expérimentale de MIPS. (a,b) Colloïdes auto-propulsés donc l’auto-propulsion est contrôlée numériquement pour produire le quorum-sensing souhaité (a), v_0 correspondant à l’amplitude de l’autoproulsion des particules (reproduit de [10]). On observe une séparation de phase (b) où des couleurs plus chaudes indiquent une densité plus élevée. Les trois images correspondent à trois valeur de la concentration seuil c_{th} qui augmente de gauche à droite. (c) Colloïdes autopropulsés interagissant par des forces répulsives de paires (reproduit de [20]). (d–f) Colloïdes auto-propulsés s’agrégant (d,e) jusqu’à une certaine taille typique (e,f) où MIPS est arrêtée du fait de l’alignement au seins des “clusters” (reproduits d [124]). (g) Formation d’agrégats de bactéries *Myxococcus xanthus* (reproduit de [65]). (h) MIPS arrêtée dans une colonie de bactéries *E. Coli* génétiquement modifiées. La dynamique de population est en compétition avec MIPS et induit la sélection d’une taille caractéristique du “pattern” (courtoisie du Prof. Jian-Dong Huang).

1.2.2 Modèles de la dynamique individuelle d'une particule active

Contrairement à la thermodynamique (section 1.1.1) et à la physique statistique des systèmes d'équilibre (section 1.1.2), il n'existe pas de principe général permettant de décrire de manière générique l'état stationnaire d'un système actif. Pour espérer lier les comportements émergents des systèmes actifs aux caractéristiques microscopiques des particules actives, il faut commencer par modéliser la dynamique d'un agent actif individuel.

Dans cette section, on présente des modèles usuels de dynamiques microscopiques que nous avons étudiés au cours de cette thèse. Ceux-ci sont des modèles de matière active dite “sèche”, pour laquelle les particules actives acquièrent leur autopropulsion en poussant sur un substrat fixe. Celui-ci se comporte alors comme un réservoir d'impulsion, dont il n'est pas nécessaire de modéliser l'évolution. Ces modèles sont particulièrement adaptés à la description de systèmes actifs constitués, par exemple, de cellules évoluant sur un gel d'agar ou sur la matrice extracellulaire [105, 64]. Pour les systèmes constitués de particules actives se déplaçant généralement dans un solvant, telles que des bactéries ou des colloïdes Janus, il peut parfois être important de considérer les interactions hydrodynamiques entre ces particules [79]. Toutefois, quand ces interactions sont négligeables, les modèles de matière active sèche constituent de bonnes approximations. Dans ce cadre, on peut modéliser la dynamique d'un agent actif avec son environnement “passif” (solvant ou gel d'agar par exemple) comme on le fait dans l'équation de Langevin (section 1.1.3) :

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{f}^a - \gamma\dot{\mathbf{r}} - \nabla V(\mathbf{r}) + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta} \quad (1.15)$$

où m est la masse de la particule, γ le coefficient de friction, \mathbf{f}^a la force active d'autopropulsion, V un potentiel extérieur et $\boldsymbol{\eta}$ un bruit blanc gaussien centré de corrélations $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. Une bactérie telle que *Escherichia Coli*, ou un colloïde Janus sont généralement de taille micrométrique, et se déplacent dans un solvant aqueux à des vitesses de l'ordre de quelques micromètres par seconde. Le nombre de Reynolds de l'écoulement correspondant est ainsi de l'ordre de 10^{-5} . On peut donc supposer que, dans les conditions typiques que l'on cherche à décrire, l'inertie est négligeable devant les frottements visqueux. On supposera ainsi, dans toute la suite de cet exposé, que l'on peut se ramener à une équation de type Langevin sur-amortie :

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}^a - \gamma^{-1} \nabla V(\mathbf{r}) + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\eta} \quad (1.16)$$

où $\mathbf{v}^a \equiv \gamma^{-1} \mathbf{f}^a$ est appelée “vitesse d'autopropulsion” et $D_t \equiv k_B T / \gamma$ est le coefficient de diffusion translationnelle.

Il s'agit ensuite de modéliser la dynamique de la vitesse d'autopropulsion elle-même. Une première approche consiste à supposer que cette vitesse d'autopropulsion est de module constant v_0 , tandis que son orientation $\mathbf{u}(t)$ évolue de façon aléatoire [24, 109] :

$$\mathbf{v}^a(t) = v_0 \mathbf{u}(t), \quad (1.17)$$

le processus de réorientation de $\mathbf{u} \in \mathbb{S}^{d-1}$ (d est la dimension de l'espace dans lequel la particule se meut) étant généralement modélisé par un processus Markovien :

- soit discret, auquel cas la transition $\mathbf{u} \xrightarrow{\alpha} \mathbf{u}'$ constitue un processus de Poisson de taux α , la nouvelle orientation \mathbf{u}' étant tirée uniformément sur la sphère unité. De telles particules sont généralement appelées RTPs, de l'anglais “run and tumble particles”. L'équation maîtresse de la dynamique de réorientation est alors

$$\partial_t p(\mathbf{u}, t) = -\alpha p(\mathbf{u}, t) + \frac{\alpha}{\Omega} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} p(\mathbf{u}, t) d\mathbf{u} = -\alpha p(\mathbf{u}, t) + \frac{\alpha}{\Omega}, \quad (1.18)$$

où Ω est la surface totale de \mathbb{S}^{d-1} .

- soit continu ; dans ce cas on suppose que \mathbf{u} est un mouvement brownien sur \mathbb{S}^{d-1} . L'équation de Fokker-Planck de la dynamique est alors

$$\partial_t p(\mathbf{u}, t) = D_r \Delta_{\mathbf{u}} p(\mathbf{u}, t), \quad (1.19)$$

où D_r est le coefficient de diffusion angulaire, et $\Delta_{\mathbf{u}}$ est le laplacien sur la sphère. Ces particules sont baptisées ABPs, pour “active brownian particles”.

Le modèle RTP (Eq. 1.18) est particulièrement adapté pour décrire le mouvement de bactéries, telles que *Escherichia Coli*, nageant dans un fluide. En effet une telle bactérie nage de manière rectiligne sur un temps typique α^{-1} , ce mouvement étant entrecoupé de moments de culbute lors desquels la particule se réoriente. La durée caractéristique de ces culbutes (ou “tumble”) étant très petite devant α^{-1} , ceux-ci peuvent être correctement approximés par des événements instantanés. Le modèle ABP, quant à lui, est plus adapté à la description de colloïdes actifs (tels que les coilloïdes Janus) dont le processus de réorientation se produit de manière continue. La figure 1.3 donne une représentation schématique des trajectoires typiques d'une RTP et d'une ABP.

La seconde approche à laquelle on s'est intéressé lors de cette thèse consiste à modéliser l'autopropulsion par un processus d'Ornstein-Uhlenbeck :

$$\tau \dot{\mathbf{v}}^a = -\mathbf{v}^a + \sqrt{2D_{\mathbf{v}}} \boldsymbol{\xi} \quad (1.20)$$

où $\boldsymbol{\xi}$ est un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \xi_t^\alpha \xi_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. Le processus \mathbf{v}^a est un mouvement brownien corrélé sur une échelle de temps caractéristique τ :

$$\langle \mathbf{v}^a(t) \otimes \mathbf{v}^a(t') \rangle = \frac{D_{\mathbf{v}}}{\tau} e^{-|t-t'|/\tau} \mathbf{I} \quad (1.21)$$

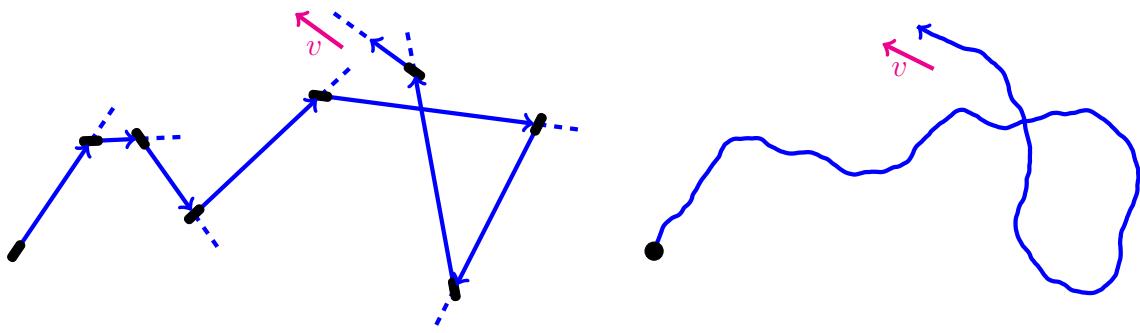


Figure 1.3 – Comparaison entre une trajectoire typique d'un RTP (à gauche) et d'une ABP (à droite). Reproduite de [23].

où \mathbf{I} est la matrice identité¹⁹, et de mesure stationnaire ayant pour densité

$$p(\mathbf{v}_p) = Z^{-1} \exp \left[\frac{\tau |\mathbf{v}_p|^2}{2D_v} \right], \quad (1.22)$$

la vitesse d'autopropulsion \mathbf{v}^a typique étant ainsi $\sqrt{d\tau^{-1}D_v}$. Une telle particule est appelée particule d'Ornstein-Uhlenbeck active, ou AOUP [118, 74].

Il existe des différences notables de comportement entre ces deux familles de modèles. Par exemple la mesure stationnaire de l'autopropulsion des ABPs et RTPs est la mesure uniforme sur \mathbb{S}^{d-1} tandis que celle des AOUP est une gaussiennes sur \mathbb{R}^d . Ou encore, lorsqu'on met de telles particules dans un piège harmonique, les AOUPs se répartissent toujours de façon gaussienne autour du centre du piège [118], tandis que les ABPs et RTPs s'accumulent sur ses bords lorsque la longueur de persistance est suffisamment grande [109]. Néanmoins les AOUPs et les ABPs/RTPs présentent d'importantes similarités à de grandes échelles, lorsqu'on coarse-graine la dynamique de particules actives en interaction, comme nous le verrons au chapitre 3 notamment.

Par ailleurs, la parité de tels modèles de particules vis à vis du renversement du temps peut être subtile. En effet, si on néglige le bruit translationnel dans l'équation (1.16), la dynamique d'une AOUP (1.16)&(1.20) ressemble trait pour trait à l'équation de Langevin sous-amortie (1.9) qui, elle, satisfait le bilan détaillé. Mais cette ressemblance est altérée dès que l'on considère l'inertie de la particule AOUP, ou qu'on la plonge dans un potentiel extérieur générique. Nous discuterons en détails le comportement de ces modèles microscopiques vis à vis du renversement du temps au chapitre 2. Plus généralement, les propriétés des modèles de systèmes actifs vis à vis du renversement du temps, aux échelles microscopiques comme

19. C'est la corrélation en temps long, i.e. quand $t + t' \gg \tau$.

macroscopiques, seront discutées tout au long de ce manuscrit puisqu'elles ont été au cœur des travaux effectués lors de cette thèse.

1.2.3 Particules actives en interaction

Dans cette section, on présente les deux types d'interaction entre particules actives auxquels on s'est particulièrement intéressé au cours de cette thèse : le quorum-sensing et la taxie. Notons qu'on présente aux chapitres 3 et 4 le coarse-graining explicite d'ABPs, de RTPs et d'AOUPs interagissant par quorum-sensing ou par taxie, mais qu'aux chapitre 4 et 5 on étudie des classes de dynamiques macroscopiques actives plus générales que les équations que l'on aura explicitement obtenues par coarse-graining. On peut donc s'attendre à ce que certains des résultats exposés aux chapitres 4 et 5 s'appliquent à d'autre formes d'interaction entre particules actives.

Quorum-sensing. Le premier type d'interaction est le quorum-sensing (QS), qui correspond à la capacité d'un agent à modifier son comportement en fonction de la densité des autres agents autour de lui²⁰. Un piéton ajustant sa vitesse de déplacement en fonction de la foule environnante est un exemple simple de quorum-sensing à l'échelle macroscopique. A l'échelle microscopique, le quorum-sensing est un type d'interaction que l'on observe fréquemment au sein de populations de micro-organismes. Chez les bactéries, telles que *Vibrio Fischeri*, *Vibrio Cholerae* ou *Escherichia Coli*, le quorum-sensing se fait *via* l'émission et la détection de molécules signalétiques, appelées "auto-inducteurs", qui sont généralement des acyl homosérine lactones, des oligopeptides ou du diester de furanosyl borate [76, 33, 56]. Cette mesure de la concentration locale de leurs congénères permet aux bactéries de coordonner des comportements collectifs — souvent *via* des mécanismes de régulation de l'expression génétique — tels que la formation de biofilms, l'expression de facteur de virulence, la bioluminescence, ou encore (dans le cas qui nous intéresse le plus dans le cadre de cette thèse) la motilité [14, 33].

Au chapitre 3, pour modéliser le quorum-sensing au sein d'un système de N particules actives, on supposera qu'un paramètre a de l'activité — qui décrit typiquement l'amplitude de la vitesse d'autopropulsion, tel que v_0 (voir équation (1.17)) chez les ABPs et les RTPs, ou D_v chez les AOUPs (confère équation (1.20)) — dépend fonctionnellement du champ de densité $\rho(\mathbf{r}, t)$ de particules actives ainsi que, pour chaque particule i , de sa position \mathbf{r}_i . Ce que l'on notera par $a(\mathbf{r}_i, [\rho])$, une variable encadrée par des crochets indiquant une dépendance fonctionnelle dans

20. Étymologiquement, le "quorum-sensing", qui peut être traduit par "détection du quorum" en français, fait référence au terme juridique "quorum" qui désigne le nombre minimal de membres d'une assemblée devant être présents pour qu'une délibération puisse être menée.

tout ce manuscrit²¹. Par la suite, on désignera les particules actives interagissant par quorum-sensing par l'acronyme QSAPs, de l'anglais “quorum-sensing active particules”, comme il est souvent d'usage en physique de la matière active.

Taxie. La taxie est définie comme le mouvement biaisé d'un agent en réponse à la variation spatiale (le gradient) d'un certain stimulus, ce stimulus pouvant être de diverse nature : chimique, lumineuse, ou mécanique par exemple. Les particules ont alors tendance à “remonter” ou à “descendre” le gradient du (champ correspondant au) stimulus, pour se diriger vers les zones où, par exemple, la concentration en nutriments ou en oxygène est la plus élevée. C'est un phénomène que l'on retrouve dans beaucoup de systèmes biologiques. On peut citer le chimiotactisme de certaines bactéries telles que *Escherichia Coli* [11], le phototactisme d'algues telles que *Chlamydomonas* [90], ou le durotactisme des cellules épithéliales [117]. La taxie n'est néanmoins pas limitée aux systèmes biologiques. L'autopropulsion de certains colloïdes actifs, par exemple, dépend de la concentration d'agents chimiques dans leur environnement, ces derniers ne constituant pas uniquement la source d'énergie de l'autopropulsion [52] mais pouvant également biaiser la dynamique des colloïdes actifs [113, 89].

De manière similaire à notre modélisation du quorum-sensing, on modélisera la taxie (au chapitre 4) par une dépendance de certains paramètres a d'activité en le gradient d'un champ c représentant le stimulus. Plus précisément, on supposera que, pour la i ème particule, $a(\mathbf{r}_i, \mathbf{u}_i, [c]) = a_0 + a_1 \mathbf{u}_i \cdot \nabla c(\mathbf{r}_i, t)$. Notons que le paramètre a pourra non seulement être un paramètre contrôlant l'amplitude de l'autopropulsion, tel que v_0 (voir équation (1.17)) ou D_v (voir équation (1.20)), mais également sa dynamique de réorientation, tel que α (voir équation (1.18)) ou D_r (cf. équation (1.19)). On désignera les particules actives tactiques par l'acronyme TAPs, de l'angle “tactic active particles”.

Par ailleurs, notons que le champ $c(\mathbf{r}, t)$ correspondant au stimulus peut être “imposé par l'environnement” des particules actives — comme dans le cas de la phototaxie de Chlamydomonas — ou peut être engendré par les particules actives elles-mêmes — auquel cas le champ c médie une interaction entre les particules actives. Dans le cas du chimiotactisme bactérien par exemple, le champ c peut correspondre à la concentration d'un agent chimique (appelé ligand chimiotactique) émis par chaque bactérie. Ce ligand est produit à un taux λ , puis se diffuse dans le milieu environnant avec un constante de diffusion ν , avant de se dégrader au taux ω , ce qui conduit à la dynamique :

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) = \nu \Delta c(\mathbf{r}, t) + \lambda \rho(\mathbf{r}, t) - \omega c(\mathbf{r}, t) \quad (1.23)$$

21. Cette notation a pour but de distinguer le cas où $a(\mathbf{r}_i, [\rho])$ dépend de la valeur de $\rho(\mathbf{r})$ en des points \mathbf{r} ne se limitant pas à \mathbf{r}_i , du cas où a dépend de ρ de manière purement locale, i.e. $a(\mathbf{r}_i, [\rho]) = a(\rho(\mathbf{r}_i))$, ce dernier cas étant souvent noté (de manière abrégée) $a(\rho)$ en physique.

Si le temps caractéristique de relaxation du champ c (ici donné par ω^{-1}), est petit devant le temps typique d'évolution du champ ρ de densité des agents actifs, on peut se placer dans la limite où c suit adiabatiquement ρ , auquel cas c satisfait l'équation de Poisson écrantée :

$$\left(\frac{\omega}{\nu} - \Delta\right)c = \frac{\lambda}{\nu}\rho , \quad (1.24)$$

dont la solution est donné par

$$c = \frac{\lambda}{\nu}G * \rho \quad (1.25)$$

où G est la fonction de Green de l'équation (1.24) et $*$ est le produit de convolution. Notons que l'on s'attend à ce que cette séparation d'échelle entre les temps typiques d'évolution des champs c et ρ ait bien lieu (sur des échelles de longueur suffisamment grandes) puisque, le champ ρ étant conservé, il relaxe sur une distance L pendant un temps typique L^z (où $z > 0$ est l'exposant dynamique) qui diverge donc avec L . Au chapitre 4, on étudiera de manière plus générale le cas où c est donné par la convolution de ρ avec un noyau G quelconque, *i.e.* qui ne se réduit pas nécessairement à la fonction de Green de l'équation (1.24). Au delà de considérations purement théoriques, l'analyse menée au chapitre 4 sur de tels systèmes pourrait fournir un outil supplémentaire de contrôle des systèmes actifs et de leur comportements collectifs, puisqu'il est expérimentalement possible de choisir arbitrairement le noyau G en utilisant un dispositif expérimental similaire à celui de [10, 62], où la motilité des particules actives est asservie à l'intensité d'émissions lumineuses. Une mesure instantanée du champ ρ , suivie de l'émission d'un champ de lumière adéquat (proportionnel à $\rho * G$ par exemple), pourrait permettre de réaliser expérimentalement des particules actives tactiques, interagissant *via* un noyau G quelconque.

1.2.4 Modèle macroscopique de systèmes actifs et (pseudo-)équilibre macroscopique

Les modèles de QSAPs et de TAPs que nous avons étudiés au cours de cette thèse constituent des instances de la “matière active scalaire”, qui peut être décrite à l'échelle macroscopique par un unique champ hydrodynamique, celui de la densité ρ de particules actives. Pour la plupart des modèles que nous avons considérés, l'hydrodynamique fluctuante du champ ρ est donnée (voir chapitres 3 et 4) par l'équation dynamique suivante :

$$\partial_t\rho = -\nabla \cdot \left[M\nabla\mu + \sqrt{2M}\boldsymbol{\Lambda} \right] \quad (1.26)$$

où $M(\mathbf{r}, [\rho])$ est une mobilité collective, où $\mu(\mathbf{r}, [\rho])$ joue le rôle d'un potentiel chimique, et où $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ est un champ de vecteurs aléatoire gaussien de moyenne nulle et satisfaisant $\langle \Lambda^\alpha(\mathbf{r}, t)\Lambda^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta^{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t')$. Notons que certains modèles phénoménologiques de particules actives interagissant par des potentiels de paires, comme le modèle B actif [131], sont également de la forme de l'équation (1.26). Ainsi l'étude d'équations de la forme (1.26) peut s'appliquer à des situations plus générales que la dynamique collective des QSAPs et des TAPs — comme nous l'avons mentionné à la section 1.2.3.

En générale l'équation (1.26) ne vérifie pas le bilan détaillé et on ne connaît par la mesure d'équilibre $\mathcal{P}[\rho]$. Néanmoins, il existe des cas particuliers où une connexion avec l'équilibre peut être faite. Notons tout d'abord que l'amplitude du bruit et la mobilité sont toutes deux données par $M(\mathbf{r}, [\rho])$ dans l'équation (1.26), celle-ci satisfaisant ainsi la relation d'Einstein. Ce n'est donc pas le bruit qui brise le bilan détaillé dans l'équation (1.26), mais plutôt le fait que μ ne dérive en général pas d'une énergie libre fonctionnelle (on discute cela en détails au chapitre 4).

Pour fixer les idées, plaçons-nous dans le cas de RTPs interagissant par quorum-sensing. Les dynamiques de chacune des particules satisfont les équations (1.16)–(1.18), où l'amplitude v_0 de l'autopropulsion dépend fonctionnellement de la densité ρ de particules actives : $v_0(\mathbf{r}, [\rho])$. Pour simplifier les notations, on néglige le bruit thermique, ce qui revient à prendre $D_t = 0$ dans l'équation (1.16). Un coarse-graining explicite permet alors de montrer (confère [109] et les chapitres 3 et 4) que l'hydrodynamique fluctuante est donnée par l'équation (1.26), où le potentiel chimique et la mobilité sont respectivement :

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \ln \left[\rho(\mathbf{r}) v_0(\mathbf{r}, [\rho]) \right] \quad \text{et} \quad M(\mathbf{r}, [\rho]) = \rho(\mathbf{r}) \frac{v_0^2(\mathbf{r}, [\rho])}{d\alpha} \quad (1.27)$$

Dans le cas d'*Escherichia Coli*, le quorum-sensing est médié par des agents chimiques. Si bien que l'on a plutôt $v_0(\mathbf{r}, [c])$ que $v_0(\mathbf{r}, [\rho])$ initialement²². Supposons d'une part que le quorum-sensing dépend seulement localement de la concentration en agents chimiques, *i.e.* $v_0(\mathbf{r}, [c]) = v_0(c(\mathbf{r}))$, et d'autre part que l'on peut approximer la répartition spatiale de c , comme dans le cas des ligands chimiотactiques (1.23)–(1.25), par la convolution de ρ avec un noyau G :

$$c(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' . \quad (1.28)$$

Si G est invariant par rotation (comme c'est le cas de la fonction de Green de toute équation isotrope telle que (1.24)) et que sa portée typique $\ell_G^2 \equiv \int r^2 G(r) dr$ est

22. En négligeant le temps de réponse de la bactérie au champ de ligand.

petite devant la distance typique de variation de ρ , on a

$$\begin{aligned} v_0(c(\mathbf{r})) &\simeq v_0 \left(\int G(\mathbf{r}') \left[\rho(\mathbf{r}) - \mathbf{r}' \cdot \nabla \rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} H(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}' \otimes \mathbf{r}' \right] d\mathbf{r}' \right) \\ &\simeq v_0(\rho(\mathbf{r})) + \frac{\ell_G^2}{2d} v'_0(\rho(\mathbf{r})) \Delta \rho(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

où $H(\mathbf{r})$ est la hessienne de ρ en \mathbf{r} et où on a supposé l'intégrale de G égale à 1 (ce que l'on peut toujours faire quitte à modifier v_0). Ainsi le potentiel chimique (1.27) est approximativement donné, au second ordre en gradients de ρ , par [111]

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) \simeq \ln [\rho(\mathbf{r}) v_0(\rho(\mathbf{r}))] - \kappa(\rho(\mathbf{r})) \Delta \rho(\mathbf{r}) , \quad \text{où} \quad \kappa(\rho(\mathbf{r})) \equiv -\frac{\ell_G^2 v'_0(\rho(\mathbf{r}))}{2d v_0(\rho(\mathbf{r}))} \quad (1.29)$$

Équilibre macroscopique. Si l'on approxime μ à l'ordre dominant en gradient de ρ , le potentiel chimique est purement local : $\mu(\mathbf{r}, [\rho]) \simeq \ln[\rho(\mathbf{r}) v_0(\rho(\mathbf{r}))]$. On peut alors définir une énergie libre $\mathcal{F}[\rho]$ dont dérive μ , et ce quelle que soit l'allure de la fonction $v_0(\rho)$:

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} , \quad \text{avec} \quad \mathcal{F}[\rho] \equiv \int f(\rho(\mathbf{r})) d\mathbf{r} , \quad (1.30)$$

où f est la densité d'énergie libre, donnée par

$$f(\rho) \equiv \rho \ln \rho + \int^\rho \ln [v_0(s)] ds \quad (1.31)$$

Puisqu'il existe $\mathcal{F}[\rho]$ telle que $\mu = \delta \mathcal{F} / \delta \rho$, le système actif est macroscopiquement à l'équilibre (approximativement, puisqu'on a fait une approximation locale sur $\mu(\mathbf{r}, [\rho])$) et l'équation de Fokker-Planck (fonctionnelle) associée à (1.26) admet une mesure stationnaire (sans courant) :

$$\mathcal{P}[\rho] = \frac{1}{Z} e^{-\mathcal{F}[\rho]} . \quad (1.32)$$

Pour connaître le profil le plus probable, il suffit donc de minimiser \mathcal{F} . En particulier, lorsque le système actif étudié peut subir une séparation de phase induite par la motilité, on peut construire le diagramme de phase grâce à l'énergie libre \mathcal{F} comme on l'aurait fait pour une séparation liquide-gaz d'équilibre. Pour cela on minimise (sous contrainte de conservation du nombre total de particules actives) l'énergie libre \mathcal{F} (qui est extensive) sur l'ensemble des profils séparés de phase, où la phase "liquide" (*i.e.* la plus dense) de densité ρ_ℓ occupe une certaine fraction du volume total du système, tandis que la phase "gazeuse" de densité ρ_g occupe le

reste du système. Ceci revient à déterminer un couple de densités (ρ_ℓ, ρ_g) en lesquels la densité d'énergie libre $f(\rho)$ admet une tangente commune (cf. figure 1.4).

En général, cet équilibre à l'échelle macroscopique est brisé si l'on considère le terme suivant du développement de μ en gradients de ρ (confère équation (1.29)). Il existe néanmoins une exception [109] : si $\kappa' = 0$, alors on peut de nouveau définir une énergie libre $\mathcal{F}[\rho]$ dont dérive μ . Dans ce cas la fonction $v_0(\rho)$ est nécessairement un exponentielle $v_0(\rho) \propto \exp(\lambda\rho)$ et l'énergie libre est donnée par :

$$\mathcal{F} = \int \left[\rho(\mathbf{r}) \log \rho(\mathbf{r}) + \frac{\lambda}{2} \rho(\mathbf{r})^2 - \frac{\lambda \ell_G^2}{4d} |\nabla \rho(\mathbf{r})|^2 \right] d\mathbf{r} \quad (1.33)$$

Là encore, minimiser la partie locale de \mathcal{F} permet d'obtenir le diagramme de phase de MIPS.

Pseudo-équilibre macroscopique. Si $\kappa' \neq 0$, le système n'est plus macroscopiquement à l'équilibre et il n'existe pas d'énergie libre \mathcal{F} telle que $\mu = \delta\mathcal{F}/\delta\rho$. Néanmoins, si $\kappa(\rho)$ ne s'annule pas, on peut définir [110, 111] le changement de variable $\mathcal{R} : \rho \mapsto R$, où \mathcal{R} est une solution quelconque de l'équation

$$\mathcal{R}'(\rho) = \frac{1}{\kappa(\rho)} . \quad (1.34)$$

On a alors

$$\mu(\mathbf{r}, [\mathcal{R}^{-1}(R)]) = \frac{\delta \mathcal{H}[R]}{\delta R(\mathbf{r})} \quad (1.35)$$

avec une pseudo-énergie libre

$$\mathcal{H}[R] \equiv \int \left[h(R(\mathbf{r})) + \frac{\kappa^2(\mathcal{R}^{-1}(R(\mathbf{r})))}{2} |\nabla R(\mathbf{r})|^2 \right] d\mathbf{r} . \quad (1.36)$$

dont la densité locale h satisfait

$$h'(R) = \ln \left[\mathcal{R}^{-1}(R) v_0(\mathcal{R}^{-1}(R)) \right] . \quad (1.37)$$

Dans le cas d'un système actif pouvant subir une séparation de phase induite par la motilité, on peut alors déterminer des pseudo-densités liquide R_ℓ et gazeuse R_g en appliquant la construction de la tangente commune à la densité locale $h(R)$ de la pseudo-énergie libre $\mathcal{H}[R]$, puis revenir aux véritables densités de liquide et de gaz en appliquant le changement de variable inverse : $\rho_\ell \equiv \mathcal{R}^{-1}(R_\ell)$ et $\rho_g \equiv \mathcal{R}^{-1}(R_g)$, les densités ρ_ℓ et ρ_g correspondant bien aux densités des phases dense et diluée de MIPS [110, 111] (voir figure 1.4). Notons que, dans le cas d'un interaction quorum-sensing qui n'est pas purement locale, le développement du potentiel chimique μ à l'ordre deux en gradients et l'application de la méthode de la tangente commune sur $h(R)$ fournit génériquement une meilleure approximation du diagramme des phases que l'approximation purement locale de μ suivie de la construction de la tangente commune sur $f(\rho)$ (cf. figure 1.4).

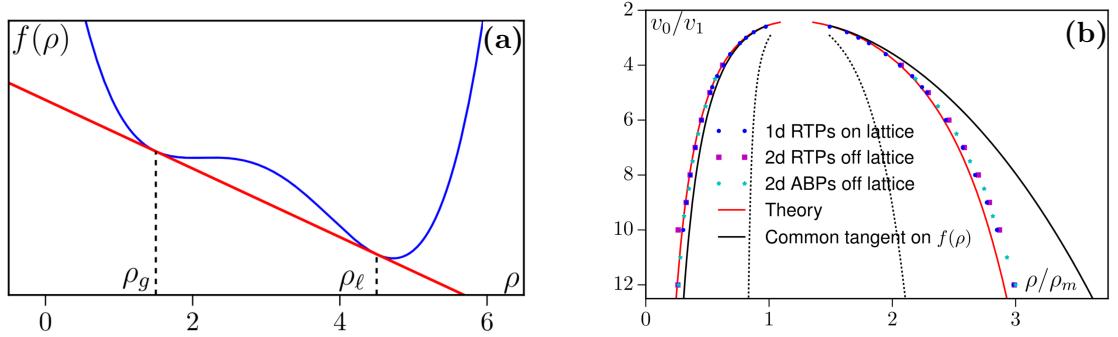


Figure 1.4 – Reproduite de [110]. (a) Représentation schématique de la construction de la tangente commune sur la densité d'énergie libre (locale) $f(\rho)$. Les densités ρ_g et ρ_ℓ ayant une tangente commune correspondent aux densités de coexistence gaz–liquide. Le schéma est similaire dans le cas du pseudo–équilibre : il suffit de remplacer $f(\rho)$ par $h(R)$ et (ρ_g, ρ_ℓ) par (R_g, R_ℓ) . (b) Diagramme liquide–gaz de QSAPs : les points de couleur correspondent à des simulations numériques d'ABPs ou de RTPs interagissant *via* quorum–sensing. L'amplitude de leur vitesse d'autopropulsion est donnée par $v(\tilde{\rho}) = v_0 + \frac{v_1 - v_0}{2} ([1 + \tanh(2\tilde{\rho}/\rho_m - 2)]$ où $\tilde{\rho} \equiv G * \rho$ avec le noyau de convolution $G(\mathbf{r}) \equiv \frac{\Theta(r_0 - r)}{Z} \exp\left(\frac{-r_0^2}{r_0^2 - r^2}\right)$. Θ est la fonction de Heaviside tandis que r_0 , Z , v_0 , v_1 , et ρ_m sont des constantes (voir [110] pour les détails). Les lignes pleines correspondent aux binodales obtenues *via* la construction de la tangente commune sur $f(\rho)$ et $h(R)$ en noir et rouge, respectivement. Les lignes en pointillés correspondent aux spinodales qui sont les solutions de $f''(\rho) = 0$ (qui sont identiques à celle de $h''(R) = 0$).

Ainsi, malgré le fait que la dynamique microscopique des particules actives soient irréversibles, la description du système à l'échelle macroscopique se trouve être réversibles dans certains cas — quand μ est (approximativement) purement locale ou quand $\kappa' = 0$ —, ou “quasiment réversible” dans d'autres cas — quand un changement de variable $\rho \mapsto R$ permet de se “ramener” à une théorie d'équilibre.

Enfin, notons que, lorsque les interactions entre les particules actives induisent un alignement (polaire ou nématische par exemple) de leur autopropulsion, il est nécessaire, pour décrire le système actif à l'échelle macroscopique, d'ajouter à la dynamique du champ de densité des équations décrivant l'évolution de champs hydrodynamiques supplémentaires (tels que ceux du vecteur polarisation ou du tenseur nématische). Une grande partie des travaux menés au cours de cette thèse sont généralisables à ces cas de figure. Ces éventuelles généralisations seront dis-

cutées au fil de ce manuscrit.

1.3 Organisation de la thèse

L'étude de la matière active porte de grands espoirs non seulement pour améliorer notre compréhension du vivant mais également pour élaborer de nouveau (méta-)matériaux.

Du fait de la dissipation énergétique que chaque agent actif produit en s'auto-propulsant, les systèmes actifs semblent être génériquement hors équilibre. Néanmoins, nous avons constaté, à la section 1.2.2, que la question de la parité des modèles usuels de dynamique active microscopique (ABP, RTP et AOUP) vis à vis du renversement du temps pouvait être subtile. C'est pourquoi nous commençons par exposer, au chapitre 2 du présent manuscrit, une étude détaillée du renversement du temps. Dans ce chapitre, nous proposons une formulation originale, basée sur la théorie des groupes, du renversement du temps dans les processus stochastiques (markoviens). D'une part, cette formulation permet une classification des différentes notions de "symétrie par renversement du temps" que l'on peut être amené à considérer lorsqu'on modélise un système physique par une équation différentielle stochastique. D'autre part, elle permet de démontrer aisément que l'une de ces classes de "symétrie par renversement du temps" est en fait "universelle", au sens où elle contient l'ensemble des processus décrits par des équations différentielles stochastiques. Dans ce même chapitre, on rappelle ensuite le lien entre irréversibilité et géométrie (la généralisation de ce lien aux théories des champs faisant l'objet du chapitre 5) et on montre que, dans certains cas, le rotationnel du champ de force imposé à une particule peut être vu comme la source directe de la production d'entropie du système. Enfin, la dernière section du chapitre 2 est consacrée à l'étude détaillé du renversement du temps dans les modèles usuels de dynamique active microscopique.

Pour pouvoir décrire les comportement émergents d'un système actif, il est souvent pratique d'être en mesure d'établir une théorie des champs décrivant la dynamique du système sur de grandes échelles d'espace et de temps. Le chapitre 3 de ce manuscrit est consacré à la description de deux méthodes de coarse-graining de dynamiques actives microscopiques que l'on utilise, aux chapitres 3 et 4, pour obtenir l'hydrodynamique (fluctuante) d'ensembles de particules actives (ABPs, RTPs ou AOUPs) interagissant par quorum-sensing ou par taxie.

A la section 1.2.4 de cette introduction, nous avons vu que certains systèmes actifs avaient déjà été décrits avec succès, à l'échelle macroscopique, par des modèles d'équilibre ou "quasiment d'équilibre", sans pour autant que des critères généraux pour déterminer l'existence de tels états de (pseudo-)équilibre aient été établis. Le chapitre 4 de ce manuscrit est consacré à l'étude d'un tel critère général.

On emploie notamment ce critère pour mettre en bijection, à l'échelle macroscopique, certains systèmes actifs, interagissant *via* quorum-sensing ou taxie, avec des systèmes de particules passives en interaction de paires. Nous exploitons ensuite ces bijections pour prédire le comportement des ces systèmes actifs à partir de la connaissance des systèmes passifs correspondants.

Lorsque le coarse-graining d'un système actif ne mène pas à une dynamique macroscopique d'équilibre, la mesure stationnaire est génériquement inconnue et s'accompagne de courants de probabilité — eux aussi inconnus en général. Dans le cas de systèmes dont l'irréversibilité provient de l'imposition de conditions aux bords ou de champs de forces, ces courants de probabilité se manifestent dans l'espace “réel” par des courants d'énergie ou de matière par exemple. Ce qui les rend immédiatement observables expérimentalement. Mais dans le cas de systèmes actifs (macroscopiquement hors équilibre) il est possible que les courants de probabilité ne se manifestent pas de manière évidente dans l'espace réel. C'est le cas de MIPS par exemple, qui ne s'accompagne souvent daucun courant dans l'espace réel. Dans de telles situations, les courants de probabilité associés à la dynamique irréversible d'un champ, qui vivent dans un espace fonctionnel abstrait, peuvent s'avérer difficile à caractériser ou à observer. Au chapitre 5, on introduit un nouvel opérateur différentiel généralisant aux espaces fonctionnels (de dimension infinie, dans lesquels vivent les champs hydrodynamiques) le rotationnel de l'analyse vectorielle en dimension 3, et la dérivée extérieure de la géométrie différentielle en dimension finie quelconque. On montre ensuite que cet opérateur peut être utilisé pour caractériser les courants de probabilités associés à la dynamique irréversible d'un champ. On illustre son utilisation sur le modèle actif B (qui peut subir MIPS), pour lequel on est alors capable de mesurer les courants de probabilité. On montre ensuite que, dans le cas d'un état stationnaire séparé de phases, ces courants se manifestent dans l'espace réel par des modes de vibration anisotropes localisés aux interfaces entre les phases.

Chapitre 2

Symétrie Temporelle et Réversibilité

Dans cette section on s'intéresse à la réversibilité de la dynamique d'une particule de taille mésoscopique, éventuellement active, plongée dans un bain thermique et soumise à une force extérieure. On se place systématiquement à l'état stationnaire, *i.e.* on suppose que la mesure de probabilité des degrés de liberté de la particule est la mesure stationnaire p_{ss} . De ce fait, on emploiera indistinctement les termes de “processus irréversible” et de “système hors équilibre”¹. Nous avons vu en introduction qu'il existe dans la littérature trois notions différentes permettant de caractériser, à l'état stationnaire, l'équilibre ou la réversibilité :

D1 – en thermodynamique, une transformation est dite réversible lorsque la production d'entropie S^c est nulle. Or, pour un système à l'état stationnaire $S^c = -Q/T$. Ainsi un système à l'état stationnaire qui dissipe continuellement de l'énergie sous forme de chaleur peut être vu comme subissant perpétuellement une transformation irréversible. Ce critère de dissipation d'énergie à l'état stationnaire est fréquemment étendu pour caractériser un système hors équilibre.

D2 – en physique statistique des ensembles, le système est d'équilibre si et seulement si la mesure stationnaire p_{ss} est une mesure de Gibbs

D3 – en physique statistique des processus stochastiques, un système est à l'équilibre ssi il vérifie “le” bilan détaillé, c'est à dire ssi la statistique \mathcal{P} des trajectoires du système est la même que la statistique $\bar{\mathcal{P}}$ des trajectoires du système “renversé en temps”, *i.e.* $\mathcal{P} = \bar{\mathcal{P}}$. Pour mesurer le degré d'irréver-

1. Un potentiel régime transitoire irréversible des systèmes ayant un état stationnaire d'équilibre n'étant jamais considéré.

sibilité du système, la théorie de la thermodynamique stochastique suggère d'utiliser une *production d'entropie informationnelle* [60, 63, 68] définie par $\Sigma = \langle \log(\mathcal{P}/\bar{\mathcal{P}}) \rangle_{\mathcal{P}}$, où $\langle \cdot \rangle_{\mathcal{P}}$ désigne la moyenne par rapport à \mathcal{P} . Le système est alors à l'équilibre si Σ est nulle.

La première définition ci-dessus caractérise entièrement l'irréversibilité par une dissipation d'énergie. La seconde, quant à elle, décrit l'équilibre par une propriété statique : celle de l'allure de la mesure stationnaire. Enfin, la troisième définition met en relation l'irréversibilité et la dynamique, ou “l’écoulement du temps”, de manière plus explicite.

L'objectif de ce chapitre est double : il s'agit, d'une part, d'analyser l'irréversibilité de la dynamique d'une particule active individuelle vis à vis des critères **(D1)**, **(D2)** et **(D3)** — analyse que l'on présente à la section 2.4 — et d'autre part de poser les bases sur lesquelles nous nous appuierons lors de l'étude de l'irréversibilité des ensembles de particules actives en interaction que l'on mènera aux chapitres 3 et 4.

Pour atteindre ce but, on commence par mettre en lumière à la section 2.1 certaines subtilités des définitions **(D1)**, **(D2)** et **(D3)** à travers l'étude de la réversibilité de systèmes passifs simples. On verra tout d'abord que l'usage de la première définition ne permet souvent pas de capturer entièrement la production d'entropie thermodynamique totale, les modèles de dynamique stochastique employés ne décrivant qu'un nombre réduit de l'ensemble des degrés de liberté réels des systèmes sous-jacents. Ensuite, on constatera que la seconde définition n'est généralement pas suffisante pour impliquer un équilibre aux sens de **(D1)** ou **(D3)**. Enfin, on mettra en évidence l'ambiguïté de la troisième définition vis à vis de la manière de “renverser le temps” dans la dynamique.

Pour mieux cerner les tenants et aboutissants de cette troisième définition, on propose à la section 2.2 une formalisation mathématique du renversement du temps permettant non seulement de “classifier” les manières de renverser le temps² mais également de démontrer aisément un résultat de “symétrie universelle”.

La section 2.3, quant à elle, rappelle les liens étroits entre réversibilité, courants de probabilité, et géométrie dans le cas des dynamiques sur-amorties, lien que l'on exploitera largement aux chapitres 3 et 4.

Par ailleurs, précisons d'emblée que toutes les intégrales stochastiques de ce chapitre seront considérées au sens de Stratonovich.

2. La classification proposée à la section 2.2 ne cherche pas une complète exhaustivité. Elle tente seulement de capturer les renversements du temps les plus “physiques” ou “naturels”.

2.1 Renversement du temps de systèmes passifs simples

Il y a plusieurs manières, pour un processus stochastique donné, de définir un “renversement du temps”, i.e. d’associer à la statistique de chemins “forward” \mathcal{P} une statistique “backward” $\bar{\mathcal{P}}$. Parmi celles-ci, certaines peuvent ne pas avoir de sens physique (en tant que “renversement du temps”) où n’apporter (quasiment) aucune information sur le système que l’on étudie. Mais il est également possible que plusieurs “renversements du temps” apportent des informations complémentaires sur le système étudié. De plus, les liens entre ces notions de réversibilité — associées à la définition **(D3)** et à différents “renversement du temps” — et les définitions **(D1)** et **(D2)** présentent quelques subtilités. Cette section illustre ces subtilités à travers des exemples de systèmes passifs de complexité croissante.

2.1.1 Renversement du temps dans l’équation de Langevin sur-amortie.

On considère l’équation de Langevin sur-amortie suivante, qui décrit le mouvement d’une particule de position \mathbf{r} , immergée dans un bain thermique de température T , et soumise à un champ de force $\mathbf{F}(\mathbf{r})$:

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \zeta \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) + \sqrt{2\zeta k_B T} \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.1)$$

où ζ est la mobilité et $\boldsymbol{\eta}$ est un bruit blanc gaussien centré (i.e. de moyenne nulle) tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. La probabilité de parcours d’un chemin $(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, avec $\mathbb{T} \equiv [0, \mathcal{T}]$, est donnée par [83, 116] :

$$\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \frac{1}{Z} \exp \left[-\frac{1}{4\zeta k_B T} \int_0^{\mathcal{T}} (\dot{\mathbf{r}}_t - \zeta \mathbf{F}(\mathbf{r}_t))^2 + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) dt \right] p_{ss}(\mathbf{r}_0) \quad (2.2)$$

où l’on a supposé que le système est à l’état stationnaire, la probabilité stationnaire étant notée p_{ss} . Cet exemple étant censé être le plus simple, définissons la mesure de chemins renversée en temps par

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t)_{t \in \mathbb{T}}], \quad (2.3)$$

où

$$(\bar{\mathbf{r}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}} \quad (2.4)$$

correspond à la trajectoire initiale $(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathcal{T}}$ parcourue en sens inverse. $\bar{\mathcal{P}}$ est ainsi donnée en remplaçant dans la mesure de chemin (2.2) \mathbf{r}_t par $\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}$ et, par conséquent, $\dot{\mathbf{r}}_t$ par $-\dot{\mathbf{r}}_{\mathcal{T}-t}$.

Sur le plan “expérimental”, se demander si le système est irréversible au sens du bilan détaillé (**D3**) pour le renversement du temps (2.3)–(2.4) c’est faire plusieurs “films” de la particule, *i.e.* des enregistrements de sa trajectoire, sur un intervalle \mathbb{T} , et comparer la statistique de ces films avec celle des films joués en sens inverse.

Sur le plan théorique, pour mesurer cette irréversibilité, on peut calculer le taux de production d’entropie informationnelle :

$$\sigma \equiv \frac{1}{\mathcal{T}} \Sigma_{\mathbb{T}} = \frac{1}{\mathcal{T}} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle = \frac{1}{k_B T} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{F} \rangle . \quad (2.5)$$

On constate que, dans ce cas, l’entropie informationnelle coïncide bien (à k_B près) avec l’entropie thermodynamique puisque $k_B \sigma$ est égale au flux de chaleur allant du système au bain thermique divisé par la température :

$$\sigma = \frac{1}{k_B T} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{F} \rangle = \frac{1}{k_B T} \langle -\dot{\mathbf{r}}_t \cdot (-\zeta^{-1} \dot{\mathbf{r}}_t + \sqrt{2\zeta^{-1} k_B T} \boldsymbol{\eta}_t) \rangle . \quad (2.6)$$

Lorsque la force \mathbf{F} dérive d’un potentiel $V(\mathbf{r})$, le système est bien réversible à la fois au sens de la thermodynamique, au sens du bilan détaillé (correspondant à une simple inversion de la variable temporelle) ainsi qu’au sens des ensembles statistiques, puisque dans ce cas, d’une part, la force ne travaille pas en moyenne à l’état stationnaire

$$\langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) \rangle = -\langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \nabla V(\mathbf{r}_t) \rangle = -\frac{d}{dt} \langle V(\mathbf{r}_t) \rangle = 0 \quad (2.7)$$

et d’autre part la mesure stationnaire est bien donnée par une mesure de Gibbs :

$$p_{ss}(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z} e^{-V(\mathbf{r})/k_B T} . \quad (2.8)$$

Cependant, bien que les définitions de l’irréversibilité au sens du bilan détaillé (**D3**) et de la thermodynamique (**D1**) soient ici totalement équivalentes (car les entropies informationnelle et thermodynamique sont égales), elles ne sont pas équivalentes à l’irréversibilité au sens des ensembles statistiques (**D2**) : on a bien que l’équilibre au sens de (**D1**) \Leftrightarrow (**D3**) implique³ l’équilibre au sens de (**D2**) mais la réciproque est fausse. En effet si l’on considère, par exemple, une force $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ donnée par

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\alpha \mathbf{r} + \mathbf{r} \times \mathbf{A} \quad (2.9)$$

3. Notons que l’on a seulement montré que $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r})$ implique, d’une part, la réversibilité au sens de (**D3**) (qui est équivalente à celle (**D1**)), et d’autre part la réversibilité au sens de (**D2**). On montrera à la section 2.3 que la réversibilité au sens de (**D3**) (et (**D1**)) est bien équivalente à $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r})$, et donc qu’elle implique la réversibilité au sens de (**D2**).

alors la probabilité stationnaire est toujours donnée par l'équation (2.8) avec $V(\mathbf{r}) = \alpha|\mathbf{r}|^2/2$, mais le taux de production d'entropie est non nul puisque :

$$\sigma = \frac{1}{k_B T} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) \rangle = \frac{1}{k_B T} \left\langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \left(-\nabla_{\mathbf{r}} \left[\frac{\alpha|\mathbf{r}_t|^2}{2} \right] + \mathbf{r}_t \times \mathbf{A} \right) \right\rangle \quad (2.10)$$

où, bien que la contribution de la force gradient soit nulle (confère (2.7)), celle de la force rotationnelle ne l'est pas. En effet le travail $\langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{r}_t \times \mathbf{A} \rangle$, défini au sens de Stratonovich, est égale à la limite quand $\Delta t \rightarrow 0$ de l'expression suivante, où l'on a posé $\Delta \mathbf{r}_t \equiv \mathbf{r}_{t+\Delta t} - \mathbf{r}_t$:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\Delta \mathbf{r}_t}{\Delta t} \cdot \left[\left(\mathbf{r}_t + \frac{\Delta \mathbf{r}_t}{2} \right) \times \mathbf{A} \right] \right\rangle &= \left\langle \frac{\Delta \mathbf{r}_t}{\Delta t} \cdot [\mathbf{r}_t \times \mathbf{A}] \right\rangle \\ &= \zeta \langle [-\alpha \mathbf{r}_t + \mathbf{r}_t \times \mathbf{A}] \cdot [\mathbf{r}_t \times \mathbf{A}] \rangle + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &= \zeta \sum_{i,j,k,l,m} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} A^k A^m \langle r_t^j r_t^l \rangle + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &= \frac{\zeta k_B T}{\alpha} \sum_{i,j,k,m} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijm} A^k A^m + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &= \frac{2\zeta k_B T}{\alpha} |\mathbf{A}|^2 + \mathcal{O}(\Delta t) \end{aligned}$$

où l'on a simplement utilisé les propriétés du produit vectoriel et du symbole de Levi-Civita ainsi que la mesure stationnaire. Ainsi le taux de production d'entropie (informationnelle et thermodynamique) est

$$\sigma = \frac{2\zeta}{\alpha} |\mathbf{A}|^2 \quad (2.11)$$

et malgré le fait que la mesure stationnaire soit une mesure de Gibbs (réversibilité au sens (**D2**)), le système est irréversible (ou "hors-équilibre") au sens des définitions (**D1**) et (**D3**).

2.1.2 Renversement du temps dans l'équation de Langevin sous-amortie.

On considère maintenant l'équation de Langevin sous-amortie :

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \mathbf{v}_t \quad (2.12)$$

$$m\dot{\mathbf{v}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{r}_t) - \gamma \mathbf{v}_t + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.13)$$

où m est la masse de la particule et $\gamma = \zeta^{-1}$ est le coefficient d'amortissement.

Supposons que l'on définisse la mesure de chemin reversée en temps par

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.14)$$

où la trajectoire $(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ inverse de $(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est définie, comme dans la section précédente, en renversant seulement la variable temporelle :

$$(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, \mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}}. \quad (2.15)$$

Ce choix implique que, partant d'une trajectoire $(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ solution de (2.12)–(2.13), *i.e.* telle que $\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \neq 0$, la probabilité d'observer la trajectoire inverse $\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]$ est nulle puisque $(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ ne peut pas satisfaire l'équation (2.12) car $\dot{\bar{\mathbf{r}}}_t = -\bar{\mathbf{v}}_t$. Ainsi la production d'entropie informationnelle associée au renversement du temps (2.14)–(2.15) diverge :

$$\Sigma_{\mathbb{T}} = +\infty. \quad (2.16)$$

Notons, d'une part, que la variable $\bar{\mathbf{v}}$ des trajectoires renversées en temps définies par (2.15) n'a plus le sens physique d'une variable vitesse puisqu'elle satisfait $\dot{\bar{\mathbf{r}}}_t = -\bar{\mathbf{v}}_t$ (pour les trajectoires associées, *via* (2.15), à celles issues de (2.12)–(2.13)). D'autre part, l'étude du bilan détaillé (2.14)–(2.15) apporte une information presque triviale puisqu'elle nous enseigne simplement que le fait de ne pas “retourner la variable vitesse” lors de l'inversion du temps donne lieu à des trajectoires impossibles.

Ainsi, pour définir un renversement du temps plus utile et physiquement cohérent, il est nécessaire, en plus de renverser la variable temporelle, de renverser la variable de vitesse :

$$(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}} \quad (2.17)$$

On définit ensuite la mesure renversée en temps des trajectoires :

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}}]. \quad (2.18)$$

Le calcul du taux de production d'entropie informationnelle donne alors :

$$\sigma = \frac{1}{k_B T} \langle \mathbf{v}_t \cdot (\mathbf{F} - m\dot{\mathbf{v}}_t) \rangle. \quad (2.19)$$

A nouveau, σ est bien égale au flux de chaleur divisé par (k_B fois) la température, et coïncide ainsi avec le taux de production d'entropie thermodynamique. Ainsi la réversibilité au sens de la thermodynamique (**D1**) et la réversibilité au sens du bilan détaillé (**D3**) — pour le renversement du temps défini par (2.17)–(2.18) — sont à nouveau équivalentes et ont lieu si et seulement si $\sigma = 0$. On peut monter (confère appendice F) que l'irréversibilité au sens de (**D1**) et (**D3**) est à nouveau

équivalente au fait que le champ de force dérive d'un potentiel : $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}}V(\mathbf{r})$ et que cela implique une mesure stationnaire du type Boltzmann–Gibbs

$$p_{ss}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{Z} e^{-m|\mathbf{v}|^2/2k_B T} e^{-V(\mathbf{r})/k_B T} \quad (2.20)$$

donc la réversibilité au sens (**D2**).

Enfin, sur le plan de “l’interprétation expérimentale”, l’étude de la réversibilité au sens du bilan détaillé donné par les équations (2.17)–(2.18) revient à faire des “films” de l’espace des phases (\mathbf{r}, \mathbf{v}) de la particule sur un intervalle de temps T et à comparer la statistique de ces films avec ceux obtenus en renversant le temps et en inversant la variable de vitesse dans les films initiaux. Notons que, bien que l’accès “direct” à l’espace des phases soit impossible, l’équation (2.12) permet de réaliser indirectement ces “films de l’espace des phases” *via* le protocole suivant : on réalise des films dans l’espace “réel” (ou “espace des configurations”, *i.e.* l’espace dans lequel évolue la variable \mathbf{r}), puis on déduit la vitesse de la particule en différenciant sa variable de position, ce qui permet de “relever” la trajectoire depuis l’espace réel jusque dans l’espace des phases. Ensuite on joue les films dans l’espace réel simplement en inversant le temps. Enfin, on relève les trajectoires obtenues jusque dans l’espace des phases, ces derniers films étant ceux dont la statistique est à comparer avec celle des films initiaux de l’espace des phases.

2.1.3 Renversement du temps en présence d’une force qui ne travaille pas.

On suppose maintenant que notre particule possède une charge électrique q et que, mises à part les forces exercées par le bain thermique, la particule est uniquement soumise à un champ magnétique \mathbf{B} , constant et uniforme :

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \mathbf{v}_t \quad (2.21)$$

$$m\dot{\mathbf{v}}_t = q\mathbf{v}_t \times \mathbf{B} - \gamma\mathbf{v}_t + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.22)$$

Notons tout d’abord que, si l’on suppose par exemple des conditions au bords périodiques sur le domaine spatiale dans lequel évolue la particule, la mesure stationnaire associée au processus est

$$p_{ss}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{Z} e^{-m|\mathbf{v}|^2/k_B T} \quad (2.23)$$

qui est bien une mesure de Gibbs. Ainsi le processus défini par les équations (2.21)–(2.22) est bien à l’équilibre au sens (**D2**) des ensembles statistiques. De plus, un calcul direct permet de montrer que la force totale $-\gamma\mathbf{v}_t + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_t$ exercée par

le bain sur la particule ne travaille pas à l'état stationnaire. La chaleur échangée avec le bain est donc nulle. Le système est ainsi également réversible au sens (**D1**) de la thermodynamique, ce qui était attendu étant donné que la force exercée par le champ magnétique n'exerce aucun travail sur la particule.

Ensuite, sur le plan de la réversibilité au sens (**D3**) du bilan détaillé, étant dans un contexte sous-amortie, on pourrait vouloir définir, comme à la section précédente 2.1.2,

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.24)$$

avec

$$(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}} . \quad (2.25)$$

On peut montrer par un calcul direct que ce choix mène à un taux de production d'entropie informationnelle donnée par :

$$\sigma = \frac{2q^2}{m\gamma} |\mathbf{B}|^2 , \quad (2.26)$$

Cette production d'entropie informationnelle ne coïncide donc pas avec la production d'entropie thermodynamique qui, comme on l'a dit précédemment, est nulle puisque, le champ magnétique ne produisant aucun travail sur la particule, il ne peut en aucun cas maintenir un flux de chaleur en régime permanent.

En revanche, si dans notre manière de “renverser le temps”, en plus de renverser les variables de temps et de vitesse, on renverse également le champ magnétique $\mathbf{B} \mapsto -\mathbf{B}$, on peut montrer que le taux de production d'entropie informationnelle s'annule :

$$\sigma = 0 , \quad (2.27)$$

et coïncide ainsi avec le taux de production d'entropie thermodynamique. Formellement, cette dernière manière de “renverser le temps” revient à définir la probabilité de chemin

$$\bar{\mathcal{P}}_{\mathbf{B}}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}_{-\mathbf{B}}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.28)$$

avec

$$(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv (\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}} , \quad (2.29)$$

où on a noté $\mathcal{P}_{\mathbf{B}}$ la probabilité de chemin associée aux équations (2.21)-(2.22).

Notons que les bilans détaillés (2.24)–(2.25) et (2.28)–(2.29) apportent des informations complémentaires sur la dynamique (2.21)–(2.22). Le fait que le taux de production d'entropie (2.26) associé au bilan détaillé (2.24)–(2.25) ne s'annule pas met en lumière une forme d'irréversibilité des trajectoires du système : dans le plan orthogonal à \mathbf{B} , les particules ont davantage tendance à tourner dans un sens (déterminé par le sens de \mathbf{B} et le signe de la charge q) que dans l'autre —

asymétrie que l'on observerait dans la statistique des trajectoires si l'on mettait en œuvre, par exemple, le protocole expérimentale décrit à la fin de la section 2.1.2. Le fait que le taux de production d'entropie informationnelle (2.27) s'annule lorsqu'on inverse le champ magnétique — et coïncide ainsi avec le taux de production d'entropie thermodynamique — indique que l'irréversibilité de la statistique des trajectoires de (2.21)–(2.22), au sens thermodynamique, ne provient pas des degrés de liberté (\mathbf{r}, \mathbf{v}) des équations (2.21)–(2.22), mais des degrés de liberté sous-jacents au champ magnétique \mathbf{B} .

En effet, supposons que le champ \mathbf{B} soit engendré par la circulation d'électrons dans une bobine aux bornes de laquelle on impose une différence de potentiel ΔU fixée. On aurait alors pu “raffiner” le modèle (2.21)–(2.22) en ajoutant des équations modélisant l'évolution de l'ensemble $\mathbf{X}_t \equiv (\mathbf{r}_t^i, \mathbf{v}_t^i)_i$ des positions et vitesses des électrons au cours du temps, en fonction de ΔU , ainsi que l'expression du champ \mathbf{B} en fonction des vitesses des électrons — cette dernière expression étant impaire selon les équations de Maxwell. Si on note

$$(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv ((\mathbf{r}_{T-t}^i, -\mathbf{v}_{T-t}^i)_i)_{t \in \mathbb{T}} \quad (2.30)$$

la trajectoire renversée en temps des électrons (où on a pas modifié ΔU), alors on peut définir un taux de production d'entropie plus global (*i.e.* qui inclut la dynamique des électrons) :

$$\tilde{\sigma} \equiv \frac{1}{T} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t, \mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t, \bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.31)$$

Tout d'abord, si l'on intègre les degrés de liberté des électrons (*i.e.* on marginalise par rapport à \mathbf{X}) dans la dynamique totale, on retombe bien sur la dynamique initiale (2.21)–(2.22) avec un champ magnétique moyen $\langle \mathbf{B} \rangle$. Or, on peut montrer (voir appendice B) que la production d'entropie associé à la dynamique marginalisée minore la production d'entropie “totale”, *i.e.*

$$\tilde{\sigma} \geq \sigma \quad (2.32)$$

où

$$\sigma \equiv \frac{1}{T} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}_{\langle \mathbf{B} \rangle}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}_{\langle \mathbf{B} \rangle}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.33)$$

est donné par l'expression (2.26) en remplaçant \mathbf{B} par $\langle \mathbf{B} \rangle$. Par ailleurs, en conditionnant le numérateur et le dénominateur respectivement par $(\mathbf{X}_t)_t$ et $(\bar{\mathbf{X}}_t)_t$ on peut décomposer $\tilde{\sigma}$:

$$\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_2 \quad (2.34)$$

avec

$$\tilde{\sigma}_1 \equiv \frac{1}{T} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t | \mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t | \bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad \text{et} \quad \tilde{\sigma}_2 \equiv \frac{1}{T} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle . \quad (2.35)$$

Or l'entropie $\tilde{\sigma}_1$ se réécrit

$$\tilde{\sigma}_1 = \frac{1}{\mathcal{T}} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}_{\mathbf{B}_t}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}_{-\mathbf{B}_{\mathcal{T}-t}}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.36)$$

où $(\mathbf{B}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est le champ magnétique engendré par $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ et, par symétrie des équations de Maxwell, $(-\mathbf{B}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}}$ est celui engendré par $(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$. Si la vitesse des électrons fluctue faiblement autour de sa moyenne, on peut faire une approximation de type champ moyen :

$$\tilde{\sigma}_1 \simeq \frac{1}{\mathcal{T}} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}_{\langle \mathbf{B} \rangle}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}_{-\langle \mathbf{B} \rangle}[(\bar{\mathbf{r}}_t, \bar{\mathbf{v}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.37)$$

qui vaut zéro d'après l'équation (2.27). Ainsi l'entropie informationnelle du système total

$$\tilde{\sigma} \simeq \tilde{\sigma}_2 = \frac{1}{\mathcal{T}} \left\langle \log \frac{\mathcal{P}[(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}]}{\mathcal{P}[(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}]} \right\rangle \quad (2.38)$$

i.e. est approximativement due à la seule dynamique des électrons. Notons que la production d'entropie thermodynamique totale est, quant à elle, exactement due à la dynamique des seuls électrons, et doit être proportionnelle à la vitesse moyenne de l'ensemble des électrons multipliée par la différence de potentiel ΔU .

Ainsi on peut conclure que la dynamique de la particule mésoscopique, bien que réversible au sens thermodynamique puisque non-dissipative (ce qui est bien capturé par le bilan détaillé avec inversion du champ magnétique), présente une forme d'irréversibilité dans la statistique de ses trajectoires (capturée par le bilan détaillé sans inversion du champ \mathbf{B}). Cette dernière est en fait induite par la dynamique sous-jacente des électrons soumis à une différence de potentiel ΔU , qui, quant à elle, est bien irréversible non seulement au sens du bilan détaillé (sans inversion de ΔU) mais également au sens de la thermodynamique.

Irréversibilité, coarse-graining et production d'entropie(s) sont ainsi liés de manière subtile.

2.2 Formalisation mathématique de la symétrie temporelle des équations stochastiques

Dans cette section on re-définit la notion de renversement du temps — qu'on appellera aussi TRS, de l'anglais “Time Reversal Symmetry” — à l'aide de concepts simples issus de la théorie des actions de groupe. Cela nous permettra de clarifier la classification des différentes notions de TRS qui se dessinait déjà lors de l'examen de cas simples à la section 2.1. On qualifiera ainsi la transformation effectuée sur la mesure de chemin de :

- *T-symétrie*, lorsqu'elle consiste simplement en l'inversion de la variable temporelle, comme dans le cas de l'équation de Langevin sur-amortie (2.1) ;
- *PT-symétrie* — pour “Parité-Temps” — lorsqu'en plus de renverser la variable temporelle, on renverse également des degrés de liberté, comme dans le cas de l'équation de Langevin sous-amortie (2.12)–(2.13). Notons que l'emploi du terme “parité” sera employé dans ce manuscrit pour désigner n'importe quelle symétrie vectorielle, et pas seulement celle qui inverse les degrés de liberté spatiaux — comme c'est notamment l'usage en mécanique quantique. Par exemple, on qualifiera d'opération de parité l'application $(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \mapsto (\mathbf{r}, -\mathbf{v})$ qui inverse seulement la vitesse, sans modifier la variable \mathbf{r} de position.
- *E(P)T-symétrie* — pour “(Parité-)Temps Étendue” — lorsqu'on renverse aussi un terme dans l'ensemble des forces appliquées au système, comme le champ magnétique dans la dynamique (2.21)–(2.22).

En plus de clarifier la classification des différentes notions de TRS couramment employées, cette formalisation nous permettra de démontrer aisément que tout processus stochastique admet une E(P)T-symétrie.

2.2.1 Contexte général

Le cadre général dans lequel s'inscrit cette section 2.2 est celui de l'étude des symétries par renversement du temps des processus stochastiques markoviens solutions d'équations différentielles stochastiques (EDS) de la forme

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.39)$$

Dans cette équation une réalisation $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^d$ de \mathbf{X}_t représente *l'ensemble des degrés de liberté d'une particule* à un instant t . Ce n'est donc pas nécessairement une variable de position seulement. Elle peut éventuellement contenir des variables d'impulsion, d'autopropulsion, etc. De plus, dans l'équation (2.39), $\boldsymbol{\eta}$ est un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = 2D^{\alpha\beta}\delta(t - t')$, où \mathbf{D} est une matrice de diffusion *constante et uniforme*.

On étudie cette EDS sur un intervalle temporelle $\mathbb{T} = [0; \mathcal{T}]$, où $\mathcal{T} \in \mathbb{R}$. On définit également l'ensemble \mathfrak{X} des couples (\mathbf{F}, \mathbf{D}) tels que l'équation (2.39) associée possède une unique mesure stationnaire p_{ss} . Dans tout ce chapitre on note : en minuscule les trajectoires $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ (qui sont des applications de \mathbb{T} à valeurs dans \mathbb{R}^d) et en majuscules les processus stochastiques $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ (qui peuvent être vu comme des variables aléatoires à valeurs dans l'ensemble des trajectoires de \mathbb{T} dans \mathbb{R}^d). De plus, dans l'ensemble de ce chapitre, on n'étudie que des équations (2.39) telle que $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$, et on suppose que la condition initiale \mathbf{X}_0 du processus stochastique $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, solution de (2.39), est distribuée selon la probabilité stationnaire p_{ss} , de telle sorte que l'on soit toujours dans l'état stationnaire.

Dans ce cadre, une équation de la forme (2.39) est associée de manière univoque à :

- Un couple champ de force – matrice de diffusion : $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$.
- Une équation de Fokker-Planck de la forme :

$$\partial_t p = \mathcal{W}p \quad (2.40)$$

où l'opérateur d'évolution \mathcal{W} est donné par

$$\mathcal{W}p = -\nabla \cdot [p\mathbf{F} - \mathbf{D}\nabla p] \quad \text{avec} \quad \mathbf{D}\nabla p \equiv D^{\alpha\beta}\partial_{x^\beta}p. \quad (2.41)$$

On définit également le courant de probabilité $\mathcal{J}([p], \mathbf{x})$ (fonctionnelle de p) :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}, [p]) \equiv p(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{D}\nabla p(\mathbf{x}) \quad (2.42)$$

On note $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$ et $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$ les espaces auxquels \mathcal{W} et \mathcal{J} appartiennent respectivement lorsque $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$.

- Une mesure sur les trajectoires $\mathcal{P}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}]$, que l'on identifiera à (l'exponentielle de) la fonctionnelle d'Onsager-Machlup :

$$\mathcal{P}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \frac{1}{Z} \exp \left[-\frac{1}{4} \int_{\mathbb{T}} [\dot{\mathbf{x}}_t - \mathbf{F}(\mathbf{x}_t)]^t \mathbf{D}^{-1} [\dot{\mathbf{x}}_t - \mathbf{F}(\mathbf{x}_t)] + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}_t) dt \right] p_{ss}(\mathbf{x}_0) \quad (2.43)$$

On pensera toujours à \mathcal{P} comme à une densité de probabilité par rapport à une “mesure de Lebesgue” sur l'espace des trajectoires.⁴ On note $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ l'espace auquel \mathcal{P} appartient.

4. Lorsque \mathbf{D} a des valeurs propres nulles, associées à un sous-espace propre E_0 de \mathbb{R}^d , le terme associé à $|\dot{\mathbf{x}}_t^0 - \mathbf{F}^0(\mathbf{x}_t)|^2$ dans l'exponentielle vaut $-\infty$, sauf lorsque $\dot{\mathbf{x}}_t^0 = \mathbf{F}^0(\mathbf{x}_t)$. La probabilité de chemin sur la composante \mathbf{x}^0 de la trajectoire, sachant les autres composantes, est donc un dirac selon les lignes de flot de $\mathbf{F}(\mathbf{x}_t)$.

→ Une probabilité à deux points⁵ $p_2(\mathbf{x}, t; \mathbf{y}, \tau)$ dont on note l'espace $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$.

Ainsi un couple $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$, un opérateur d'évolution \mathcal{W} , une fonctionnelle de courant \mathcal{J} , une mesure de chemins \mathcal{P} , ou une mesure à deux point p_2 caractérisent entièrement un processus (stationnaire) $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ solution de l'équation (2.39). Autrement dit les espaces \mathfrak{X} , $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ et $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$ sont en bijection.

Notons au passage que la connaissance de la mesure stationnaire p_{ss} , du courant de probabilité stationnaire $\mathbf{J}_{ss} \equiv \mathcal{J}(\cdot, [p_{ss}])$ et de la matrice de diffusivité \mathbf{D} implique la connaissance de l'ensemble du processus stochastique, puisque

$$\mathbf{F} = p_{ss}^{-1} (\mathbf{J}_{ss} + \mathbf{D} \nabla p_{ss}) . \quad (2.44)$$

Si la caractérisation de la mesure stationnaire du système est une question centrale en physique statistique, celle du courant de probabilité stationnaire l'est également, puisqu'à eux deux (et avec \mathbf{D}) ils contiennent “toute l'information” sur le processus stochastique. Le chapitre 5 de ce manuscrit porte sur une méthode de caractérisation de ce courant de probabilité dans les théories des champs stochastiques.

Dans ce contexte, définir un “renversement du temps” (ou TRS) pour le processus $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, solution stationnaire (*i.e.* dont la mesure ponctuelle est constante) de la dynamique (2.39), c'est définir un processus “adjoint” (ou “dual”) $(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, solution stationnaire d'une dynamique “adjointe”, ayant une probabilité de chemin que l'on notera $\bar{\mathcal{P}}$. On exige par ailleurs que l'application $\mathcal{P} \mapsto \bar{\mathcal{P}}$ soit *involutive*, puisque “inverser le cours du temps” une seconde fois doit nous ramener dans la situation initiale⁶.

Le système est alors dit *réversible par rapport au renversement choisi* si et seulement si $\mathcal{P} = \bar{\mathcal{P}}$. C'est à dire ssi les processus adjoints $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ et $(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ ont la même probabilité de parcourir n'importe quelle trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}} : \mathcal{P}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}]$.

On rappelle que la donnée d'une involution \mathfrak{s} sur un ensemble A est identique à la donnée d'une action \bullet du groupe $\mathbb{Z}_2 = (\{0; 1\}, +)$ sur ce même ensemble, où l'action \bullet est définie par

$$\forall a \in A , \quad 0 \bullet a \equiv id_A(a) \quad \text{et} \quad 1 \bullet a \equiv \mathfrak{s}(a) \quad (2.45)$$

5. On peut obtenir la probabilité à deux points en intégrant la probabilité de chemins. Réciproquement, l'équation (2.39) étant markovienne, on peut établir la probabilité à n points à partir de la probabilité à 2 points pour n quelconque, puis la probabilité de chemins par “passage à la limite”.

6. Notons que certains auteurs [98] exigent de plus que la mesure stationnaire p_{ss} soit inchangée par un tel renversement du temps. On choisit de ne pas imposer cette contrainte dans la définition des “renversements du temps” étudiés dans ce chapitre.

où on a noté id_A l'application identité de A (cf. appendice C pour plus de détails). Dans ce chapitre, on choisira le point de vue de l'action de \mathbb{Z}_2 , puisque celui-ci donne accès à bon nombre d'opérations naturelles sur les actions de groupes que nous rappelons en détails dans l'appendice C. Précisons tout de même que les deux opérations dont nous ferons le plus usage dans la suite de cette section sont les opérations

- d'induction d'action : si G est un groupe qui agit sur deux ensembles A et B via des actions notées respectivement \bullet_A et \bullet_B , on peut définir une action \bullet_{B^A} de G sur l'ensemble B^A des applications f de A dans B par

$$[g \bullet_{B^A} f](a) \equiv g \bullet_B f(g^{-1} \bullet_A a) \quad (2.46)$$

pour tout élément a dans A . On dit que l'action \bullet_{B^A} est induite à partir des actions \bullet_A et \bullet_B .

- de transport d'action : si un groupe G agit sur un ensemble A et que f est une application bijective de A dans un ensemble B , on peut définir une action \bullet_B sur B par

$$\forall b \in B, \forall g \in G, g \bullet_B b \equiv f(g \bullet_A f^{-1}(b)). \quad (2.47)$$

On dit que \bullet_B est l'action transportée de \bullet_A par f .

2.2.2 (P)T-symétrie

Dans cette section, on se donne une symétrie vectorielle \mathbf{p} sur \mathbb{R}^d . Par exemple si $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \mathbf{v})$ décrit des variables de position et de vitesse seulement, on peut définir une simple “inversion des vitesses” $\mathbf{p} : (\mathbf{r}, \mathbf{v}) \mapsto (\mathbf{r}, -\mathbf{v})$. On définit également l'involution d'inversion de la variable temporelle $t : t \in \mathbb{T} \mapsto \mathcal{T} - t \in \mathbb{T}$.

On va voir que, malgré l'apparente complexité de la définition d'une TRS donnée en 2.2.1, qui consiste à définir une involution sur l'espace des mesures de trajectoires, on peut reconstruire une grande classe de tels renversement du temps à partir des simples applications \mathbf{p} et t . En plus d'éclairer le concept général de TRS, la simplicité de cette construction nous permettra également de déduire aisément bon nombre de propriétés des TRS qui consistent à inverser le temps et “retourner” des degrés de liberté.

Actions induites : espaces des trajectoires et des probabilités de chemins

L'involution \mathbf{p} (respectivement t) est naturellement associée à une action de \mathbb{Z}_2 dans \mathbb{R}^d (resp. \mathbb{T}), notée $*_{\mathbf{p}}$ (resp. $*_t$). Ainsi les espaces $(\mathbb{R}^d, *_{\mathbf{p}})$ et $(\mathbb{T}, *_t)$ sont tous deux des \mathbb{Z}_2 -ensembles. L'espace des trajectoires du problème considéré étant simplement (inclus dans) l'ensemble $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{T}}$ des applications de \mathbb{T} dans \mathbb{R}^d , on peut le

munir d'une action de \mathbb{Z}_2 naturellement induite (cf. appendice C) à partir de $*_{\mathfrak{p}}$ et $*_{\mathfrak{t}}$: on note $*_{\mathfrak{pt}}$ l'action ainsi obtenue. Pour toute trajectoire $\mathbf{x} : t \in \mathbb{T} \mapsto \mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^d$ (notée aussi \mathbf{x}_t), on a

$$(g *_{\mathfrak{pt}} \mathbf{x})(t) \equiv g *_{\mathfrak{p}} \mathbf{x}(g^{-1} *_{\mathfrak{t}} t). \quad (2.48)$$

Lorsque $g = g^{-1} = 0$, on a nécessairement une transformation triviale, i.e. qui ne fait rien : $(0 *_{\mathfrak{pt}} \mathbf{x})(t) = \mathbf{x}(t)$. Lorsque $g = g^{-1} = 1$: $(1 *_{\mathfrak{pt}} \mathbf{x})(t) = \mathfrak{p}[\mathbf{x}(\mathcal{T} - t)]$.

Par ailleurs, une "mesure" de chemin \mathcal{P} est, quant à elle, une application de l'espace des trajectoires $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{T}}$ dans \mathbb{R} . Puisque $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{T}}$ est maintenant muni d'une action de \mathbb{Z}_2 , et que l'on peut toujours définir une action triviale de \mathbb{Z}_2 sur \mathbb{R} (qui laisse inchangé tout élément de \mathbb{R}), on peut à nouveau définir une action induite sur l'espace des probabilités de chemin, notée $*_{\mathfrak{pt}}$:

$$[g *_{\mathfrak{pt}} \mathcal{P}][(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[g^{-1} *_{\mathfrak{pt}} (\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.49)$$

Ainsi, à partir d'une paire d'actions élémentaires $(*_{\mathfrak{t}}, *_{\mathfrak{p}})$ de \mathbb{Z}_2 opérant respectivement sur le temps \mathbb{T} et l'espace des états \mathbb{R}^d , on a pu induire une action $*_{\mathfrak{pt}}$ sur l'espace des probabilités de trajectoires.

Transport d'action et réversibilité

Pour une involution linéaire \mathfrak{p} donnée, la procédure précédente permet de définir, par restriction⁷ de $*_{\mathfrak{pt}}$ à $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}} \subset \mathbb{R}^{([\mathbb{R}^d]^{\mathbb{T}})}$, une action sur $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, toujours notée $*_{\mathfrak{pt}}$. Ainsi, pour tout processus stochastique (stationnaire) \mathbf{X}_t , solution de l'équation (2.39) pour un certain couple $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$, de mesure de chemin (stationnaire) $\mathcal{P} \in \mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, on peut définir un processus $\bar{\mathbf{X}}_t$, de mesure de chemin (stationnaire) $\bar{\mathcal{P}}$ définie par

$$\bar{\mathcal{P}} \equiv 1 *_{\mathfrak{pt}} \mathcal{P}, \quad (2.50)$$

c'est à dire

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv [1 *_{\mathfrak{pt}} \mathcal{P}][(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[1^{-1} *_{\mathfrak{pt}} (\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\mathfrak{p}(\mathbf{x}_{\mathcal{T}-t}))_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.51)$$

ou encore

$$\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad \text{où} \quad (\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}} \equiv 1 *_{\mathfrak{pt}} (\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}} \quad (2.52)$$

où $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est la trajectoire "inverse" de $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ (pour les involutions \mathfrak{p} et \mathfrak{t} considérées). Ce processus stochastique $\bar{\mathbf{X}}_t$, ayant $\bar{\mathcal{P}}$ pour mesure de chemins, sera appelé indifféremment processus \mathfrak{pt} -dual, \mathfrak{pt} -adjoint, ou \mathfrak{pt} -inverse (ou PT-dual, PT-adjoint, ou PT-inverse, lorsqu'on ne précisera pas les involutions \mathfrak{p} et \mathfrak{t}). C'est le "processus renversé en temps" associé au processus initial \mathbf{X}_t , pour l'involution \mathfrak{p} choisie (\mathfrak{t} est toujours la même pour un intervalle \mathbb{T} donné).

7. Le fait que $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ soit stable par $*_{\mathfrak{pt}}$ sera donné par l'équation (2.56).

Notons qu'on définit parfois le processus renversé en temps $(\bar{\mathbf{X}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ du processus $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ (solution stationnaire de (2.39)) comme le processus qui réalise toute trajectoire $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, “inverse” d'une trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$, avec la même probabilité que le processus initiale $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ réalise $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$. Ce qui s'écrit mathématiquement

$$\bar{\mathcal{P}}[(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \equiv \mathcal{P}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \quad (2.53)$$

ce qui est bien équivalent à l'équation (2.52). Notons que cette dernière définition ne sera pas valable pour des renversement du temps impliquant, non seulement une inversion de la variable temporelle et (éventuellement) de certains degrés de liberté, mais également une transformation directe du champ de force \mathbf{F} (voire de la matrice \mathbf{D}), comme on le verra à la section 2.2.3. C'est pourquoi on a donné une définition plus générale d'un renversement du temps à la section 2.2.1, n'impliquant qu'une involution sur les probabilités de chemins $\mathcal{P} \mapsto \bar{\mathcal{P}}$.

On voudrait maintenant connaître plus en détails les propriétés de ce processus dual. En particulier on voudrait savoir pour quel couple $(\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{D}}) \in \mathfrak{X}$ ce processus dual est solution de l'équation (2.39). L'espace $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ étant en bijection avec $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$, et \mathfrak{X} , on peut transporter l'action $\star_{\mathfrak{pt}}$ à tous ces espaces, via des applications bijectives appropriées (cf. paragraphe “transport d'action” de l'appendice C). Les actions obtenues seront en général également notées $\star_{\mathfrak{pt}}$. Lorsqu'on aura besoin par la suite de préciser de quelle action on parle, on utilisera les notations $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathbb{P}}$, $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathbb{P}^2}$, $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathbb{W}}$, $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathbb{J}}$, et $\star_{\mathfrak{pt}}^{\mathfrak{X}}$. La construction formelle de ces actions à partir des involutions \mathfrak{p} et \mathfrak{t} est synthétisée dans la figure 2.1.

Étant donné que l'action de $0 \in \mathbb{Z}_2$ est toujours triviale, on va se contenter, à partir de maintenant, de décrire l'action de $1 \in \mathbb{Z}_2$. Pour tout élément e sur lequel \mathbb{Z}_2 opère via une action $\star_{\mathfrak{pt}}$, on pose

$$\bar{e} \equiv 1 \star_{\mathfrak{pt}} e . \quad (2.54)$$

On démontre ensuite (cf. Appendice D) que le processus \mathfrak{pt} -dual a les propriétés suivantes :

→ sa mesure à deux points est

$$\bar{p}_2(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) = p_2(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), \mathcal{T} - \tau, \mathfrak{p}(\mathbf{x}), \mathcal{T} - t) \quad (2.55)$$

→ sa mesure stationnaire est

$$\bar{p}_{ss} = p_{ss} \circ \mathfrak{p} . \quad (2.56)$$

En particulier, ceci implique que les deux processus adjoints ont la même mesure stationnaire si et seulement si p_{ss} est invariante sous \mathfrak{p} .

→ son opérateur d'évolution est

$$\bar{\mathcal{W}} = \mathfrak{P} p_{ss} \mathcal{W}^\dagger p_{ss}^{-1} \mathfrak{P} \quad (2.57)$$

où l'opérateur \mathfrak{P} agit sur les fonctions $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ via $\mathfrak{P}f : \mathbf{x} \mapsto f \circ \mathfrak{p}(\mathbf{x})$, et où \mathcal{W}^\dagger est l'opérateur dual de \mathcal{W} au sens \mathbb{L}^2 (pour la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d). L'expression explicite de l'opérateur d'évolution est donnée par

$$\bar{\mathcal{W}}\psi = -\nabla \cdot \left[\left(2J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{F} \circ \mathfrak{p} \right) \psi - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \psi \right] \quad (2.58)$$

où $J_{\mathfrak{p}}$ est la jacobienne de $\mathfrak{p} : [J_{\mathfrak{p}}]_{ij} = \partial_j \mathfrak{p}^i$, et où $J_{\mathfrak{p}}^t$ est sa transposée.

→ son champ de forces $\bar{\mathbf{F}}$, sa matrice de diffusion $\bar{\mathbf{D}}$, ainsi que sa fonctionnelle de courant $\bar{\mathcal{J}}$ sont respectivement donnés par :

$$\bar{\mathbf{F}} = 2J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{F} \circ \mathfrak{p} \quad (2.59)$$

$$\bar{\mathbf{D}} = J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \quad (2.60)$$

$$\bar{\mathcal{J}}[p] = p \bar{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{D}} \nabla p \quad (2.61)$$

→ sa mesure de chemin $\bar{\mathcal{P}}$ est, quant à elle, obtenue en remplaçant \mathbf{F} et \mathbf{D} respectivement par $\bar{\mathbf{F}}$ et $\bar{\mathbf{D}}$ dans l'expression (2.43) de \mathcal{P} — ou, de manière équivalente, en remplaçant $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ par $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ dans \mathcal{P} .

Le processus $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est alors dit **pt-réversible** — on dira simplement **t-réversible** lorsque \mathfrak{p} est l'identité — lorsque l'une des conditions équivalentes suivantes est vérifiée :

$$\mathcal{P} = \bar{\mathcal{P}}, \quad p_2 = \bar{p}_2, \quad \mathcal{W} = \bar{\mathcal{W}}, \quad (\mathbf{F}, \mathbf{D}) = (\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{D}}), \quad \text{ou encore } \mathcal{J} = \bar{\mathcal{J}}.$$

En terme d'action de \mathbb{Z}_2 , la *réversibilité* signifie que le processus stochastique $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est un *point fixe pour l'action $\star_{\mathfrak{pt}}$* . Les ensembles $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$, et \mathfrak{X} — décrivant tous $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ de manière univoque — étant “ \mathbb{Z}_2 -équivalents” (i.e. il existe des bijections équivariantes entre eux), un élément de l'un de ces ensembles est un point fixe pour l'action de \mathbb{Z}_2 ssi ses images (par les bijections équivariantes) dans les autres ensembles sont également des points fixes (cf. appendice C). D'où l'équivalence des définitions de réversibilité dans tous ces ensembles.

Par ailleurs, si l'on note $E^{\mathfrak{X}}$ l'un des ensembles $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$, ou \mathfrak{X} , et e un élément de $E^{\mathfrak{X}}$, alors on peut décomposer e en parties symétrique et anti-symétrique sous l'action $\star_{\mathfrak{pt}}$:

$$e = e^S + e^A \quad \text{avec} \quad e^S = \frac{1}{2} (e + 1 \star_{\mathfrak{pt}} e) \quad \text{et} \quad e^A = \frac{1}{2} (e - 1 \star_{\mathfrak{pt}} e) \quad (2.62)$$

La \mathbb{pt} -réversibilité est alors équivalente à $e^S = e$ ou encore à $e^A = 0$. Notons que ceci reste vrai pour les espaces $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ et $\mathbb{p}_2^{\mathfrak{X}}$ mais les parties symétrique et anti-symétrique d'un élément ne sont alors en général plus des probabilités.

Enfin, signalons que l'on donne dans l'appendice H l'expression de $\bar{\mathcal{W}}$ (ainsi que celles de $\bar{\mathbf{F}}$, $\bar{\mathbf{D}}$ et $\bar{\mathcal{J}}$) dans le cas, plus général, d'une équation différentielle stochastique avec bruit multiplicatif.

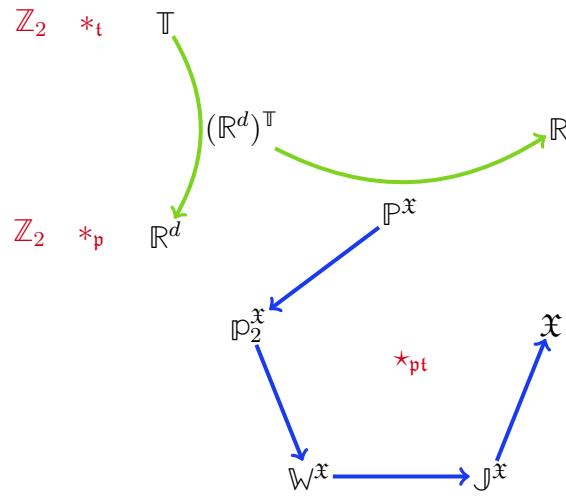


Figure 2.1 – Construction de l'action $*_{\mathbb{pt}}$ de \mathbb{Z}_2 , formalisant le “renversement du temps”, sur tous les espaces d’intérêt (décrivant la dynamique stochastique (2.39)) à partir de deux actions élémentaires de \mathbb{Z}_2 : $*_t$ et $*_p$ (notées en rose en haut à gauche de la figure), agissant respectivement sur le temps \mathbb{T} et l'espace \mathbb{R}^d . Chaque flèche verte désigne l'espace des fonctions entre les ensembles de départ et d'arrivée. Leur courbure symbolise l'*induction* d'une action sur l'espace des fonctions depuis les actions sur les espaces de départ et d'arrivée. Les flèches bleues symbolisent l'existence d'une bijection entre les espaces, permettant, lorsque décrétée équivariante, le *transport* d'une action depuis la source de la flèche jusqu'à son but. Les espaces $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{p}_2^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$ et \mathfrak{X} sont tous des \mathbb{Z}_2 -ensembles qui sont ainsi \mathbb{Z}_2 -équivalents par construction. On note donc, pour simplifier, chacune des actions de \mathbb{Z}_2 sur ces espaces par la même notation $*_{\mathbb{pt}}$ (schématisée en rose au centre du pentagone délimité par les flèches bleues). Enfin, notons que l'on aurait tout à fait pu transporter l'action $*_{\mathbb{pt}}$ dans l'autre sens du pentagone depuis $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ (i.e. de $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$ à \mathfrak{X} et ainsi de suite), en identifiant $\bar{\mathbf{F}}$ et $\bar{\mathbf{D}}$ dans l'expression de $\bar{\mathcal{P}}$.

2.2.3 EPT-symétrie : PT-symétrie étendue

On a vu, à travers l'exemple de la particule chargée en champ magnétique (cf. équations (2.21)-(2.22)), qu'il peut être utile de pouvoir exprimer une forme plus générale de réversibilité (toujours au sens (**D3**) d'un bilan détaillé) que celle décrite par les (P)T-symétries. Cette forme plus générale consiste à modifier directement le champ de force \mathbf{F} appliqué au système — et éventuellement la matrice de diffusion \mathbf{D} — en plus de renverser le temps ainsi qu'éventuellement certains degrés de liberté.

Pour formaliser cela, on suppose disposer d'une nouvelle involution ϵ définie directement sur l'espace \mathfrak{X} des couples (champs de force, diffusivité). On peut penser à l'inversion d'un éventuel champ magnétique par exemple. Comme pour les applications t et p , cette involution peut être vu comme une action $*_\epsilon$ du groupe \mathbb{Z}_2 sur \mathfrak{X} . On peut, comme dans la section précédente, transporter cette action à tous les espaces en bijection avec \mathfrak{X} , notamment à $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, où l'action obtenue est notée $*_\epsilon$. Ensuite, si une condition de compatibilité est respectée (il faut que les actions $*_\epsilon$ et $*_{pt}$ commutent – cf. paragraphe “composition d’actions” de l’appendice C pour plus de détails), on peut composer cette action avec $*_{pt}$, pour obtenir une action $*_{\epsilon pt}$, définie par :

$$1 *_{\epsilon pt} \mathcal{P} \equiv 1 *_{pt} (1 *_\epsilon \mathcal{P}) = 1 *_\epsilon (1 *_{pt} \mathcal{P}) \quad (2.63)$$

A nouveau, on peut transporter l'action obtenue à tous les espaces $\mathbb{P}_2^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{W}^{\mathfrak{X}}$, $\mathbb{J}^{\mathfrak{X}}$ et \mathfrak{X} . Ces espaces étant ainsi \mathbb{Z}_2 -équivalents, on note par le même symbole $*_{\epsilon pt}$ les actions obtenues. Si $E^{\mathfrak{X}}$ est l'un de ces espaces et e un élément de $E^{\mathfrak{X}}$, on renote

$$\bar{e} \equiv 1 *_{\epsilon pt} e \quad (2.64)$$

Pour obtenir l'expression explicite de \bar{e} (notamment celles de $\bar{\mathcal{W}}$, $\bar{\mathbf{F}}$, $\bar{\mathbf{D}}$ et $\bar{\mathcal{J}}$), il suffit de remplacer le couple (\mathbf{F}, \mathbf{D}) par $1 *_\epsilon (\mathbf{F}, \mathbf{D}) \equiv \epsilon(\mathbf{F}, \mathbf{D})$ dans l'expression de \bar{e} donnée à la section 2.2.2.

La construction générale d'une ϵpt -symétrie ainsi réalisée est résumé dans la figure 2.2.

Cette formulation coïncide bien avec ce que nous avions fait dans le cas d'une particule chargée plongée dans un champ magnétique (cf. équations (2.21)–(2.22)) puisque dans ce cas, en choisissant pour ϵ l'application qui inverse le sens du champ magnétique, et en notant \mathcal{P}_B la probabilité “forward” (i.e. du système avant renversement du temps), on trouve que la probabilité de chemins renversée en temps est bien :

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{P}_B}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] &\equiv [1 *_{\epsilon pt} \mathcal{P}_B][(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= [1 *_{pt} (1 *_\epsilon \mathcal{P}_B)][(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= [1 *_{pt} \mathcal{P}_{-B}][(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= \mathcal{P}_{-B}[(\mathbf{r}_{\mathcal{T}-t}, -\mathbf{v}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathbb{T}}] \end{aligned}$$

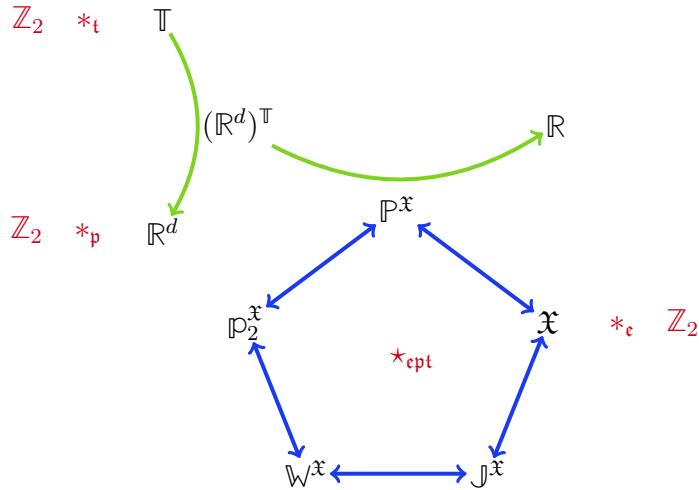


Figure 2.2 – Résumé de la construction d’un “renversement du temps” (étendu), formalisé par une action \star_{ept} de \mathbb{Z}_2 sur les espaces \mathbb{Z}_2 -équivalents \mathbb{P}^x , \mathbb{P}_2^x , \mathbb{W}^x , \mathbb{J}^x et \mathfrak{X} , décrivant la dynamique (2.39). Cette action \star_{ept} est construite à partir d’actions élémentaires $*_t$, $*_p$ et $*_e$ agissant respectivement sur le temps \mathbb{T} , l’espace des états \mathbb{R}^d et l’espace \mathfrak{X} des champs de force et des matrices de corrélation du bruit. Le code couleur est le même que celui de la figure 2.1.

L’intérêt d’une telle formulation est notamment de voir immédiatement que, pour n’importe quelle involution linéaire \mathfrak{p} sur \mathbb{R}^d (donc notamment $\mathfrak{p} = id_{\mathbb{R}^d}$) et tout processus stochastique $(\mathbf{X}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ solution de (2.39) pour un couple $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \in \mathfrak{X}$ quelconque, on peut trouver une modification du champ de force \mathbf{F} (et éventuellement de \mathbf{D}) qui “compense” le renversement du temps (*i.e.* la PT-symétrie définie par \mathfrak{p} et t). Cette modification de (\mathbf{F}, \mathbf{D}) étant donnée par l’action de $1 \in \mathbb{Z}_2$ via $*_e \equiv \star_{\mathfrak{p}t}^{\mathfrak{X}}$. En effet, on voit immédiatement que prendre $*_e \equiv \star_{\mathfrak{p}t}^{\mathfrak{X}}$ conduit à une action \star_{ept} sur \mathbb{P}^x égale à l’identité :

$$1 \star_{\text{ept}} \mathcal{P} = 1 \star_{\mathfrak{p}t} (1 \star_e \mathcal{P}) = 1 \star_{\mathfrak{p}t} (1 \star_{\mathfrak{p}t} \mathcal{P}) = (1 + 1) \star_{\mathfrak{p}t} \mathcal{P} = 0 \star_{\mathfrak{p}t} \mathcal{P} = \mathcal{P}. \quad (2.65)$$

Ainsi, n’importe quelle équation stochastique est invariante sous une telle ept -symétrie (puisque celle-ci est l’identité), *i.e.* *n’importe quelle équation stochastique possède une EPT-symétrie*⁸.

Plus concrètement, ces EPT-symétries “universelles” consistent à : appliquer une PT-symétrie dans la probabilité de chemin \mathcal{P} ; cette symétrie transforme le couple $(\mathbf{F}, \mathbf{D}) \mapsto 1 \star_{\mathfrak{p}t}^{\mathfrak{X}} (\mathbf{F}, \mathbf{D})$; l’action $*_e = \star_{\mathfrak{p}t}^{\mathfrak{X}}$ consiste alors à ré-inverser le champ

8. Même une infinité, puisque \mathfrak{p} est quelconque dans cette construction.

de force (et éventuellement la matrice de diffusion si nécessaire) : $1 \star_{\text{pt}}^{\mathfrak{X}} (\mathbf{F}, \mathbf{D}) \rightarrow (\mathbf{F}, \mathbf{D})$, ce qui re-donne la mesure initiale.

Notons que la transformation (2.28)–(2.29) appliquée au système magnétique décrit par les équations (2.21)–(2.22), qui permet de retrouver l'entropie thermodynamique à partir d'une entropie informationnelle, est exactement de cette nature, *i.e.* elle coïncide avec \star_{cpt} pour $*_{\epsilon} \equiv \star_{\text{pt}}^{\mathfrak{X}}$ et $\mathbf{p}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \equiv (\mathbf{r}, -\mathbf{v})$. Mieux, toute EPT-symétrie qui laisse invariante un système donné (*i.e.* pour laquelle le système est réversible au sens (**D3**)) coïncide, pour ce système, avec une action “universelle” \star_{cpt} , où $*_{\epsilon} = \star_{\text{pt}}^{\mathfrak{X}}$ (pour un certain \mathfrak{p}) ! Ceci n'est peut-être pas évident quand on regarde l'action \star_{cpt} au niveau de l'espace $\mathbb{P}^{\mathfrak{X}}$, car une part de la transformation réalisée dans la probabilité de chemin provient d'un renversement du temps (et éventuellement de certains degrés de liberté), tandis qu'une autre consiste à modifier directement la force (et éventuellement la matrice de diffusion). Mais c'est clair quand on examine l'action \star_{cpt} dans l'espace \mathfrak{X} : pour que le système soit cpt -réversible, il faut précisément que l'involution ϵ fasse la transformation inverse de celle induite par la pt -symétrie.

Enfin, ce résultat “d'EPT-symétrie universelle” suggère fortement qu'*il n'est pas possible de dégager de propriété générale des systèmes EPT-symétriques* — comme nous le faisons notamment à la prochaine section 2.3 pour les systèmes (P)T-symétriques — puisqu'ils le sont finalement tous. Néanmoins, la notion de PT-symétrie Étendue a son importance, notamment parce qu'elle permet de faire coïncider l'entropie informationnelle et l'entropie thermodynamique dans certains systèmes tels que celui de la particule chargée en champ magnétique (cf. (2.21)–(2.22)).

2.3 Réversibilité et courants de probabilité

2.3.1 T-symétrie des systèmes sur-amortis & courants de probabilité

On s'intéresse dans cette section à des systèmes ne comprenant pas de variable “naturellement” impaire sous renversement du temps. Ces systèmes doivent donc, en particulier, être sur-amortis, i.e. évoluer dans des conditions telles que les effets inertiels soient négligeables devant les frottements visqueux. De plus, on s'intéresse seulement aux propriétés de tels systèmes vis à vis de la “symétrie temporelle” consistant simplement à renverser la variable de temps. Autrement dit, on s'intéresse seulement au système dont l'étude de l'irréversibilité se ramène à l'étude de leur comportement sous T-symétrie.

On reprend les notations de l'équation (2.39) :

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.66)$$

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$. On suppose néanmoins ici que la matrice de corrélation du bruit est l'identité, i.e. $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = 2\delta^{\alpha\beta}\delta(t-t')$. Bien que cette hypothèse semble restreindre la généralité des résultats qui sont présentés dans cette section, on peut montrer qu'il est toujours possible de se ramener à une configuration similaire — de mouvement brownien biaisé — en définissant une métrique courbe et en ajoutant un terme supplémentaire de force effective(voir appendice I et [54]), ce qui ne modifie pas “moralement” les conclusions de cette section.

On veut maintenant étudier les propriétés de réversibilité de l'équation (2.66) vis à vis de la T-symétrie. On peut montrer que le système est irréversible si et seulement s'il existe une trajectoire $C_{A \rightarrow B}$, allant d'un point A à un point B , qui a plus de chance d'être parcourue que sa trajectoire inverse $C_{B \rightarrow A}$ (cf. appendice E). Une première intuition, naïve, serait de dire que, le terme stochastique du bain étant isotrope, la particule a toujours plus de chance de “descendre les lignes de flot de \mathbf{F} ” que de les “remonter”, donc que le système est irréversible dès qu'il est soumis à un champ de force \mathbf{F} non nul. En fait, cette intuition s'applique non pas aux probabilités “totales” de parcourt $\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B}]$ vs. $\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A}]$, mais aux probabilités de parcourt *conditionnées aux points de départ* : $\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A]$ vs. $\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B]$. En effet

$$\frac{\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A]}{\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B]} = e^{W_{A \rightarrow B}}, \quad \text{avec} \quad W_{A \rightarrow B} \equiv \int_{\mathbb{T}} \mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{X}}_t dt \quad (2.67)$$

où $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}$ est (une paramétrisation de) la trajectoire $C_{A \rightarrow B}$. Si cette trajectoire “descend les lignes de flot de \mathbf{F} ”, c'est à dire si $W_{A \rightarrow B}$ est positif, alors on a bien

que $\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A] > \mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B]$. Néanmoins l'examen de la formule des probabilités conditionnelles :

$$\frac{\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B}]}{\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A}]} = \frac{\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A] p_{ss}(A)}{\mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B] p_{ss}(B)} \quad (2.68)$$

montre que le travail $W_{A \rightarrow B}$ peut être “compensé” par le fait que la probabilité d’être en B soit plus importante que celle d’être en A . Une autre manière de formuler cela est de prendre le log de l’équation (2.68), qui donne une version trajectorielle [104] de la décomposition que fait le second principe de la thermodynamique de la variation d’entropie, entre chaleur et entropie produite :

$$\hat{\Sigma}_{A \rightarrow B} = \hat{Q}_{A \rightarrow B} + \Delta \hat{S}_{A \rightarrow B} \quad (2.69)$$

où $\Sigma_{A \rightarrow B} \equiv \log(\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B}] / \mathcal{P}[C_{B \rightarrow A}])$ est l’entropie produite en parcourant la trajectoire $C_{A \rightarrow B}$ (qui peut être négative), $\hat{Q}_{A \rightarrow B} \equiv \log(\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A] / \mathcal{P}[B \rightarrow A | \mathbf{x}_0 = B]) = W_{A \rightarrow B}$ est la chaleur transmise au bain⁹, et $\Delta \hat{S}_{A \rightarrow B} \equiv -\log p_{ss}(B) + \log p_{ss}(A)$ est la variation de l’entropie de Shannon “trajectorielle” $\hat{S}(\mathbf{x}) \equiv -\log p_{ss}(\mathbf{x})$ entre les points A et B . La “compensation” mentionnée plus haut correspond alors à celle de $\hat{Q}_{A \rightarrow B}$ par $\Delta \hat{S}_{A \rightarrow B}$ qui conduit bien à une production trajectorielle d’entropie nulle $\hat{\Sigma}_{A \rightarrow B} = 0$. Lorsque cette compensation a lieu pour toutes les trajectoires, on a bien la propriété de bilan détaillé

$$\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B} | \mathbf{x}_0 = A] p_{ss}(A) = \mathcal{P}[C_{B \rightarrow A} | \mathbf{x}_0 = B] p_{ss}(B) , \quad (2.70)$$

i.e. le processus étudié est bien réversible. On sait que cette compensation systématique (i.e. pour toutes les trajectoires) est notamment réalisée lorsque le champ de force dérive d’un potentiel $\mathbf{F} = -\nabla V$, auquel cas la mesure d’équilibre est une mesure de Gibbs–Boltzmann : $p_{ss}(\mathbf{x}) = e^{-V(\mathbf{x})}/Z$. On peut alors se demander s’il existe des champs de force qui ne dérivent pas d’un potentiel, mais pour lesquels la “compensation” est néanmoins possible. Comme on l’a vu à la section 2.2.2, la réponse est négative, puisque la réversibilité du processus implique d’après l’équation (2.59) :

$$\mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}} = 2\mathbf{D}\nabla \log p_{ss} - \mathbf{F} \quad i.e. \quad \mathbf{F} = \nabla \log p_{ss} . \quad (2.71)$$

9. $W_{A \rightarrow B}$ ne correspond pas au “travail de l’opérateur” apparaissant dans le premier principe de la thermodynamique (stochastique). En effet, un tel travail (infinitésimal) d’un opérateur serait donné par $\partial_\lambda V(\mathbf{r})d\lambda$, où le système serait soumis à une force $-\nabla_{\mathbf{r}} V_\lambda(\mathbf{r})$, paramétrée par un paramètre λ que l’opérateur ferait varier au cours d’une transformation. $W_{A \rightarrow B}$ est le travail du champ de force (fixe) sur la particule. Celui-ci correspond à une variation d’énergie potentielle du système. Le système étant sur-amorti, l’énergie de la particule est réduite à cette énergie potentielle. Le travail de l’opérateur étant nul, on a bien égalité entre flux de chaleur et variation du potentiel.

Pour comprendre ce résultat, il suffit de regarder le problème de création d'entropie trajectorielle en ne considérant que des trajectoires fermées, i.e. des boucles. Pour de telles trajectoires, le travail de \mathbf{F} ne peut pas être compensé par la variation de l'entropie de Shannon trajectorielle. S'il existe une boucle orientée C^+ qu'il est plus probable de parcourir que la boucle d'orientation inverse C^- , alors la production d'entropie de C^+ est

$$\Sigma_{C^+} \equiv \log \frac{\mathcal{P}[C^+]}{\mathcal{P}[C^-]} = \oint_{C^+} \mathbf{F} \cdot d\vec{\ell} = \int_{\Omega} \nabla \times \mathbf{F} \cdot d\vec{S} \quad (2.72)$$

où Ω est une surface orientée dont le bord est C^+ . Ainsi dès que \mathbf{F} possède une composante rotationnelle, l'entropie produite est strictement positive, et le système est donc hors équilibre.

On peut par ailleurs démontrer [104] que le taux de production d'entropie σ est donnée par

$$\sigma = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{J}_{ss}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} . \quad (2.73)$$

où

$$\mathbf{J}_{ss}(\mathbf{x}) \equiv \mathcal{J}([p_{ss}], \mathbf{x}) \quad (2.74)$$

est le courant de probabilité à l'état stationnaire. Or, le courant stationnaire étant de divergence nulle, il existe un champ de vecteurs \mathbf{W} sur \mathbb{R}^d tel que

$$\mathbf{J}_{ss}(\mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{W}(\mathbf{x}) . \quad (2.75)$$

On peut donc réécrire la production d'entropie¹⁰ :

$$\sigma = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{W}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.76)$$

Ainsi, *le rotationnel de \mathbf{F}* peut être vu comme *la source de la production d'entropie*, et le vecteur $\mathbf{W}(\mathbf{x})$ comme un poids sur les boucles infinitésimales aux voisinage de \mathbf{x} .

Notons que les formules (2.72) et (2.76) ont été exprimées à l'aide de l'opérateur rotationnel, qui n'existe qu'en dimension $d = 3$. En dimensions quelconque (finie), cet opérateur est simplement remplacé par la dérivée extérieure de la 1-forme associée à \mathbf{F} . De plus, la dernière égalité de l'équation (2.72) a été obtenue en utilisant le théorème de Stokes. L'application de ce théorème est conditionnée au fait que l'espace d'évolution de la particule soit simplement connexe. Lorsque ce n'est pas le cas, et que la particule évolue sur un tore par exemple, il existe des boucles qui font le tour de "trous". Il existe alors une source supplémentaire d'entropie (i.e. autre que $\nabla \times \mathbf{F}$), c'est la composante harmonique de la décomposition de Hodge

10. En utilisant la formule d'analyse vectoriel $\nabla \cdot A \times B = -A \cdot \nabla \times B + B \cdot \nabla \times A$.

de \mathbf{F} , qui quantifie justement la propension de \mathbf{F} à tourner autour des “trous” de la variété.

Enfin, on conclut que l’irréversibilité *vis à vis de la T-symétrie* est — entre autres — équivalente à $\mathbf{J}_{ss} = 0$, ce qui, dans un espace simplement connexe tel que \mathbb{R}^d , est également équivalent à $\nabla \times \mathbf{F} = 0$ (ou sa généralisation à l’aide de la dérivée extérieure en dimension supérieure à 3). La généralisation de ce résultat aux théories des champs — cadre adapté à l’étude des comportements collectifs — fait l’objet du chapitre 5.

2.3.2 PT-symétrie : bilan détaillé & courants projetés dans l'espace invariant

Dans cette section on montre que certains résultats de la section précédente 2.3.1 se généralisent aux symétries temporelles nécessitant un “renversement” de certains degrés de liberté, i.e. aux PT-symétries.

Puisqu’on a supposé (cf. section 2.2.2) que l’application \mathfrak{p} qui renverse certains degrés de liberté est une symétrie vectorielle, on peut décomposer l’espace des états du système en la somme directe $\mathbb{R}^d = \mathbb{V}^1 \oplus \mathbb{V}^2$, telle que les restrictions de \mathfrak{p} à ces sous-espaces soient $\mathfrak{p}|_{\mathbb{V}^1} = id_{\mathbb{V}^1}$ et $\mathfrak{p}|_{\mathbb{V}^2} = -id_{\mathbb{V}^2}$ respectivement. On appellera \mathbb{V}^1 le *facteur invariant* (sous renversement du temps) de l’espace des états.

Si $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, on note \mathbf{x}^1 et \mathbf{x}^2 ses composantes selon \mathbb{V}^1 et \mathbb{V}^2 , respectivement. Pour toute fonction f qui contient une variable de \mathbb{R}^d , de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \dots \times \mathbb{R}^d$, voir de $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{T}}$, on note f^{pr} sa projection (ou marginale) sur le facteur invariant :

$$f^{\text{pr}} \equiv \int f d\mathbf{x}^2, \quad f^{\text{pr}} \equiv \int f d\mathbf{x}_1^2 \dots d\mathbf{x}_n^2 \quad \text{ou} \quad f^{\text{pr}} \equiv \int f \mathcal{D}[\mathbf{x}^2(t)].$$

La fonction obtenue est alors seulement définie sur \mathbb{V}^1 , $\mathbb{V}^1 \times \dots \times \mathbb{V}^1$, ou $(\mathbb{V}^1)^{\mathbb{T}}$.

On peut alors montrer que la projection sur le facteur invariant du courant de probabilité stationnaire est nulle pour un système PT-symétrique :

$$\mathbf{J}_{ss}^{1,\text{pr}} = 0. \quad (2.77)$$

En effet la projection de l’équation de Fokker-Planck sur \mathbb{V}^1 s’écrit

$$\partial_t p^{\text{pr}} = -\nabla \cdot \mathcal{J}^{1,\text{pr}}[p], \quad \text{où} \quad \mathcal{J}^{1,\text{pr}}[p] \equiv \int_{\mathbb{V}^2} (p \mathbf{F}^1 - [\mathbf{D} \nabla p]^1) d\mathbf{x}^2 \quad (2.78)$$

En effet, puisque le système est à l’équilibre, $p_{ss}^- = p_{ss} \circ \mathfrak{p} = p_{ss}$ d’une part, et $\bar{\mathbf{D}} = \mathbf{D}$ et $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}$ d’autre part. Donc en particulier $\mathbf{F}^1 = \bar{\mathbf{F}}^1 = [2\mathbf{D} \nabla \log p_{ss} - \mathbf{F} \circ \mathfrak{p}]^1$, ce qui implique que

$$\int_{\mathbb{V}^2} p_{ss} \mathbf{F}^1 d\mathbf{x}^2 = \int ([2\mathbf{D} \nabla p_{ss}]^1 - p_{ss} \mathbf{F}^1 \circ \mathfrak{p}) d\mathbf{x}^2 = \int ([2\mathbf{D} \nabla p_{ss}]^1 - p_{ss} \mathbf{F}^1) d\mathbf{x}^2, \quad (2.79)$$

où la seconde égalité est obtenue par le changement de variable $\mathbf{x}^2 \mapsto -\mathbf{x}^2$ dans l'intégrale $\int p_{ss}(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2) \mathbf{F}(\mathbf{x}^1, -\mathbf{x}^2) d\mathbf{x}^2$, sachant que $p_{ss}(\mathbf{x}^1, -\mathbf{x}^2) = p_{ss}(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2)$. L'équation (2.79) permet ensuite de déduire directement que $\mathbf{J}_{ss}^{1,pr} \equiv \mathcal{J}^{1,pr}[p_{ss}] = 0$.

Par ailleurs le PT-bilan détaillé s'écrit au niveau de la probabilité à deux points (dans l'état stationnaire)

$$p(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) = p(\mathbf{p}(\mathbf{y}), T - \tau, \mathbf{p}(\mathbf{x}), T - t) . \quad (2.80)$$

Ou encore

$$p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, \tau) p_{ss}(\mathbf{y}) = p(\mathbf{p}(\mathbf{y}), T - \tau | \mathbf{p}(\mathbf{x}), T - t) p_{ss}(\mathbf{x}) . \quad (2.81)$$

L'intégration de l'équation (2.80) par rapport à \mathbf{x}^2 et \mathbf{y}^2 donne, après changement de variables ($\mathbf{x}^2, \mathbf{y}^2 \mapsto (-\mathbf{x}^2, -\mathbf{y}^2)$) :

$$p(\mathbf{x}^1, t, \mathbf{y}^1, \tau) = p(\mathbf{y}^1, T - \tau, \mathbf{x}^1, T - t) , \quad (2.82)$$

c'est à dire

$$p(\mathbf{x}^1, t | \mathbf{y}^1, \tau) p_{ss}^{pr}(\mathbf{y}^1) = p(\mathbf{y}^1, T - \tau | \mathbf{x}^1, T - t) p_{ss}^{pr}(\mathbf{x}^1) . \quad (2.83)$$

qui est la version usuelle du bilan détaillé pour un système t-symétrique, i.e. où on ne renverse que le temps (on dira aussi un "T-bilan détaillé"). Ainsi pour un système PT-symétrique, on a non seulement un PT-bilan détaillé global (i.e. sur l'espace des états \mathbb{R}^d tout entier) mais également un T-bilan détaillé sur le facteur invariant \mathbb{V}^1 de l'espace des états.

2.4 Irréversibilité et matière active

Le travail détaillé dans les sections précédentes m'a notamment servi à comprendre l'irréversibilité (au sens “du” bilan détaillé (**D3**)) des systèmes passifs et comment elle peut être reliée à l'irréversibilité au sens de la thermodynamique (**D1**) (et au sens des ensembles statistiques (**D2**)). Cette section est le prolongement de mes réflexions, appliquées à une particule active individuelle. Elle comprend une partie important de la publication [P3] de ma liste de publications. Le prolongement de ces réflexions au cas d'ensembles de particules actives en interaction sera présenté aux chapitres 4 et 5.

Considérons une particule active dans un bain thermique, obéissant à la dynamique (sur-amortie) suivante

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \mathbf{v}_t^a - \zeta \nabla V(\mathbf{r}_t) + \sqrt{2D} \boldsymbol{\eta}_t \quad (2.84)$$

où $\boldsymbol{\eta}_t$ est un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t-t')$, et où $\mathbf{v}^a \equiv \zeta \mathbf{f}^a$, avec ζ la mobilité de la particule et \mathbf{f}^a la force active, i.e. la force d'autopropulsion de la particule.

Chaleur dissipée. Pour étudier l'irréversibilité thermodynamique du système, on calcul la chaleur dissipée dans le bain lors du parcours d'une trajectoire $(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}$ sur un intervalle de temps $\mathbb{T} = [0; \mathcal{T}]$. Celle-ci est donnée par

$$\hat{Q} = - \int_0^{\mathcal{T}} (-\zeta^{-1} \dot{\mathbf{r}}_t + \sqrt{2\zeta^{-2} D} \boldsymbol{\eta}_t) \cdot \dot{\mathbf{r}}_t dt = \int_0^{\mathcal{T}} (\mathbf{f}_t^a - \nabla V(\mathbf{r}_t)) \cdot \dot{\mathbf{r}}_t dt . \quad (2.85)$$

Dans l'état stationnaire, la chaleur moyenne dissipée dans le bain par unité de temps est donc :

$$\frac{\langle \hat{Q} \rangle}{\mathcal{T}} = \langle \mathbf{f}^a \cdot \dot{\mathbf{r}} \rangle , \quad (2.86)$$

où $\langle \cdot \rangle$ désigne, comme toujours dans ce chapitre, la moyenne contre la mesure stationnaire p_{ss} . De manière générique, le travail moyen de la force active étant non nul (voir appendice G pour l'exemple d'une AOUP), un système actif est génériquement hors d'équilibre au sens thermodynamique (**D1**).

PT-symétrie de la dynamique. Intéressons nous maintenant à l'irréversibilité au sens du bilan détaillé (**D3**). La probabilité de chemin associée à la dyna-

mique (2.84) est

$$\begin{aligned}\mathcal{P}[(\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}] &= \mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}} | (\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}, \mathbf{r}_0] \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}, \mathbf{r}_0] \\ &= \mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}} | (\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}, \mathbf{r}_0] \mathcal{P}[\mathbf{r}_0 | (\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}] \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= \mathcal{P}[(\mathbf{r}_t)_{t \in \mathbb{T}} | (\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}, \mathbf{r}_0] p_{ss}(\mathbf{r}_0 | \mathbf{v}_0^a) \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}] \\ &= \mathcal{Z}^{-1} \exp \left[\frac{-1}{4D} \int_{\mathbb{T}} \left([\dot{\mathbf{r}}_t - \mathbf{v}_t^a + \zeta \nabla V(\mathbf{r}_t)]^2 - \zeta \Delta V(\mathbf{r}_t) \right) dt \right] p_{ss}(\mathbf{r}_0 | \mathbf{v}_0^a) \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}]\end{aligned}$$

où on a seulement utilisé l'indépendance de \mathbf{r}_0 par rapport aux \mathbf{v}_t^a pour $t > 0$. On considère la transformation linéaire $\mathbf{p}_\varepsilon(\mathbf{v}^a) = \varepsilon \mathbf{v}^a$, où ε peut valoir 0 ou 1. On suppose que la dynamique de l'autopropulsion \mathbf{v}^a est (P)T-symétrique pour l'involution \mathbf{p}_ε , que ε soit égale à 0 ou 1, i.e. on suppose que la mesure de chemin de l'autopropulsion présente les symétries $\mathcal{P}[(\varepsilon \mathbf{v}_{T-t}^a)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}]$, pour $\varepsilon = 0$ et 1. Notons que c'est le cas des modèles stochastiques de particule active les plus employés : RTP, ABP et AOUP¹¹. On a ainsi la probabilité du chemin renversé $(\mathbf{r}_{T-t}, \varepsilon \mathbf{v}_{T-t}^a)_{t \in \mathbb{T}}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}[(\mathbf{r}_{T-t}, \varepsilon \mathbf{v}_{T-t}^a)_{t \in \mathbb{T}}] &= \mathcal{Z}^{-1} \exp \left[\frac{-1}{4D} \int_{\mathbb{T}} \left([-\dot{\mathbf{r}}_t - \varepsilon \mathbf{v}_t^a + \zeta \nabla V(\mathbf{r}_t)]^2 + \zeta \Delta V(\mathbf{r}_t) \right) dt \right] \\ &\quad \times p_{ss}(\mathbf{r}_T | \mathbf{v}_T^a) \mathcal{P}[(\mathbf{v}_t^a)_{t \in \mathbb{T}}]\end{aligned}\tag{2.87}$$

Puis la production d'entropie informationnelle

$$\sigma_\varepsilon = \frac{\zeta}{2D} \left[(1 + \varepsilon) \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{f}_t^a \rangle + (1 - \varepsilon) \zeta \langle \mathbf{f}_t^a \cdot \nabla V(\mathbf{r}_t) \rangle \right]\tag{2.88}$$

Tout d'abord, on constate que la production d'entropie informationnelle σ_1 , correspondant à un renversement de la variable temporelle seulement, coïncide bien avec la production d'entropie thermodynamique puisque σ_1 est égale aux flux instantané de chaleur (2.86) divisé par k_B fois la température — en supposant vérifiée la relation d'Einstein $D = \zeta k_B T$.

Par ailleurs, il est difficile d'interpréter σ_{-1} , mais une première observation saute aux yeux : lorsque $\nabla V = 0$, i.e. en l'absence de force extérieur, σ_{-1} s'annule ! Ce résultat met en lumière une symétrie de la dynamique d'une particule active libre (une PT-symétrie au sens défini à la section 2.2). D'après les résultats de la partie 2.3.2, cette symétrie implique en particulier un T-bilan détaillé pour la dynamique projetée sur l'espace réel (cf. équation (2.83)) — i.e. après intégration de l'autopropulsion \mathbf{v}^a — ainsi que l'absence de tout courant de probabilité projeté dans ce même espace (cf. équation (2.77)). Physiquement, cela signifie que, pour une particule active libre¹², il est impossible de distinguer une trajectoire

11. Ceux-ci étant T-symétriques et isotropes.

12. Cette particule active peut, par exemple, évoluer dans un espace avec conditions aux bords périodiques, où dans un contenant très grand devant la taille typique de la particule, que l'on observerait loin des bords.

“forward” d’une trajectoire “backward” en observant seulement la position \mathbf{r}_t de la particule (voir figure 2.3). De plus, on constate que la positivité de σ_{-1} implique qu’à l’état stationnaire, “il est plus probable que la force active s’oppose à la force $-\nabla V$, plutôt qu’elle n’aille dans le même sens”. Intuitivement, on sent bien qu’il est d’autant plus probable qu’une particule active “remonte” le potentiel si son autopropulsion l’y aide. Ainsi, bien que ne correspondant pas à la production d’entropie thermodynamique, σ_{-1} fournit des informations importantes sur la dynamique active.

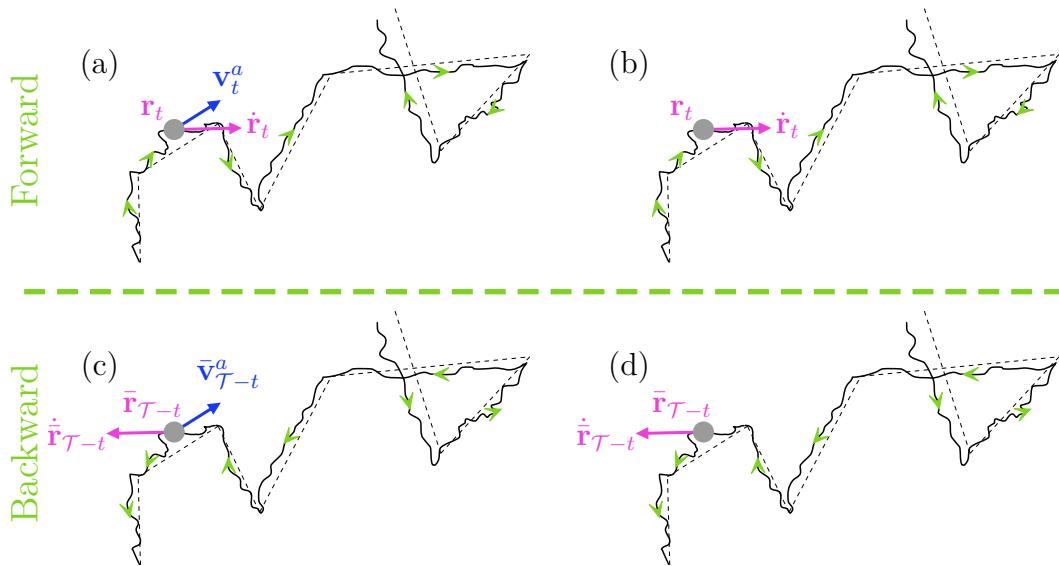


Figure 2.3 – Trajectoires d’une RTP soumise à un bruit thermique (translationnel). La particule est représentée par un disque, sa vitesse est représentée par un vecteur rose, et la direction de son autopropulsion par un vecteur bleu (lorsque celle-ci est mesurée). La trajectoire sans bruit thermique est tracée en pointillés, et la direction du temps est symbolisée par des flèches vertes. On peut enregistrer la position et l’orientation de la particule (a), ou seulement sa position (b). Les trajectoires renversées en temps (T-symétriques) de (a) et (b) sont représentées en (c) et (d) respectivement. Elles n’ont clairement pas la même probabilité d’être observées puisque la réalisation du bruit doit s’opposer à l’autopropulsion dans (c), mais pas nécessairement dans (d). (Figure adaptée de [80].)

Mesure stationnaire. Qu’en est-il de l’irréversibilité de la dynamique active (2.84) au sens (**D2**) des “ensembles statistiques”? *i.e.* la mesure stationnaire associée à l’équation (2.84) est-elle une mesure de type Gibbs–Boltzmann? On va supposer à partir de maintenant que le bruit translationnel de l’équation (2.84) est négligeable, *i.e.* $D = 0$, de telle sorte que \mathbf{v}^a est la seule source de stochasticité de la dynamique (2.84). De plus on va s’intéresser seulement à la marginale en espace $p_{ss}(\mathbf{r})$ associée (2.84). Cette question a été examinée en dimension quelconque, et dans les cas où le processus d’autopropulsion \mathbf{v}^a évolue via : des culbutes (ou “tumbles”) [4, 101, 119]; une diffusion angulaire [109, 128]; ou un processus d’Ornstein–Uhlenbeck [42, 118]. Dans chacun de ces cas, on peut définir un temps de persistance τ , une vitesse typique d’autopropulsion v_0 , une longueur de persistance $\ell_p = v_0\tau$, et un coefficient de diffusion à grande échelle $D_{\text{eff}} \propto \ell_p^2/\tau$. Dans la limite $\tau \rightarrow 0$, à D_{eff} fixé, la dynamique active devient équivalente à une dynamique passive réversible (au sens de chacune des trois définitions de l’introduction de ce chapitre), et p_{ss} devient une mesure de Gibbs–Boltzmann, où la température effective est donnée par $T_{\text{eff}} = D_{\text{eff}}/\zeta$.

Cependant lorsque le temps de persistance augmente, le système actif n’est plus réversible, sa mesure stationnaire n’est plus une mesure de Gibbs, et des propriétés impossibles à l’équilibre émergent. Pour s’en rendre compte, il suffit d’examiner les développements de p_{ss} en série de τ obtenus par exemple pour AOUP [13, 42, 72, 74] et RTP [112, 17] en une dimension :

$$p_{ss}(x) = \frac{1}{Z} e^{-V_{\text{eff}}/T_{\text{eff}}} \quad (2.89)$$

où le potentiel effectif est, pour une AOUP :

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(x) &= V(x) - \tau \left[T_{\text{eff}} V''(x) - \frac{1}{2} V'(x)^2 \right] - \tau^2 \left[\frac{T_{\text{eff}}}{2} V^{(4)}(x) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \int^x V'(y)^2 V^{(3)}(y) dy - T_{\text{eff}} V'(x) V^{(3)}(x) - \frac{T_{\text{eff}}}{4} V''(x) \right] + \mathcal{O}(\tau^3) \end{aligned} \quad (2.90)$$

tandis que pour une RTP :

$$V_{\text{eff}}(x) = V(x) - \frac{\zeta \tau}{T_{\text{eff}}} \left[V'(x)^2 + \frac{1}{T_{\text{eff}}} \int^x V'(y)^3 dy \right] + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (2.91)$$

Ainsi, au delà de la limite d’équilibre obtenue pour $\tau \rightarrow 0$, on constate deux effets intéressants à τ fini. D’une part, un potentiel V purement répulsif peut conduire à un potentiel effectif V_{eff} comportant des parties attractives, et ce grâce au terme $-\tau T_{\text{eff}} V''$ chez une AOUP (2.90) et au terme $-\zeta \tau V'^2/T_{\text{eff}}$ chez une RTP (2.91). Bien que dérivé perturbativement, ce résultat fournit une explication heuristique à un trait caractéristique des particules actives : leur accumulation au voisinage

de murs [38, 39, 40, 133]. D'autre part, on observe *l'apparition de termes non locaux dans V_{eff}* , ce qui, une fois encore, donne une explication heuristique aux expériences remarquables menées sur des bactéries qui ont montré qu'un ensemble d'obstacles asymétriques se comporte comme une pompe quand placé au milieu d'une cavité microfluidique [44] (cf. Figure 2.4). Ce phénomène est interdit à l'équilibre, puisqu'une mesure de Gibbs–Boltzmann n'est perturbé que localement (à une constante de renormalisation près) lorsque le potentiel est perturbé localement.

Par ailleurs, il existe des différences notables entre AOUP et RTP, malgré leur limite d'équilibre commune pour $\tau \rightarrow 0$. Chez AOUP, les effets non locaux apparaissent à l'ordre τ^2 , tandis qu'ils surviennent à l'ordre τ pour des RTP. De plus, une AOUP dans un piège harmonique $V(\mathbf{r}) = k|\mathbf{r}|^2/2$ conduit à une distribution stationnaire gaussienne [42, 118], tandis que les ABP et les RTP s'accumulent sur une “ligne d'horizon” $|\mathbf{r}| = v_0/(\zeta k)$ dans la limite de grand τ [8, 26, 31, 109, 120, 121].

Une autre caractéristique notable des systèmes actifs est *l'émergence de courants permanents* de masse lorsque le mouvement isotropique des particules est “rectifié” par la présence d'un potentiel asymétrique [2, 45, 57, 75, 92, 97, 115, 134] (cf. Figure 2.4). La présence de tels courants indique qu'une force moyenne non nulle est exercée par un obstacle asymétrique sur des particules actives. D'après la troisième loi de Newton, ce courant implique l'application d'une force opposée, des particules actives sur l'obstacle. Ceci explique, par exemple, pourquoi une roue asymétrique plongée dans un bain de bactéries fait montrer d'un mouvement moyen de rotation permanent à l'état stationnaire [32, 69, 108].

Il existe encore d'autres propriétés des systèmes actifs qui les distinguent de systèmes passifs à l'équilibre. Certaines d'entre elles, telles que la loi d'Arrhénius modifiée ou encore la brisure de la symétrie d'Onsager-Machlup, sont discutées plus en détail dans la publication [P3].

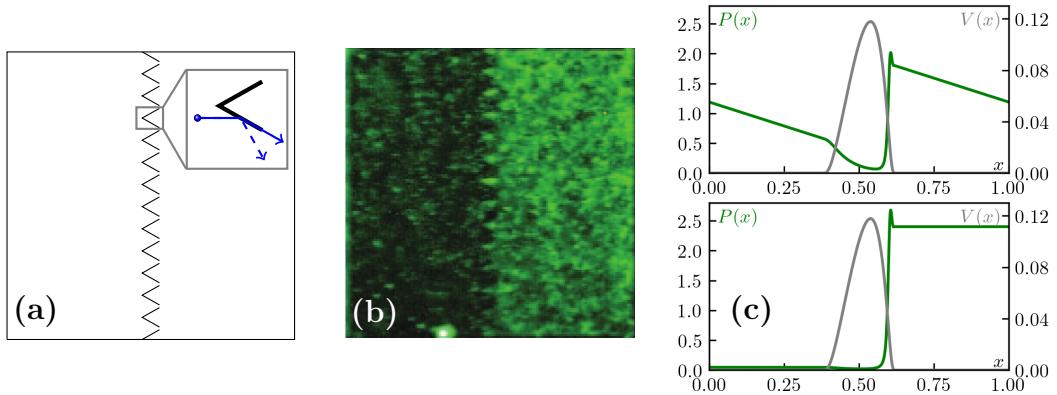


Figure 2.4 – (a) & (b) Chambre microfluidique dans laquelle des bactéries RTP ou des particules colloïdales (passives) peuvent être insérées. Un ensemble d’obstacles asymétriques sépare la cavité en deux parties **(a)**. Tandis que des particules colloïdales mèneraient à une densité uniforme en dehors des obstacles, les bactéries s’accumulent d’un côté du dispositif **(b)**, comme l’indique leurs signaux fluorescents. Extrait de Ref [44]. **L’encart du schéma (a)** : la distribution stationnaire (qui n’est pas du type Gibbs-Boltzmann) peut être vue comme résultant d’un effet de “ratchet” [129]. Celui-ci est induit par l’interaction entre particules et obstacles [120] : remplacer le couple d’alignement ressenti par la bactérie à son contact avec un obstacle (ligne bleue pleine) par une réflexion spéculaire (ligne pointillée bleue) de leur orientation mène à une dynamique T-symétrique et à une densité uniforme. **(c)** Densités stationnaires (courbes vertes) engendrées par un obstacle asymétrique (courbe grise) placé au centre du système. Des conditions aux bords fermées (en bas) mènent à des densités différentes dans les deux compartiments tandis que des conditions aux bords périodiques (en haut) conduisent à un profil linéaire loin de l’obstacle et à un courant permanent non nul.

Chapitre 3

Coarse-graining des Systèmes Actifs

Comme nous l'avons brièvement discuté en introduction (confère section 1.1.4), le cadre *a priori* le plus adapté à la description des comportements collectifs de systèmes actifs est celui de la théorie des champs. Pour pouvoir décrire au mieux de tels comportements collectifs, il faut ainsi être en mesure de déduire, à partir de la dynamique “microscopique” d'un ensemble de N particules actives en interaction, la dynamique des champs hydrodynamiques du système — ceux-ci étant réduits au seul champ de densité de particules actives ρ dans tous les modèles étudiés au cours de cette thèse.

Notons E l'espace “physique” (*i.e.* celui de la variable de position) dans lequel évoluent les particules actives (dans cette section $E = \mathbb{R}^d$ ou $E = \mathbb{R}^d/\mathbb{Z}^d$), A l'espace de la variable décrivant l'autopropulsion d'une particule active (pour une AOUP, $A = \mathbb{R}^d$ tandis que pour une ABP ou une RTP $A = \mathbb{S}^{d-1}$) et \mathbb{F} (pour “field”) l'espace¹ auquel appartient le champ de densité ρ . Formellement, l'objectif est de “coarse-grainer” la dynamique microscopique, initialement définie sur $(E \times A)^N$, pour obtenir une dynamique sur \mathbb{F} , ce que l'on peut schématiquement écrire

$$(E \times A)^N \xrightarrow{\text{Cg}} \mathbb{F} , \quad (3.1)$$

1. On peut se figurer \mathbb{F} comme étant l'espace des fonctions continues de E dans \mathbb{R} . Mais dans la suite on manipulera la densité empirique $\hat{\rho}$ comme si elle appartenait à \mathbb{F} . Dans ce cas, \mathbb{F} est plutôt un espace de distributions sur E . Une telle distribution pourra être associée à une fonction continue seulement dans le cas où elle est “régulière”. Ce qui serait le cas dans la limite d'un nombre de particules infini (si la mesure empirique est normalisée). Dans les chapitres suivants, on oubliera la distribution $\hat{\rho}$ et on manipulera ρ comme si c'était bien une fonction continue de E dans \mathbb{R} .

où “Cg” signifie “coarse-graining”. Au cours de cette thèse, on a systématiquement décomposé l’opération de coarse-graining (3.1) en deux étapes

$$(E \times A)^N \xrightarrow{\text{Ld}} E^N \xrightarrow{\text{Dg}} \mathbb{F}, \quad (3.2)$$

où “Ld” et “Dg” signifient respectivement “limite diffusive” et “méthode de Dean généralisée”. La première étape (Ld) consiste à clore la hiérarchie d’équations que l’on obtient en intégrant les degrés de liberté actifs (*i.e.* l’autopropulsion des particules), en prenant une limite de grandes échelles de temps et d’espace. Quant à la seconde étape (Dg), elle consiste à calculer la dynamique d’un ensemble de masses de Dirac portées par les positions des particules, ces dernières satisfaisant les équations dynamiques obtenues après l’étape de la limite diffusive.

Dans ce chapitre, on met en œuvre deux méthodes différentes de coarse-graining de la dynamique d’un ensemble de particules actives browniennes (ABPs) interagissant (entre elles ou avec un champ extérieur) par quorum-sensing pour obtenir l’hydrodynamique fluctuante du champ de densité ρ des particules actives. Au chapitre suivant, on appliquera ces deux méthodes pour déduire l’hydrodynamique fluctuante du champ de densité associé à des systèmes actifs plus généraux, où des particules actives de type ABPs, RTPs ou AOUPs interagissent par quorum-sensing ou par taxie. Les deux méthodes de coarse-graining présentées dans ce chapitre coïncident au niveau de la seconde étape (Dg) du coarse-graining (3.2) que l’on présente donc une seule et unique fois à la section 3.5. C’est au niveau de la première étape (Ld) que ces deux méthodes diffèrent, comme on va le voir aux sections 3.2, 3.3 et 3.4. La première méthode, exposée dans la section 3.2, a été introduite avant ma thèse pour les RTPs, et repose sur une hypothèse de découplage entre les dynamiques individuelles et la dynamique de ρ . Je l’ai, par la suite, généralisée au cas des AOUPs dans la publication [P3]. La seconde méthode, qui a fait l’objet de la publication [P4], dérive explicitement ce découplage ; elle est détaillée à la section 3.4, la section 3.3 ayant essentiellement pour but d’éclaircir les calculs menés à la section 3.4.

Pour réaliser le coarse-graining de la dynamique d’ABPs, on utilise un développement en tenseurs harmoniques de la densité de probabilité : à une particule $\psi(\mathbf{u}, \mathbf{r})$ pour la première méthode ; à N particules $\psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ pour la seconde méthode. Les formules et les notations utilisées dans tout ce chapitre pour mettre en œuvre un tel développement sont exposées dans la section 3.1.

Ce chapitre étant essentiellement méthodologique et calculatoire, le lecteur principalement intéressé par l’application de ces résultats à l’étude macroscopique de la matière active pourra sauter ce chapitre en première lecture. Dans cette perspective, on résume ici les résultats établis dans ce chapitre :

Partant de la dynamique microscopique d -dimensionnelle d'un ensemble d'ABPs donnée par

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])\mathbf{u}_i + \sqrt{2D_t}\boldsymbol{\eta}_i , \quad (3.3)$$

où la dépendance de l'amplitude d'autopropulsion v_0 en la densité empirique $\hat{\rho}(\mathbf{r}) \equiv \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ modélise une interaction de type quorum-sensing entre les particules, et où les $\boldsymbol{\eta}_i$ sont des bruits blancs gaussiens indépendants centrés de covariance unité, on montre que la limite diffusive (Ld) de la dynamique est

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])}{d(d-1)D_r} \nabla_{\mathbf{r}_i} [v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])\phi] + D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi \right] , \quad (3.4)$$

où D_r est la diffusion rotationnelle de chacune des particules, et ϕ est la densité de probabilité jointe de la position des N particules. On montre finalement, en appliquant la méthode de Dean généralisée (Dg), que l'hydrodynamique fluctuante du champ ρ est

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ D(\mathbf{r}, [\rho])\rho(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\rho])|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} - \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\rho])\rho} \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \right\} , \quad (3.5)$$

avec la diffusivité collective

$$D(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}]) \equiv D_t + \frac{v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])^2}{d(d-1)D_r} , \quad (3.6)$$

et le potentiel chimique

$$\mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\rho]) \equiv \frac{1}{2} \ln D(\mathbf{r}, [\rho]) + \ln \rho(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \frac{\delta D(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} , \quad (3.7)$$

et où $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t)$ est un champ gaussien centré de covariance $\langle \Lambda^\alpha(\mathbf{r}, t)\Lambda^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta^{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t')$.

3.1 Tenseurs harmoniques : rappels et notations

3.1.1 Décomposition de la densité à une particule, tenseurs harmoniques et produit tensoriel symétrique

A la section 3.2 on manipulera une densité de probabilité $\psi(\mathbf{u}, \mathbf{r})$ définie sur $\mathbb{S}^{d-1} \times E$. En tant que fonction (que l'on supposera de carré intégrable) sur la sphère \mathbb{S}^{d-1} , on peut décomposer ψ en tenseurs harmoniques (ou tenseurs “sphériques” ou “irréductibles”) [37, 102, 114] :

$$\psi(\mathbf{u}, \mathbf{r}) = \sum_{p=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\Omega} \frac{(d-2+2p)!!}{p!(d-2)!!} \right] \mathbf{a}^p(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}^{\otimes p} \quad (3.8)$$

où “.” représente la contraction (totale) entre tenseurs contravariants induite par le produit scalaire canonique² de \mathbb{R}^d , où la double factorielle est définie pour tout entier naturel n par

$$n!! \equiv \prod_{k=0}^{\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor} (n-2k) \quad (3.9)$$

et où le moment harmonique d'ordre p : \mathbf{a}^p , est donné par

$$\mathbf{a}^p(\mathbf{r}) = \langle \psi \widehat{\mathbf{u}^{\otimes p}} \rangle = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \psi \widehat{\mathbf{u}^{\otimes p}} d\mathbf{u} , \quad (3.10)$$

les crochets $\langle \cdot \rangle$ signifiant l'intégrale sur \mathbb{S}^{d-1} contre la mesure uniforme³, notée $d\mathbf{u}$, et les tenseurs $\mathbf{u}^{\otimes p}$ étant définis ci-dessous. Les moments \mathbf{a}^p sont dit “harmoniques” puisqu'ils sont symétriques de traces nulles (ce qui est la définition d'un tenseur harmonique), comme c'est d'ailleurs le cas des tenseurs $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes p}}$ qui correspondent aux tenseurs $\mathbf{u}^{\otimes p}$ dont on a “soustrait les traces” (en préservant leur symétrie). L'expression des $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes p}}$ en fonction des $\mathbf{u}^{\otimes n}$ est :

$$\widehat{\mathbf{u}^{\otimes p}} = \sum_{k=0}^{\lfloor p/2 \rfloor} \beta_d(k, p) \mathbf{I}^{\odot k} \odot \mathbf{u}^{\otimes p-2k} \quad (3.11)$$

où \mathbf{I} est le tenseur (contravariant) identité d'ordre 2 de \mathbb{R}^d (*i.e.* la matrice identité de taille $d \times d$ dans toute base orthonormale), $\beta_d(k, p)$ est donné par une formule récursive, dont l'expression générale ne nous sera pas utile, et l'opération \odot est

2. Si $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d)$ est une base quelconque de \mathbb{R}^d et $\mathbf{S} = S^{i_1 \dots i_p} \mathbf{e}_{i_1} \otimes \dots \otimes \mathbf{e}_{i_p}$ et $\mathbf{T} = T^{i_1 \dots i_p} \mathbf{e}_{i_1} \otimes \dots \otimes \mathbf{e}_{i_p}$ sont des tenseurs contravariants d'ordre p , alors $\mathbf{S} \cdot \mathbf{T} \equiv S^{i_1 \dots i_p} g_{i_1 j_1} \dots g_{i_p j_p} T^{j_1 \dots j_p}$ où g_{ij} est le produit scalaire (canonique) entre \mathbf{e}_i et \mathbf{e}_j .

3. C'est la mesure uniforme dont l'intégrale sur \mathbb{S}^{d-1} donne la “surface” totale de la sphère.

définie ci-dessous. On aura simplement besoin des expressions explicites pour $p = 1, 2$ et 3 qui sont données par :

$$\widehat{\mathbf{u}^{\otimes 1}} = \mathbf{u}, \quad \widehat{\mathbf{u}^{\otimes 2}} = \mathbf{u}^{\otimes 2} - \frac{1}{d}\mathbf{I}, \quad \text{et} \quad \widehat{\mathbf{u}^{\otimes 3}} = \mathbf{u}^{\otimes 3} - \frac{3}{d+2}\mathbf{u} \odot \mathbf{I}. \quad (3.12)$$

Notons que la décomposition inverse, exprimant les $\mathbf{u}^{\otimes p}$ en fonction des $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes n}}$, est donnée par :

$$\mathbf{u}^{\otimes p} = \sum_{k=0}^{\lfloor p/2 \rfloor} \alpha_d(k, p) \mathbf{I}^{\odot k} \odot \widehat{\mathbf{u}^{\otimes p-2k}} \quad (3.13)$$

où on donne l'expression générale des $\alpha_d(k, p)$ qui est relativement simple :

$$\alpha_d(k, p) = \frac{p!}{2^k(p-2k)!k!} \frac{[d+2(p-2k-1)]!!}{[d+2(p-k-1)]!!}. \quad (3.14)$$

Dans les équations (3.11) à (3.13) — comme dans l'ensemble de ce chapitre — le symbole \odot représente le produit tensoriel symétrique. On rappelle que, comme le produit tensoriel \otimes , le produit \odot est associatif et bilinéaire, mais qu'il est également commutatif (contrairement à \otimes). Si \mathbf{S} et \mathbf{T} sont des tenseurs de \mathbb{R}^d respectivement d'ordre s et t alors

$$\mathbf{S} \odot \mathbf{T} \equiv \pi_{\mathcal{G}_{s+t}}(\mathbf{S} \otimes \mathbf{T}) \quad (3.15)$$

où $\pi_{\mathcal{G}_{s+t}}$ est la projection sur le sous-espace des tenseurs symétriques d'ordre $t+s$ donnée par

$$\pi_{\mathcal{G}_{t+s}}(\mathbf{X}) = \frac{1}{(t+s)!} \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_{t+s}} X^{i_{\sigma(1)} \dots i_{\sigma(t+s)}} \mathbf{e}_{i_1} \otimes \dots \otimes \mathbf{e}_{i_{t+s}} \quad (3.16)$$

où \mathbf{X} est un tenseur d'ordre $t+s$, où $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d)$ est une base quelconque de \mathbb{R}^d , où \mathcal{G}_{s+t} est le groupe des permutations de $s+t$ éléments, et où on a supposé une sommation implicite sur tous les indices répétés (convention d'Einstein). Ainsi, on a par exemple que, dans une base quelconque, les coordonnées de $\mathbf{u} \odot \mathbf{I}$ sont

$$[\mathbf{u} \odot \mathbf{I}]^{i_1 i_2 i_3} = \frac{1}{3!} \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_3} u^{i_{\sigma(1)}} I^{i_{\sigma(2)} i_{\sigma(3)}} \quad (3.17)$$

$$= \frac{2}{3 \times 2} (u^{i_1} I^{i_2 i_3} + u^{i_2} I^{i_1 i_3} + u^{i_3} I^{i_1 i_2}) \quad (3.18)$$

où on a utilisé que \mathbf{I} est symétrique : $I^{ij} = I^{ji}$. Ceci implique en particulier que les coordonnées de $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes 3}}$ sont

$$[\widehat{\mathbf{u}^{\otimes 3}}]^{ijk} = u^i u^j u^k - \frac{3}{d+2} [\mathbf{u} \odot \mathbf{I}]^{ijk} = u^i u^j u^k - \frac{1}{d+2} (u^i I^{jk} + u^j I^{ik} + u^k I^{ij}) \quad (3.19)$$

où $I^{ij} = \delta^{ij}$ dans une base orthonormale.

Pour finir, on rappelle que les composantes de chaque tenseur $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes p}}$ (dans un base quelconque de \mathbb{R}^d) sont des fonctions propres de l'opérateur laplacien $\Delta_{\mathbf{u}}$ sur la sphère \mathbb{S}^{d-1} , de valeurs propres égales à $-p(p+d-2)$. Ainsi

$$\Delta_{\mathbf{u}} \widehat{\mathbf{u}^{\otimes p}} = -p(p+d-2) \widehat{\mathbf{u}^{\otimes p}} . \quad (3.20)$$

où il est sous-entendu que le laplacien est appliqué composante par composante.

3.1.2 Décomposition de la densité à N particules, moments à une particule et moments conditionnés

Aux sections 3.3 et 3.4, on manipulera une densité de probabilité à N particules $\psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ définie sur $(\mathbb{S}^{d-1})^N \times E^N$. De manière similaire au cas d'une fonction définie sur \mathbb{S}^{d-1} , on peut décomposer $\psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ en tenseurs harmoniques :

$$\psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{p_1, \dots, p_N=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\Omega^N} \prod_{i=1}^N \frac{(d-2+2p_i)!!}{p_i!(d-2)!!} \right] \mathbf{a}^{p_1 \dots p_N} \cdot \mathbf{u}_1^{\otimes p_1} \otimes \dots \otimes \mathbf{u}_N^{\otimes p_N} \quad (3.21)$$

où le moment harmonique à N particules, d'ordre (p_1, \dots, p_N) est

$$\mathbf{a}^{p_1 \dots p_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \left\langle \psi \bigotimes_{k=1}^N \widehat{\mathbf{u}_k^{p_k}} \right\rangle \equiv \int_{(\mathbb{S}^{d-1})^N} \psi \widehat{\mathbf{u}_1^{\otimes p_1}} \otimes \dots \otimes \widehat{\mathbf{u}_N^{\otimes p_N}} d\mathbf{u}_1 \dots d\mathbf{u}_N \quad (3.22)$$

où les crochets $\langle \cdot \rangle$ désignent cette fois l'intégrale sur $(\mathbb{S}^{d-1})^N$ par rapport à $d\mathbf{u}_1 \dots d\mathbf{u}_N$. On note également

$$\mathbf{a}_i^{p_i} \equiv \mathbf{a}^{0 \dots 0 p_i 0 \dots 0}, \quad \mathbf{a}_{i,j}^{p_i, p_j} \equiv \mathbf{a}^{0 \dots 0 p_i 0 \dots 0 p_j 0 \dots 0} \quad (3.23)$$

où p_i et p_j sont respectivement en ième et jème positions. De manière générale, pour tout sous-ensemble ordonné K de $\llbracket 1; N \rrbracket$, on note

$$\mathbf{a}_K^{p_K} \equiv \mathbf{a}^{p_1, \dots, p_N} \quad (3.24)$$

où $p_i \neq 0$ si et seulement si $i \in K$, et $p_K \equiv (p_k)_{k \in K}$.

On définit également les moments harmoniques conditionnés

$$\tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \int \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \psi(\{\mathbf{u}_k, \mathbf{r}_k\}_{k \in K} \mid \{\mathbf{r}_k\}_{k \notin K}) \prod_{k \in K} d\mathbf{u}_k , \quad (3.25)$$

de telle sorte que

$$\mathbf{a}_K^{p_K}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_k\}_{k \notin K}) \quad (3.26)$$

où

$$\phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_k\}_{k \notin K}) \equiv \int \psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \left[\prod_{i=1}^N d\mathbf{u}_i \right] \left[\prod_{j \in K} d\mathbf{r}_j \right] \quad (3.27)$$

est la marginale spatiale en les $N - |K|$ particules n'appartenant pas à K , et $|K|$ étant le cardinal de K . Notons qu'on écrira souvent $\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ au lieu de $\phi_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ pour la marginale spatiale à N particules.

Enfin, on définit les moments harmoniques à une particule

$$\check{\mathbf{a}}_k^{p_k}(\mathbf{r}_k) \equiv \int \psi_1(\mathbf{u}_k, \mathbf{r}_k) \mathbf{u}_k^{\otimes p_k} d\mathbf{u}_k \quad (3.28)$$

où $k \in \llbracket 1; N \rrbracket$, et où $\psi_1(\mathbf{u}_k, \mathbf{r}_k)$ est la marginale (en orientation et position) de la k ème particule, définie par

$$\psi_1(\mathbf{u}_k, \mathbf{r}_k) \equiv \int \psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \prod_{i \neq k} d\mathbf{u}_i d\mathbf{r}_i . \quad (3.29)$$

3.2 Limite diffusive d'une ABP dont les paramètres dépendent de l'espace

On considère dans cette section une unique particule active brownienne (ABP) dont la dynamique s'écrit :

$$\dot{\mathbf{r}} = v_0 \mathbf{u} + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\eta} \quad (3.30)$$

où \mathbf{u} suit un processus de diffusion sur \mathbb{S}^{d-1} — dont la constante de diffusion rotationnelle est notée D_r —, et $\boldsymbol{\eta}$ un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. On suppose que l'amplitude $v_0(\mathbf{r})$ de l'autopropulsion est une fonction de la position $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$ de la particule active. L'équation de Fokker-Planck associée à ce processus s'écrit

$$\partial_t \psi(\mathbf{u}, \mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [v_0(\mathbf{r}) \mathbf{u} \psi - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \psi] + D_r \Delta_{\mathbf{u}} \psi \quad (3.31)$$

Partant du processus aléatoire sur les variables position–orientation (\mathbf{r}, \mathbf{u}) , on aimeraient se ramener à un processus aléatoire sur la seule variable \mathbf{r} de position. Pour cela on méthode classique consiste à intégrer l'équation de Fokker-Planck (3.31) par rapport à \mathbf{u} . Mais (on va le voir dans un instant) l'équation obtenue sur la marginale en espace ϕ :

$$\phi(\mathbf{r}) \equiv \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \psi(\mathbf{u}, \mathbf{r}) d\mathbf{u} \quad (3.32)$$

n'est pas fermée. Elle implique le premier moment en \mathbf{u} de ψ : $\mathbf{a}^1(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \mathbf{u} \psi \rangle$. Pour obtenir la dynamique de ce premier moment “angulaire”, il faut multiplier l'équation (3.31) par \mathbf{u} avant d'intégrer par rapport à \mathbf{u} . Mais cette équation implique à son tour un moment angulaire d'ordre plus élevé (le second). L'itération de ce processus — multiplication tensorielle⁴ de (3.31) par $\mathbf{u}^{\otimes p}$ puis intégration par rapport à \mathbf{u} — mène ainsi à une hiérarchie d'équations couplées sur les moments angulaires. Pour clore cette hiérarchie, on va rescaler le temps et l'espace par la taille L du système, avant de prendre la limite de grande échelle spatio-temporelle $L \rightarrow \infty$. Notons que parler de la “taille” L du système implique l'existence de bords, auxquels il faut imposer des conditions, que l'on choisies périodiques pour simplifier l'étude. La variable spatiale \mathbf{r} du système n'évolue donc plus sur \mathbb{R}^d mais sur $\mathbb{R}^d/(L\mathbb{Z})^d$. A des échelles de temps et d'espace très grandes respectivement devant le temps et la longueur de persistance de la particule, on s'attend à ce que la marche aléatoire active mène à un comportement diffusif. On applique donc un rescaling de type diffusif (ou “rescaling parabolique”) :

$$(\mathbf{r}, t) \rightarrow (\mathbf{r}/L, t/L^2) . \quad (3.33)$$

4. On multiplie à droite pour suivre la convention de contraction tensorielle.

L'espace “réel” (*i.e.* celui de la variable \mathbf{r} de position) de la dynamique rescalée est donc $\mathbb{R}^d/\mathbb{Z}^d$. A toute fonction $f(\mathbf{r})$ définie sur $\mathbb{R}^d/(L\mathbb{Z})^d$ est associée une fonction, définie sur $\mathbb{R}^d/\mathbb{Z}^d$, donnée par $\tilde{f}(\mathbf{r}) \equiv f(L\mathbf{r})$, que l'on renote immédiatement f pour ne pas alourdir les notations. Procédant de manière similaire pour toutes les fonctions de la variable temporelle, l'équation (3.31) dans les variables rescalées s'écrit simplement :

$$\partial_t \psi(\mathbf{u}, \mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [Lv_0(\mathbf{r})\mathbf{u}\psi - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \psi] + L^2 D_r \Delta_{\mathbf{u}} \psi . \quad (3.34)$$

On applique alors la procédure annoncée ci-dessus. La première équation de la hiérarchie est celle portant sur ϕ :

$$\partial_t \phi(r, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [Lv_0(\mathbf{r})\mathbf{a}^1(\mathbf{r}, t) - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \phi] \quad (3.35)$$

La seconde équation, qui porte sur la dynamique de $\mathbf{a}^1(\mathbf{r}, t)$, s'écrit quant à elle :

$$\partial_t \mathbf{a}^1 = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [Lv_0(\mathbf{r}) \langle \mathbf{u}^{\otimes 2} \psi \rangle - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \phi] + L^2 D_r \langle \mathbf{u} \Delta_{\mathbf{u}} \psi \rangle \quad (3.36)$$

Or on a d'une part $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes 2}} = \mathbf{u}^{\otimes 2} - \mathbf{I}/d$ et d'autre part :

$$\langle \mathbf{u} \Delta_{\mathbf{u}} \psi \rangle = \langle \psi \Delta_{\mathbf{u}} \mathbf{u} \rangle = -(d-1) \langle \psi \mathbf{u} \rangle = -(d-1)\mathbf{a}^1 \quad (3.37)$$

où la première égalité est due au fait que l'opérateur $\Delta_{\mathbf{u}}$ soit autoadjoint, la seconde au fait que les fonctions composantes de \mathbf{u} soient des vecteurs propres de $\Delta_{\mathbf{u}}$ pour la valeur propre $-(d-1)$, et la dernière au fait que $\widehat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$. Ainsi, l'équation (3.36) se réécrit

$$\partial_t \mathbf{a}^1 = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [Lv_0(\mathbf{r}) \left(\mathbf{a}^2 + \frac{\mathbf{I}}{d} \phi \right) - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \phi] - L^2(d-1)D_r \mathbf{a}^1 \quad (3.38)$$

On constate que le dernier terme de l'équation (3.38) fait tendre \mathbf{a}^1 vers sa solution “stationnaire” (en fait plutôt vers la solution de (3.39)) en un temps caractéristique $1/[L^2(d-1)D_r]$ qui temps vers zéro quand la taille du système devient grande. Ainsi, sur l'échelle de temps rescalé, macroscopique, on peut faire une approximation “de variable rapide” :

$$\mathbf{a}^1 = -\frac{1}{(d-1)D_r} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\frac{1}{L} v_0(\mathbf{r}) \left(\mathbf{a}^2 + \frac{\mathbf{I}}{d} \phi \right) - \frac{1}{L^2} D_t \nabla_{\mathbf{r}} \phi \right] . \quad (3.39)$$

Cette approximation revient à se placer sur des échelles de temps suffisamment grandes, sur lesquelles \mathbf{a}^1 suit adiabatiquement le champ conservé ϕ — \mathbf{a}^2 étant également une variable rapide, dont l'influence sur \mathbf{a}^1 est négligeable dans la limite de grande échelle, comme nous allons le voir.

En multipliant l'équation (3.34) par $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes 2}}$ puis en intégrant par rapport à \mathbf{u} , on obtient la dynamique du second moment harmonique :

$$\partial_t \mathbf{a}^2 = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [L v_0 \langle \mathbf{u} \otimes \widehat{\mathbf{u}^{\otimes 2}} \psi \rangle - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{a}^2] - L^2 D_r \langle \widehat{\mathbf{u}^{\otimes 2}} \psi \rangle \quad (3.40)$$

Or l'équation (3.11) (ou l'équation (3.13)) donne $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes 2}} = \mathbf{u}^{\otimes 2} - \mathbf{I}/d$ et $\widehat{\mathbf{u}^{\otimes 3}} = \mathbf{u}^{\otimes 3} - 3\mathbf{u} \odot \mathbf{I}/(d+2)$. Ainsi

$$\partial_t \mathbf{a}^2 = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[L v_0 \left(\mathbf{a}^3 + \frac{3}{d+2} \mathbf{a}^1 \odot \mathbf{I} - \frac{1}{d} \mathbf{a}^1 \otimes \mathbf{I} \right) - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{a}^2 \right] - L^2 2d D_r \mathbf{a}^2 \quad (3.41)$$

où on a utilisé la bilinéarité de \otimes et \odot . En réalisant un approximation de variable rapide :

$$\mathbf{a}^2 = -\frac{1}{2dD_r} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\frac{1}{L} v_0 \left(\mathbf{a}^3 + \frac{3}{d+2} \mathbf{a}^1 \odot \mathbf{I} - \frac{1}{d} \mathbf{a}^1 \otimes \mathbf{I} \right) - \frac{1}{L^2} D_t \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{a}^2 \right] \quad (3.42)$$

Afin de pouvoir clore l'équation (3.35), on suppose que, dans les unités rescalées, la fonction v_0 et tous les moments \mathbf{a}^p où $p \in \mathbb{N}$ ($\mathbf{a}^0 = \phi$) ainsi que toutes leurs dérivées spatiales restent bornés quand $L \rightarrow \infty$.

Cette hypothèse et l'équation (3.42) permettent de conclure que, dans la limite $L \rightarrow \infty$, on a

$$\mathbf{a}^2 = \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right). \quad (3.43)$$

Puis, à partir de l'équation (3.39), on conclut :

$$\mathbf{a}^1 = -\frac{1}{L d(d-1) D_r} \nabla_{\mathbf{r}} [v_0 \phi] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right). \quad (3.44)$$

Réinjectant cette dernière égalité dans l'équation (3.35) on obtient l'expression asymptotique quand L devient grand :

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}, t) = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\frac{v_0}{d(d-1) D_r} \nabla_{\mathbf{r}} [v_0 \phi] + D_t \nabla_{\mathbf{r}} \phi \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right). \quad (3.45)$$

Ainsi, à l'ordre dominant dans la limite des grands systèmes, on obtient finalement une équation fermée sur la marginale spatiale :

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}, t) = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\frac{v_0}{d(d-1) D_r} \nabla_{\mathbf{r}} [v_0 \phi] + D_t \nabla_{\mathbf{r}} \phi \right]. \quad (3.46)$$

On donne maintenant quelques précisions sur le sens physique et mathématique du “développement asymptotique dans la limite $L \rightarrow \infty$ ” qui mène de l'équation (3.31) à l'équation (3.46).

D'une part, sur le plan mathématique, pour faire un développement asymptotique où prendre une limite $L \rightarrow \infty$, il faut considérer non pas un unique système, mais une succession de systèmes de taille L . On suppose déjà que D_r et D_t sont des constantes, notamment indépendantes de L . Mais il faut également préciser le comportement de la fonction v_0 en fonction de L . Pour cela on note $v_0^{(L)}$ la fonction définie initialement sur $\mathbb{R}^d/(L\mathbb{Z})^d$, et $\tilde{v}_0^{(L)}$ sa version rescalée, définie sur $\mathbb{R}^d/\mathbb{Z}^d$. On pourrait alors considérer (notamment) les deux cas de figure suivants :

- (i) soit on exige que la dépendance spatiale de l'amplitude de l'autopropulsion ne dépende pas de L dans le système de coordonnées rescalé, auquel cas la fonction $v_0^{(L)}$ varie avec L dans le système de coordonnées initial de manière à être invariante d'échelle, *i.e.* de manière à ce que $\tilde{v}_0^{(L)}$ soit indépendante de L . Dans ce cas, le terme dominant du membre de droite de l'équation (3.45) est un point fixe du rescaling et on peut bien prendre mathématiquement la limite $L \rightarrow \infty$ qui mène à (3.46), cette limite étant alors qualifiée de "limite de Kac".
- (ii) soit on exige que la dépendance spatiale de l'amplitude de l'autopropulsion ne dépende pas de L dans le système de coordonnées initial, auquel cas on doit se munir initialement d'une fonction $v_0 : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ telle que pour tout L , $v_0^{(L)}$ est définie comme la restriction de v_0 à $[-L/2; L/2]^d$. Mais considérant des conditions aux bords périodiques, pour éviter toute singularité aux bords de $[-L/2; L/2]^d$ (on a supposé que les gradients sont toujours bornés), il faut que la fonction v_0 initiale soit "suffisamment symétrique", *i.e.* $\partial_{x_k}^\ell v_0(x_1, \dots, -x_i, \dots, x_d) = \partial_{x_k}^\ell v_0(x_1, \dots, x_i, \dots, x_d)$, $\forall i, k = 1, \dots, N$, pour un ordre ℓ de dérivation suffisamment grand, et $\forall \mathbf{r} = (x_1, \dots, x_d)$ au moins à partir d'une certaine norme $|\mathbf{r}| \sim L_0/d$, où L_0 est la taille minimale du système avec conditions aux bords périodiques que l'on considère. Le problème est alors que l'approximation de faibles gradients dans le système de coordonnées rescalé ne peut par être juste pour L quelconque. On doit alors considérer un "cut-off" L_{\max} en deçà duquel l'hypothèse $\nabla_{\mathbf{r}} \tilde{v}_0 = \mathcal{O}_{L \rightarrow L_{\max}}(1)$ est bien satisfaite. L'équation (3.45) peut alors être considérée comme un développement asymptotique quand $L \rightarrow L_{\max}^-$, dont l'équation (3.46) est une approximation à l'ordre dominant, valable en pour L proche du cut-off L_{\max} mais pas au delà.

D'autre part, sur le plan physique, on se donne initialement un système de taille fixe L (par exemple au cours d'une expérience). La limite " $L \rightarrow \infty$ " (ou $L \rightarrow L_{\max}^-$) signifie alors que L doit être très grand devant certaines longueurs caractéristiques. Plus précisément, la taille L du système doit être grande devant la longueur de persistance $|v_0|/D_r$ (où $|v_0|$ désigne l'amplitude typique de la fonction v_0)⁵. Mais

5. Nul besoin d'inclure D_t dans les constantes dont les combinaisons algébriques forment des longueurs qui doivent être petites devant L , puisque le phénomène de diffusion spatiale associée

il ne faut pas que L soit grande devant la longueur typique de variation de la fonction v_0 , auquel cas l'hypothèse de faibles gradients ne serait plus valide.

Ainsi, sur des échelles de temps et d'espace “suffisamment grandes”, le comportement d'une unique ABP peut être décrit par l'équation (3.46). On est donc passé d'une dynamique sur $E \times A$ à une dynamique de grandes échelles sur E . Cependant l'objectif de la première étape de coarse-graining, discutée dans l'introduction du présent chapitre, consiste plutôt à réaliser la transition entre des descriptions dynamiques :

$$(E \times A)^N \longrightarrow E^N \quad (3.47)$$

d'un ensemble de particules actives en interaction. Dans le cas d'un ensemble d'ABPs interagissant par quorum-sensing (qui est celui que l'on étudie en détails dans ce chapitre), l'interaction peut être modélisée (voir section 1.2.3 de l'introduction) par une dépendance fonctionnelle de l'amplitude v_0 de l'autopropulsion en la densité de particules actives $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t))$. La dynamique initiale dont on aurait dû partir aurait alors consisté en un ensemble d'équations dynamiques identiques à (3.30) portant sur la position \mathbf{r}_i et l'orientation \mathbf{u}_i de $i = 1, \dots, N$ particules, dont le seul couplage aurait consisté à ajouter à la dépendance purement spatiale de l'autopropulsion $v_0(\mathbf{r}_i)$ de chaque particule i une dépendance fonctionnelle en la densité $\hat{\rho}$, *i.e.* à remplacer $v_0(\mathbf{r}_i)$ par $v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])$. Or, si on suppose que l'évolution du champ de densité de particules $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)$ est très lente devant celle des moments angulaires $\mathbf{a}^k(\mathbf{r}, t)$ alors, dans le traitement mathématique de la hiérarchie de la dynamique de ces moments, on peut considérer que le champs $\hat{\rho}$ est quasiment constant et ainsi approximer les $v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])$ par $v_0(\mathbf{r}_i)$ dans les équations dynamiques des \mathbf{a}^k . Cette hypothèse permet de déduire que la limite diffusive de N ABPs en interaction QS est donnée par la limite diffusive d'un ensemble d'ABPs indépendantes, auxquelles on ajoute un couplage *a posteriori* en remplaçant les $v_0(\mathbf{r}_i)$ par $v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])$ dans l'équation de la limite diffusive. Celle-ci est alors donnée par :

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])}{d(d-1)D_r} \nabla_{\mathbf{r}_i} [v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])\phi] + D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi \right]. \quad (3.48)$$

Cette méthode d'obtention de la limite diffusive de N ABPs en interaction de type QS, utilisée dans [109], est celle de la “méthode 1” mentionnée en introduction de ce chapitre. À la section 3.4, on réalisera un calcul plus minutieux de cette limite diffusive, en prenant en compte de manière plus explicite le couplage entre les particules tout au long des calculs, et on aboutira effectivement à l'équation (3.48).

à D_t est invariant d'échelle (sous rescaling diffusif).

3.3 Limite diffusive d'un gaz parfait de particules actives

Dans cette section, on calcule la limite diffusive de N ABPs n'interagissant pas entre elles. Ceci permet de traiter séparément les difficultés techniques liées au passage à N particules et celles liées aux interactions. Comme dans la section 3.2, on suppose que l'amplitude de l'autopropulsion $v_0(\mathbf{r}_i)$ de chaque particule $i = 1, \dots, N$ dépend de sa seule position \mathbf{r}_i . On a donc un système de N équations différentielles stochastiques (EDS) :

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v_0(\mathbf{r}_i)\mathbf{u}_i + \sqrt{2D_t}\boldsymbol{\eta}_i \quad (3.49)$$

où $\mathbf{u}_i \in \mathbb{S}^{d-1}$ est l'orientation de l'autopropulsion de la i ème particule et où les $\boldsymbol{\eta}_i$ sont N bruits blancs gaussiens, indépendants, de moyennes nulles, et satisfaisant $\langle \eta_i^\alpha(t)\eta_j^\beta(t') \rangle = \delta_{ij}\delta^{\alpha\beta}\delta(t - t')$. On suppose de plus que les états initiaux $(\mathbf{r}_i(0), \mathbf{u}_i(0))$ des particules sont tirés selon des probabilités indépendantes.

Sans surprise, la condition initiale étant factorisée et les particules n'interagissant pas entre elles, le résultat de la limite diffusive sera un ensemble de N équations indépendantes, chacune identique à l'équation (3.46). Bien que le résultat soit connu à l'avance du fait de l'indépendance des particules, le calcul que l'on réalise dans cette section présente néanmoins une subtilité dans la justification du scaling des moments harmoniques d'influence négligeable dans la limite des grands systèmes, subtilité que l'on retrouvera lorsque l'on calculera la limite diffusive de N particules actives en interaction à la section 3.4.

Notons qu'à partir de maintenant la "limite de grande taille" qui correspondait formellement à prendre $L \rightarrow \infty$ à la section 3.2 est remplacée par la limite thermodynamique : on considère que le nombre de particules N tend vers l'infini avec L . Plus précisément, on exige que la densité moyenne globale reste inchangée. La limite thermodynamique correspond ainsi à

$$N, L \rightarrow \infty \quad \text{où} \quad N \propto L^d. \quad (3.50)$$

L'évolution de la loi jointe à N particules $\psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ — après rescaling des coordonnées — est donnée par l'équation de Fokker-Planck associée aux dynamiques (3.49) :

$$\partial_t \psi = - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot [L v_0(\mathbf{r}_i) \mathbf{u}_i \psi - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \psi] + L^2 D_r \sum_{i=1}^N \Delta_{\mathbf{u}_i} \psi. \quad (3.51)$$

En intégrant les degrés de liberté orientationnels on obtient

$$\partial_t \phi = - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot [L v_0 \mathbf{a}_i^1 - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi] \quad (3.52)$$

Cherchant à reproduire la stratégie de la section 3.2, on calcule la dynamique du premier moment de chaque particule k en multipliant l'équation (3.51) par \mathbf{u}_k et en intégrant sur tous les \mathbf{u}_i :

$$\begin{aligned}\partial_t \langle \mathbf{u}_k \psi \rangle &= - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot [L v_0(\mathbf{r}_i) \langle \mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_k \psi \rangle - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \langle \mathbf{u}_k \psi \rangle] + L^2 D_r \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{u}_k \Delta_{\mathbf{u}_i} \psi \rangle \\ &= -\nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot \left[L v_0(\mathbf{r}_k) \left(\mathbf{a}_k^2 + \frac{\mathbf{I}}{d} \phi \right) - D_t \nabla_{\mathbf{r}_k} \mathbf{a}_k^1 \right] - L^2(d-1) D_r \mathbf{a}_k^1 \\ &\quad - \sum_{i \neq k} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[L v_0(\mathbf{r}_i) \mathbf{a}_{i,k}^{1,1} - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \mathbf{a}_i^1 \right]\end{aligned}$$

c'est à dire

$$\underbrace{\partial_t \mathbf{a}_k^1}_{(1)} = \underbrace{-\nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot \left[L v_0(\mathbf{r}_k) \left(\mathbf{a}_k^2 + \frac{\mathbf{I}}{d} \phi \right) - D_t \nabla_{\mathbf{r}_k} \mathbf{a}_k^1 \right]}_{(2)} \underbrace{- L^2(d-1) D_r \mathbf{a}_k^1}_{(3)} \\ \underbrace{- \sum_{i \neq k} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[L v_0(\mathbf{r}_i) \mathbf{a}_{i,k}^{1,1} - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \mathbf{a}_i^1 \right]}_{(4)} \quad (3.53)$$

A ce stade si l'on réalise la même approximation de variable rapide que celle de la section précédente 3.2 (qui nous a permis de passer de l'équation (3.38) à l'équation (3.39)) qui consiste à négliger (1) devant (3) dans la limite thermodynamique, on ne sera pas en mesure de déduire un résultat similaire à l'équation (3.44). En effet, on ne pourra pas conclure que le terme (4) est négligeable devant (2), car (4) est une somme contenant environ $N \sim L^d$ termes. C'est ici que l'indépendance des particules facilite la résolution du problème : puisque que l'on a à tout instant⁶

$$\psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(\mathbf{u}_i, \mathbf{r}_i) \quad (3.54)$$

alors en particulier

$$\mathbf{a}_k^1(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \left[\int \mathbf{u}_k \psi_1(\mathbf{u}_k, \mathbf{r}_k) d\mathbf{u}_k \right] \left[\prod_{i \neq k} \int \psi_i(\mathbf{u}_i, \mathbf{r}_i) d\mathbf{u}_i \right] = \check{\mathbf{a}}_k^1(\mathbf{r}_k) \prod_{i \neq k} \phi_i(\mathbf{r}_i) . \quad (3.55)$$

6. En effet si on note \mathcal{W} l'opérateur d'évolution de (3.51), celui-ci est la somme de N opérateurs d'évolution à une particule \mathcal{W}_i qui commutent entre eux, donc l'exponentielle de l'opérateur \mathcal{W} est le produit des exponentielles des opérateurs \mathcal{W}_i et la mesure à N particules à l'instant t est $\psi(t) = e^{t\mathcal{W}_1} \otimes \dots \otimes e^{t\mathcal{W}_N} [\psi_1(0) \otimes \dots \otimes \psi_1(0)] = (e^{t\mathcal{W}_1} \psi_1(0)) \otimes \dots \otimes (e^{t\mathcal{W}_N} \psi_1(0))$, i.e. la mesure reste factorisée.

Ainsi on obtient

$$\partial_t \mathbf{a}_k^1 = \left[\prod_{i \neq k} \phi_1(\mathbf{r}_i) \right] \partial_t \check{\mathbf{a}}_k^1(\mathbf{r}_k) + \check{\mathbf{a}}_k^1(\mathbf{r}_k) \sum_{i \neq k} \left[\prod_{j \neq i, k} \phi_1(\mathbf{r}_j) \right] \partial_t \phi_1(\mathbf{r}_i). \quad (3.56)$$

L'intégration de l'équation (3.52) par rapport aux $\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i}$ permet de déduire la dynamique de la marginale spatiale à une particule :

$$\begin{aligned} \partial_t \phi_1(\mathbf{r}_i) &= \int \left(- \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_j} \cdot \left[Lv_0 \check{\mathbf{a}}_j^1 \prod_{k \neq j} \phi_1(\mathbf{r}_k) - D_t \nabla_{\mathbf{r}_j} \phi \right] \right) \prod_{j \neq i} d\mathbf{r}_j \\ &= -\nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[Lv_0(\mathbf{r}_i) \check{\mathbf{a}}_i^1(\mathbf{r}_i) - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_1(\mathbf{r}_i) \right] \end{aligned}$$

Ainsi

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{a}_k^1 &= \left[\prod_{i \neq k} \phi_1(\mathbf{r}_i) \right] \partial_t \check{\mathbf{a}}_k^1(\mathbf{r}_k) \\ &\quad - \sum_{i \neq k} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[Lv_0(\mathbf{r}_i) \check{\mathbf{a}}_i^1(\mathbf{r}_i) \otimes \check{\mathbf{a}}_k^1(\mathbf{r}_k) \left(\prod_{j \neq i, k} \phi_1(\mathbf{r}_j) \right) - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_1(\mathbf{r}_i) \check{\mathbf{a}}_k^1(\mathbf{r}_k) \left(\prod_{j \neq i, k} \phi_1(\mathbf{r}_j) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.57)$$

On constate que la dernière ligne de l'équation ci-dessus (3.58) — qui est contenue dans le terme (1) de l'équation (3.53) — est égale au terme (4) de l'équation (3.53). Ceux-ci se simplifient donc et l'équation (3.53) se réécrit :

$$\begin{aligned} \left[\prod_{i \neq k} \phi_1(\mathbf{r}_i) \right] \partial_t \check{\mathbf{a}}_k^1 &= -\nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot \left[Lv_0(\mathbf{r}_k) \left(\mathbf{a}_k^2 + \frac{\mathbf{I}}{d} \phi \right) - D_t \nabla_{\mathbf{r}_k} \mathbf{a}_k^1 \right] \\ &\quad - L^2(d-1) D_r \mathbf{a}_k^1 \end{aligned} \quad (3.58)$$

ayant éliminé le terme divergeant plus vite que L^2 , on peut maintenant faire une approximation de variable rapide et négliger $\left[\prod_{i \neq k} \phi_1(\mathbf{r}_i) \right] \partial_t \check{\mathbf{a}}_k^1$ devant $-L^2(d-1) D_r \check{\mathbf{a}}_k^1 \left[\prod_{i \neq k} \phi_1(\mathbf{r}_i) \right]$ pour obtenir la dynamique sur de grandes échelles de temps du premier moment orientationnel par rapport à la particule k :

$$\mathbf{a}_k^1 \simeq -\frac{1}{(d-1) D_r} \nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot \left[\frac{1}{L} v_0(\mathbf{r}_k) \left(\mathbf{a}_k^2 + \frac{\mathbf{I}}{d} \phi \right) - \frac{1}{L^2} D_t \nabla_{\mathbf{r}_k} \mathbf{a}_k^1 \right] \quad (3.59)$$

De manière similaire, si on calcule la dynamique de \mathbf{a}_k^2 , qu'on décompose $\partial_t \mathbf{a}_k^2$ comme on l'a fait pour $\partial_t \mathbf{a}_k^1$, et qu'on réalise une approximation de variable rapide en négligeant $\partial_t \check{\mathbf{a}}_k^2$, on obtient, comme dans la section 3.2, l'équation :

$$\mathbf{a}_k^2 \simeq -\frac{1}{2d D_r} \nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot \left[\frac{1}{L} v_0(\mathbf{r}_k) \left(\mathbf{a}_k^3 + \frac{3}{d+2} \mathbf{a}_k^1 \odot \mathbf{I} - \frac{1}{d} \mathbf{a}_k^1 \otimes \mathbf{I} \right) - \frac{1}{L^2} D_t \nabla_{\mathbf{r}_k} \mathbf{a}_k^2 \right] \quad (3.60)$$

A nouveau, si on suppose que tous les moments, ainsi que leurs dérivées, restent bornés à la limite thermodynamique, on conclut que

$$\mathbf{a}_k^2 = \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) \quad (3.61)$$

puis que

$$\mathbf{a}_k^1 \simeq -\frac{1}{Ld(d-1)D_r} \nabla_{\mathbf{r}_k} [v_0(\mathbf{r}_k)\phi] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right) \quad (3.62)$$

et enfin, comme attendu, en négligeant les termes sous-dominants à la limite thermodynamique :

$$\partial_t \phi = \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_0(\mathbf{r}_i)}{d(d-1)D_r} \nabla_{\mathbf{r}_i} [v_0(\mathbf{r}_i)\phi] + D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi \right] \quad (3.63)$$

3.4 Limite diffusive d'un grand nombre de particules en interaction

On considère un ensemble de $i = 1, \dots, N$ ABPs satisfaisant la dynamique sur-amortie :

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v_0^i \mathbf{u}_i \quad (3.64)$$

où on a négligé le bruit thermique (ce qui revient à prendre $D_t = 0$ dans les sections précédentes) pour simplifier les calculs — les calculs avec D_t non nul étant détaillés dans l'appendice J. De plus, on modélise ici le quorum-sensing *via* l'amplitude de l'autopropulsion v_0^i de chaque particule i qui est une fonction de la position de l'ensemble des particules : $v_0^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Le but de section est d'établir la limite diffusive de nos N ABPs en interaction, satisfaisant (3.64), dont la probabilité jointe vérifie l'équation de Fokker–Planck (dans les unités rescalées) :

$$\partial_t \psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = - \sum_i \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot [L v_0^i \mathbf{u}_i \psi] + \sum_i L^2 D_r \Delta_{\mathbf{u}_i} \psi. \quad (3.65)$$

Comme dans les sections 3.2 et 3.3, on commence par intégrer par rapport à tous les \mathbf{u}_i pour obtenir la dynamique de la marginale spatiale :

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = - \sum_i \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot [L v_0^i \mathbf{a}_i^1]. \quad (3.66)$$

Obtenir la limite diffusive du système consiste à clore asymptotiquement (pour la limite thermodynamique) la dynamique (3.66) de la marginale spatiale. Pour cela, on va montrer que le moment harmonique d'ordre 1 de chaque particule i se comporte asymptotiquement comme :

$$\mathbf{a}_i^1 = \frac{-1}{L d(d-1) D_r} \nabla_{\mathbf{r}_i} [v_0^i \phi] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right). \quad (3.67)$$

Dans la prochaine section, on énonce (et commente) les hypothèses que nous avons employées pour démontrer (3.67), avant d'exposer la preuve en elle-même dans les sections qui suivent.

3.4.1 Hypothèses de travail

Dans le but d'établir la limite diffusive de (3.64), on fait les hypothèses suivantes (le sens physique de **H1** étant discuté après l'énoncé des hypothèses) :

H1 – Écrantage par les positions des voisins directs. Pour toute configuration $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \in E^N$, il existe un voisinage $\mathcal{X}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \subset E^N$ tel que, pour des orientations quelconques $(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N) \in (\mathbb{S}^{d-1})^N$, l'état $(\mathbf{u}_i, \mathbf{r}_i)$ de toute

particule i sachant les positions \mathbf{r}_j de ses voisines dans un voisinage $\mathcal{V}(\mathbf{r}_i) \subset E$ est indépendant de l'état de toutes les particules situées hors de $\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)$:

$$\psi|_{\mathcal{Y}}(\mathbf{u}_i, \mathbf{r}_i | \{\mathbf{u}_j, \mathbf{r}_j\}_{j \neq i}) = \psi|_{\mathcal{Y}}(\mathbf{u}_i, \mathbf{r}_i | \{\mathbf{r}_j\}_{j \in \mathcal{V}_i}) \quad (3.68)$$

où on a posé $\mathcal{V}_i \equiv \{j \in \llbracket 1; N \rrbracket \setminus \{i\} \mid \mathbf{r}_j \in \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)\}$ et où $\psi|_{\mathcal{Y}}$ est la restriction à $\mathcal{Y} \equiv (\mathbb{S}^{d-1})^N \times \mathcal{X} \subset (\mathbb{S}^{d-1} \times E)^N$. Autrement dit, l'information de la position des voisins \mathcal{V}_i de la particule i est “l'information maximale” que l'on puisse avoir sur l'état de i . On suppose de plus que les voisinages $\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)$ restent de taille bornée dans E , dans les unités initiales, à la limite thermodynamique. Ceci implique que, dans les coordonnées renormalisées, le volume $|\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)| = \mathcal{O}(1/L^d)$ à la limite thermodynamique.

H2 – Interactions de portée finie. L'autopropulsion v_0^i de toute particule i , de position \mathbf{r}_i , n'est influencée que par les particules situées dans un voisinage $\tilde{\mathcal{V}}(\mathbf{r}_i) \subseteq \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)$ de la particule i .

H3 – Densité spatiale bornée. Dans la limite thermodynamique, la marginale spatiale $\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ n'est non nulle que pour des configurations “typiques” $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ où le système est “suffisamment homogène” au sens où le nombre de particules, dans tout voisinage \mathcal{V} de taille fini (dans les coordonnées initiales), reste fini à la limite thermodynamique.

H4 – Champs bornés. Les fonctions ψ, ϕ , leurs marginales à $k \leq N$ particules, tous les moments harmoniques \mathbf{a}_K^{PK} et conditionnés $\tilde{\mathbf{a}}_K^{PK}$, les fonctions v_0^i , ainsi que les dérivées spatiales (dans les coordonnées renormalisées) à tout ordre de ces fonctions, restent bornées à la limite thermodynamique.

L'hypothèse **H1** vise à exprimer le fait que l'état d'une particule i de position \mathbf{r}_i ne dépende que de l'état de ses voisins “les plus proches”, *i.e.* ceux situés dans le voisinage spatiale $\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)$. Néanmoins, l'identité de ces “proches voisins” dépend de la configuration $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Ainsi, l'identité des particules qui sont (ou pas) dans \mathcal{V}_i change lorsque l'on varie “drastiquement” les positions $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Mais si ces positions “ne s'écartent pas trop” d'une configuration $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ donnée, alors l'identité des voisins proches reste la même. Pour une configuration $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ donnée, le voisinage $\mathcal{X}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ sert justement à formaliser le fait que la configuration spatiale des particules “ne s'écarte pas trop” de $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ ⁷.

Dans toute la suite de cette section, on se restreint à l'étude d'un ensemble de positions $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ situées dans un certain sous-ensemble $\mathcal{X} \subset E^N$ qui est, d'une part, tel que le système soit suffisamment homogène au sens de **H3** et,

7. Notons que si, dans la configuration $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, une particule k est sur le bord de $\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)$, alors le voisinage $\mathcal{X}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ n'existe pas (il ne contient pas d'ouvert). Mais cette situation se produit sur un sous-ensemble de E^N de mesure nulle.

d'autre part, tel que chaque particule i ait toujours le même sous-ensemble de voisins $\mathcal{V}_i \subset \llbracket 1; N \rrbracket$ quelle que soit la configuration $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \in \mathcal{X}$. Ainsi, on a en particulier toutes les propriétés (3.68) pour $\mathcal{Y} \equiv (\mathbb{S}^{d-1})^N \times \mathcal{X}$ et des \mathcal{V}_i fixés. L'analyse permettra de déduire la dynamique de $\phi|_{\mathcal{X}}$ à la limite thermodynamique, pour tout voisinage \mathcal{X} où le système est “suffisamment homogène”. L'hypothèse **H3** supposant que ϕ s'annule en dehors de ces voisinages, on pourra conclure que la dynamique obtenue est en fait valide pour toute configuration. Enfin, pour alléger les notations, on omettra le symbole de restriction et on notera f à la place de $f|_{\mathcal{Y}}$ ou $f|_{\mathcal{X}}$ dans toutes les situations où ça aurait dû être le cas.

3.4.2 Moments harmoniques d'ordre 1

Pour démontrer le scaling (3.67), on commence par multiplier (tensoriellement par la droite) l'équation (3.65) par \mathbf{u}_k puis on intègre par rapport à tous les \mathbf{u}_i pour obtenir la dynamique du premier moment (harmonique) de la k ème particule :

$$\partial_t \mathbf{a}_k^1 = -\nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot \left[Lv_0^k \mathbf{a}_k^2 + L \frac{v_0^k}{d} I \phi_N \right] - L^2(d-1) D_r \mathbf{a}_k^1 - \sum_{i \neq k} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[Lv_0^i \mathbf{a}_{i,k}^{1,1} \right]. \quad (3.69)$$

Inspiré par la section précédente 3.3, on décompose la dérivée temporelle du moment total \mathbf{a}_k^1 en fonction de celles du moment conditionné $\tilde{\mathbf{a}}_k^1$ et de la marginale à $N-1$ particules :

$$\partial_t \mathbf{a}_k^1 = \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \neq k}) \partial_t \tilde{\mathbf{a}}_k^1 + \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \partial_t \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \neq k}). \quad (3.70)$$

On obtient la dynamique de la marginale spatiale en les $N-1$ particules $i \neq k$ en intégrant l'équation (3.66) par rapport à \mathbf{r}_k

$$\partial_t \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \neq k}) = - \sum_{i \neq k} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[L \int v_0^i \mathbf{a}_i^1 d\mathbf{r}_k \right] \quad (3.71)$$

En décomposant le moment \mathbf{a}_i^1 en le produit du moment conditionné $\tilde{\mathbf{a}}_i^1$ et de la marginale en les $N-1$ particules $j \neq i$, on peut réécrire l'équation (3.71) comme suit :

$$\partial_t \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \neq k}) = - \sum_{i \neq k} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[L \int v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i}) d\mathbf{r}_k \right] \quad (3.72)$$

En injectant l'équation (3.72) dans l'équation (3.70) puis, à son tour, l'équation obtenue dans (3.69), on obtient

$$\begin{aligned} \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \neq k}) \partial_t \tilde{\mathbf{a}}_k^1 &= -L \nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot \left[v_0^k \mathbf{a}_k^2 + \frac{v_0^k}{d} I \phi_N \right] \\ &\quad - L^2(d-1) D_r \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \neq k}) - L \Upsilon_1^k. \end{aligned} \quad (3.73)$$

où on a posé

$$\Upsilon_1^k \equiv \sum_{i \neq k} \left(\nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \mathbf{a}_{i,k}^{1,1} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\int v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \right) \quad (3.74)$$

On va maintenant montrer que les termes Υ_1^k et $\nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot [v_0^k \mathbf{a}_k^2]$ du membre de droite de l'équation (3.73) sont négligeables devant $\nabla_{\mathbf{r}_k} [d^{-1} v_0^k \phi_N]$ à la limite thermodynamique.

3.4.3 Comportement asymptotique du terme résiduel Υ_1^k à la limite thermodynamique

D'une part, le moment d'ordre (1, 1) en une paire (i, k) de particules distinctes

$$\mathbf{a}_{i,k}^{1,1} \equiv \int \mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_k \psi(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{u}_1 \dots d\mathbf{u}_N \quad (3.75)$$

se réécrit, par une simple application de la définition des probabilités conditionnelles :

$$\mathbf{a}_{i,k}^{1,1} = \int \mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_k \psi_1(\mathbf{u}_i, \mathbf{r}_i, |\mathbf{u}_k, \mathbf{r}_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) \psi_1(\mathbf{u}_k, \mathbf{r}_k | \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{u}_i d\mathbf{u}_k \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) \quad (3.76)$$

Si on suppose que i et k sont telles que $i \notin \mathcal{V}_k$ (et donc $k \notin \mathcal{V}_i$), l'hypothèse **H1** permet de réécrire :

$$\mathbf{a}_{i,k}^{1,1} = \left[\int \mathbf{u}_i \psi_1(\mathbf{u}_i, \mathbf{r}_i, |\{\mathbf{r}_j\}_{j \in \mathcal{V}_i}) d\mathbf{u}_i \right] \otimes \left[\int \mathbf{u}_k \psi_1(\mathbf{u}_k, \mathbf{r}_k | \{\mathbf{r}_j\}_{j \in \mathcal{V}_k}) d\mathbf{u}_k \right] \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) \quad (3.77)$$

C'est à dire

$$\mathbf{a}_{i,k}^{1,1} = \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq k,i}), \quad (3.78)$$

où $\tilde{\mathbf{a}}_i^1$ (respectivement $\tilde{\mathbf{a}}_k^1$) n'est fonction que de \mathbf{r}_i et des $\{\mathbf{r}_j\}_{j \in \mathcal{V}_i}$ (respectivement de \mathbf{r}_k et des $\{\mathbf{r}_j\}_{j \in \mathcal{V}_k}$). De plus, l'hypothèse **H3** assure, quant à elle, que l'équation (3.78) soit valide, à particule i fixée, pour un nombre extensif de particules k (celles n'appartenant pas à \mathcal{V}_i).

D'autre part, pour toute paire de particules (i, k), on décompose l'intégrale

$$\int_E v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \quad (3.79)$$

en la somme d'une intégrale sur $\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)$, où $\tilde{\mathbf{a}}_i^1$ dépend bien de \mathbf{r}'_k , et d'une intégrale sur $E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)$, où $\tilde{\mathbf{a}}_i^1$ ne dépend pas de \mathbf{r}'_k :

$$\begin{aligned} \int_E v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k &= \int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \\ &\quad + v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \int_{E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \end{aligned} \quad (3.80)$$

Pour que l'intégrale à la seconde ligne de l'équation ci-dessus donne la marginale à $N - 1$ particule, on ajoute et on soustrait le terme

$$v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \quad (3.81)$$

dans lequel la fonction $\tilde{\mathbf{a}}_i^1$ est évaluée au point $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N)$ de l'équation initiale (3.65) — toutes les autres équations de cette section étant supposées être évaluées en ce même point (et son voisinage \mathcal{X}). L'intégrale (3.79) s'écrit finalement

$$\begin{aligned} \int_E v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k &= \int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \\ &\quad + v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \int_{E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \\ &\quad + v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \left[\int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \right. \\ &\quad \left. - \int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \right] \end{aligned}$$

C'est à dire

$$\int_E v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k = v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) + \gamma_k^i \quad (3.82)$$

où

$$\gamma_k^i \equiv \left[\int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k - v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \phi_{N-1}(\mathbf{r}'_k, \{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) d\mathbf{r}'_k \right]. \quad (3.83)$$

Notons qu'à la limite thermodynamique

$$\gamma_k^i = \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{a}}_i^1 |\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)|) = \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{a}}_i^1 / L^d). \quad (3.84)$$

On peut ainsi, à l'aide des équations (3.78) et (3.82), réécrire le terme Υ_1^k défini en (3.74) comme suit :

$$\begin{aligned} \Upsilon_1^k &= \sum_{i \neq k} \left(\nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \mathbf{a}_{i,k}^{1,1} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) + \gamma_k^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \right) \\ &= \sum_{i \in \mathcal{V}_k} \left(\nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \mathbf{a}_{i,k}^{1,1} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) + \gamma_k^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \right) \\ &\quad + \sum_{i \neq k, i \notin \mathcal{V}_k} \left(\nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq k,i}) \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) + \gamma_k^i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \right] \right) \end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que $\tilde{\mathbf{a}}_k^1$ ne dépend pas de \mathbf{r}_i dès lors que $i \notin \mathcal{V}_k$. Finalement on a

$$\begin{aligned} \Upsilon_1^k &= \sum_{i \in \mathcal{V}_k} \left(\nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \mathbf{a}_{i,k}^{1,1} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-2}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \neq i,k}) + \gamma_k^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \right) \\ &\quad - \sum_{i \neq k, i \notin \mathcal{V}_k} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\gamma_k^i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \right] \end{aligned} \quad (3.85)$$

donc en terme de comportement asymptotique à la limite thermodynamique :

$$\Upsilon_1^k = \sum_{i \in \mathcal{V}_k} \left[\mathcal{O}(\mathbf{a}_{i,k}^{1,1}) + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{a}}_i^1 \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1) + \mathcal{O}(\gamma_k^i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1) \right] + \sum_{i \neq k, i \notin \mathcal{V}_k} \mathcal{O}(\gamma_k^i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_k^1) \quad (3.86)$$

Ainsi, en supposant que les moment conditionnés scalent comme leurs analogues non-conditionnés, et que les scaling des moments sont les mêmes pour toutes les (associations de) particules, et sachant (3.84) et que la somme sur $i \in \mathcal{V}_k$ comporte $\mathcal{O}(1)$ termes tandis que celle sur $\{i \neq k, i \notin \mathcal{V}_k\}$ en compte $\mathcal{O}(N) = \mathcal{O}(L^d)$, on a

$$\Upsilon_1^k = \mathcal{O}(\mathbf{a}_{i,k}^{1,1}) + \mathcal{O}((\tilde{\mathbf{a}}_i^1)^2) + \mathcal{O}((\tilde{\mathbf{a}}_i^1)^2/L^d) + \mathcal{O}(L^d(\tilde{\mathbf{a}}_i^1)^2/L^d) \quad (3.87)$$

c'est à dire

$$\Upsilon_1^k = \mathcal{O}(\mathbf{a}_{i,k}^{1,1}) + \mathcal{O}((\mathbf{a}_i^1)^2). \quad (3.88)$$

3.4.4 Limite diffusive

Maintenant que l'on s'est assuré que le terme Υ_1^k de l'équation (3.73) reste borné à la limite thermodynamique, on peut supposer de manière cohérente que le terme en $-L^2 \tilde{\mathbf{a}}_k^1$ est bien dominant devant $\partial_t \tilde{\mathbf{a}}_k^1$ dans cette même équation. Ainsi, sur des échelles d'espace et de temps suffisamment grandes, le moment $\tilde{\mathbf{a}}_k^1$ relaxe quasi-instantanément vers la solution de :

$$\tilde{\mathbf{a}}_k^1 \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \neq k}) \simeq -\frac{1}{L(d-1)D_r} \left(\nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot \left[v_0^k \mathbf{a}_k^2 \right] + \nabla_{\mathbf{r}_k} \left[\frac{v_0^k}{d} \phi \right] + \Upsilon_1^k \right) \quad (3.89)$$

Et puisque $\mathbf{a}_k^1 = \tilde{\mathbf{a}}_k^1 \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \neq k})$, on a

$$\mathbf{a}_k^1 = \frac{-1}{Ld(d-1)D_r} \nabla_{\mathbf{r}_k} \left[v_0^k \phi \right] + \mathcal{O}\left(\frac{\mathbf{a}_k^2}{L}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{\mathbf{a}_{i,k}^{1,1}}{L}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{(\mathbf{a}_i^1)^2}{L}\right) \quad (3.90)$$

qui permet de conclure que \mathbf{a}_k^1 tend vers 0 à la limite thermodynamique au moins comme $1/L$.

Si on réalisait les mêmes calculs pour les moments \mathbf{a}_k^2 et $\mathbf{a}_{i,k}^{1,1}$ que ceux effectués pour le moment a_k^1 entre les équations (3.69) et (3.90), on montrerait que \mathbf{a}_k^2 et $\mathbf{a}_{i,k}^{1,1}$

tendent également vers 0 au moins aussi vite que $1/L$ à la limite thermodynamique — on fait le calcul pour un moment quelconque, en prenant en compte la taxie et la diffusion translationnelle dans l'appendice J. On peut ainsi conclure qu'à l'ordre dominant, dans la limite thermodynamique

$$\mathbf{a}_k^1 = \frac{-1}{Ld(d-1)D_r} \nabla_{\mathbf{r}_k} \left[v_0^k \phi \right] \quad (3.91)$$

En réinjectant l'équation (3.91) dans l'équation (3.66) on obtient finalement la limite diffusive :

$$\partial_t \phi = \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_0^i}{d(d-1)D_r} \nabla_{\mathbf{r}_i} (v_0^i \phi) \right] \quad (3.92)$$

où, cette fois, on a bien mené les calculs avec des interactions (de type quorum-sensing) entre particules, modélisées par les fonctions $v_0^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Cette méthode de calcul de la limite diffusive est celle que nous avions qualifiée de “seconde méthode” dans l'introduction de ce chapitre, par opposition à la “première méthode” présentée à la section 3.2. On constate que les résultats obtenus sont bien les mêmes (équation (3.48) *vs.* équation (3.92)) moyennant l'existence d'une fonctionnelle $v_0(\mathbf{r}, [\rho])$ telle que $v_0^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])$.

3.5 De la limite diffusive à l'hydrodynamique fluctuante

Considérons le cas général d'un ensemble de $i = 1, \dots, N$ particules, évoluant dans un espace E de dimension d (E désigne toujours \mathbb{R}^d ou $\mathbb{R}^d/\mathbb{Z}^d$) selon la dynamique stochastique suivante, définie au sens d'Ito :

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + \sqrt{2D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}\boldsymbol{\eta}_i \quad (3.93)$$

où les $\boldsymbol{\eta}_i$ sont des bruits blancs gaussiens centrés tels que $\langle \eta_i^\alpha \eta_j^\beta \rangle = \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$.

L'objectif de cette section est de passer de la dynamique stochastique (3.93), définie sur l'espace E^N des configurations de N particules, à une dynamique sur l'espace \mathbb{F} des champs de densité de particules. Cet objectif correspond à la seconde étape du plan de coarse-graining, symbolisé par “l'équation” (3.2), que l'on appelle “méthode de Dean généralisée” (noté “Dg” dans (3.2)), puisque cette méthode correspond à la généralisation aux bruits multiplicatifs, établie dans [109], de la méthode introduite par Dean dans [28].

Dans l'appendice (L), on présente en détails l'application de cette méthode à l'équation (3.93). Dans cette section, on se contente de rappeler dans les grandes lignes les étapes de la méthode de “Dean généralisée”, puis de donner le résultat de son application à l'équation (3.93), et enfin de donner l'hydrodynamique fluctuante associée à la limite diffusive (3.92) d'un ensemble d'ABPs interagissant par quorum-sensing — qui est un cas particulier de l'équation générale (3.93).

3.5.1 Méthode générale

On commence par définir la densité empirique de particules :

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) . \quad (3.94)$$

On note $\mathcal{D}_N(E)$ l'ensemble des distributions sur E qui sont la somme de N masses Dirac. L'application qui à une configuration $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ associe la densité empirique $\hat{\rho}$ va de E^N — espace sur lequel est définie la dynamique (3.93) — dans l'espace $\mathcal{D}_N(E)$ qui est lui-même inclus (confère discussion dans la première note de pied de page de ce chapitre) dans l'espace \mathbb{F} des champs scalaires sur E . Pour obtenir la dynamique du champ de densité associée à (3.93), il suffit alors de “pousser en avant” (en un sens géométrique purement formel⁸) la dynamique initiale par l'application $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \mapsto \hat{\rho}$.

8. En effet, cette idée du “pushforward” géométrique n'est qu'une image (utile pour se figurer comment on “transporte” la dynamique de E^N dans \mathbb{F}) puisque la dynamique (3.93) étant stochastique, elle n'est pas vraiment associée à un champ de vecteur sur E^N .

Une hypothèse cruciale pour réaliser ce “poussé–en–avant” consiste à supposer qu'il existe des fonctions

$$\mathbf{F} : E \times \mathbb{F} \longrightarrow \mathbb{R}^d \quad \text{et} \quad D : E \times \mathbb{F} \longrightarrow \mathbb{R} \quad (3.95)$$

telles que, pour tout $i = 1, \dots, N$,

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \mathbf{F}(\mathbf{r}_i, \hat{\rho}) \quad \text{et} \quad D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = D(\mathbf{r}_i, \hat{\rho}) . \quad (3.96)$$

Cette hypothèse implique notamment que la dynamique microscopique (3.93) de l'ensemble des particules est invariante par permutation des particules (*i.e.* des positions \mathbf{r}_i). Nous reviendrons brièvement sur ce point au dernier chapitre de ce manuscrit.

Ensuite, on utilise la formule d'Ito pour montrer que

$$\partial_t \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \left[\mathbf{F}(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) + \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\hat{\rho}])} \boldsymbol{\eta}_i \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) - \nabla_{\mathbf{r}} [D(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)] \right\} \quad (3.97)$$

Puis, en sommant sur i les dynamiques des $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ (équation ci-dessus) et en remplaçant le terme de bruit par un champ aléatoire de même loi, on obtient :

$$\partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \mathbf{F}(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) \hat{\rho}(\mathbf{r}) - \nabla_{\mathbf{r}} [D(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) \hat{\rho}(\mathbf{r})] + \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\hat{\rho}])} \hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (3.98)$$

où $\hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t)$ est un champ gaussien $\hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t)$ de moyenne nulle et tel que $\langle \hat{\Lambda}^\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\Lambda}^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$. Enfin, on suppose que dans la limite de grand nombre de particules N , on peut remplacer dans l'équation (3.98) la mesure empirique $\hat{\rho}$ par un champ continu ρ , satisfaisant l'équation différentielle stochastique

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \mathbf{F}(\mathbf{r}, [\rho]) \rho(\mathbf{r}) - \nabla_{\mathbf{r}} [D(\mathbf{r}, [\rho]) \rho(\mathbf{r})] + \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\rho])} \rho \Lambda(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (3.99)$$

où Λ est un champ gaussien centré vérifiant $\langle \Lambda^\alpha(\mathbf{r}, t) \Lambda^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$, *i.e.* où on a remplacé $\hat{\Lambda}$ par $\sqrt{\rho} \Lambda$.

3.5.2 Application aux ABPs interagissant par quorum–sensing

La limite diffusive de N ABPs interagissant *via* quorum–sensing (3.92) obtenue à la section 3.4 peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\partial_t \phi = - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left\{ \frac{1}{2} D_i \phi \nabla_{\mathbf{r}_i} [\ln D_i] - \nabla_{\mathbf{r}_i} [D_i \phi] \right\} \quad (3.100)$$

avec

$$D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv D_t + \frac{v_0^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)^2}{d(d-1)D_r} . \quad (3.101)$$

Si on suppose maintenant qu'il existe une application $v_0 : E \times \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$v_0^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}]) \quad (3.102)$$

alors on déduit immédiatement que

$$D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = D(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}]) \quad (3.103)$$

où

$$D(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}]) \equiv D_t + \frac{v_0(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])^2}{d(d-1)D_r} . \quad (3.104)$$

est une diffusivité de grande échelle.

D'après la construction générale de l'hydrodynamique fluctuante (3.99) à partir de (3.93), on peut conclure, en supposant (3.102), qu'un ensemble de N ABPs interagissant par quorum-sensing, dont la dynamique microscopique est (3.64) (et la limite diffusive est donc (3.92)), est décrit sur de grandes échelles de temps et d'espace par l'hydrodynamique fluctuante (3.99), où $D(\mathbf{r}, [\rho])$ est donné par (3.104) et où $\mathbf{F}(\mathbf{r}, [\rho])$ est définie par (cf. appendice L) :

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, [\rho]) \equiv \frac{1}{2} D(\mathbf{r}, [\rho]) \left[\nabla_{\mathbf{r}} \ln D(\mathbf{r}, [\rho]) + \nabla_{\mathbf{r}'} \left. \frac{\delta \ln D(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r}')} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \right] . \quad (3.105)$$

On peut finalement réécrire l'hydrodynamique fluctuante (3.99) de la façon suivante :

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ D(\mathbf{r}, [\rho]) \rho(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\rho]) \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} - \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\rho])} \rho \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (3.106)$$

où μ joue le rôle d'un potentiel chimique dont l'expression est

$$\mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\rho]) \equiv \frac{1}{2} \ln D(\mathbf{r}, [\rho]) + \ln \rho(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \frac{\delta D(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} . \quad (3.107)$$

Notons que dans la suite de ce manuscrit, on supposera (confère discussion de la section 4.1 du chapitre 4) :

$$\left. \left[\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta D(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} = 0 , \quad (3.108)$$

ce qui nous permettra notamment de remplacer $\nabla_{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\rho]) \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}}$ par $\nabla_{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}, [\rho])$ dans l'équation (3.106).

Au prochain chapitre, on appliquera les méthodes de coarse-graining exposées dans le présent chapitre pour déduire l'hydrodynamique fluctuante d'ABPs, de

RTPs et d'AOUPs interagissant par quorum-sensing ou par taxie et on montrera que, dans certaines situations, ces dynamiques macroscopiques sont exactement les mêmes que celles de systèmes passifs interagissant via des forces qui dérivent de potentiels. Ces systèmes actifs présenteront ainsi une réversibilité effective à grandes échelles, malgré l'irréversibilité de leurs dynamiques microscopiques. Cela nous permettra notamment de prévoir leurs comportements collectifs à partir de la connaissance de ceux des systèmes passifs correspondants.

Chapitre 4

Mapping et pseudo-mapping macroscopiques vers l'équilibre

Dans l'ensemble de ce chapitre, motivé par le coarse-graining de systèmes actifs présenté au chapitre précédent, on considère des équations hydrodynamiques fluctuantes (définies au sens d'Ito) pour le champ de densité $\rho(\mathbf{r}, t)$ de particules actives de la forme

$$\partial_t \rho = \nabla \cdot [M \nabla \mu + \sqrt{2M} \boldsymbol{\Lambda}] . \quad (4.1)$$

où $\mu(\mathbf{r}, [\rho])$ joue le rôle d'un potentiel chimique, où $M(\mathbf{r}, [\rho])$ est la mobilité collectivité collective, et où $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t)$ est un champ gaussien centré tel que $\langle \Lambda^\alpha(\mathbf{r}, t) \Lambda^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$. On note toujours E l'espace auquel la variable de position \mathbf{r} appartient, et \mathbb{F} l'espace fonctionnel auquel le champ ρ appartient. On montre qu'une version généralisée du théorème de Schwarz peut être utilisée pour déterminer les conditions d'existence d'états d'équilibre macroscopique et de pseudoéquilibre macroscopique pour des systèmes actifs décrits, à grande échelle, par l'équation (4.1).

Dans la section 4.1, qui est essentiellement technique, on discute des situations dans lesquelles le bilan détaillé de l'équation (4.1) revient à déterminer s'il existe une fonctionnelle $\mathcal{F}[\rho]$ telle que

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} . \quad (4.2)$$

Lorsqu'une telle fonctionnelle \mathcal{F} existe, on dira que μ est fonctionnellement intégrable, et que le système est macroscopiquement à l'équilibre, ou encore qu'il existe un "mapping vers l'équilibre" à l'échelle macroscopique. Ensuite, on discute

de l'emploi d'une condition de Schwarz généralisée en tant que condition nécessaire et suffisante (CNS) d'intégrabilité fonctionnelle. Enfin, on introduit une structure géométrique formelle sur \mathbb{F} et on définit un opérateur de dérivation extérieure fonctionnelle.

Dans la section 4.2, on met en œuvre cette condition pour déterminer l'existence de mapping vers l'équilibre dans des systèmes composés d'ABPs, de RTPs ou d'AOUPs interagissant *via* quorum-sensing ou taxie — systèmes dont on détermine l'hydrodynamique fluctuante en appliquant les méthodes du chapitre précédent.

Dans la section 4.3, on considère le cas où μ est une fonction locale¹ de ρ , *i.e.* où $\mu(\mathbf{r}, [\rho])$ dépend de ρ et de ses dérivées en \mathbf{r} jusqu'à un ordre fini : $\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \mu(\rho(\mathbf{r}), \nabla\rho(\mathbf{r}), \dots)$. Dans le cas où l'espace physique E est de dimension 1, on montre que la condition d'intégrabilité de Schwarz — qui est une condition “distributionnelle” — est équivalente à un ensemble d'équations aux dérivées partielles (EDP) que la fonction $\mu(\rho, \partial_x\rho, \dots)$ doit satisfaire.

Dans la section 4.4 on généralise les conditions d'intégrabilité précédemment établies au cas où une fonction à valeurs vectorielles

$$\vec{\mu}(\vec{\rho}, \partial_x \vec{\rho}, \dots) \equiv (\mu^1(\vec{\rho}, \partial_x \vec{\rho}, \dots), \dots, \mu^n(\vec{\rho}, \partial_x \vec{\rho}, \dots)) \quad (4.3)$$

dépend (localement) d'un ensemble de champs $\vec{\rho} \equiv (\rho^1, \dots, \rho^n)$ ce qui permet notamment de discuter le cas des mélanges actifs de n espèces.

Enfin, dans la section 4.5, on montre que la condition d'intégrabilité de Schwarz peut également être employée donner un ensemble de conditions nécessaires et suffisantes à l'existence d'un pseudo-mapping vers l'équilibre.

1. Dans la suite de ce manuscrit, on dira que μ est une fonctionnelle “purement locale” ou “strictement locale” de ρ lorsque $\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \mu(\rho(\mathbf{r}))$.

4.1 Réversibilité, intégrabilité, condition de Schwarz et dérivée extérieure fonctionnelle

4.1.1 Équation de Fokker–Planck fonctionnelle et réversibilité

L'équation aux dérivées partielles stochastique (4.1) (EDPS) est associée à une équation de Fokker–Planck fonctionnelle de la forme [109] :

$$\partial_t P[\rho] = - \int_E d\mathbf{r} \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left(P[\rho] M(\mathbf{r}, [\rho]) \nabla_{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}, [\rho]) + \left[\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta M(\mathbf{r}', [\rho]) P[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \right) \quad (4.4)$$

que l'on écrira de manière plus concise

$$\partial_t P[\rho] = - \int_E d\mathbf{r} \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} \nabla \cdot \left[PM \nabla \mu + \nabla \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} MP \right] \quad (4.5)$$

Dans la suite de ce manuscrit, on travail dans la cadre de l'hypothèse suivante, que l'on verra être pertinente pour les systèmes physiques étudiés :

“ on peut sortir la mobilité $M(\mathbf{r}, [\rho])$ de l'opérateur $\nabla \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})}$ dans l'équation (4.5) ”

de telle sorte que l'équation de Fokker–Planck se réécrit :

$$\partial_t P[\rho] = - \int_E d\mathbf{r} \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} \nabla \cdot \left[PM \nabla \mu + M \nabla \frac{\delta P}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] \quad (4.7)$$

Ceci est possible notamment dans les cas de figure suivants :

1. lorsque M est une constante. C'est notamment le cas pour le modèle actif B, que l'on étudiera au chapitre suivant.
2. lorsque la mobilité M est une fonction purement locale de ρ , *i.e.* $M(\mathbf{r}, [\rho]) = M(\rho(\mathbf{r}))$. Cette situation est assez délicate, sans doute car l'équation (4.5) n'est pas encore bien comprise mathématiquement. Il existe essentiellement deux arguments permettant de conclure que l'hypothèse (4.6) est alors vérifiée. Le premier est que, lorsqu'on calcule l'hydrodynamique fluctuante (4.1) associée à un ensemble de particules passives (sur-amorties) en interaction de paires et soumises à un bruit thermique additif [28], la mobilité $M(\mathbf{r}, [\rho])$ est égale (à une constante près) à $\rho(\mathbf{r})$. Le bilan détaillé macroscopique de ce système, microscopiquement à l'équilibre, est alors assuré seulement si l'équation (4.5) est équivalente à (4.7), *i.e.* seulement si l'hypothèse (4.6) est

vérifiée. Le second argument est associé à la définition de (4.5) en tant que “limite” d’une équation de Fokker–Planck standard, associée à une discréétisation spatiale (symétrique) de l’EDPS (4.1) (voir [109]). Dans ce cas

$$\nabla \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} M(\rho(\mathbf{r})) \quad (4.8)$$

apparaît comme la “limite continue” de

$$\left[\frac{\partial}{\partial \rho(i+1)} - \frac{\partial}{\partial \rho(i-1)} \right] M(\rho(i)) \quad (4.9)$$

qui est bien égale à

$$M(\rho(i)) \left[\frac{\partial}{\partial \rho(i+1)} - \frac{\partial}{\partial \rho(i-1)} \right] \quad (4.10)$$

et qui, quand le pas de discréétisation spatiale tend vers zéro, “tend vers”

$$M(\rho(\mathbf{r})) \nabla \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})}. \quad (4.11)$$

3. lorsque $M(\mathbf{r}, [\rho]) = D(\mathbf{r}, [\rho])\rho(\mathbf{r})$, où $D(\mathbf{r}, [\rho])$ est une diffusivité collective telle que

$$\left[\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta D(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} = 0. \quad (4.12)$$

Ceci est notamment vrai lorsque $D(\mathbf{r}, [\rho]) = D(\tilde{\rho}(\mathbf{r}))$, où $\tilde{\rho} = G * \rho$ avec un noyau de convolution G qui est symétrique par rapport à l’origine [109].

Dans la suite de ce manuscrit, on ne considérera que des cas particuliers de l’équation (4.1) où l’une des trois conditions ci-dessus est satisfaite, si bien que l’on se restreint à partir de maintenant à l’étude “générale” des EDPS de la forme (4.1) satisfaisant l’hypothèse (4.6).

Dans un tel cadre, l’équation (4.1) satisfait le bilan détaillé (au sens de la T-symétrie) si et seulement si, comme dans le cas d’une EDS en dimension finie (voir chapitre 2 et appendice H), le courant de probabilité stationnaire

$$\mathbf{J}_{ss}(\mathbf{r}, [\rho]) \equiv \nabla \cdot \left[M \nabla \mu + M \nabla \frac{\delta \log P_{ss}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] P_{ss}[\rho] \quad (4.13)$$

est nul.

On note que s’il existe une fonctionnelle $\mathcal{F}[\rho]$ (alors qualifiée d’énergie libre) telle que

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})}, \quad (4.14)$$

alors $P_{ss} \propto e^{-\mathcal{F}[\rho]}$ et $\mathbf{J}_{ss} = 0$. Dans la suite, on suppose que $(M(\mathbf{r}, [\rho]))$ est telle que la réciproque est vraie, *i.e.* que $\mathbf{J}_{ss} = 0$ implique l’existence d’une fonctionnelle $\mathcal{F}[\rho]$ satisfaisant (4.14).

4.1.2 Théorème de Schwarz généralisé

Une des formalisations mathématiques rigoureuses de la dérivation fonctionnelle est celle de la dérivation au sens de Fréchet. Dans un tel cadre, une fonctionnelle $\mathcal{F}[\rho]$ suffisamment régulière peut être développée à l'ordre 2 dans le voisinage d'un champ ρ sous la forme :

$$\mathcal{F}[\rho + \phi] \simeq \mathcal{F}[\rho] + \delta\mathcal{F}[\rho](\phi) + \delta^2\mathcal{F}[\rho](\phi, \phi) , \quad (4.15)$$

où $\delta\mathcal{F}[\rho]$ et $\delta^2\mathcal{F}[\rho]$ sont respectivement les différentielles première et seconde de \mathcal{F} en ρ , qui peuvent s'écrire respectivement :

$$\delta\mathcal{F}[\rho](\phi) = \int \frac{\delta\mathcal{F}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r})} \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4.16)$$

et

$$\delta^2\mathcal{F}[\rho](\phi, \psi) = \int \frac{\delta^2\mathcal{F}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}')} \phi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' . \quad (4.17)$$

Notons que les dérivées fonctionnelles première $\frac{\delta\mathcal{F}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r})}$ et seconde $\frac{\delta^2\mathcal{F}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}')}$ de \mathcal{F} , qui sont respectivement définies par les équations (4.16) et (4.17), ne sont pas nécessairement de "vérifiables fonctions", mais peuvent être des "fonctions généralisées" représentant (au sens de Riesz) respectivement les formes linéaire $\delta\mathcal{F}$ et bilinéaire $\delta^2\mathcal{F}$, de la même manière que la "fonction" $\mathbf{r}' \mapsto \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ représente le delta de Dirac en \mathbf{r} : $\delta_{\mathbf{r}}$.

Dans le cadre de la dérivation au sens de Fréchet, on peut montrer [5] que la différentielle seconde de \mathcal{F} en ρ , lorsqu'elle existe, est nécessairement symétrique, *i.e.*

$$\forall \phi, \psi , \quad \delta^2\mathcal{F}[\rho](\phi, \psi) = \delta^2\mathcal{F}[\rho](\psi, \phi) . \quad (4.18)$$

Cette condition de symétrie est une version généralisée du théorème de Schwarz (qui porte sur la commutativité des dérivées partielles en dimension finie). Lorsqu'écrite à l'aide de la dérivée fonctionnelle seconde, et non de la différentielle seconde, elle prend la forme :

$$\frac{\delta^2\mathcal{F}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}')} = \frac{\delta^2\mathcal{F}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r}')\delta\rho(\mathbf{r})} . \quad (4.19)$$

Le théorème de Schwarz généralisé, écrit sous la forme (4.19), est donc à comprendre au sens "des distributions", c'est à dire :

$$\forall \phi, \psi , \quad \int \frac{\delta^2\mathcal{F}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}')} \phi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \int \frac{\delta^2\mathcal{F}[\rho]}{\delta\rho(\mathbf{r}')\delta\rho(\mathbf{r})} \phi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' . \quad (4.20)$$

Comme dans le cas de la dimension finie, le théorème de Schwarz implique une condition nécessaire d'intégrabilité d'une fonction(nelle) $\mu(\mathbf{r}, [\rho])$:

$$\frac{\delta\mu(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r}')} = \frac{\delta\mu(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r})} \quad (4.21)$$

qui est donc à comprendre au sens “des distributions” :

$$\forall \phi, \psi, \int \frac{\delta\mu(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r}')} \phi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \int \frac{\delta\mu(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r})} \phi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' . \quad (4.22)$$

Notons qu'une telle condition d'intégrabilité fonctionnelle semble n'avoir été utilisée en physique de la matière active qu'en de rare occasion [50, 70], et à chaque fois dans des circonstances telles que la dérivée fonctionnelle $\frac{\delta\mu}{\delta\rho}$ soit une fonction, et non une distribution générique. Pour illustrer son fonctionnement quand $\frac{\delta\mu}{\delta\rho}$ n'est pas une distribution régulière (donc non associée à une fonction), considérons par exemple le cas où $\mu(x, [\rho]) = \partial_x^k \rho(x)$ en une dimension. La dérivée fonctionnelle est

$$\frac{\delta\mu(x, [\rho])}{\delta\rho(y)} = \partial_x^k \delta(x - y) \quad (4.23)$$

et la condition d'intégrabilité de Schwarz s'écrit alors

$$\int [\psi(x)\phi^{(k)}(x) - \phi(x)\psi^{(k)}(x)] dx = 0 . \quad (4.24)$$

Si l'on réalise k intégrations par parties dans le terme de gauche de l'équation ci-dessus, celle-ci se réécrit :

$$\int \psi(x)\phi^{(k)}(x) [1 - (-1)^k] dx = 0 \quad (4.25)$$

qui est vrai pour un couple (ϕ, ψ) quelconque si et seulement si k est pair. Dans ce cas, l'énergie libre est donnée par :

$$\mathcal{F}[\rho] = \frac{(-1)^n}{2} \int [\partial_x^n \rho(x)]^2 dx , \quad \text{avec } n \equiv \frac{k}{2} . \quad (4.26)$$

Notons que la condition k pair se voit immédiatement au niveau distributionnel, puisque la condition de Schwarz s'écrit $\partial_x^k \delta(x - y) = \partial_y^k \delta(x - y)$, c'est à dire $\partial_x^k \delta(x - y)[1 - (-1)^k] = 0$.

Enfin, notons que dans tous les cas que nous considérerons dans la suite de ce manuscrit, ρ appartient à un ensemble de fonctions \mathbb{F} simplement connexe. Par exemple, si ρ est un champ de densité conservée², alors \mathbb{F} est convexe et donc simplement connexe (car étoilé par rapport à n'importe lequel de ses éléments). Ce qui implique que la condition d'intégrabilité de Schwarz est non seulement nécessaire mais également suffisante [58].

2. Il faudrait également faire des hypothèses pour que \mathbb{F} soit complet. Par exemple que ρ soit de carré intégrable, et défini à un ensemble dénombrable de valeurs près.

4.1.3 Dérivée extérieure fonctionnelle

On introduit maintenant un cadre formel pour faire de la géométrie différentielle sur l'espace \mathbb{F} des champs ρ . Cette structure sera surtout utile au chapitre suivant mais nous permettra déjà dans ce chapitre, d'une part de préparer le chapitre suivant, et d'autre part de simplifier quelques notations. On définit l'espace fonctionnel

$$\mathbb{H} = \left\{ \text{fonctions } \phi : E \longrightarrow \mathbb{R} \text{ telles que } \int_E \phi = 0 \right\} \quad (4.27)$$

Notons que la contrainte d'intégrale nulle est nécessaire si l'on veut ajouter une fonction ϕ à un champ conservé ρ sans modifier $\int_E \rho$. En suivant [84], on définit une structure (formelle) de fibré tangent $T\mathbb{F}$ associé à \mathbb{F} en posant

$$T\mathbb{F} \equiv \mathbb{F} \times \mathbb{H}. \quad (4.28)$$

Les “sections”

$$\begin{aligned} \phi : \mathbb{F} &\longrightarrow \mathbb{H} \\ \rho &\longmapsto \phi(\cdot, [\rho]) \end{aligned}$$

du fibré $T\mathbb{F}$ ainsi défini (qui est trivial, au sens des fibrés), *i.e.* les “champs de vecteurs fonctionnels” sur \mathbb{F} , sont donc telles que, pour tout ρ ,

$$\phi(\cdot, [\rho]) \in T_\rho \mathbb{F} = \mathbb{H}, \quad \text{i.e.} \quad \int_E \phi(\mathbf{r}, [\rho]) \, d\mathbf{r} = 0. \quad (4.29)$$

Ensuite, à toute application μ , fonction de la variable \mathbf{r} et fonctionnelle de ρ :

$$\begin{aligned} \mu : E \times \mathbb{F} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (\mathbf{r}, \rho) &\longmapsto \mu(\mathbf{r}, [\rho]) \end{aligned}$$

on associe la 1-forme différentielle fonctionnelle (notée en gras) :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu} : T\mathbb{F} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \phi &\longmapsto \int_E \mu(\mathbf{r}, [\rho]) \phi(\mathbf{r}, [\rho]) \, d\mathbf{r} \end{aligned}$$

où $\boldsymbol{\mu}[\rho]$ est ainsi un élément de $T_\rho^* \mathbb{F}$, *i.e.* une application linéaire sur $T_\rho \mathbb{F} = \mathbb{H}$.

Par analogie avec la géométrie différentielle en dimension finie, on introduit maintenant la dérivée extérieure fonctionnelle de $\boldsymbol{\mu}$, notée $d\boldsymbol{\mu}$, définie comme (deux fois) la partie antisymétrique de la différentielle $\delta\mu$. Pour tout champ ρ et toute paire (ϕ, ψ) de fonctions de \mathbf{r} , on a :

$$d\boldsymbol{\mu}[\rho](\phi, \psi) = \delta\mu(\mathbf{r}, [\rho])(\phi, \psi) - \delta\mu(\mathbf{r}, [\rho])(\psi, \phi) \quad (4.30)$$

c'est à dire

$$d\boldsymbol{\mu}[\rho](\phi, \psi) = \int \left[\frac{\delta\mu(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r}')} - \frac{\delta\mu(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r})} \right] \phi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} \, d\mathbf{r}'. \quad (4.31)$$

La condition d'intégrabilité de Schwarz se traduit alors simplement comme l'annullation de la dérivée extérieure fonctionnelle de μ :

$$\mathrm{d}\mu = 0 . \quad (4.32)$$

De plus, si, comme en dimension finie, on définit la dérivée extérieure des fonctionnelle (0-formes) comme la simple différentielle, *i.e.*

$$\mathrm{d}\mathcal{F}[\rho](\phi) \equiv \delta\mathcal{F}[\rho](\phi) \quad (4.33)$$

alors on a bien

$$\mathrm{d}(\mathrm{d}\mathcal{F}) = 0 \quad (4.34)$$

i.e. la dérivée extérieure fonctionnelle satisfait

$$\mathrm{d}^2 = 0 . \quad (4.35)$$

Autrement dit, l'image de la dérivée extérieure fonctionnelle (des 0-formes) est incluse dans le noyau de la dérivée extérieure fonctionnelle (des 1-formes). Enfin, la remarque faite précédemment sur le fait qu'on ne considérera que des situations où la condition de Schwarz n'est pas seulement nécessaire mais également suffisante, nous permet de conclure que, dans tous les cas considérés dans la suite, l'image de d (appliquée au 0-formes) est égale au noyau de d (appliquée aux 1-formes), *i.e.*

$$\mathrm{Im}(\mathrm{d}) = \mathrm{Ker}(\mathrm{d}) . \quad (4.36)$$

4.2 Particules actives interagissant par quorum-sensing ou taxie : Mapping vers l'équilibre

Dans cette section, on illustre comment les méthodes, discutées dans la section 4.1, peuvent servir à étudier la physique de systèmes actifs concrets.

4.2.1 QSAPS, bilan détaillé macroscopique et MIPS

Dans cette section, on considère un ensemble de particules actives $i = 1, \dots, N$ satisfaisant les dynamiques microscopiques :

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v^i \mathbf{u}_i + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\eta}_i, \quad (4.37)$$

où \mathbf{u}_i est l'orientation de l'autopropulsion de la i ème particule, et où les $\boldsymbol{\eta}_i(t)$ sont des bruits blancs gaussien centrés tels que $\langle \eta_i^\alpha(t) \eta_j^\beta(t') \rangle = \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. De plus, on suppose que les particules interagissent *via* quorum-sensing, et on modélise cette interaction par une dépendance de l'amplitude v^i de l'autopropulsion de chaque particule i en la position de l'ensemble des particules : $v^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Que la réorientation dynamique de chaque \mathbf{u}_i se fasse *via* des culbutes ponctuelles (RTPs) à un taux constant α , *via* une diffusion angulaire (ABPs) sur \mathbb{S}^{d-1} de constante D_r , ou *via* un processus d'Ornstein–Uhlenbeck (AOUPs) de la forme

$$\dot{\mathbf{u}}_i = \frac{1}{\tau_0} \mathbf{u}_i + \sqrt{\frac{2}{d\tau_0}} \boldsymbol{\xi}_i \quad (4.38)$$

où τ_0 est le temps de persistance et où les $\boldsymbol{\xi}_i$ sont des bruits blancs gaussien centrés tels que $\langle \xi_i^\alpha(t) \xi_j^\beta(t') \rangle = \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$, on peut montrer, en utilisant les méthodes exposées au chapitre précédent (voir appendices J et K), que la limite diffusive de la dynamique de l'ensemble des particules actives s'écrit :

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left\{ D\phi \nabla_{\mathbf{r}_i} \left[\frac{1}{2} \ln D \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} [D\phi] \right\} \quad (4.39)$$

avec la diffusivité

$$D(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv D_t + \frac{v^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)^2 \tau}{d}. \quad (4.40)$$

où le temps de persistance τ est donné par :

$$\tau = \frac{1}{\alpha + (d-1)D_r} \quad \text{ou} \quad \tau = \tau_0 \quad (4.41)$$

respectivement pour des RTPs\ABPs ou pour des AOUPS. On suppose alors qu'il existe une application

$$\begin{aligned} v : E \times \mathbb{F} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (\mathbf{r}, \rho) &\longmapsto v(\mathbf{r}, [\rho]) \end{aligned}$$

telle que pour tout $i = 1, \dots, N$,

$$v^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = v(\mathbf{r}_i, \hat{\rho}) . \quad (4.42)$$

On peut alors déduire (voir chapitre précédent) que l'hydrodynamique fluctuante du champ de densité ρ est

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ D(\mathbf{r}, [\rho]) \rho(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\rho])|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} - \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\rho])\rho} \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (4.43)$$

où $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t)$ est un champ de vecteurs gaussien centré tel que $\langle \Lambda^\alpha(\mathbf{r}, t) \Lambda^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$, la fonctionnelle de diffusivité est

$$D(\mathbf{r}, [\rho]) \equiv D_t + \frac{v(\mathbf{r}, [\rho])^2 \tau}{d} , \quad (4.44)$$

et le potentiel chimique μ est

$$\mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\rho]) \equiv \frac{1}{2} \log D(\mathbf{r}, [\rho]) + \log \rho(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \frac{\delta D(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} . \quad (4.45)$$

On suppose maintenant que la fonctionnelle d'autopropulsion est donnée par une fonction locale d'une convolution de la densité

$$v(\mathbf{r}, [\rho]) = v(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) , \quad \text{où} \quad \tilde{\rho}(\mathbf{r}) \equiv \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' , \quad (4.46)$$

où le noyau de convolution G vérifie $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = G(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$. Ceci implique notamment que

$$\left[\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta v(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} = \nabla G(0) = 0 , \quad (4.47)$$

et donc que

$$\left[\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta D(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} = 0 . \quad (4.48)$$

Ainsi l'équation (4.43) peut se réécrire

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ D(\mathbf{r}, [\rho]) \rho(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}, [\rho]) - \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\rho])\rho} \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (4.49)$$

avec

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) \equiv \frac{1}{2} \log D(\mathbf{r}, [\rho]) + \log \rho(\mathbf{r}) . \quad (4.50)$$

On cherche alors à déterminer dans quelles situations l'hydrodynamique fluctuante (4.49) est réversible (au sens du T-bilan détaillé). Comme on l'a discuté à la section précédente, dans un tel contexte, la réversibilité est équivalente à l'existence d'un fonctionnelle d'énergie libre $\mathcal{F}[\rho]$) telle que

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})}, \quad (4.51)$$

qui est elle-même équivalente à l'annulation de la dérivée extérieure fonctionnelle de $\boldsymbol{\mu}$ (la forme linéaire associée à μ) :

$$d\boldsymbol{\mu} = 0. \quad (4.52)$$

Injectant l'expression de μ donnée par (4.50) dans la condition nécessaire et suffisante (4.52) (CNS), on obtient

$$\frac{1}{2D(\mathbf{r}, [\rho])} \frac{\delta D(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r}')} + \frac{1}{\rho(\mathbf{r})} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{2D(\mathbf{r}', [\rho])} \frac{\delta D(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} + \frac{1}{\rho(\mathbf{r}')} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (4.53)$$

Le terme purement local $\log \rho(\mathbf{r})$ dans l'expression (4.50) de μ — qui donne lieu aux diracs dans l'équation ci-dessus — est toujours intégrable puisque

$$\frac{1}{\rho(\mathbf{r})} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}')} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.54)$$

La CNS d'intégrabilité se réduit alors à

$$\frac{1}{D(\mathbf{r}, [\rho])} \frac{\delta D(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r}')} = \frac{1}{D(\mathbf{r}', [\rho])} \frac{\delta D(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})}. \quad (4.55)$$

En utilisant les expressions (4.44) et (4.46), elle se réécrit

$$\frac{v(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) v'(\tilde{\rho}(\mathbf{r}))}{D_t + d^{-1}\tau v^2(\tilde{\rho}(\mathbf{r}))} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{v(\tilde{\rho}(\mathbf{r}')) v'(\tilde{\rho}(\mathbf{r}'))}{D_t + d^{-1}\tau v^2(\tilde{\rho}(\mathbf{r}'))} G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (4.56)$$

Le noyau G étant symétrique par rapport à l'origine, on a finalement

$$\frac{v(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) v'(\tilde{\rho}(\mathbf{r}))}{D_t + d^{-1}\tau v^2(\tilde{\rho}(\mathbf{r}))} = \frac{v(\tilde{\rho}(\mathbf{r}')) v'(\tilde{\rho}(\mathbf{r}'))}{D_t + d^{-1}\tau v^2(\tilde{\rho}(\mathbf{r}'))}. \quad (4.57)$$

Les termes de part et d'autre de l'équation ci-dessus étant des fonctions de deux variables \mathbf{r} et \mathbf{r}' indépendantes, on déduit qu'ils sont tous deux égaux à une certaine constante notée a . La CNS d'intégrabilité devient donc :

$$v(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) v'(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) = \alpha \left(D_t + \frac{\tau}{d} v^2(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) \right), \quad (4.58)$$

ce qui se réécrit

$$\frac{d}{2\tau} \left(D_t + \frac{\tau}{d} v^2(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) \right)' = \alpha \left(D_t + \frac{\tau}{d} v^2(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) \right) . \quad (4.59)$$

On conclut finalement que

$$v(\tilde{\rho}(\mathbf{r})) = \pm \sqrt{A e^{\frac{2\tau\alpha}{d}\tilde{\rho}(\mathbf{r})} - \frac{dD_t}{\tau}} \quad (4.60)$$

où

$$A \in \mathbb{R}_+ \quad \text{et} \quad \alpha \in \mathbb{R} . \quad (4.61)$$

On a ainsi répertorié l'ensemble des fonctions $v(\tilde{\rho})$ donnant lieu à une hydrodynamique fluctuante (4.49) satisfaisant le bilan détaillé.

Quelques remarques s'imposent. Tout d'abord, notons que pour que l'autopropulsion $v(\tilde{\rho})$ donnée par la formule (4.60) soit correctement définie, la densité convolée $\tilde{\rho}$ (et la constante α) doit être telle que

$$\alpha\tilde{\rho} \geq \frac{d}{2\tau} \log \frac{dD_t}{\tau A} . \quad (4.62)$$

Ensuite, lorsque $D_t = 0$, on retrouve la forme d'autopropulsion $v(\tilde{\rho})$ étant connue pour mener à une équation macroscopique réversible [50] :

$$v(\tilde{\rho}) \propto e^{\frac{\tau\alpha}{d}\tilde{\rho}} . \quad (4.63)$$

Enfin, pour une fonction $v(\tilde{\rho})$, le potentiel chimique μ s'écrit (à une constante additive inessentielle près) :

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \quad (4.64)$$

avec l'énergie libre

$$\mathcal{F}[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}) \log \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{\tau}{2d} \int \alpha G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' , \quad (4.65)$$

qui coïncide avec l'énergie libre d'un ensemble de particules passives interagissant *via* des forces de paires dérivant du potentiel αG . Ceci donne une explication heuristique de MIPS puisque, si G est un noyau positif et que les particules actives ralentissent quand la densité augmente, *i.e.* $\alpha < 0$, alors le systèmes se comporte macroscopiquement comme un ensemble de particules passives interagissant *via* un potentiel attractif³.

3. Pour qu'un tel potentiel αG donne éventuellement lieu à une transition liquide-gaz et non à une condensation, il faut en fait que l'intégrale de G soit négative, et donc que G ne soit positif que dans un certain intervalle de distance. On discute plus amplement ce point à la section suivante, dans le cadre du collapse chimiotactique.

4.2.2 TAPS et mapping vers l'équilibre

Le travail présenté dans cette section a fait l'objet de la publication [P5].

De la dynamique microscopique à l'hydrodynamique fluctuante

On considère un ensemble de N particules actives où chaque particule i de position \mathbf{r}_i et d'orientation \mathbf{u}_i suit la dynamique

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v^i \mathbf{u}_i + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\eta}_i , \quad (4.66)$$

où $\boldsymbol{\eta}_i(t)$ sont des processus gaussiens centrés tels que $\langle \eta_i^\alpha(t) \eta_j^\beta(t') \rangle = \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta} \delta(t-t')$. De plus, on suppose que les particules actives interagissent de manière tactique entre elles *via* un champ c qui dépend de la position de chacune des particules et dont la valeur ressentie par chaque particule i de position \mathbf{r}_i est donnée par une fonction $c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Signalons que l'on adopte cette formation — *i.e.* $c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ est le champ c “mesuré en \mathbf{r}_i ” — pour coller aux notations du chapitre précédent et des appendices J et K. Par la suite, l'équation (4.74) permettra de donner une allure plus conventionnelle au champ c .

- Dans le cas où les particules sont des AOUPs, on suppose que la dynamique de réorientation des \mathbf{u}_i est encore donnée par l'équation (4.38), et on modélise la taxie par une dépendance linéaire de l'amplitude de l'autopropulsion v^i en le gradient de c_i :

$$v^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = v_0 - v_1 \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) , \quad (4.67)$$

où v_0 est une constante positive et v_1 une constante de signe quelconque. On constate que lorsque v_1 est positif (respectivement négatif), la particule i a tendance à ralentir (respectivement accélérer) lorsqu'elle est “alignée avec $\nabla_{\mathbf{r}_i} c_i$ ”, *i.e.* quand $\mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i > 0$, tandis qu'elle a tendance à accélérer (respectivement ralentir) quand elle est “anti-alignée avec $\nabla_{\mathbf{r}_i} c_i$ ”, *i.e.* quand $\mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i < 0$. Qualitativement, la particule a ainsi tendance à “descendre le gradient de c ” lorsque $v_1 > 0$, où à “remonter le gradient de c ” lorsque $v_1 < 0$.

- Dans le cas où les particules sont des ABPs ou des RTPs, on modélise la taxie de deux manières différentes. Soit, comme pour les AOUPs, *via* une dépendance de l'amplitude v^i de l'autopropulsion en le gradient de c_i suivant l'équation (4.67). Soit suivant une dépendance des paramètres des dynamiques de réorientation en le gradient de c_i : dans le cas des ABPs, la diffusivité rotationnelle (au sens d'Ito) devient

$$D_r^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \Theta_0 + \Theta_1 \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (4.68)$$

tandis que dans le cas des RTPs, le taux de tumble devient

$$\alpha^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \alpha_0 + \alpha_1 \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (4.69)$$

où Θ_0 et α_0 sont des constantes positives, et où Θ_1 et α_1 sont des constantes quelconques⁴. On constate que, lorsque Θ_1 ou α_1 sont positifs, la particule i a tendance à changer plus souvent de direction lorsqu'elle est alignée avec $\nabla_{\mathbf{r}_i} c_i$ tandis que la persistance de son orientation augmente quand elle est anti-alignée avec $\nabla_{\mathbf{r}_i} c_i$. Bien évidemment, des signes négatifs pour Θ_1 ou α_1 conduisent au phénomène inverse.

En appliquant les méthodes de coarse-graining présentées au chapitre précédent (voir appendices J et K), on montre que la limite diffusive commune à l'ensemble de ces particules prend la forme suivante :

$$\partial_t \phi = - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left\{ -D\phi \nabla_{\mathbf{r}_i} \left[\frac{\chi}{D} c_i \right] - D \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi \right\} \quad (4.70)$$

avec les constantes

$$D \equiv D_t + \frac{v_0^2 \tau}{d} \quad \text{et} \quad \chi \equiv \frac{v_1}{d} + \frac{v_0}{d} \frac{\alpha_1 + (d-1)\Theta_1}{\alpha_0 + (d-1)\Theta_0}. \quad (4.71)$$

et où le temps de persistance τ est donné par

$$\tau = \frac{1}{\alpha_0 + (d-1)\Theta_0} \quad \text{ou} \quad \tau = \tau_0 \quad (4.72)$$

respectivement pour des ABPs\RTPs et des AOUPs. On suppose alors qu'il existe une application

$$\begin{aligned} c : E \times \mathbb{F} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (\mathbf{r}, \rho) &\longmapsto c(\mathbf{r}, [\rho]) \end{aligned}$$

qui vérifie

$$\nabla_{\mathbf{r}} \left. \frac{\delta c(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} = 0 \quad (4.73)$$

et qui est telle que

$$c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = c(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}]) \quad (4.74)$$

pour tout $i = 1, \dots, N$. On peut alors montrer, comme on l'a vu au chapitre précédent, que l'hydrodynamique fluctuante du champ de densité ρ des particules actives est donnée par

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[D\rho(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}, [\rho]) + \sqrt{2D\rho(\mathbf{r})} \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (4.75)$$

4. On suppose que la dynamique est telle que les D_r^i et α^i restent toujours positifs.

avec le potentiel chimique

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \frac{\chi}{D} c(\mathbf{r}, [\rho]) + \log \rho(\mathbf{r}) \quad (4.76)$$

et où $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ est un champ de vecteurs gaussien centré tel que $\langle \Lambda^\alpha(\mathbf{r}, t) \Lambda^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$.

Réversibilité et système passif équivalent

Supposons que le champ c soit donné par

$$c(\mathbf{r}, [\rho]) = \int K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{p-1}) \rho(\mathbf{r}_1) \dots \rho(\mathbf{r}_{p-1}) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{p-1}, \quad (4.77)$$

où K est *a priori* quelconque. Pour déterminer dans quelles situations les modèles de particules actives tactiques (TAPs) décrits dans cette section — où l'interaction tactique est mediée par un champ c donné par (4.77) — sont macroscopiquement réversibles, on calcul la dérivée extérieur de (la 1-forme associée à) μ . Un calcul rapide donne que $d\mu = 0$ si et seulement si

$$\sum_{i=1}^{p-1} \int [K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i = \mathbf{r}', \dots, \mathbf{r}_{p-1}) - K(\mathbf{r}', \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i = \mathbf{r}, \dots, \mathbf{r}_{p-1})] \prod_{j=1, j \neq i}^{p-1} \rho(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j = 0. \quad (4.78)$$

On constate qu'il suffit que K soit invariant par permutation de toutes ses variables pour que $d\mu = 0$, ce que l'on suppose dans la suite de cette section. Dans ce cas, le potentiel chimique dérive bien d'une énergie libre :

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \quad (4.79)$$

avec

$$\mathcal{F}[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}) \log \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{\chi}{p! D} \int K(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_p) \rho(\mathbf{r}_1) \dots \rho(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_p. \quad (4.80)$$

On remarque que les équations (4.75), (4.79) et (4.80) décrivent également l'hydrodynamique fluctuante d'un ensemble de N colloïdes browniens interagissant via des forces dérivant d'un potentiel à p corps. Plus précisément, un ensemble de N particules satisfaisant la dynamique d'équilibre suivante :

$$\gamma \dot{\mathbf{r}}_i = - \sum_{j_1, \dots, j_{p-1}} \nabla_{\mathbf{r}_i} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{j_1}, \dots, \mathbf{r}_{j_{p-1}}) + \sqrt{2\gamma k_B T} \boldsymbol{\eta}_i \quad (4.81)$$

est macroscopiquement décrit par les équations (4.75), (4.79) et (4.80) avec les relations de correspondance suivantes :

$$\gamma^{-1}k_B T \Leftrightarrow D \quad (4.82)$$

$$\gamma^{-1}V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_p) \Leftrightarrow \chi K(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_p) \quad (4.83)$$

Le mapping (4.82)–(4.83) établit une connexion macroscopique entre les dynamique active (hors d'équilibre) (4.66) à (4.69) et la dynamique d'équilibre (4.81), qui diffèrent fortement à l'échelle microscopique. En particulier, les rôles joués par K et V sont de natures très différentes, bien qu'ils jouent un rôle similaire dans la dynamique macroscopique du champ de densité ρ . En cela, l'approche présentée dans cette section diffère drastiquement de certaines approches alternatives qui consistent à modéliser la chimiotaxie cellulaire directement à l'échelle microscopique par des dynamiques browniennes dans lesquelles le champ c joue le rôle d'un potentiel [27]. Dans de telles approches, l'équivalence macroscopique (avec une dynamique d'équilibre), décrite dans cette section, provient directement d'une correspondance microscopique.

Dans la suite de cette section on explore la correspondance (4.82)–(4.83) à travers deux exemples distincts.

Phases lamellaire, micellaire, et cristalline

De récents développements expérimentaux, permettant de contrôler l'autopropulsion individuelle de chacune des particules actives, et utilisant des radiations lumineuses couplées avec des boucles de rétroaction [10, 62], rendent la réalisation de la dynamique (4.66)–(4.67) expérimentalement possible. Pour explorer la physique ainsi rendue accessible, on considère, dans ce paragraphe, un cas simple où le champ c est obtenu en convolant la densité ρ avec un noyau invariant par translation $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ de la forme :

$$K(\mathbf{r}) = A e^{\frac{-\sigma_0^2}{\sigma_0^2 - |\mathbf{r}|^2}} H(\sigma_0 - |\mathbf{r}|) + \varepsilon e^{\frac{-\sigma_1^2}{\sigma_1^2 - |\mathbf{r}|^2}} H(\sigma_1 - |\mathbf{r}|) \quad (4.84)$$

où $H(\cdot)$ est la fonction de Heaviside. Le noyau K est la superposition de deux fonctions “en cloche” d’amplitudes respectives A et ε , avec $A > \varepsilon > 0$, et de longueur caractéristiques respective σ_0 et σ_1 , avec $\sigma_1 > \sigma_0 > 0$ (voir figure 4.2–(a)). On rapporte dans la ligne supérieure de la figure 4.1 les états stationnaires de simulations de la dynamique de RTPs satisfaisant les équations (4.66)–(4.67). Lorsque la densité moyenne ρ_0 augmente le système passe par une série de transitions de phases : un gaz désordonné (que l'on n'affiche pas) est tout d'abord remplacé par un cristal de “micelles”, chacune comprenant un nombre croissant de particules à mesure que ρ_0 augmente (1ère colonne), jusqu'à ce qu'une transition vers une

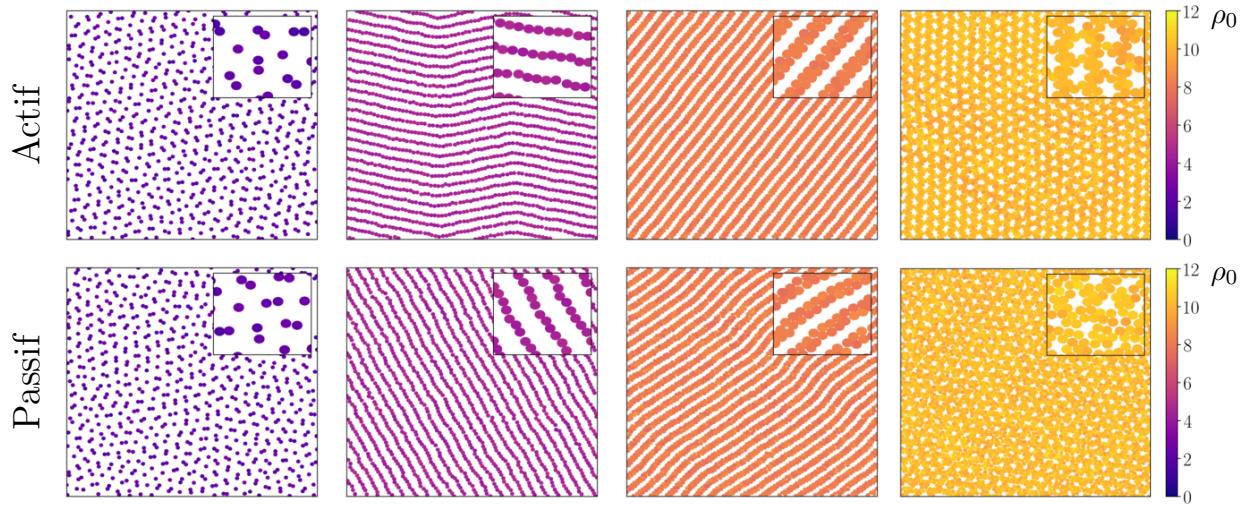


Figure 4.1 – Figure extraite de la publication [P5]. Simulations de la dynamique active de RTPs (4.66)–(4.67) (ligne du haut) et de la dynamique passive (4.81) (ligne du bas), satisfaisant les conditions du mapping (4.82)–(4.83) avec $K(\mathbf{r})$ défini par (4.84). Les couleurs représentent la densité locale de particules. Les paramètres sont : $v_0 = 1$, $v_1 = 0.2$, $\alpha_0 = 50$, $\sigma_0 = 0.3$, $\sigma_1 = 1$, $\varepsilon = 5$, $A = 10$, $D_t = \alpha_1 = \Theta_0 = \Theta_1 = 0$, $dt = 10^{-3}$. Les clichés correspondent au temps $t = 20\,000$ dans un système de taille 20×20 . De la gauche vers la droite, $\rho_0 \equiv N/L^2$ est égal à 2, 4, 8 et 10.

phase lamellaire se produise (2nd colonne). Augmentant davantage ρ_0 , le nombre de particules composant les bandes augmente (3ème colonnes). A haute densité ρ_0 , un “cristal inverse” apparaît (4ème colonne), dans lequel les particules et les “trous” ont échangé leurs rôles respectifs par rapport au cristal de micelles initial. La physique sous-jacente peut être étudiée *via* le mapping vers l'équilibre : en effet, les simulations numériques correspondant au système passif (4.81) pour des paramètres satisfaisant les relations de correspondance (4.82)–(4.83), coïncident parfaitement avec celle des TAPS (voir seconde ligne de la figure 4.1). Dans le système passif, le noyau (4.84) correspond à un potentiel de paire comprenant un cœur répulsif entouré d'un secteur en anneau moins répulsif. Il a été montré *via* des simulations de type Monte Carlo que des systèmes passifs avec des potentiels similaires conduisent à une variété de phases exotiques [71, 48, 106], qui sont ainsi rendues accessibles aux systèmes actifs *via* le mapping (4.82)–(4.83).

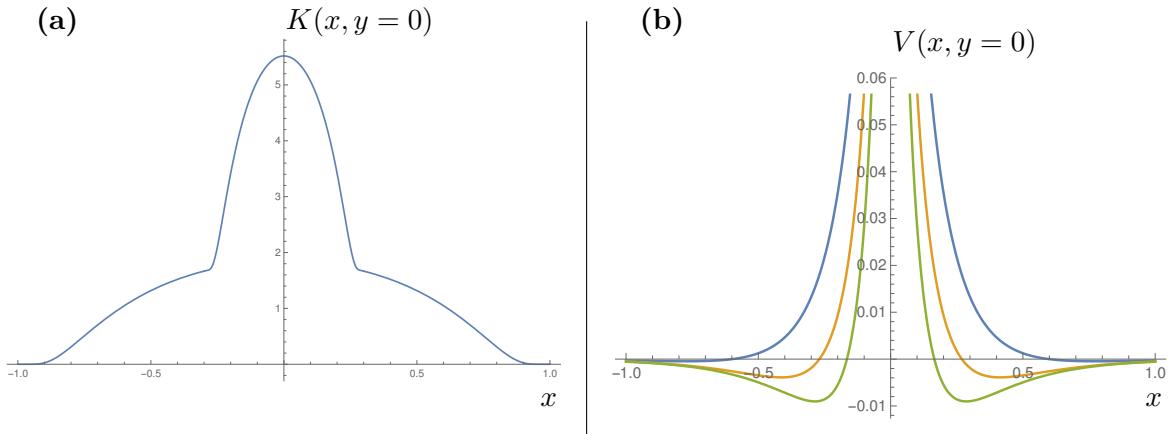


Figure 4.2 – (a) : coupe selon $y = 0$ du graphe du noyau convolutionnel $K(\mathbf{r})$ de l'équation (4.84), pour les paramètres de la figure 4.1. (b) coupe selon $y = 0$ du potentiel $V(\mathbf{r})$ donné par l'équation (4.92), pour $\ell_r = 1/6, 1/8, 1/10$ respectivement en bleu, orange et vert. Les autres paramètres de $V(\mathbf{r})$ correspondent à ceux de la figure 4.3.

Chimiotactisme : compétition entre chimio-attractif et chimio-répulsif

Si des champs $c(\mathbf{r}, [\rho])$ de la forme (4.77) peuvent être engendrés artificiellement en laboratoire, certains sont également observables dans la nature. Dans les systèmes biologiques, les interactions tactiques sont souvent mediées par des agents chimiques (produits par les particules actives) qui se diffusent dans l'environnement, menant ainsi naturellement à un couplage linéaire entre c et ρ . Inspiré par le chimiotactisme bactérien, on considère un modèle de RTPs dans lequel les particules actives interagissent *via* des molécules chimio-attractives (“chemo-attractant”) et des molécules chimio-répulsives (“chemo-repellent”) dont on note c_a et c_r les concentrations respectives. On suppose que les RTPs suivent la dynamique (4.66) (avec une amplitude d'autopropulsion v_0 constante) et que le taux de tumble de la particule i est donné par

$$\alpha = \alpha_0 - \alpha_1^a \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_a + \alpha_1^r \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_r . \quad (4.85)$$

Des constantes α_1^a et α_1^r toutes deux positives biaisent la marche aléatoire des particules vers les régions de haute c_a et de basse c_r . Comme nous l'avons discuté à la section 1.2.3, si les molécules signalétiques sont produites à un taux λ_n , diffusent selon une constante de diffusion ν_n , et se dégradent à un taux ω_n , où $n \in \{a, r\}$, on peut considérer que, sur des échelles de temps suffisamment grandes, leurs

dynamiques suivent de manière quasi-statique celle du champ ρ selon l'équation :

$$\left(\Delta - \frac{\omega_n}{\nu_n} \right) c = -\frac{\lambda_n}{\nu_n} \rho . \quad (4.86)$$

Si on note G_n la fonction de Green de l'équation ci-dessus, la solution générale de celle-ci s'écrit :

$$c_n = \frac{\lambda_n}{\nu_n} G_n * \rho . \quad (4.87)$$

Le système appartient ainsi à la classe décrite par l'équation (4.77) avec $p = 2$. Introduisant les longueurs d'écrantage

$$\ell_n \equiv \sqrt{\frac{\nu_n}{\omega_n}} , \quad (4.88)$$

les fonctions de Green s'écrivent

$$G_n(\mathbf{r}) = \frac{\ell_n}{2} e^{-|\mathbf{r}|/\ell_n} \quad (4.89)$$

en 1D,

$$G_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} K_0 \left(\frac{|\mathbf{r}|}{\ell_n} \right) \quad (4.90)$$

en 2D, où K_0 est la fonction de Bessel modifiée du second type et d'ordre 0, et

$$G_n(\mathbf{r}) = \frac{e^{-|\mathbf{r}|/\ell_n}}{4\pi|\mathbf{r}|} \quad (4.91)$$

en 3D.

Le mapping (4.82)–(4.83) assure alors que le système actif considéré est équivalent, à l'échelle macroscopique, à un système de particules brownienne (satisfaisant (4.81)) interagissant *via* des forces qui dérivent du potentiel (voir figure 4.2–(b)) :

$$V(\mathbf{r}) = \frac{\gamma v_0}{d\alpha_0} \left[\frac{\alpha_1^r \lambda_r}{\nu_r} G_r(\mathbf{r}) - \frac{\alpha_1^a \lambda_a}{\nu_a} G_a(\mathbf{r}) \right] . \quad (4.92)$$

La superposition d'agents chimio-attractifs et chimio-répulsifs correspond ainsi, à l'échelle macroscopique, à un système d'équilibre avec interactions attractives et répulsives. Considérons le cas où $\alpha_1^r > \alpha_1^a$ et $\ell_r \leq \ell_a$. La physique du système chimiotactique correspond ainsi à celle du problème bien connu des interactions à cœur dur répulsif et à queues attractives. Le système est purement répulsif (voir figure 4.2–(b), courbe bleue) pour $\ell_r = \ell_a$, menant ainsi à une phase gazeuse (colonne de gauche de la figure 4.3). Lorsque ℓ_r diminue, des queues attractives se

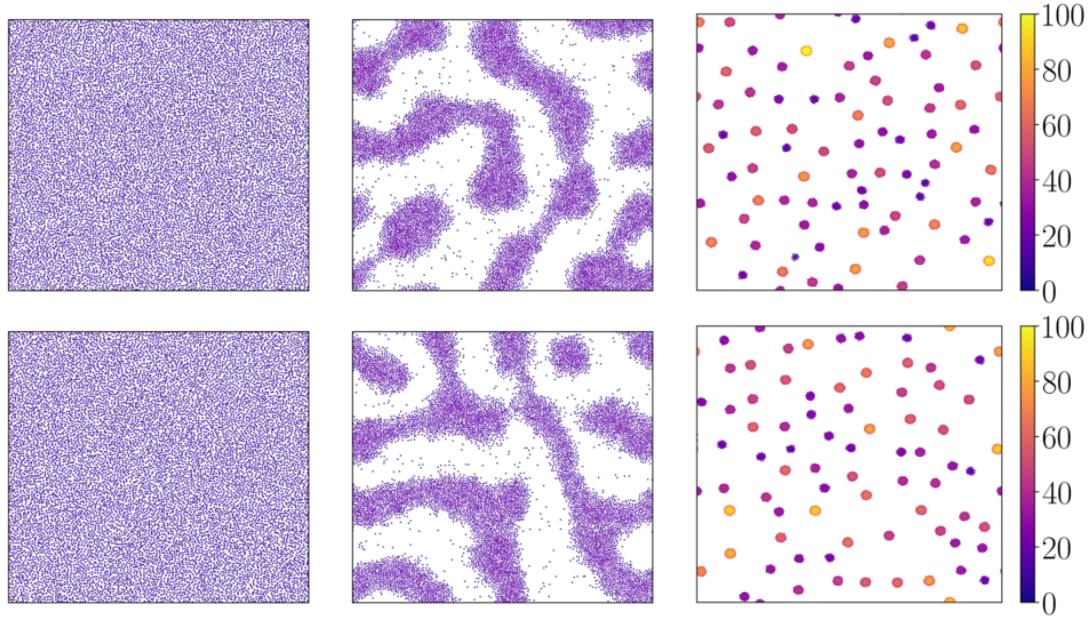


Figure 4.3 – Figure extraite de la publication [P5]. Simulations des dynamiques active (4.66)–(4.85) (ligne du haut) et passive (4.81)–(4.92) (ligne du bas), sous les conditions du mapping (4.82)–(4.83). La couleur représente la densité locale. De gauche à droite $\ell_r = 1/6, 1/8, 1/10$. Le collapse chimiотactique a lieu dès lors que $\bar{V} < 0$, *i.e.* en dessous de $\ell_r = 1/8.2$. Paramètres : $L = 40$, $\rho_0 = 7$, $\lambda_a/2\pi\nu_a = 0.05$, $\ell_a = 0.25$, $\lambda_r/2\pi\nu_r = 0.2$, $\alpha_0 = 100$, $\alpha_1^{r,a} = 200$, $v_0 = 1$, $T^{-1} = 200$, $\gamma = 1$, $v_1 = \Theta_0 = \Theta_1 = D_t = 0$, $dt = 10^{-3}$. Les images correspondent à un temps de simulation $t = 10^4$.

développent (voir figure 4.2–(b), courbe orange), rendant ainsi possible une coexistence liquide–gaz (colonne centrale de la figure 4.3). Pour des longueurs ℓ_r encore plus petites (cf. figure 4.2–(b), courbe verte), la phase liquide devient thermodynamiquement instable et le système “collapse” (colonne de droite de la figure 4.3) dès lors que [100]

$$\bar{V} \equiv \int V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} < 0 . \quad (4.93)$$

On rapporte dans la figure 4.3, les résultats de simulations numériques des dynamiques active (4.66)–(4.85) (ligne du haut) et passive (4.81)–(4.92) (ligne du bas), en utilisant la fonction de Green 2D donnée par l'équation (4.90), et en faisant varier ℓ_r (qui diminue de gauche à droite dans la figure 4.3). A nouveau, malgré les différences fondamentales entre leurs dynamiques et interactions microscopiques, la physique de grande échelle de ces deux systèmes est difficilement différentiable.

4.3 Intégrabilité d'un champ scalaire

Dans cette section, on suppose que la dimension de l'espace “physique” ou “réel” E , dans lequel les particules actives se déplacent, est de dimension 1. Plus précisément, on suppose que $E = \mathbb{R}$ ou $E = \mathbb{S}^1$. On suppose de plus que $\mu(x, [\rho])$ est une fonction locale de ρ . Autrement dit on suppose que

$$\mu(x, [\rho]) = \mu(\rho(x), \partial_x \rho(x), \dots, \partial_x^K \rho(x)) , \quad (4.94)$$

où K est un entier naturel fixé quelconque, et où on utilise la notation⁵ :

$$\partial_x^k \rho(x) \equiv \frac{d^k \rho}{dx^k}(x) . \quad (4.95)$$

L'objectif de cette sous-section est de montrer que la condition d'intégrabilité de Schwarz appliquée à un potentiel chimique μ de la forme (4.94) s'écrit, de manière plus explicite, comme un ensemble d'équations aux dérivées partielles sur la fonction μ .

Dans l'ensemble de cette section, pour toute fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R}$, on utilisera la notation abrégée :

$$f_x \equiv f(x) . \quad (4.96)$$

De même on utilisera souvent la notation

$$\mu_x \equiv \mu(x, [\rho]) . \quad (4.97)$$

La condition de Schwarz appliquée à μ s'écrit :

$$d\mu[\rho](\phi, \psi) = 0 . \quad (4.98)$$

pour toute fonctions ϕ, ψ dans \mathbb{H} . Mais la dérivée extérieure de (la 1-forme associée à) μ s'écrit :

$$d\mu[\rho](\phi, \psi) \equiv \int \left[\frac{\delta \mu_x}{\delta \rho_y} - \frac{\delta \mu_y}{\delta \rho_x} \right] \phi_y \psi_x dx dy = \int \frac{\delta \mu_x}{\delta \rho_y} [\phi_y \psi_x - \phi_x \psi_y] dx dy \quad (4.99)$$

5. Puisque $\dim(E) = 1$, les dérivées par rapport à x ne sont pas des dérivées partielles (si on considère un champ ρ fixé qui ne dépend pas du temps). Mais on utilise la notation abrégé $\partial_x \rho$ plutôt que quelque chose comme $d_x \rho$ pour éviter la confusion avec la différentielle de ρ : $d\rho(x) \equiv \frac{d^k \rho}{dx^k}(x) dx$.

où la dernière égalité est obtenue en séparant les intégrales sur ϕ et ψ , en intervertisant les variables muettes d'intégration $x \leftrightarrow y$ dans l'une de ces intégrales, puis en réunissant à nouveau les intégrales. Or, la dérivée fonctionnelle de μ s'écrit :

$$\frac{\delta\mu_x}{\delta\rho_y} = \sum_{k=0}^K \frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial^k\rho)} \partial_x \delta(x-y) = \sum_{k=0}^K \frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial^k\rho)} (-1)^k \partial_y \delta(x-y). \quad (4.100)$$

Réinjectant cette expression dans l'équation (4.99), on obtient

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}[\rho](\phi, \psi) = \int \left[\sum_{k=0}^K \frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial^k\rho)} (-1)^k \partial_y \delta(x-y) \right] [\phi_y \psi_x - \phi_x \psi_y] \, dx \, dy \quad (4.101)$$

c'est à dire :

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}[\rho](\phi, \psi) = \int \sum_{k=1}^K \frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial^k\rho)} [\psi_x \partial_x^k \phi_x - \phi_x \partial_x^k \psi_x] \, dx \, dy \quad (4.102)$$

où on a retiré de la somme le terme en $k = 0$ puisqu'il s'annule systématiquement.

À ce stade, on aimerait pouvoir dire quelque chose comme

“les fonctions ϕ et ψ étant quelconques, l'annulation de $\mathrm{d}\mu[\rho](\phi, \psi)$ implique que

$$\frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial^k\rho)} = 0 \quad (4.103)$$

pour tout $k = 0, \dots, K$ ”.

Ceci est en fait faux puisque, par exemple dans le cas $K = 2$, on peut factoriser un opérateur de dérivation du terme en $k = 2$:

$$\psi_x \partial_x^2 \phi_x - \phi_x \partial_x^2 \psi_x = \partial_x [\psi_x \partial_x \phi_x - \phi_x \partial_x \psi_x] \quad (4.104)$$

ce qui permet d'intégrer par parties le terme $k = 2$ dans l'équation (4.102). Dans le cas $K = 2$, l'équation (4.102) se réécrit ainsi :

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}[\rho](\phi, \psi) = \int \left[\frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial\rho)} - \partial_x \left(\frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial^2\rho)} \right) \right] [\psi_x \partial_x \phi_x - \phi_x \partial_x \psi_x] \, dx. \quad (4.105)$$

Cette fois (comme nous allons le voir) l'équation (4.105) implique bien l'annulation de la fonction en facteur du terme $\psi_x \partial_x \phi_x - \phi_x \partial_x \psi_x$ dans l'intégrale, *i.e.*

$$\frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial\rho)} - \partial_x \left(\frac{\partial\mu_x}{\partial(\partial^2\rho)} \right) = 0 \quad (4.106)$$

On va montrer que ceci se généralise, *i.e.* que l'annulation de la dérivée extérieure $\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}$ est équivalente à un ensemble d'équations aux dérivées partielles (EDP), semblables à (4.106), satisfaites par μ . Pour cela, on définit, pour tout entier naturel non nul k , l'opérateur différentiel bilinéaire antisymétrique :

$$\begin{aligned}\Omega_k^A : \quad \mathbb{H} \times \mathbb{H} &\longrightarrow \mathbb{H} \\ (\phi, \psi) &\longmapsto \Omega_k^A(\phi, \psi)\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}\Omega_k^A(\phi, \psi) : \quad E &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto \psi_x \partial_x^k \phi_x - \phi_x \partial_x^k \psi_x\end{aligned}$$

Puis on montre (voir appendice M, qui contient également des preuves utiles aux sections suivantes) que les opérateurs d'ordre pair Ω_{2j}^A se “développent” sur les opérateurs d'ordre impair Ω_{2i+1}^A de la manière suivante :

$$\forall j \in \mathbb{N}^*, \quad \Omega_{2j}^A = \sum_{i=0}^{j-1} b_{2i+1}^{2j} \partial_x^{(2j-2i-1)} \Omega_{2i+1}^A \quad (4.107)$$

où les coefficients b_{2i+1}^{2j} sont définis récursivement par :

$$\forall j \in \mathbb{N}^*, \quad \forall i < j, \quad b_{2i+1}^{2j} \equiv a_{2i+1}^{2j} + \sum_{k=i+1}^{j-1} a_{2k}^{2j} b_{2i+1}^{2k} \quad (4.108)$$

avec

$$a_k^n \equiv \frac{(-1)^{n-1-k}}{2} \sum_{i=0}^k \binom{n-1-k+i}{n-1-k} \quad (4.109)$$

On réinjecte ensuite les développements (4.107) dans l'expression (4.102) :

$$\begin{aligned}\text{d}\mu[\rho](\phi, \psi) &= \sum_{j=0}^{\lfloor (K-1)/2 \rfloor} \int \frac{\partial \mu_x}{\partial (\partial^{2j+1} \rho)} \Omega_{2j+1}^A(\phi, \psi)(x) dx \\ &\quad + \sum_{j=1}^{\lfloor K/2 \rfloor} \int \frac{\partial \mu_x}{\partial (\partial^{2j} \rho)} \sum_{i=0}^{j-1} b_{2i+1}^{2j} \partial_x^{(2j-2i-1)} \Omega_{2i+1}^A(\phi, \psi)(x) dx\end{aligned} \quad (4.110)$$

Une série d'intégrations par partie et un réarrangement de la somme de la seconde ligne donne finalement :

$$\text{d}\mu[\rho](\phi, \psi) = \sum_{j=0}^{\lfloor (K-1)/2 \rfloor} \int \left[\frac{\partial \mu}{\partial (\partial^{2j+1} \rho)} - \sum_{l=j+1}^{\lfloor K/2 \rfloor} b_{2j+1}^{2l} \partial_x^{(2l-2j-1)} \left(\frac{\partial \mu}{\partial (\partial^{2l} \rho)} \right) \right] \Omega_{2j+1}^A(\phi, \psi)(x) dx \quad (4.111)$$

Enfin, on démontre (voir appendice N) que la condition d'intégrabilité fonctionnelle de la dérivée extérieure, qui s'écrit, sous une forme “distributionnelle,

$$\text{d}\mu = 0, \quad (4.112)$$

est équivalente à l'ensemble d'EDP :

$$\forall j = 0, \dots, \lfloor (K-1)/2 \rfloor, \quad$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial(\partial^{2j+1}\rho)} - \sum_{l=j+1}^{\lfloor K/2 \rfloor} b_{2j+1}^{2l} \partial_x^{(2l-2j-1)} \left(\frac{\partial \mu}{\partial(\partial^{2l}\rho)} \right) = 0 \quad (4.113)$$

Précisons que le fait que l'annulation de (4.111) implique l'ensemble des équations (4.113) peut être interprété comme la liberté (en un sens généralisé) de la famille de formes bilinéaires $(\Omega_{2j+1}^A(\cdot, \cdot)(x))_{j \in \mathbb{N}, x \in E}$. On verra au chapitre suivant que cette famille peut être considérée comme l'ensemble des sources d'entropie éventuelles de la dynamique (4.1) d'un champ actif scalaire ρ pour un potentiel chimique μ local en ρ . Le préfacteur de chacune de ces formes bilinéaires apparaissant dans le membre de droite de l'équation (4.111) pourra ainsi être interprété comme l'intensité de la production d'entropie par chacune de ces sources.

4.4 Intégrabilité d'un champ vectoriel

Dans cette section, on généralise les résultats de la section 4.3 (ainsi que ceux de la section 4.1) au cas où l'application μ , ainsi que le champ ρ sont à valeurs dans \mathbb{R}^n , où $n \in \mathbb{N}$. On utilise alors les notations suivantes :

$$\vec{\rho}(\mathbf{r}) \equiv (\rho^1(\mathbf{r}), \dots, \rho^n(\mathbf{r}))^t \quad (4.114)$$

et

$$\vec{\mu}(\mathbf{r}, [\vec{\rho}]) \equiv (\mu^1(\mathbf{r}, [\rho]), \dots, \mu^n(\mathbf{r}, [\rho]))^t \quad (4.115)$$

où les applications coordonnées sont écrites dans la base canonique de \mathbb{R}^n et où l'exposant t symbolise la transposition. On peut alors penser aux ρ^i comme aux densités de particules de n types différents. L'application concrète des résultats théoriques de cette section aux mélanges actifs fait d'ailleurs l'objet d'un travail en cours, qui donnera prochainement lieu à une publication. Mais les résultats présentés dans cette section sont également valables si $\vec{\rho}$ correspond à un champ d'une nature physique véritablement vectorielle, comme un champ de vitesse ou de polarisation par exemple. $\vec{\mu}$ n'a alors plus le sens d'un (ensemble de) potentiel(s) chimique(s) mais il peut tout de même être intéressant de s'intéresser à l'intégrabilité d'une fonction(nelle) $\vec{\mu}$, quelle que soit son sens physique dans un contexte donné.

4.4.1 Généralité dans le cas où la dimension de E est quelconque

Commençons par établir l'allure de la condition d'intégrabilité de Schwarz dans ce cas vectoriel général. L'objectif étant d'établir un critère permettant de déterminer s'il existe une fonctionnelle $\mathcal{F}[\vec{\rho}]$ à valeurs dans \mathbb{R} telle que

$$\forall i = 1, \dots, n, \quad \mu^i(\mathbf{r}, [\vec{\rho}]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\vec{\rho}]}{\delta \rho^i(\mathbf{r})} \quad (4.116)$$

ce que l'on renote de manière plus condensée :

$$\vec{\mu}(\mathbf{r}, [\vec{\rho}]) = \frac{\delta \mathcal{F}[\vec{\rho}]}{\delta \vec{\rho}(\mathbf{r})}. \quad (4.117)$$

A nouveau, une fonctionnelle $\mathcal{F}[\vec{\rho}]$ suffisamment régulière se développe au second ordre de la manière suivante :

$$\mathcal{F}[\vec{\rho} + \vec{\phi}] \simeq \mathcal{F}[\vec{\rho}] + \delta \mathcal{F}[\vec{\rho}](\vec{\phi}) + \delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}](\vec{\phi}, \vec{\phi}). \quad (4.118)$$

La condition de Schwarz correspond encore à la symétrie de $\delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}]$, i.e. on doit avoir $\forall \vec{\phi}, \vec{\psi}$:

$$\delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}](\vec{\phi}, \vec{\psi}) = \delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}](\vec{\psi}, \vec{\phi}), \quad (4.119)$$

c'est à dire

$$\sum_{i,j=1}^n \int \frac{\delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}]}{\delta \rho^j(\mathbf{r}) \delta \rho^i(\mathbf{r}')} [\phi^j(\mathbf{r}) \psi^i(\mathbf{r}') - \psi^j(\mathbf{r}) \phi^i(\mathbf{r}')] d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = 0. \quad (4.120)$$

On peut encore réécrire cette équation en séparant l'intégrale en deux, échangeant les variables d'intégration et les indices de sommation dans l'une d'entre elles, avant de les réunir à nouveau :

$$\sum_{i,j=1}^n \int \left[\frac{\delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}]}{\delta \rho^j(\mathbf{r}) \delta \rho^i(\mathbf{r}')} - \frac{\delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}]}{\delta \rho^i(\mathbf{r}') \delta \rho^j(\mathbf{r})} \right] \phi^j(\mathbf{r}) \psi^i(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = 0, \quad (4.121)$$

ce que l'on peut écrire, "au sens des distributions" :

$$\frac{\delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}]}{\delta \rho^j(\mathbf{r}) \delta \rho^i(\mathbf{r}')} = \frac{\delta^2 \mathcal{F}[\vec{\rho}]}{\delta \rho^i(\mathbf{r}') \delta \rho^j(\mathbf{r})} \quad (4.122)$$

Ainsi, pour une application $\vec{\mu}(\mathbf{r}, [\vec{\rho}])$, la condition d'intégrabilité de Schwarz s'écrit :

$$\frac{\delta \mu^i(\mathbf{r}', [\vec{\rho}])}{\delta \rho^j(\mathbf{r})} = \frac{\delta \mu^j(\mathbf{r}, [\vec{\rho}])}{\delta \rho^i(\mathbf{r}')} \quad (4.123)$$

De manière similaire à la section 4.1, on peut définir une forme linéaire associée à $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu}[\rho] : \vec{\phi} \mapsto \sum_{i=1}^n \int \mu^i(\mathbf{r}, [\vec{\rho}]) \phi^i(\mathbf{r}, [\vec{\rho}]) d\mathbf{r}. \quad (4.124)$$

On peut à nouveau associé à $\vec{\mu}$ une forme bilinéaire :

$$\text{d}\vec{\mu}[\vec{\rho}] : (\vec{\phi}, \vec{\psi}) \mapsto \sum_{i,j} \int \left[\frac{\delta \mu^i(\mathbf{r}', [\vec{\rho}])}{\delta \rho^j(\mathbf{r})} - \frac{\delta \mu^j(\mathbf{r}, [\vec{\rho}])}{\delta \rho^i(\mathbf{r}')} \right] \phi^j(\mathbf{r}) \psi^i(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (4.125)$$

ce qui généralise l'opérateur d de dérivation fonctionnelle défini à la section 4.1. La condition d'intégrabilité de Schwarz prend alors la forme, plus compacte :

$$\text{d}\vec{\mu} = 0. \quad (4.126)$$

4.4.2 CNS d'intégrabilité, sous forme d'EDP, quand $\dim(E) = 1$

On suppose à nouveau que l'espace E est de dimension 1 et que $\vec{\mu}$ ne dépend de $\vec{\rho}$ que localement *i.e.*

$$\vec{\mu}(x, [\vec{\rho}]) = \vec{\mu} \left(\vec{\rho}(x), \partial_x \vec{\rho}(x), \dots, \partial_x^K \vec{\rho}(x) \right)^t \quad (4.127)$$

où K est un entier naturel quelconque. Comme dans la section 4.3, on utilise par commodité la notation abrégée :

$$\mu_x^i \equiv \mu^i(x, [\rho]) , \quad (4.128)$$

ainsi que pour toute autre fonction dépendant (notamment) de x . La dérivée fonctionnelle de μ^i s'écrit :

$$\frac{\delta \mu_x^i}{\delta \rho_y^j} = \sum_{k=0}^K \frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^k \rho_x^j)} (-1)^k \partial_y \delta(x - y) . \quad (4.129)$$

On réinjecte alors cette équation dans l'expression (4.125) de $\mathbb{d}\vec{\mu}(\vec{\phi}, \vec{\psi})$:

$$\mathbb{d}\vec{\mu}(\vec{\phi}, \vec{\psi}) = \sum_{i,j=1}^n \sum_{k=0}^K \int \left[\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^k \rho_x^j)} (-1)^k \partial_y \delta(x - y) - \frac{\partial \mu_y^j}{\partial (\partial^k \rho_y^i)} (-1)^k \partial_x \delta(x - y) \right] \phi_y^j \psi_x^i dx dy \quad (4.130)$$

c'est à dire

$$\mathbb{d}\vec{\mu}(\vec{\phi}, \vec{\psi}) = \sum_{i,j=1}^n \sum_{k=0}^K \int \left[\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^k \rho_x^j)} \psi_x^i \partial_x \phi_x^j - \frac{\partial \mu_y^j}{\partial (\partial^k \rho_y^i)} \phi_y^j \partial_x \psi_x^i \right] dx . \quad (4.131)$$

On introduit alors l'opérateur

$$\Omega_k : (\phi, \psi) \longmapsto \Omega_k(\phi, \psi) \quad (4.132)$$

où

$$\Omega_k(\phi, \psi) : x \in E \longmapsto \psi(x) \partial_x^k \phi(x) , \quad (4.133)$$

avec ϕ et ψ deux fonctions de E dans \mathbb{R} . On introduit également les opérateurs qui sont, à un facteur 2 près, les parties symétrique

$$\Omega_k^S(\phi, \psi)(x) \equiv \psi(x) \partial_x^k \phi(x) + \phi(x) \partial_x^k \psi(x) \quad (4.134)$$

et antisymétrique

$$\Omega_k^A(\phi, \psi)(x) \equiv \psi(x) \partial_x^k \phi(x) - \phi(x) \partial_x^k \psi(x) \quad (4.135)$$

de Ω_k . On peut alors réécrire l'équation (4.131) de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \text{d}\overrightarrow{\mu}(\overrightarrow{\phi}, \overrightarrow{\psi}) &= \sum_{i,j=1}^n \sum_{k=0}^K \int \left[\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^k \rho_x^j)} \Omega_k(\phi^j, \psi^i) - \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^k \rho_x^i)} \Omega_k(\psi^i, \phi^j) \right] dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \sum_{k=0}^K \int \left(\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^k \rho_x^j)} [\Omega_k^S(\phi^j, \psi^i) + \Omega_k^A(\phi^j, \psi^i)] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^k \rho_x^i)} [\Omega_k^S(\psi^i, \phi^j) + \Omega_k^A(\psi^i, \phi^j)] \right) dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \sum_{k=0}^K \int \left(\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^k \rho_x^j)} [\Omega_k^S(\phi^j, \psi^i) + \Omega_k^A(\phi^j, \psi^i)] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^k \rho_x^i)} [\Omega_k^S(\phi^j, \psi^i) - \Omega_k^A(\phi^j, \psi^i)] \right) dx \end{aligned}$$

où on a simplement utilisé la relation $\Omega_k = (\Omega_k^S + \Omega_k^A)/2$, ainsi que les propriétés de symétrie de Ω_k^S et Ω_k^A . En réagénçant les termes on obtient

$$\text{d}\overrightarrow{\mu}(\overrightarrow{\phi}, \overrightarrow{\psi}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \sum_{k=0}^K \int \left(\left[\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^k \rho_x^j)} - \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^k \rho_x^i)} \right] \Omega_k^S(\phi^j, \psi^i) \right. \quad (4.136)$$

$$\left. + \left[\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^k \rho_x^j)} + \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^k \rho_x^i)} \right] \Omega_k^A(\phi^j, \psi^i) \right) dx \quad (4.137)$$

Or, on peut montrer (voir appendice M) les formules de factorisation suivante pour les opérateurs $\Omega_k^{S,A}$:

$$\forall j \quad \Omega_{2j}^A = \sum_{i=0}^{j-1} b_{2i+1}^{2j} \partial^{(2j-2i-1)} \Omega_{2i+1}^A \quad (4.138)$$

$$\forall j \quad \Omega_{2j+1}^S = \sum_{i=0}^j c_{2i}^{2j+1} \partial^{(2j+1-2i)} \Omega_{2i}^S \quad (4.139)$$

où les coefficients b_{2i+1}^{2j} et c_{2i}^{2j+1} sont définis par récurrence :

$$\forall j \in \mathbb{N}^*, \forall i < j, \quad b_{2i+1}^{2j} = a_{2i+1}^{2j} + \sum_{k=i+1}^{j-1} a_{2k}^{2j} b_{2i+1}^{2k} \quad (4.140)$$

$$\text{et } \forall j \in \mathbb{N}, \forall i \leq j, \quad c_{2i}^{2j+1} = a_{2i}^{2j+1} + \sum_{k=i}^{j-1} a_{2k+1}^{2j+1} c_{2i}^{2k+1} \quad (4.141)$$

$$\text{avec } a_k^n = \frac{(-1)^{n-1-k}}{2} \sum_{i=0}^k \binom{n-1-k+i}{n-1-k} \quad (4.142)$$

En réinjectant les expressions (4.138) et (4.139) dans l'équation (4.137) et en effectuant des intégrations par parties, on obtient :

$$\mathbb{d}\overrightarrow{\mu}(\overrightarrow{\phi}, \overrightarrow{\psi}) = \sum_{i,j=1}^n \left\{ \sum_{m=0}^{\lfloor K/2 \rfloor} \int \alpha_x^{ijm} \Omega_{2m}^S(\phi^i, \psi^j)(x) dx + \sum_{m=0}^{\lfloor (K-1)/2 \rfloor} \int \beta_x^{ijm} \Omega_{2m+1}^A(\phi^i, \psi^j)(x) dx \right\} \quad (4.143)$$

avec

$$\alpha_x^{ijm} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^{(2m)} \rho^j)} - \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^{(2m)} \rho^i)} - \sum_{l=m}^{\lfloor (K-1)/2 \rfloor} c_{2m}^{2l+1} \partial_x^{(2l+1-2m)} \left(\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^{(2l+1)} \rho^j)} - \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^{(2l+1)} \rho^i)} \right) \right] \quad (4.144)$$

et

$$\beta_x^{ijm} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^{(2m+1)} \rho^j)} + \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^{(2m+1)} \rho^i)} - \sum_{l=m+1}^{\lfloor K/2 \rfloor} b_{2m+1}^{2l} \partial_x^{(2l-2m-1)} \left(\frac{\partial \mu_x^i}{\partial (\partial^{(2l)} \rho^j)} + \frac{\partial \mu_x^j}{\partial (\partial^{(2l)} \rho^i)} \right) \right]. \quad (4.145)$$

Finalement, on peut démontrer (voir appendice N, les fonctions composantes ϕ^i et ψ^j pouvant être choisies arbitrairement) que

$$\mathbb{d}\overrightarrow{\mu} = 0 \quad (4.146)$$

si et seulement si

$$\alpha^{ijm} = 0 \quad \forall i, j = 1 \dots n, \quad \forall m = 0 \dots \lfloor K/2 \rfloor, \quad (4.147)$$

$$\beta^{ijm} = 0 \quad \forall i, j = 1 \dots n, \quad \forall m = 0 \dots \lfloor (K-1)/2 \rfloor. \quad (4.148)$$

4.5 Pseudo-mapping vers l'équilibre

4.5.1 Exemple d'un développement à l'ordre 2 en gradients

Dans l'article [111], les auteurs considèrent un système actif, décrit à l'échelle macroscopique de manière générique par la version champ moyen de l'équation (4.1), dans laquelle le potentiel chimique μ est donné par un développement à l'ordre 2 en gradient de ρ :

$$\mu(\mathbf{r}, [\rho]) = g(\rho(\mathbf{r})) + \lambda(\rho(\mathbf{r}))|\nabla\rho(\mathbf{r})|^2 - \kappa(\rho(\mathbf{r}))\Delta\rho(\mathbf{r}) . \quad (4.149)$$

Dans le but d'appliquer la condition d'intégrabilité de Schwarz à μ , on calcule d'abord sa dérivée fonctionnelle :

$$\begin{aligned} \frac{\delta\mu(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r}')} &= \left[g'_r + \lambda'_r |\nabla\rho_r|^2 - \kappa'_r \Delta\rho_r \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &\quad - 2\lambda_r \nabla\rho_r \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \kappa_r \Delta_{\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \end{aligned} \quad (4.150)$$

Ainsi, la dérivée extérieure fonctionnelle de μ , évaluée en une paire de fonctions $\phi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r})$, s'écrit

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\mu[\rho](\phi, \psi) &= \int \left[g'_r + \lambda'_r |\nabla\rho_r|^2 - \kappa'_r \Delta\rho_r \right] (\phi_r \psi_r - \phi_{\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{r}}) \mathrm{d}\mathbf{r} \\ &\quad + \int 2\lambda_r \nabla\rho_r \cdot [\psi_r \nabla\phi_r - \phi_r \nabla\psi_r] \mathrm{d}\mathbf{r} \\ &\quad - \int \kappa_r [\psi_r \Delta\phi_r - \phi_r \Delta\psi_r] \mathrm{d}\mathbf{r} . \end{aligned} \quad (4.151)$$

Or, comme nous l'avons vu à la section 4.3 dans le cas où $\dim(E) = 1$, on a la factorisation :

$$\psi_r \Delta\phi_r - \phi_r \Delta\psi_r = \nabla \cdot [\psi_r \nabla\phi_r - \phi_r \nabla\psi_r] , \quad (4.152)$$

ce qui permet finalement de réécrire la dérivée extérieure de μ sous la forme

$$\mathrm{d}\mu[\rho](\phi, \psi) = \int [2\lambda_r + \kappa'_r] \nabla\rho_r \cdot [\psi_r \nabla\phi_r - \phi_r \nabla\psi_r] \mathrm{d}\mathbf{r} . \quad (4.153)$$

On peut ainsi conclure que le potentiel chimique $\mu(\mathbf{r}, [\rho])$ est fonctionnellement intégrable si et seulement si

$$2\lambda + \kappa' = 0 . \quad (4.154)$$

Notons que la condition nécessaire et suffisante d'intégrabilité ci-dessus, avait été établie dans [131] seulement comme une condition suffisante. La condition d'intégrabilité de Schwarz permet ainsi de montrer qu'elle est également nécessaire.

L'équation (4.154) permet ainsi de conclure que potentiel chimique donné par (4.149) est génériquement non intégrable et qu'il n'existe pas d'énergie libre

permettant éventuellement de déterminer le diagramme de phase de MIPS. Néanmoins les auteurs parviennent à montrer qu'en introduisant une fonction scalaire

$$\mathcal{R} : \rho \in \mathbb{R} \longmapsto R \equiv \mathcal{R}(\rho) \in \mathbb{R} \quad (4.155)$$

satisfaisant l'équation

$$(2\lambda + \kappa')\mathcal{R}' + \kappa\mathcal{R}'' = 0, \quad (4.156)$$

le potentiel chimique peut être écrit comme une dérivée fonctionnelle, non pas par rapport à ρ mais par rapport à $R = \mathcal{R}(\rho)$

$$\mu(\mathbf{r}, [\mathcal{R}^{-1}(R)]) = \frac{\delta \mathcal{H}[R]}{\delta R(\mathbf{r})} \quad (4.157)$$

avec

$$\mathcal{H}[R] = \int \left[h(R(\mathbf{r})) + \frac{\kappa(\mathcal{R}^{-1}(R))}{\mathcal{R}'(R(\mathbf{r}))} |\nabla R(\mathbf{r})|^2 \right] d\mathbf{r}, \quad \text{et} \quad h'(R) = g(\mathcal{R}^{-1}(R)). \quad (4.158)$$

Le cas montré à la section 1.2.4 de l'introduction est un cas particulier⁶ dans lequel $\lambda = 0$. Comme nous l'avons décrit en introduction, cette transformation $\rho \rightarrow R$ a permis aux auteurs de [111] d'obtenir le diagramme des phases de MIPS avec une bien meilleure précision que le diagramme obtenu par une approximation purement locale $\mu(\mathbf{r}, [\rho]) \simeq \mu(\rho(\mathbf{r}))$. Néanmoins, cette transformation a été obtenue par un procédé mathématique complexe, difficilement généralisable. Dans cette section, on montre que la condition d'intégrabilité de Schwarz peut servir à formaliser cette transformation et à systématiser les conditions de son existence ainsi que les équations qu'elle doit satisfaire.

Pour cela, posons

$$\tilde{\mu}(\mathbf{r}, [R]) \equiv \mu(\mathbf{r}, [\mathcal{R}^{-1}(R)]). \quad (4.159)$$

La condition d'intégrabilité de Schwarz appliquée à $\tilde{\mu}$ donne :

$$\frac{\delta \tilde{\mu}(\mathbf{r}, [R])}{\delta R(\mathbf{r}')} = \frac{\delta \tilde{\mu}(\mathbf{r}', [R])}{\delta R(\mathbf{r})} \quad (4.160)$$

Cependant $R \equiv \mathcal{R} \circ \rho$, donc la règle de Leibniz donne :

$$\begin{aligned} \frac{\delta \tilde{\mu}(\mathbf{r}, [\mathcal{R} \circ \rho])}{\delta \rho(\mathbf{r}')} &= \int \frac{\delta \tilde{\mu}(\mathbf{r}, [\mathcal{R} \circ \rho])}{\delta R(\mathbf{r}'')} \frac{\delta \mathcal{R}(\rho(\mathbf{r}''))}{\delta \rho(\mathbf{r}')} d\mathbf{r}'' \\ &= \int \frac{\delta \tilde{\mu}(\mathbf{r}, [\mathcal{R} \circ \rho])}{\delta R(\mathbf{r}'')} \mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r}'')) \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') d\mathbf{r}'' \\ &= \frac{\delta \tilde{\mu}(\mathbf{r}, [\mathcal{R} \circ \rho])}{\delta R(\mathbf{r}')} \mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r}')) \end{aligned}$$

6. Notons que le λ de cette section n'est pas le même que celui de la section 1.2.4 de l'introduction.

i.e.

$$\frac{\delta\tilde{\mu}(\mathbf{r}, [\mathcal{R} \circ \rho])}{\delta R(\mathbf{r}')} = \frac{1}{\mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r}'))} \frac{\delta\tilde{\mu}(\mathbf{r}, [\mathcal{R} \circ \rho])}{\delta\rho(\mathbf{r}')} \quad (4.161)$$

On peut ainsi réécrire la condition d'intégrabilité (4.160) de la manière suivante :

$$\frac{1}{\mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r}'))} \frac{\delta\tilde{\mu}(\mathbf{r}, [\mathcal{R} \circ \rho])}{\delta\rho(\mathbf{r}')} = \frac{1}{\mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r}))} \frac{\delta\tilde{\mu}(\mathbf{r}', [\mathcal{R} \circ \rho])}{\delta\rho(\mathbf{r})} \quad (4.162)$$

c'est à dire

$$\frac{1}{\mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r}'))} \frac{\delta\mu(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r}')} = \frac{1}{\mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r}))} \frac{\delta\mu(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r})}. \quad (4.163)$$

La fonction \mathcal{R} étant supposée régulière, l'égalité (4.163), qui est définie au sens des distributions, peut se réécrire :

$$\mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r})) \frac{\delta\mu(\mathbf{r}, [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r}')} = \mathcal{R}'(\rho(\mathbf{r}')) \frac{\delta\mu(\mathbf{r}', [\rho])}{\delta\rho(\mathbf{r})}. \quad (4.164)$$

Cette transformation, qui peut paraître anodine à première vue, va nous permettre de simplifier grandement les calculs qui suivent. L'équation (4.164) étant valide au sens des distributions, elle s'écrit, pour toute paires de fonctions ϕ, ψ :

$$\int \mathcal{R}' \frac{\delta\mu_{\mathbf{r}}}{\delta\rho_{\mathbf{r}'}} [\phi_{\mathbf{r}'} \psi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{r}'}] d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = 0 \quad (4.165)$$

i.e.

$$\int \mathcal{R}'_{\mathbf{r}} [2\lambda_{\mathbf{r}} \nabla \rho_{\mathbf{r}} (\psi_{\mathbf{r}} \nabla \phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}} \nabla \psi_{\mathbf{r}}) - \kappa_{\mathbf{r}} (\psi_{\mathbf{r}} \Delta \phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}} \Delta \psi_{\mathbf{r}})] d\mathbf{r} = 0 \quad (4.166)$$

Or, comme nous l'avons précédemment, on a la factorisation :

$$\psi_{\mathbf{r}} \Delta \phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}} \Delta \psi_{\mathbf{r}} = \nabla \cdot [\psi_{\mathbf{r}} \nabla \phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}} \nabla \psi_{\mathbf{r}}]. \quad (4.167)$$

On peut donc réaliser une intégration par partie dans l'équation (4.166) pour obtenir :

$$\int [(2\lambda_{\mathbf{r}} + \kappa'_{\mathbf{r}}) \mathcal{R}'_{\mathbf{r}} + \kappa_{\mathbf{r}} \mathcal{R}''_{\mathbf{r}}] \nabla \rho_{\mathbf{r}} \cdot [\psi_{\mathbf{r}} \nabla \phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}} \nabla \psi_{\mathbf{r}}] d\mathbf{r} = 0 \quad (4.168)$$

qui est vérifiée si et seulement si

$$(2\lambda + \kappa') \mathcal{R}' + \kappa \mathcal{R}'' = 0, \quad (4.169)$$

qui est bien identique à l'équation (4.156). L'utilisation de la condition d'intégrabilité de Schwarz, combinée à la règle de Leibniz, permet ainsi de déterminer de

manière systématique (*via* l'équation générale (4.164)) les contraintes sur l'éventuel changement de variable \mathcal{R} qui permet d'obtenir une énergie libre généralisée satisfaisant (4.157). Enfin, on constate que l'équation (4.161) donne une interprétation géométrique de la fonctionnelle $\mathcal{R}[\rho]$ (qui est ici purement locale en ρ) : lorsque \mathcal{R} existe, $1/\mathcal{R}'$ est un facteur intégrant⁷ de la 1-forme μ .

4.5.2 Généralisation à un champ vectoriel

Condition distributionnelle générale. On reprend ici les notations de la section 4.4. On aimerait généraliser la condition (distributionnelle) (4.164) d'existence d'un changement de variable au cas d'un champ vectoriel $\vec{\rho}$. On suppose que ce changement prend la forme

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{R}} : \quad & \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n \\ \vec{\rho} \longmapsto & \vec{R} \equiv \vec{\mathcal{R}}(\vec{\rho})\end{aligned}$$

Notons que l'on pourrait chercher une fonctionnelle $\vec{\mathcal{R}}$ de $\vec{\rho}$ non locale. Cependant ce changement de variable doit être bijectif et suffisamment simple pour être utilisable en pratique. On se contente donc ici d'une forme purement locale du “facteur intégrant” $\vec{\mathcal{R}}$. En combinant les approches des sections 4.4 et 4.5.1, on montre aisément que $\vec{\mathcal{R}} = (\mathcal{R}^1, \dots, \mathcal{R}^n)^t$ doit être tel que, pour toutes fonction $\vec{\phi}, \vec{\psi}$ de E dans \mathbb{R} , et pour tout champ $\vec{\rho}$, on ait :

$$\sum_{i,j,k} \int \phi_r^i \left[\frac{\partial \mathcal{R}_r^k}{\partial \rho_r^i} \frac{\delta \mu_r^k}{\delta \rho_{r'}^j} - \frac{\partial \mathcal{R}_{r'}^k}{\partial \rho_{r'}^j} \frac{\delta \mu_{r'}^k}{\delta \rho_r^i} \right] \psi_{r'}^j dr dr' = 0 \quad (4.170)$$

Mais ceci devant être vrai pour des fonctions composantes ϕ^i et ψ^j arbitraires, on en déduit que, pour tout couple $i, j = 1, \dots, n$, on doit avoir :

$$\sum_k \int \phi_r^i \left[\frac{\partial \mathcal{R}_r^k}{\partial \rho_r^i} \frac{\delta \mu_r^k}{\delta \rho_{r'}^j} - \frac{\partial \mathcal{R}_{r'}^k}{\partial \rho_{r'}^j} \frac{\delta \mu_{r'}^k}{\delta \rho_r^i} \right] \psi_{r'}^j dr dr' = 0 . \quad (4.171)$$

L'ensemble des équations (4.171) constitue la condition (distributionnelle) à l'existence de changement de variable $\vec{\mathcal{R}}$ recherché.

7. On rappelle que pour une 1-forme ω sur une variété, une fonction f de la variété dans \mathbb{R} est un “facteur intégrant” pour ω si la 1-forme $f\omega$ est exacte (*i.e.* si le champ de vecteur associé est gradient).

Conditions sous forme d'EDP lorsque $\dim(E) = 1$ et le potentiel chimique est local. On suppose que $\dim(E) = 1$ et que $\vec{\mu}$ est locale en $\vec{\rho}$, i.e.

$$\vec{\mu}(x, [\vec{\rho}]) = \vec{\mu}(\rho_x, \partial\rho_x, \dots, \partial^K\rho_x) \quad (4.172)$$

pour $K \in \mathbb{N}$. Un calcul identique à celui effectué à la section 4.4, mais en remplaçant

$$\frac{\partial\mu_x^i}{\partial(\partial^\ell\rho_x^j)} \quad \text{par} \quad \Gamma_x^{kilj} \equiv \sum_{k=1}^n \frac{\partial\mathcal{R}_x^k}{\partial\rho_x^i} \frac{\partial\mu_x^k}{\partial(\partial^\ell\rho_x^j)} \quad (4.173)$$

permet de montrer que la condition d'existence de $\vec{\mathcal{R}}$ s'écrit :

$$\tilde{\alpha}^{ijm} = 0 \quad \forall i, j = 1 \dots n, \quad \forall m = 0 \dots \lfloor K/2 \rfloor, \quad (4.174)$$

$$\tilde{\beta}^{ijm} = 0 \quad \forall i, j = 1 \dots n, \quad \forall m = 0 \dots \lfloor (K-1)/2 \rfloor. \quad (4.175)$$

avec

$$\tilde{\alpha}^{ijm} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left[\Gamma^{ki(2m)j} - \Gamma^{kj(2m)i} - \sum_{l=m}^{\lfloor (q-1)/2 \rfloor} c_{2m}^{2l+1} \partial^{(2l+1-2m)} \left(\Gamma^{ki(2l+1)j} - \Gamma^{kj(2l+1)i} \right) \right] \quad (4.176)$$

et

$$\tilde{\beta}^{ijm} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left[\Gamma^{ki(2m+1)j} + \Gamma^{kj(2m+1)i} - \sum_{l=m+1}^{\lfloor q/2 \rfloor} b_{2m+1}^{2l} \partial^{(2l-2m-1)} \left(\Gamma^{ki(2l)j} + \Gamma^{kj(2l)i} \right) \right] \quad (4.177)$$

4.5.3 Exemples d'application

Champ scalaire en dimension 1 – développement à l'ordre 4 en gradient

On suppose ici que $\dim E = 1$, que ρ est un champ scalaire, et que $\mu(x, [\rho])$ dépend localement de ρ jusqu'à l'ordre $K = 4$, i.e.

$$\mu(x, [\rho]) = \mu(\rho_x, \partial\rho_x, \dots, \partial^4\rho_x). \quad (4.178)$$

Lorsque le champ ρ est scalaire tous les $\tilde{\alpha}^{ijm}$ sont nuls et les équations (4.174) sont donc automatiquement vérifiées. Lorsque $K = 4$, $\lfloor (K-1)/2 \rfloor = 1$, donc la CNS (4.175) d'existence d'un pseudo-mapping vers l'équilibre prend la forme d'une paire de 2 équations :

$$\begin{cases} \tilde{\beta}^{1,1,0} = 0 \\ \tilde{\beta}^{1,1,1} = 0 \end{cases} \quad (4.179)$$

Or

$$\begin{aligned}\tilde{\beta}^{1,1,0} &= 2\Gamma^{1,1,1,1} - \sum_{l=1}^2 2b_1^{2l} \partial_x^{(2l-1)} \Gamma^{1,1,2l,1} \\ &= 2 \left[\mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial\rho)} - \partial_x \left[\mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial^2\rho)} \right] + \partial_x^3 \left[\mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial^4\rho)} \right] \right]\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\tilde{\beta}^{1,1,1} &= 2\Gamma^{1,1,3,1} - 2b_3^4 \partial_x \Gamma^{1,1,4,1} \\ &= 2 \left[\mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial^3\rho)} - 2\partial_x \left[\mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial^4\rho)} \right] \right].\end{aligned}$$

Ainsi les CNS se réécrivent

$$\begin{cases} \mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial\rho)} - \partial_x \left[\mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial^2\rho)} \right] + \partial_x^3 \left[\mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial^4\rho)} \right] = 0 \\ \mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial^3\rho)} - 2\partial_x \left[\mathcal{R}' \frac{\partial \mu}{\partial(\partial^4\rho)} \right] = 0 \end{cases} \quad (4.180)$$

Supposons maintenant que le potentiel μ corresponde à un développement à l'ordre 4 en gradient de ρ

$$\mu(x, [\rho]) = g + \lambda(\partial\rho)^2 - \kappa\partial^2\rho + a\partial^4\rho + b(\partial\rho)^4 + c(\partial\rho)^2\partial^2\rho + d(\partial^2\rho)^2 + e(\partial\rho)(\partial^3\rho) \quad (4.181)$$

où les coefficients $g, \lambda, \kappa, a, b, c, d$ et e sont tous des fonctions strictement locales de ρ . En réinjectant dans les équations (4.180), on constate que différents degrés en gradients de ρ apparaissent. Ces équations devant être vraies pour n'importe quel champ ρ , chacun des termes préfacteurs d'un ordre donné en gradient de ρ doit s'annuler, et ceci pour chaque ordre apparaissant dans les équations d'intégrabilité. Des deux équations aux dérivées partielles (4.180) découlent les équations différentielles ordinaires suivantes :

$$\begin{cases} 2\lambda\mathcal{R}' + (\kappa\mathcal{R}')' = 0 \\ 4b\mathcal{R}' - (c\mathcal{R}')' + (a\mathcal{R}')^{(3)} = 0 \\ 2(d\mathcal{R}')' - 3(a\mathcal{R}')^{(2)} = 0 \\ (e - 2d)\mathcal{R}' + (a\mathcal{R}')' = 0 \\ e\mathcal{R}' - 2(a\mathcal{R}')' = 0 \end{cases} \quad (4.182)$$

où $(')$ et $(^{(k)})$ désignent respectivement la dérivée première et la dérivée k ème par rapport à ρ . On constate que le système d'EDO (4.182) est sur-déterminé. On peut donc en conclure que, contrairement au cas du développement en gradient à l'ordre 2 étudié à la section 4.5.1, le changement de variable $\rho \rightarrow R$, et donc l'existence d'une énergie libre généralisée $\mathcal{H}[R]$, est impossible dans un cas totalement général.

Équations de réaction-diffusion

On considère le système d'EDP couplées suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho_1 = D_1 \Delta \rho_1 + f_1(\rho_1, \rho_2) \\ \partial_t \rho_2 = D_2 \Delta \rho_2 + f_2(\rho_1, \rho_2) \end{cases} \quad (4.183)$$

où D_1 et D_2 sont des constantes. C'est un système de type réaction-diffusion. Pour coïncider avec le cadre de la CNS d'intégrabilité établie précédemment, on réécrit ces équations :

$$\begin{cases} \partial_t \rho_1 = F_1(\rho_1, \rho_2, \partial^2 \rho_1) \\ \partial_t \rho_2 = F_2(\rho_1, \rho_2, \partial^2 \rho_2) \end{cases} \quad (4.184)$$

Puisque $K = 2$ et $n = 2$, on a a priori : 8 équations portant sur les $\tilde{\alpha}^{ijm}$ (respectivement 4 portant sur les $\tilde{\beta}^{ijm}$). L'antisymétrie en (i, j) des $\tilde{\alpha}^{ijm}$ (resp. la symétrie des $\tilde{\beta}^{ijm}$) permet de réduire le nombre d'équations portant sur les $\tilde{\alpha}^{ijm}$ à 2 (respectivement à 3 équations pour les $\tilde{\beta}^{ijm}$) :

$$\begin{cases} \tilde{\alpha}^{1,2,0} = 0 \\ \tilde{\alpha}^{1,2,1} = 0 \\ \tilde{\beta}^{1,1,0} = 0 \\ \tilde{\beta}^{2,2,0} = 0 \\ \tilde{\beta}^{1,2,0} = 0 \end{cases} \quad (4.185)$$

Ce qui s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \rho_1} \frac{\partial F_1}{\partial \rho_2} - \frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \rho_2} \frac{\partial F_1}{\partial \rho_1} + \frac{\partial \mathcal{R}_2}{\partial \rho_1} \frac{\partial F_2}{\partial \rho_2} - \frac{\partial \mathcal{R}_2}{\partial \rho_2} \frac{\partial F_2}{\partial \rho_1} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{R}_2}{\partial \rho_1} \frac{\partial F_2}{\partial (\partial^{(2)} \rho_2)} - \frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \rho_2} \frac{\partial F_1}{\partial (\partial^{(2)} \rho_1)} = 0 \\ \partial \left[\frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \rho_1} \frac{\partial F_1}{\partial (\partial^{(2)} \rho_1)} \right] = 0 \\ \partial \left[\frac{\partial \mathcal{R}_2}{\partial \rho_2} \frac{\partial F_2}{\partial (\partial^{(2)} \rho_2)} \right] = 0 \\ \partial \left[\frac{\partial \mathcal{R}_1}{\partial \rho_2} \frac{\partial F_1}{\partial (\partial^{(2)} \rho_1)} + \frac{\partial \mathcal{R}_2}{\partial \rho_1} \frac{\partial F_2}{\partial (\partial^{(2)} \rho_2)} \right] = 0 \end{cases} \quad (4.186)$$

Ce qui se réécrit en explicitant les dérivées partielles :

$$\begin{cases} \partial_1 \mathcal{R}_1 \partial_2 f_1 - \partial_2 \mathcal{R}_1 \partial_1 f_1 + \partial_1 \mathcal{R}_2 \partial_2 f_2 - \partial_2 \mathcal{R}_2 \partial_1 f_2 = 0 \\ D_2 \partial_1 \mathcal{R}_2 - D_1 \partial_2 \mathcal{R}_1 = 0 \\ \partial(D_1 \partial_1 \mathcal{R}_1) = 0 \\ \partial(D_2 \partial_2 \mathcal{R}_2) = 0 \\ \partial(D_1 \partial_2 \mathcal{R}_1 + D_2 \partial_1 \mathcal{R}_2) = 0 \end{cases} \quad (4.187)$$

Les 4 dernières équations sont équivalentes à l'existence de 5 constantes $\alpha, \beta, \gamma, \mu, \nu$ telles que :

$$\begin{pmatrix} \mathcal{R}_1 \\ \mathcal{R}_2 \end{pmatrix} (x, y) = \begin{pmatrix} \alpha & D_2 \gamma \\ D_1 \gamma & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \end{pmatrix} \quad (4.188)$$

La première équation s'écrit alors

$$\alpha \partial_2 f_1 - D_2 \gamma \partial_1 f_1 + D_1 \gamma \partial_2 f_2 - \beta \partial_1 f_2 = 0 \quad (4.189)$$

Si on suppose maintenant que les fonctions f_1 et f_2 sont de type FitzHugh-Nagumo, *i.e.* :

$$\begin{cases} f_1(\rho_1, \rho_2) = \rho_1 - \frac{1}{3}\rho_1^3 - \rho_2 + I \\ f_2(\rho_1, \rho_2) = a(\rho_1 + b - 10a\rho_2) \end{cases} \quad (4.190)$$

on peut montrer que les changements de variables permettant l'intégration fonctionnelle sont de la forme :

$$\vec{\mathcal{R}}(\rho_1, \rho_2) = \alpha \begin{pmatrix} -a & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad \text{avec } (\alpha, c_1, c_2) \in \mathbb{R}^* \times \mathbb{R}^2 \quad (4.191)$$

En particulier

$$\vec{\mathcal{R}}(\rho_1, \rho_2) = \begin{pmatrix} -a & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \end{pmatrix} \quad (4.192)$$

convient. Ce changement de variables permet de réécrire (4.183) sous la forme

$$\begin{cases} \partial_t \rho_1 = \frac{\delta F}{\delta R_1} \\ \partial_t \rho_2 = \frac{\delta F}{\delta R_2} \end{cases} \quad (4.193)$$

avec “l'énergie libre généralisée”

$$F[R_1, R_2] = \int \frac{1}{2a} (\nabla R_1)^2 - \frac{1}{2} (\nabla R_2)^2 + \frac{1}{12a^3} R_1^4 + \frac{1}{2a} R_1^2 - 5aR_2^2 - R_1 R_2 + IR_1 + bR_2 \quad (4.194)$$

Le changement de variable étant linéaire, on peut aisément l'inverser et réécrire les équations dynamiques sous la forme :

$$\begin{cases} \partial_t \rho_1 = \frac{-1}{a} \frac{\delta \tilde{F}}{\delta \rho_1} \\ \partial_t \rho_2 = \frac{\delta \tilde{F}}{\delta \rho_2} \end{cases} \quad (4.195)$$

avec

$$\tilde{F}[\rho_1, \rho_2] = \int \frac{a}{2} (\nabla \rho_1)^2 - \frac{1}{2} (\nabla \rho_2)^2 + \frac{a}{12} \rho_1^4 + \frac{a}{2} \rho_1^2 - 5a\rho_2^2 + a\rho_1\rho_2 - aI\rho_1 + b\rho_2 \quad (4.196)$$

La méthode de changement de variable mise en œuvre a ainsi permis de mettre à jour une structure variationnelle des équations (4.183), qui peut s'avérer intéressante, par exemple, pour implémenter des méthodes numériques. De plus, notons que les équations (4.183) et (4.190) engendrent des patterns stationnaires par exemple lorsque $a = 0,08$ et $b = 0,7$, patterns que la mise en forme (4.193)–(4.194) des équations pourrait permettre d'étudier plus aisément.

Appendices

Annexe A

Approche de Jaynes, multiplicateurs de Lagrange et variables thermodynamiques

Les λ_i ne coïncident pas avec les grandeurs intensives thermodynamiques “usuelles” T, μ , etc. En effet, ces dernières ont été définies à partir de la *formulation énergétique* de l'équation fondamentale : $U(S, N, \dots)$, qui donne bien par dérivation $T = \frac{\partial U}{\partial S}$, $\mu = \frac{\partial U}{\partial N}$, etc. Un choix plus naturel [6] (au moins vis à vis de la structure des mesures de Gibbs) aurait été de partir de la *formulation entropique* de l'équation fondamentale $S(U, N, \dots)$ pour définir des grandeurs thermodynamiques intensives telles que $\frac{\partial S}{\partial U}$ ou $\frac{\partial S}{\partial N}$. Celles-ci coïncident bien avec les λ_i mais sont liées aux variables thermodynamiques intensives usuelles via $\frac{\partial S}{\partial U} = 1/T$ et $\frac{\partial S}{\partial N} = -\mu/T$ par exemple.

Pour coller au choix historique des variables thermodynamiques usuelles, il faut en fait définir, en supposant que l'observable A_1 est l'énergie du système :

$$\begin{cases} \alpha_i \equiv -\beta^{-1}\lambda_i , \quad \forall i = 1 \dots n , \quad \text{où } \beta \equiv \lambda_1 \\ \bar{\psi}(\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \equiv \beta^{-1}\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \\ \bar{\Psi}_{\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n}[p] \equiv \beta^{-1}\Psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}[p] \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Les mesures de Gibbs se ré-écrivent alors :

$$p_{\text{Gibbs}}(x) = e^{-\beta \left[-\sum_i \alpha_i A_i(x) - \bar{\psi}(\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \right]} \quad (\text{A.2})$$

Ainsi, au prix du sacrifice de la symétrie entre les variables λ_i , remplacées par $\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, on retrouve bien que, lorsque p est une mesure de Gibbs p_{Gibbs} ,

$\bar{\Psi}_{\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n}[p_{\text{Gibbs}}] = \bar{\psi}(\beta, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$, où $\bar{\psi}$ est le potentiel thermodynamique associé à l'ensemble statistique considéré. Notons que les fonctions $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \Psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}[p_{\text{Gibbs}}]$ sont appelées “potentiels de Massieu”. Ce sont les transformées de Legendre de l'entropie, plutôt que de l'énergie. Ces potentiels sont également extrémalisés à l'équilibre thermodynamique.

Annexe B

Décroissance de la production d'entropie sous coarse-graining

On illustre ici la décroissance de l'entropie (informationnelle) sous coarse-graining, ou plus précisément sous *marginalisation* :

$$\Sigma \geq \Sigma^{\text{pr}} \quad (\text{B.1})$$

où Σ est la divergence de Kullback-Leibler (ou D_{KL}) entre deux mesures \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2 définies sur un même espace : $\Sigma = D_{KL}(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2)$ et Σ^{pr} est la D_{KL} entre deux marginales $\mathcal{P}_1^{\text{pr}}$ et $\mathcal{P}_2^{\text{pr}}$ de \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2 respectivement (ou l'on a opéré la même marginalisation sur les deux mesures). En effet, si on suppose par exemple que ces deux mesures sont des probabilités de chemins sur un espace de phase, on peut intégrer la vitesse pour obtenir :

$$\begin{aligned} \Sigma &= D_{KL}(\mathcal{P}_1 | \mathcal{P}_2) \\ &= \int D[\mathbf{r}_t] D[\mathbf{v}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t] \log \frac{\mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t]}{\mathcal{P}_2[\mathbf{r}_t, \mathbf{v}_t]} \\ &= \int D[\mathbf{r}_t] D[\mathbf{v}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t] \log \frac{\mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t]}{\mathcal{P}_2[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] \mathcal{P}_2[\mathbf{r}_t]} \\ &= \int D[\mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t] \int D[\mathbf{v}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] \log \frac{\mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t]}{\mathcal{P}_2[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t]} + \int D[\mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t] \log \frac{\mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t]}{\mathcal{P}_2[\mathbf{r}_t]} \underbrace{\int D[\mathbf{v}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t]}_{=1} \\ &= \underbrace{\int D[\mathbf{r}_t] \mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t] \underbrace{D_{KL}(\mathcal{P}_1[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t] | \mathcal{P}_2[\mathbf{v}_t | \mathbf{r}_t])}_{\geq 0}}_{\geq 0} + \underbrace{D_{KL}(\underbrace{\mathcal{P}_1[\mathbf{r}_t]}_{\equiv \mathcal{P}_1^{\text{pr}}} | \underbrace{\mathcal{P}_2[\mathbf{r}_t]}_{\equiv \mathcal{P}_2^{\text{pr}}})}_{D_{KL}(\mathcal{P}_1^{\text{pr}} | \mathcal{P}_2^{\text{pr}})} \\ &\geq \Sigma^{\text{pr}} \equiv D_{KL}(\mathcal{P}_1^{\text{pr}} | \mathcal{P}_2^{\text{pr}}) \end{aligned}$$

Annexe C

Actions de groupe

Deux définitions équivalentes. Soit G un groupe et X un ensemble. On dit que G agit, ou opère sur X s'il existe une application

$$\begin{aligned} G \times X &\longrightarrow X \\ (g, x) &\longmapsto g \cdot x \end{aligned}$$

telle que

- (i) $\forall x \in X, e \cdot x = x$ où e est le neutre de G .
- (ii) $\forall x \in X, \forall g, g' \in G, g \cdot (g' \cdot x) = (gg') \cdot x$

où on a noté multiplicativement la loi de G . Une telle opération \cdot est appelée *action* de G sur X . On dit encore que X est un *G-ensemble*.

Un définition équivalente consiste à dire que G agit sur X s'il existe un morphisme de groupe

$$\begin{aligned} \phi : G &\longrightarrow S(X) \\ g &\longmapsto \phi_g \end{aligned}$$

où $S(X)$ est l'ensemble des bijection de X dans X . On rappelle que ceci suppose simplement que $\forall g, g' \in G, \phi_{gg'} = \phi_g \circ \phi_{g'}$.

L'équivalence entre les deux définitions est obtenu par la relation $\phi_g(x) = g \cdot x$.

Par ailleurs, notons qu'on vient en fait de définir la notion *d'action à gauche*, et qu'il existe une notion similaire *d'action à droite*.

Involution et action de \mathbb{Z}_2 . Soit s une involution sur un ensemble X , i.e. une application de X dans X telle que $sos = id_X$, où id_X est l'application identité de X .

On définit alors l'application $\phi : \mathbb{Z}_2 \rightarrow S(X)$ telle que $\phi(0) = id_X$ et $\phi(1) = s$. On vérifie aisément que ϕ est bien un morphisme de groupe de $(\mathbb{Z}_2, +)$ dans $(S(X), \circ)$. On peut ainsi associer – de manière naturelle et bijective – à toute involution sur un ensemble une action de \mathbb{Z}_2 sur ce même ensemble, et réciproquement.

Composition d'actions. Soit X un ensemble muni de deux actions d'un même groupe G . On désigne dans ce paragraphe ces actions par les morphismes de groupe associés $\phi : G \rightarrow S(X)$ et $\psi : G \rightarrow S(X)$. On aimerait savoir s'il est possible de construire de nouvelles actions sur X en composant ϕ et ψ , dans un ordre ou dans l'autre :

$$\begin{aligned}\Omega^{(1)} &: G \longrightarrow S(X) \\ g &\longmapsto \Omega_g^{(1)} \equiv \phi_g \circ \psi_g\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\Omega^{(2)} &: G \longrightarrow S(X) \\ g &\longmapsto \Omega_g^{(2)} \equiv \psi_g \circ \phi_g\end{aligned}$$

Puisque $\phi_e = \psi_e = id_X$ (où e est le neutre de G et id_X l'application identité de X), on a bien $\Omega_e^{(i)} = id_X$. Pour que, par exemple, $\Omega^{(1)}$ soit une véritable action de G sur X , il faut de plus que $\Omega_{gg'}^{(1)} = \Omega_g^{(1)} \circ \Omega_{g'}^{(1)}$. Or on a d'une part

$$\Omega_{gg'}^{(1)} = \phi_{gg'} \circ \psi_{gg'} = \phi_g \circ \phi_{g'} \circ \psi_g \circ \psi_{g'}$$

et d'autre part

$$\Omega_g^{(1)} \circ \Omega_{g'}^{(1)} = \phi_g \circ \psi_g \circ \phi_{g'} \circ \psi_{g'}$$

En composant les deux dernières égalités à gauche par $\phi_{g^{-1}}$ et à droite par $\psi_{g'^{-1}}$, on obtient finalement la condition pour que $\Omega^{(1)}$ corresponde bien à une action de groupe : *on doit avoir la commutativité des actions initiales* $\forall g, g' \in G, \phi_{g'} \circ \psi_g = \psi_g \circ \phi_{g'}$. Dans ce cas, $\Omega^{(1)} = \Omega^{(2)}$ correspondent à une même action bien définie, obtenue par composition des deux actions initiales.

Action induite. Si X et Y sont deux G -ensembles, il existe une manière naturelle de définir une action sur l'ensemble Y^X des applications de X dans Y . Si les action de G sur X et Y sont respectivement notées $*$ et \star , on définit l'action \cdot de G sur Y^X par :

$$\forall g \in G, \forall f \in Y^X, \forall x \in X, (g \cdot f)(x) = g \star f(g^{-1} * x)$$

Ceci définit bien une action puisque le neutre de G laisse f inchangée et que

$$\begin{aligned}[(gg') \cdot f](x) &= (gg') \star f[(gg')^{-1} * x] \\ &= g \star [g' \star f[g'^{-1} * (g * x)]] \\ &= [g \cdot (g' \cdot f)](x)\end{aligned}$$

Application équivariante. En reprenant les notations du paragraphe, si $f : X \rightarrow Y$ est une application entre deux G -ensembles, on dit que f est *équivariante* si

$$\forall g \in G, \forall x \in X, f(g * x) = g \star f(x)$$

Notons que ceci est équivalent au fait que f soit *invariante sous l'action induite*. définit au paragraphe précédent.

Transport d'action. La classe des G -ensembles constitue une *catégorie* dont les *morphismes* sont justement les applications équivariantes. Autrement dit, de même que les applications linéaires sont exactement les applications qui préserment la structure d'espace vectoriel, les applications équivariantes sont exactement celles qui préserment la structure de G -ensemble. Cette situation permet de *transporter la structure* d'un ensemble à un autre. L'idée générale est de partir d'un ensemble munie de la structure d'intérêt, de considérer une application de cet ensemble dans un autre (non structuré) et de définir la structure en question sur l'ensemble d'arrivée en décrétant que l'application est un morphisme pour cette structure. Il y a bien évidemment des conditions, spécifiques à chaque structure, à vérifier pour s'assurer que la structure ainsi transportée est définie de manière univoque. Voyons ce que cela donne pour la structure de G -ensemble.

Soit X un ensemble muni d'une action $*$ d'un groupe G . Soit Y un ensemble. Soit $f : X \rightarrow Y$. On voudrait alors définir sur Y une action \star de G en "transportant" celle de X via f . Pour cela, on voudrait définir $\forall y \in Y$,

$$g \star y = f(g * x), \text{ où } x \in f^{-1}(y).$$

On constate d'emblée qu'une première condition nécessaire est la *surjectivité* de f . Ensuite, il faut pour que cette action soit correctement définie, que

$$\forall y \in Y, \forall x, x' \in f^{-1}(y), f(g * x) = f(g * x').$$

Autrement dit, il faut que *l'action de G sur X préserve les pré-images d'éléments de Y par f* . Cette condition permet de définir de manière *univoque* une action sur Y . Cette condition, ajoutée à la surjectivité de f , permet de définir correctement et sans ambiguïté une action sur Y , puisqu'on a bien $(gg') \star y = f[(gg') * x] = f[g * (g' * x)] = g \star (g' \star x)$, ainsi que $e \star y = f(e * x) = f(x) = y$. Notons que, dans les cas où l'action \star peut bien être définie, f est équivariante par construction de \star .

Enfin, on constate que la bijectivité de f est une condition suffisante au transport de l'action de X à Y .

G-ensembles équivalents et points fixes. Soit X et Y deux G -ensembles. On dit qu'ils sont G -équivalents s'il existe une bijection équivariante entre X et Y .

En particulier, si on note f une telle bijection, *tout point fixe* x_0 dans X — i.e. un élément de X tel que $g \cdot x_0 = x_0$ pour tout $g \in G$ — a pour image un élément $y_0 = f(x_0)$ dans Y qui est *également un point fixe* pour l'action de G sur Y . En effet si $g \in G$, $g \cdot y_0 = g \cdot f(x_0) = f(g \cdot x_0) = f(x_0) = y_0$, où on a utilisé l'équivariance de f .

Annexe D

PT-symétrie

D.1 Mesure à deux points et mesure stationnaire

On se donne deux point \mathbf{x} et $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$, ainsi que deux temps $\tau, t \in \mathbb{T}$ avec $\tau \leq t$. En intégrant la relation $\bar{\mathcal{P}}[(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathbb{T}}] = \mathcal{P}[(\mathbf{p}(\mathbf{x}_{\tau-t}))_{t \in \mathbb{T}}]$ sur : toutes les trajectoires atteignant \mathbf{y} au temps τ ; puis sur toutes les trajectoire partant de \mathbf{y} à τ et arrivant en \mathbf{x} à t ; et enfin sur toutes les trajectoire partant de \mathbf{x} à t et arrivant n'importe où à \mathcal{T} , on obtient la mesure à deux points du processus pt-dual :

$$\bar{p}(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) = p(\mathbf{p}(\mathbf{y}), \mathcal{T} - \tau, \mathbf{p}(\mathbf{x}), \mathcal{T} - t) \quad (\text{D.1})$$

Notons que les processus duals \mathbf{X}_t et $\bar{\mathbf{X}}_t$ étant dans leur état stationnaire par hypothèse, si on fait tendre $t \mapsto \tau$ dans l'équation précédente (D.1), on obtient :

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\bar{p}_{ss}(\mathbf{y}) = \delta(\mathbf{p}(\mathbf{x}) - \mathbf{p}(\mathbf{y}))p_{ss}(\mathbf{p}(\mathbf{x})) = \frac{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{|\det J_{\mathbf{p}}|}p_{ss} \circ \mathbf{p}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})p_{ss} \circ \mathbf{p}(\mathbf{x})$$

où la dernière égalité vient du fait que le jacobien $J_{\mathbf{p}}$ de \mathbf{p} est tel que $\det(J_{\mathbf{p}}) = \pm 1$, \mathbf{p} étant une involution. Ainsi, on obtient le lien entre les mesures stationnaires (à un point) de nos deux processus adjoints :

$$\bar{p}_{ss} = p_{ss} \circ \mathbf{p} \quad (\text{D.2})$$

D.2 Opérateur adjoint – expression formelle

On démontre ici que l'opérateur d'évolution $\bar{\mathcal{W}}$ du processus adjoint a pour expression formelle :

$$\bar{\mathcal{W}} = \mathfrak{P}p_{ss}\mathcal{W}^\dagger p_{ss}^{-1}\mathfrak{P} \quad (\text{D.3})$$

où l'opérateur \mathfrak{P} agit sur les fonctions $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ via $\mathfrak{P}f : \mathbf{x} \mapsto f \circ \mathfrak{p}(\mathbf{x})$, et où \mathcal{W}^\dagger est l'opérateur dual de \mathcal{W} au sens \mathbb{L}^2 (pour la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d).

Pour ce faire, on utilise le fait que le “propagateur” $p(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau)$ satisfait l'équation “backward” de Kolmogorov : $\partial_\tau p(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau) = -\mathcal{W}_\mathbf{y}^\dagger p(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau)$ — où l'indice de \mathcal{W}^\dagger indique la variable à laquelle l'opérateur s'applique — tandis que le propagateur du processus dual satisfait l'équation de Kolmogorov forward (Fokker-Planck) $\partial_t \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau) = \bar{\mathcal{W}}_\mathbf{x} \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau)$. On obtient :

$$\begin{aligned}
\partial_t \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau) &= \partial_t \bar{p}(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) \\
&= \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) \partial_t p(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), T - \tau, \mathfrak{p}(\mathbf{x}), T - t) \\
&= -\bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial(T-t)} p(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), T - \tau | \mathfrak{p}(\mathbf{x}), T - t) p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \\
&= \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \mathcal{W}_{\mathfrak{p}(\mathbf{x})}^\dagger p(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), T - \tau | \mathfrak{p}(\mathbf{x}), T - t) \\
&= \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \mathcal{W}_{\mathfrak{p}(\mathbf{x})}^\dagger p(\mathfrak{p}(\mathbf{y}), T - \tau, \mathfrak{p}(\mathbf{x}), T - t) p_{ss}^{-1}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \\
&= \bar{p}_{ss}^{-1}(\mathbf{y}) p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \mathcal{W}_{\mathfrak{p}(\mathbf{x})}^\dagger p_{ss}^{-1}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \bar{p}(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, \tau) \\
&= p_{ss}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \mathcal{W}_{\mathfrak{p}(\mathbf{x})}^\dagger p_{ss}^{-1}(\mathfrak{p}(\mathbf{x})) \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau) \\
&= \mathfrak{P} p_{ss}(\mathbf{x}) \mathcal{W}_\mathbf{x}^\dagger p_{ss}^{-1}(\mathbf{x}) \mathfrak{P} \bar{p}(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, \tau)
\end{aligned}$$

D.3 Opérateur adjoint – expression explicite

On démontre ici que l'opérateur d'évolution adjoint $\bar{\mathcal{W}}$ a pour expression explicite

$$\bar{\mathcal{W}}\psi = -\nabla \cdot \left[\left(2J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} F \circ \mathfrak{p} \right) \psi - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \psi \right] \quad (\text{D.4})$$

Pour cela, on prend $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction lisse.

$$\begin{aligned}
\bar{\mathcal{W}}^\dagger f &= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \mathcal{W} p_{ss} \mathfrak{P} f \\
&= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left(-\nabla \cdot p_{ss} F \mathfrak{P} f + \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla p_{ss} \mathfrak{P} f \right) \\
&= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left(-p_{ss} F \cdot \nabla f \circ \mathfrak{p} \underbrace{-f \circ \mathfrak{p} \nabla \cdot p_{ss} F + f \circ \mathfrak{p} \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla p_{ss}}_{=0 \text{ car } p_{ss} \text{ est stationnaire}} \right. \\
&\quad \left. + 2 \nabla p_{ss} \cdot \mathbf{D} \nabla f \circ \mathfrak{p} + p_{ss} \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla f \circ \mathfrak{p} \right) \\
&= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left(-p_{ss} F \cdot \mathfrak{P} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f + 2 \nabla p_{ss} \cdot \mathbf{D} \mathfrak{P} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f + p_{ss} \nabla \cdot \mathbf{D} \mathfrak{P} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f \right) \\
&= -F \circ \mathfrak{p} \cdot J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f + 2 \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f \cdot \mathfrak{P} \nabla \log p_{ss} + \nabla \cdot J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f \\
&= -F \circ \mathfrak{p} \cdot J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f + 2 \nabla f \cdot J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} + \nabla \cdot J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f \\
&= \left[2 J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} F \circ \mathfrak{p} \right] \cdot \nabla f + \nabla \cdot J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f
\end{aligned}$$

Dans le calcul ci-dessus, on a essentiellement utilisé le fait que $\nabla f \circ \mathfrak{p} = \mathfrak{P} J_{\mathfrak{p}}^t \nabla f$. Il suffit enfin de transposer l'opérateur $\bar{\mathcal{W}}^\dagger$ (au sens \mathbb{L}^2) pour obtenir l'opérateur $\bar{\mathcal{W}}$.

Annexe E

Irréversibilité globale et existence d'une trajectoire irréversible

On démontre que l'irréversibilité au sens de la T-symétrie est équivalente à l'existence d'un chemin $C_{A \rightarrow B}$ entre deux points A et B tel que $\mathcal{P}[C_{A \rightarrow B}] \neq \mathcal{P}[C_{B \rightarrow A}]$.

Pour toute trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathcal{T}}$, on pose $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathcal{T}} \equiv (\mathbf{x}_{\mathcal{T}-t})_{t \in \mathcal{T}}$. On calcule la production d'entropie sur l'intervalle $\mathbb{T} = [0; \mathcal{T}]$:

$$\begin{aligned}\Sigma &= \int D[\mathbf{x}_t] \mathcal{P}[\mathbf{x}_t] \log \frac{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]}{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]} \\ &= \frac{1}{2} \left(\int D[\mathbf{x}_t] \mathcal{P}[\mathbf{x}_t] \log \frac{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]}{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]} + \int D[\bar{\mathbf{x}}_t] \mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t] \log \frac{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]}{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]} \right) \\ &= \frac{1}{2} \int D[\mathbf{x}_t] \left(\mathcal{P}[\mathbf{x}_t] - \mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t] \right) \log \frac{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]}{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]}\end{aligned}$$

où on a simplement groupé les trajectoires $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathcal{T}}$ et leur T-symétrique $(\bar{\mathbf{x}}_t)_{t \in \mathcal{T}}$. Or la fonction $(x, y) \in (\mathbb{R}_+^*)^2 \mapsto (x - y) \log(x/y)$ étant partout positive ou nulle, on a $(\mathcal{P}[\mathbf{x}_t] - \mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]) \log \frac{\mathcal{P}[\mathbf{x}_t]}{\mathcal{P}[\bar{\mathbf{x}}_t]} \geq 0$ pour toute trajectoire $(\mathbf{x}_t)_{t \in \mathcal{T}}$. Ainsi il suffit qu'il existe une unique trajectoire pour laquelle cette dernière quantité soit strictement positive (en supposant continue pour un topologie adéquate) pour que $\Sigma > 0$. Réciproquement, la stricte positivité de Σ implique l'existence d'une telle trajectoire, qu'il est plus probable de parcourir dans un sens que dans l'autre.

Annexe F

Réversibilité de l'équation de Langevin sous-amortie et force gradient

On considère l'équation de Langevin sous-amortie sur \mathbb{R}^d :

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} \quad (\text{F.1})$$

$$m\dot{\mathbf{v}} = -\gamma\mathbf{v} + \mathbf{f}(\mathbf{r}) + \sqrt{2\gamma k_B T}\eta \quad (\text{F.2})$$

où $\eta(t)$ est un bruit blanc gaussien de moyenne nulle et de variance unité. On peut réécrire cette dynamique comme suit :

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{F}(\mathbf{X}) + \Lambda \quad (\text{F.3})$$

avec

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -\gamma\mathbf{v}/m + \mathbf{f}/m \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \gamma k_B T/m^2 \end{pmatrix} \quad (\text{F.4})$$

Si on considère l'involution $\mathfrak{p}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \mapsto (\mathbf{r}, -\mathbf{v})$ alors sa matrice jacobienne est

$$J_{\mathfrak{p}} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (\text{F.5})$$

où \mathbf{I} est la matrice identité de taille $d \times d$. On peut ensuite écrire la force et la matrice de diffusion associé au processus \mathfrak{pt} -inverse

$$\bar{\mathbf{D}} = J_{\mathfrak{p}} \mathbf{D} J_{\mathfrak{p}}^t = \mathbf{D} \quad (\text{F.6})$$

et

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{F}} &= 2\bar{\mathbf{D}}\nabla_{\mathbf{x}} \log p_{ss} \circ \mathbf{p} - J_{\mathbf{p}}\mathbf{F} \circ \mathbf{p} \\ &= \frac{2\gamma k_B T}{m^2} \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla_{\mathbf{v}} \log p_{ss} \circ \mathbf{p} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\mathbf{v} \\ -\gamma \mathbf{v}/m - \mathbf{f}/m \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Supposons maintenant que le processus considéré soit pt-réversible. Ceci implique d'une part que $p_{ss} \circ \mathbf{p} = p_{ss}$, et d'autre part (ayant déjà $b\bar{D} = \mathbf{D}$) que $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}$. On a ainsi

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ -\gamma \mathbf{v}/m + \mathbf{f}/m \end{pmatrix} = \frac{2\gamma k_B T}{m^2} \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla_{\mathbf{v}} \log p_{ss} \circ \mathbf{p} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\mathbf{v} \\ -\gamma \mathbf{v}/m - \mathbf{f}/m \end{pmatrix} \quad (\text{F.7})$$

c'est à dire

$$\nabla_{\mathbf{v}} \log p_{ss}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = -\frac{m}{k_B T} \mathbf{v} \quad (\text{F.8})$$

Ce qui implique qu'il existe une fonction $\psi(\mathbf{r})$ de la seule variable de position, à valeurs dans \mathbb{R} , telle que la mesure stationnaire s'écrit :

$$p_{ss}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{m|\mathbf{v}|^2}{2k_B T}} e^{-\psi(\mathbf{r})}. \quad (\text{F.9})$$

Mais il existe une condition supplémentaire reliant la force $\mathbf{f}(\mathbf{r})$ et la fonction $\psi(\mathbf{r})$, imposé par la condition de stationnarité de p_{ss} , que l'on trouve en injectant (F.9) dans l'équation de Fokker–Planck associée à la dynamique :

$$\partial_t p_{ss} = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot (p_{ss} \mathbf{v}) - \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left(p_{ss} \left[-\frac{\gamma}{m} \mathbf{v} + \frac{1}{m} \mathbf{f} - \frac{\gamma k_B T}{m^2} \nabla_{\mathbf{v}} \log p_{ss} \right] \right) \quad (\text{F.10})$$

c'est à dire

$$0 = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} p_{ss} - \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (p_{ss} \mathbf{f}(\mathbf{r})) \quad (\text{F.11})$$

ce qui se réécrit, après quelques simplifications :

$$\frac{p_{ss}}{k_B T} \mathbf{v} \cdot [\mathbf{f}(\mathbf{r}) + k_B T \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})]. \quad (\text{F.12})$$

Ceci devant être vrai pour tout \mathbf{r} et tout \mathbf{v} , on a nécessairement que

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) = -k_B T \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{F.13})$$

Ainsi la réversibilité au sens du pt-bilan détaillé (qui est équivalente à la réversibilité thermodynamique) a lieu si et seulement si le champ de force $\mathbf{f}(\mathbf{r})$ est un champ gradient, auquel cas la mesure stationnaire est de type Boltzmann–Gibbs ce qui implique que le système est également réversible au sens des ensembles statistiques.

Annexe G

Matière active et chaleur dissipée

Dans cette section, on montre qu'à l'état stationnaire, une AOUP dissipe une énergie strictement positive sous forme de chaleur. On considère la dynamique

$$\dot{\mathbf{r}}_t = \mathbf{v}_t^a - \zeta \nabla V(\mathbf{r})_t + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\eta}_t \quad (\text{G.1})$$

$$\dot{\mathbf{v}}_t^a = -\frac{1}{\tau} \mathbf{v}_t^a + \sqrt{\frac{2D_a}{\tau^2}} \boldsymbol{\xi}_t \quad (\text{G.2})$$

où ζ est la mobilité de la particule, D_t l'amplitude du bruit translationnel, τ le temps de corrélation de l'autopropulsion et D_a un paramètre de contrôle du bruit actif. $\boldsymbol{\eta}$ et $\boldsymbol{\xi}$ sont quant à eux des bruits blancs gaussiens centrés, de variance unité, et indépendants entre eux. On pose alors

$$\mathbf{X} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{v}^a \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{X}) \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{v}^a - \zeta \nabla V(\mathbf{r}) \\ -\mathbf{v}^a / \tau \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{D} \equiv \begin{pmatrix} D_t & 0 \\ 0 & D_a / \tau^2 \end{pmatrix} \quad (\text{G.3})$$

Ce qui permet de réécrire la dynamique ci-dessus comme suit :

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \sqrt{2} \mathbf{D}^{1/2} \boldsymbol{\Lambda}_t \quad (\text{G.4})$$

où

$$\boldsymbol{\Lambda}_t \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{\eta}_t \\ \boldsymbol{\xi}_t \end{pmatrix}. \quad (\text{G.5})$$

Une légère généralisation du calcul (2.5) effectué à la section 2.1 dans la cas de l'équation de Langevin sur-amortie permet de conclure que la production d'entropie informationnelle associée à la T-symétrie de notre particule d'Ornstein-Uhlenbeck est donnée par

$$\sigma = \langle \dot{\mathbf{X}}_t \cdot \mathbf{D}^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) \rangle \quad (\text{G.6})$$

où les crochets indiquent la moyenne contre la mesure stationnaire. On peut développer un peu plus l'expression de σ :

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{1}{D_t} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{v}_t^a - \zeta \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}_t) \rangle - \frac{\tau}{D_a} \langle \dot{\mathbf{v}}_t^a \cdot \mathbf{v}^a \rangle \\ &= \frac{1}{D_t} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{v}_t^a \rangle - \frac{\zeta}{D_t} \frac{d}{dt} \zeta \langle V(\mathbf{r}_t) \rangle - \frac{\tau}{2D_a} \frac{d}{dt} \langle |\mathbf{v}^a|^2 \rangle\end{aligned}$$

Mais puisque l'on est dans l'état stationnaire :

$$\sigma = \frac{1}{D_t} \langle \dot{\mathbf{r}}_t \cdot \mathbf{v}_t^a \rangle \quad (\text{G.7})$$

Or, on a vu dans la section 2.3.1 que le taux de production d'entropie d'une dynamique de la forme (G.4) s'annule ssi il existe un potentiel scalaire $\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a)$ tel que

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a) = -D \nabla \Omega = - \left(\frac{D_t \nabla_{\mathbf{r}} \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a)}{\frac{D_a}{\tau^2} \nabla_{\mathbf{v}^a} \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a)} \right). \quad (\text{G.8})$$

mais l'expression (G.3) de \mathbf{F} donne d'une part

$$\frac{D_a}{\tau^2} \nabla_{\mathbf{v}^a} \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a) = \frac{1}{\tau} \mathbf{v}^a \quad (\text{G.9})$$

i.e.

$$\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a) = \frac{\tau}{2D_a} |\mathbf{v}^a|^2 + \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{G.10})$$

(où $\psi(\mathbf{r})$ est une fonction de la seule variable \mathbf{r} à valeur dans \mathbb{R}), et d'autre part :

$$\nabla_{\mathbf{r}} \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{v}^a) = \frac{\zeta}{D_t} \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) - \frac{1}{D_t} \mathbf{v}^a. \quad (\text{G.11})$$

Ce qui implique donc que

$$\frac{1}{D_t} \mathbf{v}^a = \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) - \frac{\zeta}{D_t} \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (\text{G.12})$$

Ce qui est impossible puisque le membre de gauche est une fonction (non constante) de la variable \mathbf{v}^a tandis que le membre de droite est une fonction de la seule variable \mathbf{r} . Ainsi un tel potentiel Ω pas dans le cas de la dynamique considéré dans cette section.

On peut ainsi conclure que $\sigma > 0$ et donc, à partir de l'équation (G.7), que la force active $\mathbf{f}^a = \zeta^{-1} \mathbf{v}^a$ dissipe bien une quantité strictement positive d'énergie sous forme de chaleur, à l'état stationnaire.

Annexe H

Opérateur d'évolution PT–dual : généralisation aux bruits multiplicatifs

On considère l'EDS suivante, définie sur \mathbb{R}^d au sens de Stratonovich :

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \sqrt{2}\mathbf{A}(\mathbf{X}_t)\boldsymbol{\eta}_t \quad (\text{H.1})$$

où \mathbf{A} est une matrice de taille $d \times d$ et $\boldsymbol{\eta}_t$ est un bruit blanc gaussien centré tel que $\langle \eta_t^\alpha \eta_{t'}^\beta \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(t - t')$. L'opérateur d'évolution associé à l'équation de Fokker–Planck est :

$$\mathcal{W}p = -\nabla \cdot [p\mathbf{F} - \mathbf{A} \cdot \nabla \cdot (\mathbf{A}p)] \quad (\text{H.2})$$

se qui s'écrit, dans une base orthonormale quelconque :

$$\mathcal{W}p = -\partial_i [pF^i - A^{ij}\partial_k (A^{kj}p)] \quad (\text{H.3})$$

Pour une involution linéaire \mathfrak{p} quelconque, l'opérateur \mathfrak{pt} –dual est encore donné par :

$$\bar{\mathcal{W}}^\dagger = \mathfrak{P}p_{ss}^{-1}\mathcal{W}p_{ss}\mathfrak{P} \quad (\text{H.4})$$

On peut alors monter que la forme explicite de $\bar{\mathcal{W}}$ est :

$$\bar{\mathcal{W}}p = -\nabla \cdot [p\bar{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{A}} \cdot \nabla \cdot (\bar{\mathbf{A}}p)] \quad (\text{H.5})$$

avec

$$\bar{\mathbf{A}} = J_{\mathfrak{p}}\mathbf{A} \circ \mathfrak{p} \quad (\text{H.6})$$

et

$$\bar{\mathbf{F}} = 2\bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{A}}^t \nabla \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}} \mathbf{F} \circ \mathfrak{p} + 2\bar{\mathbf{A}} \cdot \nabla \cdot \bar{\mathbf{A}} \quad (\text{H.7})$$

En effet, si f est une fonction suffisamment régulière :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{W}}^\dagger f &= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \mathcal{W} p_{ss} \mathfrak{P} f \\ &= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left\{ -\partial_i [F^i p_{ss} f \circ \mathfrak{p} - A^{ij} \partial_k (A^{kj} p_{ss} f \circ \mathfrak{p})] \right\} \\ &= \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} \left\{ -F^i p_{ss} \partial_i f \circ \mathfrak{p} - f \circ \mathfrak{p} \partial_i F^i p_{ss} + f \circ \mathfrak{p} (\partial_i A^{ij} \partial_k A^{kj} p_{ss}) \right. \\ &\quad \left. + (\partial_i f \circ \mathfrak{p}) (A^{ij} \partial_k A^{kj} p_{ss}) + (\partial_i A^{kj} p_{ss} A^{ij}) (\partial_k f \circ \mathfrak{p}) + A^{kj} p_{ss} A^{ij} (\partial_i \partial_k f \circ \mathfrak{p}) \right\} \\ &= -F^i \circ \mathfrak{p} J_{\mathfrak{p}}^{ji} \partial_j f + (J_{\mathfrak{p}}^{li} \partial_l f) \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} (A^{ij} \partial_k A^{kj} p_{ss} + \partial_k A^{ij} A^{kj} p_{ss}) \\ &\quad + (J_{\mathfrak{p}}^{ni} J_{\mathfrak{p}}^{lk} \partial_n \partial_l f) \mathfrak{P} (A^{ij} A^{kj}) \end{aligned}$$

où on a développé les dérivées partielles, puis simplifié les termes correspondant à la divergence du courant stationnaire, et enfin on a utilisé le fait que $\partial_i f \circ \mathfrak{p} = J_{\mathfrak{p}}^{ji} \mathfrak{P} \partial_j f$. Il suffit maintenant de calculer l'adjoint au sens \mathbb{L}^2 de $\bar{\mathcal{W}}^\dagger$:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{W}} \psi &= \partial_j (\psi J_{\mathfrak{p}}^{ji} F^i \circ \mathfrak{p}) + \partial_n \partial_l (\psi J_{\mathfrak{p}}^{ni} J_{\mathfrak{p}}^{lk} \mathfrak{P} A^{kj} A^{ij}) \\ &\quad - \partial_l \left\{ \psi J_{\mathfrak{p}}^{li} \mathfrak{P} p_{ss}^{-1} (A^{ij} \partial_k A^{kj} p_{ss} + \partial_k A^{ij} A^{kj} p_{ss}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{H.8})$$

Ce qui, après quelques simplifications, donne :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{W}} \psi &= -\partial_l \left\{ -J_{\mathfrak{p}}^{lk} A^{kj} \circ \mathfrak{p} \partial_n J_{\mathfrak{p}}^{ni} A^{ij} \psi + \left[-J_{\mathfrak{p}}^{li} F^i \circ \mathfrak{p} + 2J_{\mathfrak{p}}^{lk} A^{kj} \circ \mathfrak{p} \partial_n J_{\mathfrak{p}}^{ni} A^{ij} \circ \mathfrak{p} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2J_{\mathfrak{p}}^{li} J_{\mathfrak{p}}^{nk} A^{ij} \circ \mathfrak{p} A^{kj} \circ \mathfrak{p} \partial_n \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} \right] \psi \right\} \end{aligned} \quad (\text{H.9})$$

En posant

$$\bar{A}^{ij} \equiv J_{\mathfrak{p}}^{ik} A^{kj} \circ \mathfrak{p} \quad (\text{H.10})$$

et

$$\bar{F}^l \equiv \bar{A}^{lj} \bar{A}^{nj} \partial_n \log p_{ss} \circ \mathfrak{p} - J_{\mathfrak{p}}^{li} F^i \circ \mathfrak{p} - 2\bar{A}^{lj} \partial_n \bar{A}^{nj} \quad (\text{H.11})$$

on obtient bien le résultat annoncé.

Annexe I

Mouvement brownien biaisé en espace courbe, T-réversibilité et descente de gradient

On considère la même EDS (au sens de Stratonovich) que celle de l'appendice H :

$$\dot{\mathbf{X}}_t = \mathbf{F}(\mathbf{X}_t) + \sqrt{2}\mathbf{A}(\mathbf{X}_t)\boldsymbol{\eta}_t \quad (\text{I.1})$$

On pose alors $\mathbf{G}(\mathbf{x}) = (\mathbf{A}\mathbf{A}^t)^{-1}(\mathbf{x})$, que l'on suppose définie positive et que l'on va considéré comme un tenseur métrique. Dans un base quelconque $(\mathbf{e}_i)_{i=1,\dots,d}$, on note g^{ij} les coordonnées de \mathbf{G}^{-1} et g_{ij} celle de \mathbf{G} (dans la base duale). Ensuite, on définit la mesure de volume riemannienne

$$\mu(d\mathbf{x}) \equiv \omega(\mathbf{x})d\mathbf{x} \quad (\text{I.2})$$

où $d\mathbf{x}$ est la mesure de Lebesgue de \mathbb{R}^d et où

$$\omega(\mathbf{x}) \equiv \sqrt{\det[\mathbf{G}(\mathbf{x})]} . \quad (\text{I.3})$$

Une mesure de probabilité $p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$ se réécrit alors $\tilde{p}(\mathbf{x})\mu(d\mathbf{x})$, et la relation entre les densités de probabilité est donc

$$\tilde{p}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{\omega(\mathbf{x})}p(\mathbf{x}) \quad (\text{I.4})$$

On définit ensuite les opérateurs gradient et divergence en espace courbe :

$$\tilde{\nabla}\phi \equiv \mathbf{G}^{-1}\nabla\phi \quad (\text{I.5})$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \Phi \equiv \frac{1}{\omega}\nabla \cdot (\omega\Phi) \quad (\text{I.6})$$

c'est à dire, en coordonnées :

$$[\tilde{\nabla}\phi]^i \equiv g^{ij}\partial_j\phi \quad (\text{I.7})$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \Phi \equiv \frac{1}{\omega}\partial_i(\omega\Phi^i) \quad (\text{I.8})$$

où ϕ et Φ sont des applications quelconques à valeurs scalaires et vectorielles, respectivement. L'équation de Fokker–Planck associée à l'équation (I.1) est

$$\partial_t p = -\nabla \cdot [p\mathbf{F} - \mathbf{A} \cdot \nabla \cdot (\mathbf{A}p)] \quad (\text{I.9})$$

c'est à dire, en coordonnées :

$$\partial_t p = -\partial_i [pF^i - A^{ij}\partial_k(A^{kj}p)] \quad (\text{I.10})$$

tout d'abord, on remarque que

$$\begin{aligned} A^{ij}\partial_k A^{kj}p &= A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega\tilde{p} \\ &= \omega A^{ij}A^{kj}\partial_k\tilde{p} + \tilde{p}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega \\ &= \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p} + \tilde{p}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega. \end{aligned}$$

L'équation de Fokker–Planck se réécrit alors

$$\partial_t p = -\partial_i [pF^i - \tilde{p}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega - \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p}] \quad (\text{I.11})$$

$$= -\partial_i [\omega\tilde{p}F^i - \tilde{p}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega - \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p}] \quad (\text{I.12})$$

$$= -\partial_i [\omega\tilde{p}\left(F^i - \frac{1}{\omega}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega\right) - \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p}] \quad (\text{I.13})$$

en divisant l'équation par ω , on obtient

$$\partial_t \tilde{p} = -\frac{1}{\omega}\partial_i \left[\omega\tilde{p}\left(F^i - \frac{1}{\omega}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega\right) - \omega g^{ik}\partial_k\tilde{p}\right] \quad (\text{I.14})$$

c'est à dire

$$\partial_t \tilde{p} = -\tilde{\nabla} \cdot [\tilde{p}\tilde{\mathbf{F}} - \tilde{\nabla}\tilde{p}] \quad (\text{I.15})$$

avec

$$\tilde{F}^i \equiv F^i - \frac{1}{\omega}A^{ij}\partial_k A^{kj}\omega \quad (\text{I.16})$$

qui peut également s'écrire

$$\tilde{F}^i \equiv F^i - A^{ij}\partial_k A^{kj} - g^{ik}\partial_k \log \omega \quad (\text{I.17})$$

Par ailleurs, le couple $(\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{A}})$ du processus T-symétrique de (I.1) s'écrit (cf. appendice H) :

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} \quad (\text{I.18})$$

et

$$\bar{\mathbf{F}} = 2\mathbf{A}\mathbf{A}^t \nabla \log p_{ss} - \mathbf{F} + 2\mathbf{A} \cdot \nabla \cdot \mathbf{A} \quad (\text{I.19})$$

c'est à dire :

$$\bar{F}^i = 2g^{ij}\partial_j \log \tilde{p}_{ss} + 2g^{ij}\partial_j \log \omega - F^i + 2A^{ij}\partial_k A^{kj} \quad (\text{I.20})$$

La condition de réversibilité $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}$ s'écrit ainsi :

$$F^i - A^{ij}\partial_k A^{kj} - g^{ij}\partial_j \log \omega = g^{ij}\partial_j \log \tilde{p}_{ss} \quad (\text{I.21})$$

c'est à dire

$$\tilde{\mathbf{F}} = \tilde{\nabla} \log \tilde{p}_{ss} \quad (\text{I.22})$$

Autrement dit, comme dans le cas additif, un processus avec bruit multiplicatif est T-réversible ssi c'est une descente de gradient. Mais c'est descente de gradient est définie dans un géométrie courbe, dont la métrique est imposée par les corrélations du bruit, et le champ de force effectif est donné par (I.16).

Enfin, notons que la T-réversibilité, comme dans le cas avec bruit additif, est également équivalente à l'annulation du courant de probabilité.

Annexe J

Limite diffusive d'ABPs et RTPs en interaction quorum-sensing et taxie

On considère un ensemble de N particules actives dont les positions $\mathbf{r}_i \in E$ satisfont les dynamiques :

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v\mathbf{u}_i + \sqrt{2D_t}\boldsymbol{\eta}_i \quad (\text{J.1})$$

où les $\boldsymbol{\eta}_i$ sont des bruits blancs gaussiens centrés tels que $\langle \eta_i^\alpha(t)\eta_j^\beta(t') \rangle = \delta_{ij}\delta^{\alpha\beta}\delta(t-t')$, où D_t est une constante de diffusion translationnelle où les autopropulsions v^i sont données par

$$v^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = v_0^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + v_1 \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{J.2})$$

avec les v_0^i et c_i des fonctions quelconques des positions $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ et v_1 une constante. De plus on suppose que les vecteurs unitaires \mathbf{u}_i indiquant l'orientation des particules se réorientent aléatoirement sur \mathbb{S}^{d-1} , d'une part, selon un mécanisme de diffusion continu (au sens d'Ito) dont l'amplitude est donnée par

$$D_r^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \Theta_0 + \Theta_1 \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{J.3})$$

et, d'autre part, selon un mécanisme de saut dont les taux isotropes sont

$$\alpha^i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \alpha_0 + \alpha_1 \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{J.4})$$

avec α_0 et α_1 des constantes. Après rescaling diffusif, l'équation de Fokker–Planck associée à cette dynamique est :

$$\begin{aligned}\partial_t \psi = & -\sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[Lv_0^i \mathbf{u}_i \psi - v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \mathbf{u}_i^{\otimes 2} \psi - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \psi \right] \\ & + \sum_{i=1}^N \Delta_{\mathbf{u}_i} \left[(L^2 \Theta_0 + L \Theta_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \mathbf{u}_i) \psi \right] \\ & - \sum_{i=1}^N \left[L^2 \alpha_0 + L \alpha_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \mathbf{u}_i \right] \psi \\ & + \sum_{i=1}^N \int \frac{1}{\Omega} \left[L^2 \alpha_0 + L \alpha_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \mathbf{u}'_i \right] \psi(\mathbf{u}'_i, \{\mathbf{u}_j\}_{j \neq i}, \{\mathbf{r}_j\}_j) d\mathbf{u}'_i\end{aligned}\quad (\text{J.5})$$

En intégrant par rapport à tous les \mathbf{u}_i on obtient la dynamique de la marginale spatiale $\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$:

$$\partial_t \phi = - \sum_i \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[Lv_0^i \mathbf{a}_i^1 - v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left(\mathbf{a}_i^2 + \frac{1}{d} \mathbf{I} \phi \right) - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi \right]. \quad (\text{J.6})$$

L'objectif de cette section est de clore la dynamique de ϕ dans la limite thermodynamique.

Tout d'abord, notons que la dynamique de la marginale spatiale à $N - |K|$ particules (où $K \subseteq \llbracket 1; N \rrbracket$) est :

$$\begin{aligned}\partial_t \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \notin K}) = & - \sum_{i \notin K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[L \underbrace{\int v_0^i \mathbf{a}_i^1 \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k}_{(1)} - v_1 \underbrace{\int \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \mathbf{a}_i^2 \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k}_{(2)} \right. \\ & \left. - \underbrace{\frac{v_1}{d} \int \phi \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k}_{(3)} - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) \right]. \quad (\text{J.7})\end{aligned}$$

Pour commencer, notons que le terme (1) de l'équation ci-dessus peut se réécrire comme suit :

$$\begin{aligned}(1) = & \int v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \\ = & v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \int_{(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{|K|}} \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \\ & + \int_{[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{|K|}]^c} v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \\ = & v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathbf{a}_K^i\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_K^i &= \int_{[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c} v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \\ &\quad - v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_i^1 \int_{[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c} \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \end{aligned} \quad (\text{J.8})$$

où $[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c$ est le complémentaire dans E de $(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}$. Pour comprendre l'allure du domaine $[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c$, il est instructif de considérer le cas $|K| = 2$ où l'on cherche à décomposer l'intégrale d'une fonction $f(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l)$ sur $E \times E$:

$$\begin{aligned} \int_E \int_E f(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) d\mathbf{r}_k d\mathbf{r}_l &= \int_{E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \int_{E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} f(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) d\mathbf{r}_k d\mathbf{r}_l + \int_{E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \int_E f(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) d\mathbf{r}_k d\mathbf{r}_l \\ &\quad + \int_E \int_{E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} f(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) d\mathbf{r}_k d\mathbf{r}_l + \int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} \int_{\mathcal{V}(\mathbf{r}_i)} f(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l) d\mathbf{r}_k d\mathbf{r}_l \end{aligned}$$

Dans ce cas, le domaine $[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c$ est l'union de trois sous-domaine :

$$[E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)] \times [E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)], \quad [E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)] \times \mathcal{V}(\mathbf{r}_i) \quad \text{et} \quad \mathcal{V}(\mathbf{r}_i) \times [E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i)]. \quad (\text{J.9})$$

dont le volume est, asymptotiquement à la limite thermodynamique, par hypothèse :

$$\mathcal{O}\left(\left[1 - \frac{1}{L^d}\right]^2\right), \quad \mathcal{O}\left(\left[1 - \frac{1}{L^d}\right] \frac{1}{L^d}\right) \quad \text{et} \quad \mathcal{O}\left(\left[1 - \frac{1}{L^d}\right] \frac{1}{L^d}\right) \quad \text{respectivement.} \quad (\text{J.10})$$

Ainsi, on comprend aisément que le domaine $[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c$ est composé de $2^{|K|} - 1$ sous-domaines de tailles (asymptotiques) $(1 - L^{-d})^{|K|-k} (L^{-d})^k$ pour $k = 1, \dots, |K|$ présents respectivement $\binom{|K|}{k}$ fois. Le volume (asymptotique) total de $[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c$ est donc

$$\left|[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c\right| = \mathcal{O}\left(1 - \left[1 - \frac{1}{L^d}\right]^{|K|}\right) \quad (\text{J.11})$$

$$= \frac{|K|}{L^d} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^{2d}}\right) \quad (\text{J.12})$$

On en déduit ainsi le comportement de α_K^i :

$$\alpha_K^i = \mathcal{O}\left(|\tilde{\mathbf{a}}_i^1| \left|[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c\right|\right) = \mathcal{O}\left(\frac{|\tilde{\mathbf{a}}_i^1|}{L^d}\right). \quad (\text{J.13})$$

On peut traiter de manière similaire les termes (2) et (3). Tout d'abord

$$(2) = v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \tilde{\mathbf{a}}_i^2 \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{b}_K^i \quad (\text{J.14})$$

avec

$$\begin{aligned} \mathfrak{b}_K^i &= v_1 \int_{[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \tilde{\mathbf{a}}_i^2 \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \quad (\text{J.15}) \\ &\quad - v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \tilde{\mathbf{a}}_i^2 \int_{[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c} \phi_{N-1}(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \end{aligned}$$

ce qui nous permet de conclure, comme pour \mathfrak{a}_K^i , que

$$\mathfrak{b}_K^i = \mathcal{O}\left(\frac{|\tilde{\mathbf{a}}_i^2|}{L^d}\right). \quad (\text{J.16})$$

Enfin :

$$(3) = \frac{v_1}{d} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) + \mathfrak{c}_K^i \quad (\text{J.17})$$

où

$$\begin{aligned} \mathfrak{c}_K^i &= \frac{v_1}{d} \int_{[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \phi(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \quad (\text{J.18}) \\ &\quad - \frac{v_1}{d} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \int_{[(E \setminus \mathcal{V}(\mathbf{r}_i))^{[K]}]^c} \phi(\{\mathbf{r}'_k\}_{k \in K}, \{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) \prod_{k \in K} d\mathbf{r}'_k \end{aligned}$$

avec le scaling

$$\mathfrak{c}_K^i = \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^d}\right). \quad (\text{J.19})$$

Finalement

$$\begin{aligned} \partial_t \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \notin K}) &= - \sum_{i \notin K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left\{ L \left[v_1^i \tilde{\mathbf{a}}_1^i \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{a}_K^i \right] \right. \\ &\quad - \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \tilde{\mathbf{a}}_i^2 \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{b}_K^i \right] \quad (\text{J.20}) \\ &\quad - \left[\frac{v_1}{d} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) + \mathfrak{c}_K^i \right] \\ &\quad \left. - D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) \right\} \end{aligned}$$

Par ailleurs, le moment harmonique $\mathbf{a}_K^{p_K} \equiv \left\langle \psi \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle$ a pour dynamique :

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{a}_K^{p_K} = & -L \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \left\langle \psi \mathbf{u}_i \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] \\ & + \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left\langle \psi \mathbf{u}_i^{\otimes 2} \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] \\ & + \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \left\langle \psi \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] \\ & - L \sum_{i \in K} \left[\alpha_1 + \Theta_1 p_i (p_i + d - 2) \right] \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left\langle \psi \mathbf{u}_i \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \\ & - L^2 \sum_{i \in K} \left[\alpha_0 + \Theta_0 p_i (p_i + d - 2) \right] \left\langle \psi \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{J.21})$$

Or

$$\mathbf{a}_K^{p_K}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \notin K}) \quad (\text{J.22})$$

D'où

$$\begin{aligned} \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_i\}_{i \notin K}) \partial_t \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} = & -L \sum_{i \in K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \left\langle \psi \mathbf{u}_i \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] - L \mathfrak{A}_K^{p_K} \quad (\text{J.23}) \\ & + \sum_{i \in K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left\langle \psi \mathbf{u}_i^{\otimes 2} \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] + \mathfrak{B}_K^{p_K} + \mathfrak{C}_K^{p_K} \\ & + \sum_{i \in K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \left\langle \psi \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] + \mathfrak{D}_K^{p_K} \\ & - L \sum_{i \in K} \left[\alpha_1 + \Theta_1 p_i (p_i + d - 2) \right] \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left\langle \psi \mathbf{u}_i \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \\ & - L^2 \tau_{p_K}^{-1} \left\langle \psi \otimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \end{aligned}$$

où le temps caractéristique de relaxation de $\mathbf{a}_K^{p_K}$ est

$$\tau_{p_K}^{-1} \equiv \sum_{i \in K} \left[\alpha_0 + \Theta_0 p_i (p_i + d - 2) \right] \quad (\text{J.24})$$

et où

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{A}_K^{p_K} &\equiv \sum_{i \notin K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \left\langle \psi \mathbf{u}_i \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_1^i \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{a}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &= \sum_{i \notin K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \mathbf{a}_{i,K}^{1,p_K} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_1^i \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{a}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &= \sum_{i \notin K, i \in \mathcal{V}_K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \mathbf{a}_{i,K}^{1,p_K} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \tilde{\mathbf{a}}_1^i \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{a}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &\quad - \sum_{i \notin K, i \notin \mathcal{V}_K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\mathfrak{a}_K^i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{B}_K^{p_K} &\equiv \sum_{i \notin K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left\langle \psi \left(\mathbf{u}_i^{\otimes 2} - \frac{\mathbf{I}}{d} \right) \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] \right. \\
 &\quad \left. - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \tilde{\mathbf{a}}_i^2 \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{b}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &= \sum_{i \notin K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \mathbf{a}_{i,K}^{2,p_K} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \tilde{\mathbf{a}}_i^2 \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{b}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &= \sum_{i \notin K, i \in \mathcal{V}_K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \mathbf{a}_{i,K}^{2,p_K} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \tilde{\mathbf{a}}_i^2 \phi_{N-|K|-1}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K, j \neq i}) + \mathfrak{b}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &\quad - \sum_{i \notin K, i \notin \mathcal{V}_K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\mathfrak{b}_K^i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{C}_K^{p_K} &\equiv \sum_{i \notin K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left\langle \psi \frac{\mathbf{I}}{d} \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_1}{d} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) + \mathfrak{c}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &= \sum_{i \notin K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_1}{d} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \otimes \mathbf{a}_K^{p_K} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_1}{d} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) + \mathfrak{c}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &= \sum_{i \notin K, i \in \mathcal{V}_K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_1}{d} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \otimes \mathbf{a}_K^{p_K} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_1}{d} \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) + \mathfrak{c}_K^i \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
 &\quad - \sum_{i \notin K, i \notin \mathcal{V}_K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\mathfrak{c}_K^i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathfrak{D}_K^{p_K} &\equiv \sum_{i \notin K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \left\langle \psi \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
&= \sum_{i \notin K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \mathbf{a}_K^{p_K} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\} \\
&= \sum_{i \notin K, i \in \mathcal{V}_K} \left\{ \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \mathbf{a}_K^{p_K} \right] - \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{N-|K|}(\{\mathbf{r}_j\}_{j \notin K}) \right] \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K} \right\}
\end{aligned}$$

On en déduit les comportement asymptotiques :

$$\mathfrak{A}_K^{p_K} = \mathcal{O}(\mathbf{a}_{i,K}^{1,p_K}) + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{a}}_i^1 \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K}) \quad (\text{J.25})$$

$$\mathfrak{B}_K^{p_K} = \mathcal{O}(\mathbf{a}_{i,K}^{2,p_K}) + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{a}}_i^2 \otimes \tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K}) \quad (\text{J.26})$$

$$\mathfrak{C}_K^{p_K} = \mathcal{O}(\mathbf{a}_K^{p_K}) + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K}) = \mathcal{O}(\mathbf{a}_K^{p_K}) \quad (\text{J.27})$$

$$\mathfrak{D}_K^{p_K} = \mathcal{O}(\mathbf{a}_K^{p_K}) + \mathcal{O}(\tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K}) = \mathcal{O}(\mathbf{a}_K^{p_K}) \quad (\text{J.28})$$

Par ailleurs, l'approximation de variable rapide sur $\tilde{\mathbf{a}}_K^{p_K}$ donne, à partir de l'équation (J.23),

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_K^{p_K} &\simeq -\frac{\tau_{p_K}}{L} \sum_{i \in K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_0^i \left\langle \psi \mathbf{u}_i \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] - \frac{\tau_{p_K}}{L} \mathfrak{A}_K^{p_K} \\
&\quad + \frac{\tau_{p_K}}{L^2} \sum_{i \in K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[v_1 \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left\langle \psi \mathbf{u}_i^{\otimes 2} \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] + \frac{\tau_{p_K}}{L^2} \mathfrak{B}_K^{p_K} + \frac{\tau_{p_K}}{L^2} \mathfrak{C}_K^{p_K} \\
&\quad + \frac{\tau_{p_K}}{L^2} \sum_{i \in K} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \left\langle \psi \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle \right] + \frac{\tau_{p_K}}{L^2} \mathfrak{D}_K^{p_K} \\
&\quad - \frac{\tau_{p_K}}{L} \sum_{i \in K} \left[\alpha_1 + \Theta_1 p_i (p_i + d - 2) \right] \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i \cdot \left\langle \psi \mathbf{u}_i \bigotimes_{k \in K} \widehat{\mathbf{u}_k^{\otimes p_k}} \right\rangle
\end{aligned} \quad (\text{J.29})$$

dont on déduit, d'une part, que tout moment $\mathbf{a}_K^{p_K}$ tend vers zéro à la limite thermodynamique au moins aussi vite que $1/L$, *i.e.*

$$\mathbf{a}_K^{p_K} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) \quad (\text{J.30})$$

et d'autre part la dynamique des moments d'ordre 1 :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_k^1 = & -\frac{\tau_1}{L} \nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot [v_0^k \langle \psi \mathbf{u}_k^{\otimes 2} \rangle] - \frac{\tau_1}{L} \mathfrak{A}_k^1 \\ & + \frac{\tau_1}{L^2} \nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot [v_1 \nabla_{\mathbf{r}_k} c_k \cdot \langle \psi \mathbf{u}_k^{\otimes 3} \rangle] + \frac{\tau_1}{L^2} \mathfrak{B}_k^1 + \frac{\tau_1}{L^2} \mathfrak{C}_k^1 \\ & + \frac{\tau_1}{L^2} \nabla_{\mathbf{r}_k} \cdot [D_t \nabla_{\mathbf{r}_k} \langle \psi \mathbf{u}_k \rangle] + \frac{\tau_1}{L^2} \mathfrak{D}_k^1 \\ & - \frac{\tau_1}{L} [\alpha_1 + (d-1)\Theta_1] \nabla_{\mathbf{r}_k} c \cdot \langle \psi \mathbf{u}_k^{\otimes 2} \rangle \end{aligned} \quad (\text{J.31})$$

Ou encore :

$$\mathbf{a}_k^1 = -\frac{\tau_1}{Ld} \nabla_{\mathbf{r}_k} [v_0^k \phi] - \frac{\tau_1}{Ld} [\alpha_1 + (d-1)\Theta_1] \phi \nabla_{\mathbf{r}_k} c_k + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right) \quad (\text{J.32})$$

où $\tau_1^{-1} = \alpha_0 + (d-1)\Theta_0$.

$$\partial_t \phi = \sum_i \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left[\frac{v_0^i}{d[\alpha_0 + (d-1)\Theta_0]} \nabla_{\mathbf{r}_i} [v_0^i \phi] \right] \quad (\text{J.33})$$

$$+ \left(\frac{v_1}{d} + \frac{v_0^i}{d} \frac{\alpha_1 + (d-1)\Theta_1}{\alpha_0 + (d-1)\Theta_0} \right) \phi \nabla_{\mathbf{r}_i} c_i + D_t \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi \quad (\text{J.34})$$

Annexe K

Limite diffusive AOUPs en interaction quorum-sensing et taxie

Dans cet appendice, on calcule la limite diffusive, *via* la première méthode présentée dans le chapitre 3, d'un ensemble d'AOUPs interagissant *via* quorum-sensing et taxie, dont l'équation de Fokker–Planck s'écrit (en unités rescalées) :

$$\begin{aligned}\partial_t \psi &= -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [Lv_0 \mathbf{e} \psi - v_1 \nabla_{\mathbf{r}} c \cdot \mathbf{e}^{\otimes 2} \psi - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \psi] \\ &\quad - L^2 \nabla_{\mathbf{e}} \cdot \left[-\frac{1}{\tau} \mathbf{e} \psi - \frac{1}{d\tau} \nabla_{\mathbf{e}} \psi \right].\end{aligned}\tag{K.1}$$

En intégrant par rapport à \mathbf{e} on obtient la dynamique de la marginale spatiale :

$$\partial_t \phi = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [Lv_0 \mathbf{m}^1 - v_1 \nabla_{\mathbf{r}} c \cdot \mathbf{m}^2 - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \phi]\tag{K.2}$$

Pour tout entier $p \in \mathbb{N}$, on définit le moment d'ordre p par rapport à \mathbf{e} de ψ :

$$\mathbf{m}^p \equiv \int \mathbf{e}^{\otimes p} \psi d\mathbf{e}.\tag{K.3}$$

Pour obtenir une hiérarchie d'équations sur la dynamique des $\mathbf{m}^{\otimes p}$, on multiplie l'équation (K.1) par $\mathbf{e}^{\otimes p}$ (tensoriellement par la droite) et on intègre par rapport à \mathbf{e} . Pour obtenir ces dynamiques, commençons par calculer l'effet de cette opération (multiplication par $\mathbf{e}^{\otimes p}$ puis intégration par rapport à \mathbf{e}) sur la partie “orientationnelle” (*i.e.* la partie contenue dans l'opérateur de divergence selon \mathbf{e}) de l'opérateur de Fokker-Planck de (K.1).

D'une part, en effectuant une intégration par partie, on a :

$$\begin{aligned}
 \int [\mathbf{e}^{\otimes p}]_{\alpha_1 \dots \alpha_p} \nabla_{\mathbf{e}} \cdot [\mathbf{e} \psi] d\mathbf{e} &= \int \left(\prod_{i=1}^p e_{\alpha_i} \right) \sum_{k=1}^d \partial_{e_k} [e_k \psi] d\mathbf{e} \\
 &= - \sum_{k=1}^d \int \left[\sum_{j=1}^p \left(\prod_{i=1, i \neq j}^p e_{\alpha_i} \right) \partial_{e_k} e_{\alpha_j} \right] e_k \psi d\mathbf{e} \\
 &= - \sum_{j=1}^p \int \left(\prod_{i=1, i \neq j}^p e_{\alpha_i} \right) e_{\alpha_j} \psi d\mathbf{e} \\
 &= -p \int [\mathbf{e}^{\otimes p}]_{\alpha_1 \dots \alpha_p} \psi d\mathbf{e}
 \end{aligned}$$

c'est à dire :

$$\int \mathbf{e}^{\otimes p} \nabla_{\mathbf{e}} \cdot [\mathbf{e} \psi] d\mathbf{e} = -p \mathbf{m}^{\otimes p}. \quad (\text{K.4})$$

D'autre part

$$\begin{aligned}
 \int [\mathbf{e}^{\otimes p}]_{\alpha_1 \dots \alpha_p} \Delta_{\mathbf{e}} \psi d\mathbf{e} &= \int \left(\prod_{i=1}^p e_{\alpha_i} \right) \sum_{k=1}^d \partial_{e_k}^2 \psi d\mathbf{e} \\
 &= \sum_{k=1}^p \int \partial_{e_k} \left[\sum_{j=1}^p \prod_{i=1, i \neq j}^p e_{\alpha_i} \delta_{k \alpha_j} \right] \psi d\mathbf{e} \\
 &= \sum_{k=1}^p \int \left[\sum_{j=1}^p \sum_{l=1, l \neq j}^p \prod_{i=1, i \neq j, l}^p e_{\alpha_i} \delta_{k \alpha_j} \delta_{k \alpha_l} \right] \psi d\mathbf{e} \\
 &= \sum_{j=1}^p \sum_{l=1, l \neq j}^p \int \left[\prod_{i=1, i \neq j, l}^p e_{\alpha_i} \right] \delta_{\alpha_j \alpha_l} \psi d\mathbf{e}
 \end{aligned}$$

C'est à dire

$$\int [\mathbf{e}^{\otimes p}]_{\alpha_1 \dots \alpha_p} \Delta_{\mathbf{e}} \psi d\mathbf{e} = \int 2 \sum_{j=1}^p \sum_{l=j+1}^p [\mathbf{e}^{\otimes p-2}]_{\alpha_1 \dots \alpha_{i-1} \alpha_{i+1} \dots \alpha_{l-1} \alpha_{l+1} \dots \alpha_p} \delta_{\alpha_j \alpha_l} \psi d\mathbf{e} \quad (\text{K.5})$$

où, dans cette dernière équation, le réarrangement de la somme sur l et le facteur 2 viennent de la symétrie du tenseur sous l'intégrale par permutation $j \leftrightarrow l$. Par ailleurs, en notant \mathcal{G}_p le groupe de permutation d'un ensemble à $p \in \mathbb{N}$ éléments :

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{e}^{\otimes p-2} \odot \mathbf{I}]_{\alpha_1 \dots \alpha_p} &\equiv \pi_{\mathcal{G}_p} (\mathbf{e}^{\otimes p-2} \otimes \mathbf{I}) \\
 &= \frac{1}{|\mathcal{G}_p|} \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_p} e_{\alpha_{\sigma(1)}} \dots e_{\alpha_{\sigma(p-2)}} \delta_{\alpha_{\sigma(p-1)} \alpha_{\sigma(p)}} \\
 &= \frac{|\mathcal{H}|}{|\mathcal{G}_p|} \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_p / \mathcal{H}} e_{\alpha_{\sigma(1)}} \dots e_{\alpha_{\sigma(p-2)}} \delta_{\alpha_{\sigma(p-1)} \alpha_{\sigma(p)}}
 \end{aligned}$$

où \mathcal{H} est le stabilisateur du tenseur $\mathbf{e}^{\otimes p-2} \otimes \mathbf{I}$ dans \mathcal{G}_p , *i.e.* le sous-groupe de \mathcal{G}_p qui laisse ce tenseur invariant. Les permutations qui laissent $\mathbf{e}^{\otimes p-2} \otimes \mathbf{I}$ invariant sont celles qui consistent à permute des composantes de $\mathbf{e}^{\otimes p-2}$ d'une part (sous-groupe isomorphe \mathcal{G}_{p-2}), et celles de \mathbf{I} d'autre part (sous-groupe isomorphe à \mathbb{Z}_2). Les supports de ces deux sous-groupes étant disjoints, le sous-groupe qu'ils engendent est simplement le produit cartésien, *i.e.* $\mathcal{H} \cong \mathcal{G}_{p-2} \times \mathbb{Z}_2$. On obtient ainsi

$$[\mathbf{e}^{\otimes p-2} \odot \mathbf{I}]_{\alpha_1 \dots \alpha_p} = \frac{2}{p(p-1)} \sum_{\sigma \in \mathcal{G}_p / \mathcal{H}} e_{\alpha_{\sigma(1)}} \dots e_{\alpha_{\sigma(p-2)}} \delta_{\alpha_{\sigma(p-1)} \alpha_{\sigma(p)}} \quad (\text{K.6})$$

Notons d'une part que la somme dans l'équation (K.6) comporte $p(p-1)$ termes. D'autre part, pour chacun de ces termes, à $\sigma \in \mathcal{G}_p / \mathcal{H}$ donné, on peut réarranger les indices du tenseur pour que $\sigma(1) \dots \sigma(p-2)$ et $\sigma(p-1)\sigma(p)$ soient respectivement rangés par ordre croissant sans jamais sortir de la classe de σ dans $\mathcal{G}_p / \mathcal{H}$. On constate donc que le tenseur (K.6) est proportionnel au tenseur sous l'intégrale dans l'équation (K.5). Plus exactement :

$$\int \mathbf{e}^{\otimes p} \Delta_{\mathbf{e}} \psi d\mathbf{e} = p(p-1) \int \mathbf{e}^{\otimes p-2} \odot \mathbf{I} \psi d\mathbf{e} = p(p-1) \mathbf{m}^{\otimes p-2} \odot \mathbf{I} \quad (\text{K.7})$$

On peut maintenant aisément obtenir la dynamique du moment d'ordre p :

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{m}^p &= -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot [Lv_0 \mathbf{m}^{p+1} - v_1 \nabla_{\mathbf{r}} c \cdot \mathbf{m}^{p+2} - D_t \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{m}^p] \\ &\quad - L^2 \frac{p}{\tau} \mathbf{m}^p + L^2 \frac{p(p-1)}{d\tau} \mathbf{m}^{p-2} \odot \mathbf{I} \end{aligned} \quad (\text{K.8})$$

En effectuant une approximation de variable rapide, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^p &\simeq -\frac{\tau}{p} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\frac{1}{L} v_0 \mathbf{m}^{p+1} - \frac{1}{L^2} v_1 \nabla_{\mathbf{r}} c \cdot \mathbf{m}^{p+2} - \frac{1}{L^2} D_t \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{m}^p \right] \\ &\quad + \frac{p-1}{d} \mathbf{m}^{p-2} \odot \mathbf{I} \end{aligned} \quad (\text{K.9})$$

On en déduit une borne sur le comportement asymptotique des moments d'ordres pairs et impairs :

$$\rightarrow \mathbf{m}^{2n} = \mathcal{O}(1) \quad (\text{K.10})$$

$$\rightarrow \mathbf{m}^{2n+1} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) \quad (\text{K.11})$$

Et plus particulièrement pour les moments d'ordre 1 et 2 :

$$\mathbf{m}^2 = \frac{1}{d} \phi \mathbf{I} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right) \quad (\text{K.12})$$

et

$$\mathbf{m}^1 = -\frac{\tau}{dL} \nabla_{\mathbf{r}} [v_0 \phi] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^3}\right) \quad (\text{K.13})$$

Finalement la dynamique de la marginale spatiale s'écrit à l'ordre dominant :

$$\partial_t \phi = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\frac{\tau}{d} v_0 \nabla_{\mathbf{r}} (v_0 \phi) + \frac{v_1}{d} \phi \nabla_{\mathbf{r}} c + D_t \nabla_{\mathbf{r}} \phi \right] \quad (\text{K.14})$$

Annexe L

De la limite diffusive à l'hydrodynamique fluctuante

Dans cette appendice, on montre qu'un ensemble de $i = 1, \dots, N$ particules dont la dynamique stochastique, au sens d'Ito, par :

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + \sqrt{2D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}\boldsymbol{\eta}_i \quad (\text{L.1})$$

est décrit, sur de grandes échelles, par la l'hydrodynamique fluctuante (3.106). Pour cela, on suit la méthode générale [28]–[109], esquissée dans la section 3.5.

Pour commencer, on se donne une fonction test $f : E \rightarrow \mathbb{R}$. L'application de la formule d'Ito à $f(\mathbf{r}_i(t))$ donne alors :

$$\frac{d}{dt}f(\mathbf{r}_i(t)) = \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \nabla f(\mathbf{r}_i) + D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)\Delta f(\mathbf{r}_i) \quad (\text{L.2})$$

c'est à dire

$$\frac{d}{dt}f(\mathbf{r}_i(t)) = \left[\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + \sqrt{2D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}\boldsymbol{\eta}_i \right] \cdot \nabla f(\mathbf{r}_i) + D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)\Delta f(\mathbf{r}_i) \quad (\text{L.3})$$

Pour aller plus loin, et obtenir une équation ne dépendant des \mathbf{r}_i qu'implicitement à travers $\hat{\rho}$, on fait une hypothèse sur les fonctions \mathbf{F}_i et D_i , que l'on détaille à la section suivante.

L.1 Passage d'une fonction à une fonctionnelle

L.1.1 De fonctions de $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ à fonctionnelles de $\hat{\rho}$

On suppose que les fonctions \mathbf{F}_i et D_i sont telles qu'il existe une paire de fonctions

$$\mathbf{F} : E \times \mathbb{F} \longrightarrow \mathbb{R}^d \quad \text{et} \quad D : E \times \mathbb{F} \longrightarrow \mathbb{R} \quad (\text{L.4})$$

qui vérifient $\forall (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \in E^d, \forall i = 1, \dots, N :$

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \mathbf{F}(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}]) \quad \text{et} \quad D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = D(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}]) \quad (\text{L.5})$$

où $\hat{\rho}$ est donné par (3.94). On fait cette hypothèse en ayant en tête les modèles de quorum-sensing et de taxie discutés à la section 1.2.3 de l'introduction de ce manuscrit, mais signalons que la famille des fonctions (\mathbf{F}_i, D_i) qui vérifient (L.4)–(L.5) décrit une classe d'interaction bien plus large que les seules interactions de type quorum-sensing ou taxie. Par exemple, comme nous le verrons au chapitre 4, les interactions qui dérivent d'un potentiel (symétrique par rapport à l'origine) appartiennent à cette classe — l'interaction d'une particule active avec elle-même s'annulant dès lors que la dérivée du potentiel en zéro s'annule.

Par ailleurs, notons que les égalités (L.5) n'impliquent que les restrictions des fonctionnelles \mathbf{F} et D à $\mathcal{D}_N(E) \subset \mathbb{F}$. Or l'espace $\mathcal{D}_N(E)$ est en bijection avec l'espace E^N/\mathcal{G}_N (où \mathcal{G}_N est l'ensemble des permutations de N éléments) des classes d'équivalence de N -uplets $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ d'éléments de E à permutation près, puisque connaissant $\hat{\rho}$, on peut retrouver les points support $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ seulement à permutation près. Ainsi il existe une paire de fonctions

$$\hat{\mathbf{F}} : E \times E^N/\mathcal{G}_N \longrightarrow \mathbb{R}^d \quad \text{et} \quad \hat{D} : E \times E^N/\mathcal{G}_N \longrightarrow \mathbb{R} \quad (\text{L.6})$$

telles que $\forall (\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \in E^{N+1}$

$$\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, \overline{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N}) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) \quad \text{et} \quad \hat{D}(\mathbf{r}, \overline{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N}) = D(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]), \quad (\text{L.7})$$

où on a noté $\overline{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N}$ la classe d'équivalence de $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ dans E^N/\mathcal{G}_N . Mais puisque les fonctions sur E^N/\mathcal{G}_N sont en bijection avec les fonctions sur E^N qui sont invariantes par permutation de leurs N arguments, on peut en déduire l'existence d'une autre paire de fonctions

$$\tilde{\mathbf{F}} : E^{N+1} \longrightarrow \mathbb{R}^d \quad \text{et} \quad \tilde{D} : E^{N+1} \longrightarrow \mathbb{R} \quad (\text{L.8})$$

invariantes par permutation de leur N derniers arguments, telles que

$$\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) \quad \text{et} \quad \tilde{D}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = D(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) \quad (\text{L.9})$$

et ainsi

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad \text{et} \quad D_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \tilde{D}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) . \quad (\text{L.10})$$

Sous cette forme, non seulement les fonctions $\tilde{\mathbf{F}}$ et \tilde{D} vont nous aider à mener plus clairement les calculs au prochain paragraphe, mais elles ont surtout le mérite de mettre en lumière les hypothèses essentielles à l'existence des fonctions \mathbf{F} et D vérifiant (L.5). En effet l'existence de la fonction $\tilde{\mathbf{F}}$ (respectivement \tilde{D}) signifie essentiellement que les particules $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ créent un “champ” global *via* lequel elles interagissent entre elles, et que ces particules ont toutes une contribution équivalente à la constitution de ce “champ”, qui ne dépend d'ailleurs que de leurs positions. Ce “champ” fictif ne peut être que $\hat{\rho}$ lui-même, mais il peut également être un champ d'énergie potentiel, ou encore de molécules signalétiques. Un point important étant que ce modèle impose notamment qu'une particule interagissent avec elle-même (*via* la “portion” du “champ” qu'elle engendre), cette auto-interaction pouvant s'annuler dans certain cas, comme on le verra au chapitre suivant. Enfin, signalons que l'existence des fonctions $\tilde{\mathbf{F}}$ et \tilde{D} n'est équivalente qu'à l'existence de la restriction des fonctions \mathbf{F} et D à $\mathcal{D}_N(E)$. L'hypothèse d'existence de \mathbf{F} et D est donc légèrement plus forte.

L.1.2 De gradient de fonction de $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ à fonctionnelle de $\hat{\rho}$

On profite de cet interlude concernant le passage d'un fonction de $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ à une fonction(nelle) de $(\mathbf{r}, [\hat{\rho}])$, pour donner des précisions supplémentaires, qui nous serons utiles dans le calcul de l'hydrodynamique fluctuante de systèmes actifs.

Considérons le cas où, pour tout $i \in \llbracket 1; N \rrbracket$, il existe une fonction $f_i : (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \in E^N \mapsto f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \in \mathbb{R}$ telle que

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \nabla_{\mathbf{r}_i} f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{L.11})$$

et où l'on suppose qu'il existe une fonction $f : E \times \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que $f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = f(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])$. Il s'agit alors de montrer [109] que la fonction(nelle) $\mathbf{F} : E \times \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{R}^d$ telle que

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \mathbf{F}(\mathbf{r}_i, [\rho]) . \quad (\text{L.12})$$

est donnée par

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, [\rho]) = \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) + \left[\nabla_{\mathbf{r}} \frac{\delta f(\mathbf{r}', [\hat{\rho}])}{\delta \rho(\mathbf{r}')} \right]_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} . \quad (\text{L.13})$$

En effet si on considère $\mathbf{h} \in E$ et que l'on pose $\bar{h}(\mathbf{r}) \equiv \delta(\mathbf{r}_i + \mathbf{h} - \mathbf{r}) - \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})$ alors

$$f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i + \mathbf{h}, \dots, \mathbf{r}_N) = f(\mathbf{r}_i + \mathbf{h}, [\hat{\rho} + \bar{h}]) . \quad (\text{L.14})$$

Mais on a d'une part

$$f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i + \mathbf{h}, \dots, \mathbf{r}_N) - f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) = \mathbf{h} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) + \mathcal{O}(|\mathbf{h}|^2) \quad (\text{L.15})$$

et d'autre part

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}_i + \mathbf{h}, [\hat{\rho} + \bar{h}]) - f(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}]) &= \mathbf{h} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, [\hat{\rho}])|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_i} + \int \frac{\delta f(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])}{\delta \rho(\mathbf{r}')}\bar{h}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' + \mathcal{O}(|\mathbf{h}|^2) \\ &= \mathbf{h} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, [\hat{\rho}])|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_i} + \left. \frac{\delta f(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])}{\delta \rho(\mathbf{r}')}\right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_i+\mathbf{h}} \\ &\quad - \left. \frac{\delta f(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])}{\delta \rho(\mathbf{r}')}\right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_i} + \mathcal{O}(|\mathbf{h}|^2) \\ &= \mathbf{h} \cdot \left[\nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, [\hat{\rho}])|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_i} + \nabla_{\mathbf{r}'} \left. \frac{\delta f(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])}{\delta \rho(\mathbf{r}')}\right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_i} \right] + \mathcal{O}(|\mathbf{h}|^2) \end{aligned}$$

Ainsi

$$\nabla_{\mathbf{r}_i} f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) = \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, [\hat{\rho}])|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_i} + \left[\nabla_{\mathbf{r}} \left. \frac{\delta f(\mathbf{r}_i, [\hat{\rho}])}{\delta \rho(\mathbf{r}')}\right|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}_i} \right] \quad (\text{L.16})$$

et on a bien (L.13).

L.2 Retour à la méthode de Dean généralisée

On peut réécrire l'équation (L.3) à l'aide des fonctions $\tilde{\mathbf{F}}$ et \tilde{D} et introduire un Dirac en $\mathbf{r}_i(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(\mathbf{r}_i(t)) &= \int \left\{ \left[\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) + \sqrt{2\tilde{D}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)} \boldsymbol{\eta}_i \right] \cdot \nabla f(\mathbf{r}) \right. \\ &\quad \left. + \tilde{D}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \Delta f(\mathbf{r}) \right\} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (\text{L.17})$$

$$\begin{aligned} &= - \int \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \left[\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) + \sqrt{2\tilde{D}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)} \boldsymbol{\eta}_i \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right. \\ &\quad \left. - \nabla_{\mathbf{r}} \left[\tilde{D}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right] \right\} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (\text{L.18})$$

C'est à dire, au sens des distributions :

$$\begin{aligned} \partial_t \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) &= -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \left[\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) + \sqrt{2\tilde{D}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)} \boldsymbol{\eta}_i \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right. \\ &\quad \left. - \nabla_{\mathbf{r}} \left[\tilde{D}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{L.19})$$

Puis, en sommant sur $i = 1, \dots, N$, on obtient

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) &= -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{\rho}(\mathbf{r}) + \sqrt{2\tilde{D}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)} \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \boldsymbol{\eta}_i \right. \\ &\quad \left. - \nabla_{\mathbf{r}} [\tilde{D}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{\rho}(\mathbf{r})] \right\} \end{aligned} \quad (\text{L.20})$$

Notons que l'on a conservé le $(i+1)$ ème argument des fonctions $\tilde{\mathbf{F}}$ et \tilde{D} égale à \mathbf{r}_i , et non à \mathbf{r} pour pouvoir factoriser par rapport à ces fonctions lorsqu'on somme sur i et faire ainsi apparaître la densité empirique $\hat{\rho}$ dans le membre de droite de l'équation (L.20). En suivant [28], on remarque que le terme de bruit $\sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \boldsymbol{\eta}_i$ est égale en loi à un champ gaussien $\hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t)$ de moyenne nulle et tel que $\langle \hat{\Lambda}^\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\Lambda}^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$. En remplaçant ainsi le terme de bruit par $\boldsymbol{\Lambda}$ et en remplaçant les fonctions $\tilde{\mathbf{F}}$ et \tilde{D} par les fonctionnelles \mathbf{F} et D , on obtient :

$$\partial_t \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \mathbf{F}(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) \hat{\rho}(\mathbf{r}) - \nabla_{\mathbf{r}} [D(\mathbf{r}, [\hat{\rho}]) \hat{\rho}(\mathbf{r})] + \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\hat{\rho}])} \hat{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (\text{L.21})$$

Enfin, toujours en suivant [28, 109], on suppose que dans la limite de grand nombre de particules N , on peut remplacer dans l'équation (L.21) la mesure empirique $\hat{\rho}$ par un champ continu ρ , satisfaisant l'équation différentielle stochastique

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \mathbf{F}(\mathbf{r}, [\rho]) \rho(\mathbf{r}) - \nabla_{\mathbf{r}} [D(\mathbf{r}, [\rho]) \rho(\mathbf{r})] + \sqrt{2D(\mathbf{r}, [\rho])} \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}, t) \right\} \quad (\text{L.22})$$

où $\boldsymbol{\Lambda}$ est un champ gaussien centré vérifiant $\langle \Lambda^\alpha(\mathbf{r}, t) \Lambda^\beta(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$, i.e. où on a remplacé $\hat{\Lambda}$ par $\sqrt{\rho} \boldsymbol{\Lambda}$.

Annexe M

Factorisation des opérateurs Ω_k

L'objectif de cet appendice est de démontrer que les opérateurs

$$\begin{aligned} \Omega_k^A : \quad \mathbb{H} \times \mathbb{H} &\longrightarrow \mathbb{H} & \text{et} & \quad \Omega_k^S : \quad \mathbb{H} \times \mathbb{H} &\longrightarrow \mathbb{H} \\ (\phi, \psi) &\longmapsto \psi \partial^k \phi - \phi \partial^k \psi & (\phi, \psi) &\longmapsto \psi \partial^k \phi + \phi \partial^k \psi \end{aligned}$$

qui sont, à un facteur 2 près, respectivement les parties antisymétriques et symétriques des opérateurs

$$\begin{aligned} \Omega_k : \quad \mathbb{H} \times \mathbb{H} &\longrightarrow \mathbb{H} \\ (\phi, \psi) &\longmapsto \psi(x) \partial^k \phi(x) \end{aligned}$$

se décomposent de la manière suivante :

$$\forall j \quad \Omega_{2j}^A = \sum_{i=0}^{j-1} b_{2i+1}^{2j} \partial^{(2j-2i-1)} \Omega_{2i+1}^A \quad (\text{M.1})$$

$$\forall j \quad \Omega_{2j+1}^S = \sum_{i=0}^j c_{2i}^{2j+1} \partial^{(2j+1-2i)} \Omega_{2i}^S \quad (\text{M.2})$$

où les coefficients b_{2i+1}^{2j} et c_{2i}^{2j+1} sont définis par récurrence :

$$\forall j \in \mathbb{N}^*, \forall i < j, \quad b_{2i+1}^{2j} = a_{2i+1}^{2j} + \sum_{k=i+1}^{j-1} a_{2k}^{2j} b_{2i+1}^{2k} \quad (\text{M.3})$$

$$\text{et } \forall j \in \mathbb{N}, \forall i \leq j, \quad c_{2i}^{2j+1} = a_{2i}^{2j+1} + \sum_{k=i}^{j-1} a_{2k+1}^{2j+1} c_{2i}^{2k+1} \quad (\text{M.4})$$

$$\text{avec } a_k^n = \frac{(-1)^{n-1-k}}{2} \sum_{i=0}^k \binom{n-1-k+i}{n-1-k} \quad (\text{M.5})$$

Pour cela on démontre des factorisations semblables pour des polynômes de $\mathbb{R}[X, Y]$ puis, grâce à un isomorphisme d'algèbre entre $\mathbb{R}[X, Y]$ et une algèbre d'opérateurs adéquate, on déduit les formules de factorisation ci-dessus.

M.1 Factorisation polynomiale

L'objectif de cette section est de montrer les factorisations polynomiales du lemme 3 ci-dessous.

Lemme 1. *Pour toute paire d'entiers n, k on a :*

$$X^n Y^k + X^k Y^n = \sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} (X^{n+i} + Y^{n+i})(X + Y)^{k-i} \quad (\text{M.6})$$

$$X^n Y^k - X^k Y^n = \sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} (X^{n+i} - Y^{n+i})(X + Y)^{k-i} \quad (\text{M.7})$$

Démonstration. On fait la preuve pour le cas symétrique. La preuve pour le cas antisymétrique est quasiment identique. On peut voir les polynômes à gauche et à droite de la première égalité comme des polynômes en X . On peut donc démontrer le lemme en montrant que toutes les dérivées par rapport à X , en $X = 0$, des membres de gauche et droite sont égales. Pour le membre de gauche on a pour tout entier l :

$$\frac{d^l}{dX^l} \left(X^n Y^k + X^k Y^n \right) \Big|_{X=0} = Y^{n+k-l} l! (\delta_{kl} + \delta_{nl}) \quad (\text{M.8})$$

Quant au membre de droite de l'égalité :

$$\begin{aligned} & \frac{d^l}{dX^l} \left[\sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} (X^{n+i} + Y^{n+i}) \sum_{j=0}^{k-i} \binom{k-i}{j} X^j Y^{k-i-j} \right] \Big|_{X=0} \\ &= \frac{d^l}{dX^l} \left[\sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} (-1)^i \binom{k}{i} \binom{k-i}{j} (X^{n+i+j} Y^{k-i-j} + X^j Y^{k+n-j}) \right] \Big|_{X=0} \\ &= \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} (-1)^i \binom{k}{i} \binom{k-i}{j} \left(\frac{(n+i+j)!}{(n+i+j-l)!} X^{n+i+j-l} Y^{k-i-j} + \frac{j!}{(j-l)!} X^{j-l} Y^{k+n-j} \right) \Big|_{X=0} \\ &= \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} (-1)^i \binom{k}{i} \binom{k-i}{j} \left(\frac{(n+i+j)!}{(n+i+j-l)!} Y^{k-i-j} \delta_{n+i+j,l} + \frac{j!}{(j-l)!} Y^{k+n-j} \delta_{j,l} \right) \\ &= \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} (-1)^i \binom{k}{i} \binom{k-i}{j} (l! Y^{n+k-l} \delta_{n+i+j,l} + l! Y^{n+k-l} \delta_{j,l}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} (-1)^i \binom{k}{i} \binom{k-i}{j} Y^{n+k-l} l! (\delta_{j,l} + \delta_{n+i+j,l}) \\
&= Y^{n+k-l} l! \left[\sum_{i=0}^{k-l} (-1)^i \binom{k}{i} \binom{k-i}{l} \mathbb{1}_{l \in [0;k]} + \sum_{i=0}^{l-n} (-1)^i \binom{k}{i} \binom{k-i}{k+n-l} \mathbb{1}_{l \in [n;n+k]} \right] \\
&= Y^{n+k-l} l! \left[\sum_{i=0}^{k-l} (-1)^i \binom{k}{l} \binom{k-l}{i} \mathbb{1}_{l \in [0;k]} + \sum_{i=0}^{l-n} (-1)^i \binom{k}{l-n} \binom{l-n}{i} \mathbb{1}_{l \in [n;n+k]} \right] \\
&= Y^{n+k-l} l! \left[\mathbb{1}_{l \in [0;k]} \binom{k}{l} \sum_{i=0}^{k-l} \binom{k-l}{i} (-1)^i + \mathbb{1}_{l \in [n;n+k]} \binom{k}{l-n} \sum_{i=0}^{l-n} (-1)^i \binom{l-n}{i} \right] \\
&= Y^{n+k-l} l! \left[\mathbb{1}_{l \in [0;k]} \binom{k}{l} (1-1)^{k-l} + \mathbb{1}_{l \in [n;n+k]} \binom{k}{l-n} (1-1)^{l-n} \right] \\
&= Y^{n+k-l} l! (\delta_{kl} + \delta_{nl})
\end{aligned}$$

□

Lemme 2. - *Si n est pair :*

$$X^n - Y^n = \sum_{k=0}^{n-1} a_k^n (X+Y)^{n-k} (X^k - Y^k) \quad (\text{M.9})$$

- *Si n est impair :*

$$X^n + Y^n = \sum_{k=0}^{n-1} a_k^n (X+Y)^{n-k} (X^k + Y^k) \quad (\text{M.10})$$

où

$$a_k^n \equiv \frac{(-1)^{n-1-k}}{2} \sum_{i=0}^k \binom{n-1-k+i}{n-1-k} \quad (\text{M.11})$$

Démonstration. On traîte le cas impair. Le cas pair se démontre de la même manière.

$$\begin{aligned}
X^{2p+1} + Y^{2p+1} &= (X+Y) \sum_{k=0}^{2p} (-1)^k X^{2p-k} Y^k \\
&= (X+Y) \frac{1}{2} \left[\sum_{k=0}^{2p} (-1)^k X^{2p-k} Y^k + \sum_{j=0}^{2p} (-1)^{2p-j} X^j Y^{2p-j} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (X + Y) \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2p} (-1)^k \left(X^{2p-k} Y^k + X^k Y^{2p-k} \right) \\
&= (X + Y) \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2p} (-1)^k \sum_{i=0}^k (-1)^i \binom{k}{i} \left(X^{2p-k+i} + Y^{2p-k+i} \right) (X + Y)^{k-i} \\
&= (X + Y) \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2p} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{k}{j} \left(X^{2p-j} + Y^{2p-j} \right) (X + Y)^j \\
&= (X + Y) \sum_{j=0}^{2p} \left(X^{2p-j} + Y^{2p-j} \right) (X + Y)^j \left(\frac{1}{2} \sum_{i=j}^{2p} (-1)^i \binom{i}{j} \right) \\
&= \sum_{j=0}^{2p} \left(X^{2p-j} + Y^{2p-j} \right) (X + Y)^{j+1} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=j}^{2p} (-1)^i \binom{i}{j} \right) \\
&= \sum_{k=0}^{2p} (X + Y)^{2p+1-k} (X^k + Y^k) \left(\frac{1}{2} \sum_{i=2p-k}^{2p} (-1)^{2p-k} \binom{i}{2p-k} \right) \\
&= \sum_{k=0}^{2p} (X + Y)^{2p+1-k} (X^k + Y^k) \left(\frac{(-1)^{2p-k}}{2} \sum_{j=0}^k \binom{2p-k+j}{2p-k} \right)
\end{aligned}$$

□

Lemme 3.

$$\forall j \quad X^{2j} - Y^{2j} = \sum_{i=0}^{j-1} b_{2i+1}^{2j} (X + Y)^{2j-2i-1} \left(X^{2i+1} - Y^{2i+1} \right) \quad (\text{M.12})$$

$$\forall j \quad X^{2j+1} + Y^{2j+1} = \sum_{i=0}^j c_{2i}^{2j+1} (X + Y)^{2j+1-2i} \left(X^{2i} + Y^{2i} \right) \quad (\text{M.13})$$

où les coefficients b_{2i+1}^{2j} et c_{2i}^{2j+1} sont définis par récurrence :

$$\forall j \in \mathbb{N}^*, \forall i < j, \quad b_{2i+1}^{2j} \equiv a_{2i+1}^{2j} + \sum_{k=i+1}^{j-1} a_{2k}^{2j} b_{2i+1}^{2k} \quad (\text{M.14})$$

$$\text{et } \forall j \in \mathbb{N}, \forall i \leq j, \quad c_{2i}^{2j+1} \equiv a_{2i}^{2j+1} + \sum_{k=i}^{j-1} a_{2k+1}^{2j+1} c_{2i}^{2k+1} \quad (\text{M.15})$$

$$\text{avec } a_k^n \equiv \frac{(-1)^{n-1-k}}{2} \sum_{i=0}^k \binom{n-1-k+i}{n-1-k} \quad (\text{M.16})$$

Démonstration. On traîte à nouveau le cas impair, le cas pair se démontrant de la même manière. On réalise la preuve par récurrence forte. Le rang $j = 0$ donnant $0 = 0$, il est vrai. On choisit ensuite $j \in \mathbb{N}$. On suppose que le résultat est vrai $\forall i < j$. On le montre au rang j , en commençant par utiliser le lemme 2 puis en utilisant l'hypothèse de récurrence :

$$\begin{aligned}
X^{2j} - Y^{2j} &= \sum_{i=0}^{2j-1} a_i^{2j} (X + Y)^{2j-i} (X^i - Y^i) \\
&= \sum_{k=0}^{j-1} a_{2k}^{2j} (X + Y)^{2j-2k} (X^{2k} - Y^{2k}) + \sum_{k=0}^{j-1} a_{2k+1}^{2j} (X + Y)^{2j-(2k+1)} (X^{2k+1} - Y^{2k+1}) \\
&= \sum_{k=0}^{j-1} a_{2k}^{2j} (X + Y)^{2j-2k} \sum_{i=0}^{k-1} b_{2i+1}^{2k} (X + Y)^{2k-2i-1} (X^{2i+1} - Y^{2i+1}) \\
&\quad + \sum_{i=0}^{j-1} a_{2i+1}^{2j} (X + Y)^{2j-(2i+1)} (X^{2i+1} - Y^{2i+1}) \\
&= \sum_{i=0}^{j-1} \left(\sum_{k=i+1}^{j-1} a_{2k}^{2j} b_{2i+1}^{2k} \right) (X + Y)^{2j-2i-1} (X^{2i+1} - Y^{2i+1}) \\
&\quad + \sum_{i=0}^{j-1} a_{2i+1}^{2j} (X + Y)^{2j-2i-1} (X^{2i+1} - Y^{2i+1}) \\
&= \sum_{i=0}^{j-1} \left(a_{2i+1}^{2j} + \sum_{k=i+1}^{j-1} a_{2k}^{2j} b_{2i+1}^{2k} \right) (X + Y)^{2j-2i-1} (X^{2i+1} - Y^{2i+1})
\end{aligned}$$

□

M.2 Algèbre d'opérateurs et isomorphisme d'algèbres

Le problème est que si l'on traîte les opérateurs

$$\begin{aligned}
\Omega_k : \mathbb{H} \times \mathbb{H} &\longrightarrow \mathbb{H} \\
(\phi, \psi) &\longmapsto \psi(x) \partial^k \phi(x)
\end{aligned}$$

directement, on ne sera pas en mesure de les composer. Cet impossibilité implique que ce cadre n'est pas idéal pour le traitement de notre problème de factorisation par des dérivées totales. Il serait donc préférable de considérer

$$\begin{aligned}
\tilde{\Omega}_k : \mathbb{H} \times \mathbb{H} &\longrightarrow \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \\
(\phi, \psi) &\longmapsto \partial^k \phi \otimes \psi
\end{aligned}$$

où $\psi \otimes \partial^k \phi : (x, y) \mapsto \psi(x)\partial^k \phi(y)$ est le produit tensoriel usuel¹ des fonctions ψ et $\partial^k \phi$. On retrouve Ω_k à partir de $\tilde{\Omega}_k$ par l'opération de projection linéaire :

$$\begin{aligned}\pi_{\mathbb{H}} &: \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \longrightarrow \mathbb{H} \\ \phi \otimes \psi &\longmapsto \phi\psi\end{aligned}$$

où $\phi\psi : x \in E \rightarrow \phi(x)\psi(x) \in \mathbb{R}$ est simplement le produit des fonctions ϕ et ψ . En effet

$$\Omega = \pi_{\mathbb{H}}(\tilde{\Omega}_k). \quad (\text{M.17})$$

Ce cadre n'est cependant toujours pas idéal car les opérateurs tildés ne sont toujours pas des endomorphismes. Or, les opérateurs $\tilde{\Omega}_k$ étant bilinéaires, ils se factorisent de manière unique à travers \otimes . Autrement dit, la propriété universelle du produit tensoriel assure l'existence, pour tout entier k , d'un unique opérateur $\bar{\Omega}_k$

$$\begin{aligned}\bar{\Omega}_k &: \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \longrightarrow \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \\ \phi \otimes \psi &\longmapsto \partial^k \phi \otimes \psi\end{aligned}$$

On a bien maintenant $\bar{\Omega}_k$ est un endomorphisme de $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$, *i.e.* $\bar{\Omega}_k \in \text{End}(\mathbb{H} \otimes \mathbb{H})$, et on peut l'écrire

$$\bar{\Omega}_k = \partial^k \otimes id_{\mathbb{H}}, \quad (\text{M.18})$$

où $id_{\mathbb{H}}$ est l'identité de \mathbb{H} . La transition entre les différents espaces est résumée dans le diagramme commutatif ci-dessous.

$$\begin{array}{ccc} H \times H & \xrightarrow{\otimes} & H \otimes H \\ \Omega_k \downarrow & \searrow \tilde{\Omega}_k & \downarrow \bar{\Omega}_k \\ H & \xleftarrow[\pi_{\mathbb{H}}]{} & H \otimes H \end{array}$$

L'autre point crucial de ce changement d'espace est que l'opérateur de dérivation $\partial \equiv \frac{d}{dx}$ de \mathbb{H} s'exprime dans $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$ sous la forme $\partial \otimes id_{\mathbb{H}} + id_{\mathbb{H}} \otimes \partial$ au sens où

$$\frac{d}{dx} = \pi_{\mathbb{H}} \circ (\partial \otimes id_{\mathbb{H}} + id_{\mathbb{H}} \otimes \partial). \quad (\text{M.19})$$

1. Précisons que le produit tensoriel que l'on utilise pour définir $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$ est simplement de produit tensoriel algébrique, *i.e.* celui pour lequel les éléments de $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$ sont seulement des combinaisons linéaires finies d'éléments de la forme $\phi \otimes \psi$. On n'a pas besoin de considérer un produit tensoriel topologique (plus complexe) pour espérer obtenir toutes les fonctions de $E \times E$ dans \mathbb{R} puisque la condition de Schwarz ne porte que sur les paires de fonctions (ϕ, ψ) .

En effet

$$\begin{aligned} [\pi_{\mathbb{H}} \circ (\partial \otimes id_{\mathbb{H}} + id_{\mathbb{H}} \otimes \partial)] (\phi \otimes \psi)(x) &= \int [\partial_x \phi(x) \psi(y) + \phi(x) \partial_y \psi(y)] \delta(x - y) dy \\ &= \psi(x) \partial_x \phi(x) + \phi(x) \partial_x \psi(x) \\ &= \frac{d}{dx} (\phi(x) \psi(x)) \end{aligned}$$

On montre de même que, de manière plus générale, on a :

$$\frac{d^k}{dx^k} = \pi_{\mathbb{H}} \circ (\partial \otimes id_{\mathbb{H}} + id_{\mathbb{H}} \otimes \partial)^k. \quad (\text{M.20})$$

On est maintenant en mesure de démontrer la factorisation d'opérateurs annoncée en utilisant simplement la factorisation polynomiale obtenue dans l'appendice M.1. Pour cela, comme pour comme pour les opérateurs Ω_k , on définit les opérateurs

$$\begin{array}{ccc} \bar{\Omega}_k^A : & \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} & \longrightarrow \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \\ & \phi \otimes \psi & \longmapsto \partial^k \phi \otimes \psi - \phi \otimes \partial^k \psi \end{array} \quad \text{et} \quad \begin{array}{ccc} \bar{\Omega}_k^S : & \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} & \longrightarrow \mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \\ & \phi \otimes \psi & \longmapsto \partial^k \phi \otimes \psi + \phi \otimes \partial^k \psi \end{array}$$

c'est à dire

$$\bar{\Omega}_k^A = \partial^k \otimes id_{\mathbb{H}} - id_{\mathbb{H}} \otimes \partial^k \quad \text{et} \quad \bar{\Omega}_k^S = \partial^k \otimes id_{\mathbb{H}} + id_{\mathbb{H}} \otimes \partial^k \quad (\text{M.21})$$

où l'on note au passage que : Ω_1^S correspond à l'opérateur qui, composé avec $\pi_{\mathbb{H}}$, donne l'opérateur de dérivation de \mathbb{H} ; que $\Omega_0^S = 2id_{\mathbb{H}} \otimes id_{\mathbb{H}} = 2id_{\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}}$; et que Ω_0^A est l'opérateur nul. On note \mathcal{A} la sous-algèbre de $\text{End}(\mathbb{H} \otimes \mathbb{H})$ engendrée par la familles $(\Omega_k^A, \Omega_k^S)_{k \in \mathbb{N}}$. L'algèbre $(\mathcal{A}, +, \cdot, \circ)$, où $+$, \cdot et \circ sont respectivement l'addition d'opérateurs, le produit par un scalaire et la composition d'opérateurs, est une algèbre commutative composée d'éléments de la forme

$$\sum_{k,n} \lambda_{k,n} \partial^k \otimes \partial^n \quad (\text{M.22})$$

où la somme porte sur un ensemble fini d'entiers naturels et où les $\lambda_{k,n} \in \mathbb{R}$. On définit alors l'application

$$\Lambda : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}[X, Y] \quad (\text{M.23})$$

telle que pour toute paire d'entier (k, n)

$$\Lambda((\partial^k \otimes id_{\mathbb{H}}) \circ (id_{\mathbb{H}} \otimes \partial^n)) = \Lambda(\partial^k \otimes \partial^n) \equiv X^k Y^n \quad (\text{M.24})$$

et que l'on étend par linéarité à l'algèbre \mathcal{A} toute entière. Notons que la première égalité dans l'équation ci-dessus a simplement été écrite pour rappeler que c'est

bien la composition \circ dans \mathcal{A} qui correspond au produit dans $\mathbb{R}[X, Y]$ et pas le produit tensoriel \otimes .

Par ailleurs, Λ est un isomorphisme d'algèbre puisque, d'une part, c'est un morphisme d'algèbre, et que, d'autre part, il est linéaire et envoie une base de \mathcal{A} sur une base de $\mathbb{R}[X, Y]$.

Ainsi l'application de $\pi_{\mathbb{H}} \circ \Lambda^{-1}$ aux formules de factorisations polynomiales du lemme 3 de l'appendice M.1 permet de conclure que l'on a bien les formules de factorisation d'opérateurs attendues.

Si on applique maintenant l'isomorphisme inverse, Λ^{-1} , aux formules du lemme 3 de l'appendice M.1, on obtient pour tout entier j :

$$\partial^{2j} \otimes id_{\mathbb{H}} - id_{\mathbb{H}} \otimes \partial^{2j} = \sum_{i=0}^{j-1} b_{2i+1}^{2j} [(\partial \otimes id_{\mathbb{H}}) + (id_{\mathbb{H}} \otimes \partial)]^{2j-2i-1} \circ [\partial^{2i+1} \otimes id_{\mathbb{H}} - id_{\mathbb{H}} \otimes \partial^{2i+1}] \quad (\text{M.25})$$

et

$$\partial^{2j+1} \otimes id_{\mathbb{H}} + id_{\mathbb{H}} \otimes \partial^{2j+1} = \sum_{i=0}^j c_{2i}^{2j+1} [(\partial \otimes id_{\mathbb{H}}) + (id_{\mathbb{H}} \otimes \partial)]^{2j+1-2i} \circ [\partial^{2i} \otimes id_{\mathbb{H}} + id_{\mathbb{H}} \otimes \partial^{2i}] \quad (\text{M.26})$$

Or pour des entiers k et n quelconques :

$$\begin{aligned} & [\pi_{\mathbb{H}} \circ [(\partial \otimes id_{\mathbb{H}}) + (id_{\mathbb{H}} \otimes \partial)]^k \circ [\partial^n \otimes id_{\mathbb{H}} \pm id_{\mathbb{H}} \otimes \partial^n]](\phi, \psi)(x) \\ &= [\pi_{\mathbb{H}} \circ [(\partial \otimes id_{\mathbb{H}}) + (id_{\mathbb{H}} \otimes \partial)]^k](\partial^n \phi \otimes \psi \pm \phi \otimes \partial^n \psi) \\ &= \frac{d^k}{dx^k} (\psi(x) \partial^n \phi(x) \pm \phi(x) \partial^n \psi(x)) \\ &= \frac{d^k}{dx^k} \Omega_n^{S,A}(\phi, \psi). \end{aligned}$$

Ainsi, l'application de l'opérateur de projection $\pi_{\mathbb{H}}$ aux formules (M.25) et (M.26) permet finalement de trouver les formules recherchées :

$$\Omega_{2j}^A = \sum_{i=0}^{j-1} b_{2i+1}^{2j} \frac{d^{(2j-2i-1)}}{dx^{(2j-2i-1)}} \Omega_{2i+1}^A \quad (\text{M.27})$$

et

$$\Omega_{2j+1}^S = \sum_{i=0}^j c_{2i}^{2j+1} \frac{d^{(2j+1-2i)}}{dx^{(2j+1-2i)}} \Omega_{2i}^S \quad (\text{M.28})$$

où les coefficients b_k^n et c_k^n sont donnés par le lemme 3 de l'appendice M.1.

Annexe N

D'une intégrale nulle à un systèmes d'EDP

L'objectif de cet appendice est de montrer que les familles de formes bilinéaires

$$\left((\phi, \psi) \mapsto \psi(x) \partial^{2n+1} \phi(x) - \phi(x) \partial^{2n+1} (\psi)(x) \right)_{n \in \mathbb{N}, x \in E} \quad (\text{N.1})$$

et

$$\left((\phi, \psi) \mapsto \psi(x) \partial^{2n} \phi(x) + \phi(x) \partial^{2n} (\psi)(x) \right)_{n \in \mathbb{N}, x \in E} \quad (\text{N.2})$$

sont “libres” en un sens généralisé, où en plus des combinaisons linéaires (finies) sur l’indice n , on s’autorise aussi à intégrer par rapport à x sur E tout entier. On va le démontrer pour la famille (N.1). La preuve étant très similaire pour la famille (N.2), on se contentera d’expliquer brièvement à la fin comment la preuve pour la liberté de (N.1) s’adapte. De même, on fait la démonstration pour $E = \mathbb{S}^1$, celle-ci s’adaptant aisément au cas $E = \mathbb{R}$.

Soit $N \in \mathbb{N}$ un entier naturel quelconque. On suppose qu’il existe une famille $(\lambda_n)_{n=1,\dots,N}$ de fonctions de E dans \mathbb{R} (de carré intégrable) telles que, pour toute paire de fonctions ϕ, ψ :

$$\sum_{n=1}^N \int \lambda_n(x) [\psi(x) \partial^{2n+1} \phi(x) - \phi(x) \partial^{2n+1} (\psi)(x)] dx = 0 . \quad (\text{N.3})$$

Montrons que ceci implique que les fonctions λ_n sont toutes nulles.

Les fonctions ϕ, ψ et λ_n se décomposent sur la base de Fourier :

$$\phi(x) = \sum_{p \in \mathbb{Z}} \hat{\phi}(p) e^{2i\pi p x} , \quad \psi(x) = \sum_{q \in \mathbb{Z}} \hat{\psi}(q) e^{2i\pi q x} , \quad \lambda_n(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{\lambda}_n(k) e^{2i\pi k x} . \quad (\text{N.4})$$

En remplaçant dans l'équation (N.3) les expressions de ϕ et ψ par leur décomposition dans la base de Fourier, on obtient :

$$\sum_{n=1}^N \sum_{p,q \in \mathbb{Z}} (2i\pi)^{2n+1} \hat{\phi}(p) \hat{\psi}(q) [p^{2n+1} - q^{2n+1}] \int \lambda_n(x) e^{2i\pi(p+q)x} dx = 0 , \quad (\text{N.5})$$

c'est à dire

$$\sum_{n=1}^N \sum_{p,q \in \mathbb{Z}} (2i\pi)^{2n+1} \hat{\phi}(p) \hat{\psi}(q) [p^{2n+1} - q^{2n+1}] \hat{\lambda}_n^*(p+q) = 0 , \quad (\text{N.6})$$

où l'étoile symbolise la conjugaison complexe. Notons que si les fonctions ϕ et ψ sont réelles, l'expression (N.3) étant linéaire par rapport à ϕ et ψ , on en déduit qu'elle doit être également vraie pour toute fonctions à valeur dans \mathbb{C} . Ainsi, l'équation (N.6) étant vraie pour toutes fonctions ϕ, ψ complexes, on peut en particulier choisir ϕ et ψ telles que

$$\hat{\phi}(p') = \delta_{p,p'} \quad \text{et} \quad \hat{\psi}(q') = \delta_{q,q'} , \quad (\text{N.7})$$

et ce pour tout p et q dans \mathbb{Z} . On peut donc déduire que

$$\forall (p, q) \in \mathbb{Z}^2 , \quad \sum_{n=1}^N (2i\pi)^{2n+1} [p^{2n+1} - q^{2n+1}] \hat{\lambda}_n^*(p+q) = 0 , \quad (\text{N.8})$$

En posant maintenant

$$k = p + q \quad \text{et} \quad \ell = p - q , \quad (\text{N.9})$$

l'équation (N.6) se réécrit

$$\forall (p, q) \in \mathbb{Z}^2 , \quad \sum_{n=1}^N (2i\pi)^{2n+1} \left[\left(\frac{k+\ell}{2} \right)^{2n+1} - \left(\frac{k-\ell}{2} \right)^{2n+1} \right] \hat{\lambda}_n^*(k) = 0 , \quad (\text{N.10})$$

pour tout couple $(k, \ell) \in \widehat{\mathbb{Z}^2}$, où on a posé

$$\widehat{\mathbb{Z}^2} = \left\{ (k, \ell) \in \mathbb{Z}^2 \mid k \equiv \ell[2] \right\} . \quad (\text{N.11})$$

On définit maintenant

$$P_{n,k}(\ell) = \left(\frac{k+\ell}{2} \right)^{2n+1} - \left(\frac{k-\ell}{2} \right)^{2n+1} . \quad (\text{N.12})$$

En développant les puissances, on a

$$P_{n,k}(\ell) = \sum_{i=0}^{2n+1} \binom{2n+1}{i} k^i \ell^{2n+1-i} - \sum_{j=0}^{2n+1} \binom{2n+1}{j} (-1)^{2n+1-j} k^j \ell^{2n+1-j} . \quad (\text{N.13})$$

On remarque que, vu comme polynômes de la variable ℓ , les $P_{n,k}$ sont respectivement de degré $2n + 1$, puisque leur terme dominant en ℓ est :

$$\binom{2n+1}{0} k^0 \ell^{2n+1-0} - \binom{2n+1}{0} (-1)^{2n+1-0} k^0 \ell^{2n+1-0} = 2\ell . \quad (\text{N.14})$$

Ainsi, pour tout $k \in \mathbb{N}$, la famille de polynômes $(P_{n,k})_{n=1,\dots,N}$ est libre car échelonnée en degré. Notons au passage que ce fait primordial est dû à la conjonction de deux facteurs, caractéristiques de la famille (N.1), à savoir le signe “-”, en rose dans l'équation (N.12), et le fait que les puissances soient impaires dans la définition (N.12) de $P_{n,k}$ (égales à $2n+1$). Dans la preuve de la liberté de la famille (N.2), les puissances sont paires, et le signe est “+”, ce permet encore de conclure à la liberté de la famille de polynômes correspondants.

On peut maintenant réécrire l'équation (N.10) à l'aide des polynômes $P_{n,k}$:

$$\forall (k, l) \in \widehat{\mathbb{Z}^2} , \quad \sum_{n=1}^N (2i\pi)^{2n+1} \hat{\lambda}_n^*(k) P_{n,k}(\ell) = 0 . \quad (\text{N.15})$$

La famille $(P_{n,k})_{n=1,\dots,N}$ étant libre, on conclut que

$$\forall (k, l) \in \widehat{\mathbb{Z}^2} , \quad \forall n = 1, \dots, N , \quad \hat{\lambda}_n^*(k) P_{n,k}(\ell) = 0 . \quad (\text{N.16})$$

L'équation (N.16) implique que, à $k \in \mathbb{Z}$ et $n \in \llbracket 1; N \rrbracket$ fixés, le polynôme en ℓ : $\hat{\lambda}_n^*(k) P_{n,k}(\ell)$ possède une infinité de racine. Celui-ci est donc nul et on peut conclure que

$$\forall k \in \mathbb{Z} , \quad \forall n \in \llbracket 1; N \rrbracket , \quad \hat{\lambda}_n^*(k) = 0 , \quad (\text{N.17})$$

c'est à dire

$$\forall n \in \llbracket 1; N \rrbracket , \quad \lambda_n = 0 . \quad (\text{N.18})$$

Liste des publications

- P1** Jérémie O'Byrne, Alexandre Solon, Julien Tailleur, YongFeng Zhao. “An introduction to motility induced phase separation”.
In : *arXiv preprint arXiv :2112.03979* (2021).
Chapitre à paraître dans le livre “Out-of-Equilibrium Soft Matter : Active Fluid”, publié par *The Royal Society of Chemistry*.
- P2** Jérémie O'Byrne. “Non-Equilibrium Currents in Stochastic Field Theories : a Geometric Insight”.
In : *arXiv preprint arXiv :2108.13535* (2021).
- P3** Jérémie O'Byrne, Julien Tailleur. “Time-(ir) reversibility in active matter : from micro to macro”.
In : *arXiv preprint arXiv :2104.03030* (2021).
- P4** David Martin, Jérémie O'Byrne, Mike Cates, Étienne Fodor, Cesare Nardini, Julien Tailleur, Frédéric van Wijland. “Statistical mechanics of active Ornstein-Uhlenbeck particles”.
In : *Physical Review E* 103.3 (2021), p. 032607.
- P5** Jérémie O'Byrne, Julien Tailleur. “Lamellar to micellar phases and beyond : When tactic active systems admit free energy functionals”.
In : *Physical Review Letters* 125.20 (2020), p. 208003.

Bibliographie

- [1] Bilge ACUN et al. « Scalable molecular dynamics with NAMD on the summit system ». *IBM journal of research and development* 62.6 (2018), p. 4-1.
- [2] Bao-quan AI et al. « Rectification and diffusion of self-propelled particles in a two-dimensional corrugated channel ». *Physical Review E* 88.6 (2013), p. 062129.
- [3] Joshua ALPER et al. « Reconstitution of flagellar sliding ». *Methods in enzymology* 524 (2013), p. 343-369.
- [4] L ANGELANI, A COSTANZO et R DI LEONARDO. « Active ratchets ». *EPL (Europhysics Letters)* 96.6 (2011), p. 68002.
- [5] Shane ARORA, Hazel BROWNE et Daniel DANERS. « An alternative approach to Fréchet derivatives ». *Journal of the Australian Mathematical Society* 111.2 (2021), p. 202-220.
- [6] Roger BALIAN. « François Massieu et les potentiels thermodynamiques ». *Evolution des disciplines et histoire des découvertes, Académie des Sciences* (2015).
- [7] Michele BALLERINI et al. « Interaction ruling animal collective behavior depends on topological rather than metric distance: Evidence from a field study ». *Proceedings of the national academy of sciences* 105.4 (2008), p. 1232-1237.
- [8] Urna BASU et al. « Exact stationary state of a run-and-tumble particle with three internal states in a harmonic trap ». *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 53.9 (2020), 09LT01.
- [9] Christopher BATTLE et al. « Broken detailed balance at mesoscopic scales in active biological systems ». *Science* 352.6285 (2016), p. 604-607.
- [10] Tobias BÄUERLE et al. « Self-organization of active particles by quorum sensing rules ». *Nature communications* 9.1 (2018), p. 1-8.

- [11] Howard C BERG. *E. coli in Motion*. Springer Science & Business Media, 2008.
- [12] William BIALEK et al. « Statistical mechanics for natural flocks of birds ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109.13 (2012), p. 4786-4791.
- [13] Luis L BONILLA. « Active ornstein-uhlenbeck particles ». *Physical Review E* 100.2 (2019), p. 022601.
- [14] Pallaval Veera BRAMHACHARI et al. « Quorum sensing regulated swarming motility and migratory behavior in bacteria ». *Implication of Quorum Sensing System in Biofilm Formation and Virulence*. Springer, 2018, p. 49-66.
- [15] Antoine BRICARD et al. « Emergence of macroscopic directed motion in populations of motile colloids ». *Nature* 503.7474 (2013), p. 95-98.
- [16] Antoine BRICARD et al. « Emergent vortices in populations of colloidal rollers ». *Nature communications* 6.1 (2015), p. 1-8.
- [17] Christian Van den BROECK et Peter HÄNGGI. « Activation rates for non-linear stochastic flows driven by non-Gaussian noise ». *Physical Review A* 30.5 (1984), p. 2730.
- [18] Robert BROWN. *A brief account of microscopical observations made... on the particles contained in the pollen of plants, and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies*. 1828.
- [19] Jerome BUHL et al. « From disorder to order in marching locusts ». *Science* 312.5778 (2006), p. 1402-1406.
- [20] Ivo BUTTINONI et al. « Dynamical clustering and phase separation in suspensions of self-propelled colloidal particles ». *Physical review letters* 110.23 (2013), p. 238301.
- [21] Herbert B CALLEN. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatics*. 1998.
- [22] Daniel S CALOVI et al. « Swarming, schooling, milling: phase diagram of a data-driven fish school model ». *New journal of Physics* 16.1 (2014), p. 015026.
- [23] Michael E CATES et Julien TAILLEUR. « Motility-induced phase separation ». *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 6.1 (2015), p. 219-244.
- [24] Michael E CATES et Julien TAILLEUR. « When are active Brownian particles and run-and-tumble particles equivalent? Consequences for motility-induced phase separation ». *EPL (Europhysics Letters)* 101.2 (2013), p. 20010.

- [25] Andrea CAVAGNA et al. « Scale-free correlations in starling flocks ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 107.26 (2010), p. 11865-11870.
- [26] Debasish CHAUDHURI et Abhishek DHAR. « Active Brownian particle in harmonic trap: exact computation of moments, and re-entrant transition ». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2021.1 (2021), p. 013207.
- [27] Pierre-Henri CHAVANIS. « A stochastic Keller–Segel model of chemotaxis ». *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 15.1 (2010), p. 60-70.
- [28] David S DEAN. « Langevin equation for the density of a system of interacting Langevin processes ». *Journal of Physics A: Mathematical and General* 29.24 (1996), p. L613.
- [29] Julien DESEIGNE, Olivier DAUCHOT et Hugues CHATÉ. « Collective motion of vibrated polar disks ». *Physical review letters* 105.9 (2010), p. 098001.
- [30] Julien DESEIGNE et al. « Vibrated polar disks: spontaneous motion, binary collisions, and collective dynamics ». *Soft Matter* 8.20 (2012), p. 5629-5639.
- [31] Abhishek DHAR et al. « Run-and-tumble particle in one-dimensional confining potentials: Steady-state, relaxation, and first-passage properties ». *Physical Review E* 99.3 (2019), p. 032132.
- [32] Roberto DI LEONARDO et al. « Bacterial ratchet motors ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 107.21 (2010), p. 9541-9545.
- [33] Stephen P DIGGLE et al. « Cooperation and conflict in quorum-sensing bacterial populations ». *Nature* 450.7168 (2007), p. 411-414.
- [34] B. DIU et C. GUTHMANN. *Eléments de physique statistique*. Collection enseignement des sciences. Hermann, 1989. ISBN : 9782705660659. URL : <https://books.google.fr/books?id=I67gAAAAMAAJ>.
- [35] Marco DORIGO, Guy THERAULAZ et Vito TRIANNI. « Reflections on the future of swarm robotics ». *Science Robotics* 5.49 (2020).
- [36] Jörn DUNKEL et al. « Fluid dynamics of bacterial turbulence ». *Physical review letters* 110.22 (2013), p. 228102.
- [37] Harald EHRENTRAUT et Wolfgang MUSCHIK. « On symmetric irreducible tensors in d-dimensions ». *ARI-An International Journal for Physical and Engineering Sciences* 51.2 (1998), p. 149-159.
- [38] Jens ELGETI et Gerhard GOMPPER. « Self-propelled rods near surfaces ». *EPL (Europhysics Letters)* 85.3 (2009), p. 38002.

- [39] Jens ELGETI et Gerhard GOMPPER. « Wall accumulation of self-propelled spheres ». *EPL (Europhysics Letters)* 101.4 (2013), p. 48003.
- [40] Barath EZHILAN, Roberto ALONSO-MATILLA et David SAINTILLAN. « On the distribution and swim pressure of run-and-tumble particles in confinement ». *Journal of Fluid Mechanics* 781 (2015).
- [41] Yaouen FILY et M Cristina MARCHETTI. « Athermal phase separation of self-propelled particles with no alignment ». *Physical review letters* 108.23 (2012), p. 235702.
- [42] Étienne FODOR et al. « How far from equilibrium is active matter? ». *Physical review letters* 117.3 (2016), p. 038103.
- [43] Dieter FORSTER. *Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry, and correlation functions*. CRC Press, 2018.
- [44] Peter GALAJDA et al. « A wall of funnels concentrates swimming bacteria ». *Journal of bacteriology* 189.23 (2007), p. 8704-8707.
- [45] Pulak K GHOSH et al. « Self-propelled Janus particles in a ratchet: Numerical simulations ». *Physical review letters* 110.26 (2013), p. 268301.
- [46] Josiah Willard GIBBS. *Elementary principles in statistical mechanics: developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics*. Yale University Press, 1914.
- [47] Eric A GILLIES et al. « Hydrodynamic propulsion of human sperm ». *Journal of Fluid Mechanics* 625 (2009), p. 445-474.
- [48] Matthew A GLASER et al. « Soft spheres make more mesophases ». *EPL (Europhysics Letters)* 78.4 (2007), p. 46004.
- [49] Timothy GOWERS, June BARROW-GREEN et Imre LEADER. *The Princeton companion to mathematics*. Princeton University Press, 2008.
- [50] Tobias GRAFKE, Michael E CATES et Eric VANDEN-EIJNDEN. « Spatio-temporal self-organization of fluctuating bacterial colonies ». *Physical review letters* 119.18 (2017), p. 188003.
- [51] Guillaume GRÉGOIRE et Hugues CHATÉ. « Onset of collective and cohesive motion ». *Physical review letters* 92.2 (2004), p. 025702.
- [52] Jonathan R HOWSE et al. « Self-motile colloidal particles: from directed propulsion to random walk ». *Physical review letters* 99.4 (2007), p. 048102.
- [53] Edwin T JAYNES. « Information theory and statistical mechanics ». *Physical review* 106.4 (1957), p. 620.

- [54] Da-Quan JIANG et Donghua JIANG. *Mathematical theory of nonequilibrium steady states: on the frontier of probability and dynamical systems*. Springer Science & Business Media, 2004.
- [55] Yael KATZ et al. « Inferring the structure and dynamics of interactions in schooling fish ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108.46 (2011), p. 18720-18725.
- [56] Laurent KELLER et Michael G SURETTE. « Communication in bacteria: an ecological and evolutionary perspective ». *Nature Reviews Microbiology* 4.4 (2006), p. 249-258.
- [57] Nn KOUMAKIS, C MAGGI et R DI LEONARDO. « Directed transport of active particles over asymmetric energy barriers ». *Soft matter* 10.31 (2014), p. 5695-5701.
- [58] Andreas KRIEGL et Peter W MICHOR. *The convenient setting of global analysis*. T. 53. American Mathematical Soc., 1997.
- [59] C Ronald KUBE et Hong ZHANG. « Collective robotic intelligence ». *Second International Conference on Simulation of Adaptive Behavior*. 1992, p. 460-468.
- [60] Jorge KURCHAN. « Fluctuation theorem for stochastic dynamics ». *Journal of Physics A: Mathematical and General* 31.16 (1998), p. 3719.
- [61] Paul LANGEVIN. « Sur la théorie du mouvement brownien ». *Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences* 146 (1908), p. 530-532.
- [62] François A LAVERGNE et al. « Group formation and cohesion of active particles with visual perception-dependent motility ». *Science* 364.6435 (2019), p. 70-74.
- [63] Joel L LEBOWITZ et Herbert SPOHN. « A Gallavotti–Cohen-type symmetry in the large deviation functional for stochastic dynamics ». *Journal of Statistical Physics* 95.1 (1999), p. 333-365.
- [64] Chenli LIU et al. « Sequential establishment of stripe patterns in an expanding cell population ». *Science* 334.6053 (2011), p. 238-241.
- [65] Guannan LIU et al. « Self-driven phase transitions drive *Myxococcus xanthus* fruiting body formation ». *Physical review letters* 122.24 (2019), p. 248102.
- [66] Zeng Tao LIU et al. « Activity waves and freestanding vortices in populations of subcritical Quincke rollers ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 118.40 (2021).
- [67] Joël MABILLARD et Pierre GASPARD. « Microscopic approach to the macrodynamics of matter with broken symmetries ». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2020.10 (2020), p. 103203.

- [68] Christian MAES. « The fluctuation theorem as a Gibbs property ». *Journal of statistical physics* 95.1 (1999), p. 367-392.
- [69] Claudio MAGGI et al. « Micromotors with asymmetric shape that efficiently convert light into work by thermocapillary effects ». *Nature communications* 6.1 (2015), p. 1-5.
- [70] Saeed MAHDISOLTANI et al. « Nonequilibrium polarity-induced chemotaxis: Emergent Galilean symmetry and exact scaling exponents ». *Physical Review Research* 3.1 (2021), p. 013100.
- [71] Gianpietro MALESCIO et Giuseppe PELLICANE. « Stripe phases from isotropic repulsive interactions ». *Nature materials* 2.2 (2003), p. 97-100.
- [72] David MARTIN et Thibaut Arnoulx de PIREY. « AOUP in the presence of Brownian noise: a perturbative approach ». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2021.4 (2021), p. 043205.
- [73] David MARTIN et al. « Fluctuation-induced phase separation in metric and topological models of collective motion ». *Physical Review Letters* 126.14 (2021), p. 148001.
- [74] David MARTIN et al. « Statistical mechanics of active Ornstein-Uhlenbeck particles ». *Physical Review E* 103.3 (2021), p. 032607.
- [75] Danielle McDERMOTT, Cynthia J Olson REICHARDT et Charles REICHARDT. « Collective ratchet effects and reversals for active matter particles on quasi-one-dimensional asymmetric substrates ». *Soft Matter* 12.41 (2016), p. 8606-8615.
- [76] Melissa B MILLER et Bonnie L BASSLER. « Quorum sensing in bacteria ». *Annual Reviews in Microbiology* 55.1 (2001), p. 165-199.
- [77] Akankshi MUNJAL et Thomas LECUIT. « Actomyosin networks and tissue morphogenesis ». *Development* 141.9 (2014), p. 1789-1793.
- [78] Vijay NARAYAN, Sriram RAMASWAMY et Narayanan MENON. « Long-lived giant number fluctuations in a swarming granular nematic ». *Science* 317.5834 (2007), p. 105-108.
- [79] RW NASH et al. « Run-and-tumble particles with hydrodynamics: Sedimentation, trapping, and upstream swimming ». *Physical review letters* 104.25 (2010), p. 258101.
- [80] Jérémie O'BYRNE et al. « Time-(ir) reversibility in active matter: from micro to macro ». *arXiv preprint arXiv:2104.03030* (2021).
- [81] Garrett M ODELL et al. « The mechanical basis of morphogenesis: I. Epithelial folding and invagination ». *Developmental biology* 85.2 (1981), p. 446-462.

- [82] Peter J OLVER. *Applications of Lie groups to differential equations*. T. 107. Springer Science & Business Media, 2000.
- [83] Lars ONSAGER et Stefan MACHLUP. « Fluctuations and irreversible processes ». *Physical Review* 91.6 (1953), p. 1505.
- [84] Felix OTTO. « The geometry of dissipative evolution equations: the porous medium equation ». (2001).
- [85] Jérémie PALACCI et al. « Sedimentation and effective temperature of active colloidal suspensions ». *Physical Review Letters* 105.8 (2010), p. 088304.
- [86] Jean PERRIN. « Mouvement brownien et réalité moléculaire ». (1909).
- [87] Fernando PERUANI et al. « Collective motion and nonequilibrium cluster formation in colonies of gliding bacteria ». *Physical review letters* 108.9 (2012), p. 098102.
- [88] James C PHILLIPS et al. « Mapping to irregular torus topologies and other techniques for petascale biomolecular simulation ». *SC'14: Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. IEEE. 2014, p. 81-91.
- [89] Oliver POHL et Holger STARK. « Dynamic clustering and chemotactic collapse of self-phoretic active particles ». *Physical review letters* 112.23 (2014), p. 238303.
- [90] Marco POLIN et al. « Chlamydomonas swims with two “gears” in a eukaryotic version of run-and-tumble locomotion ». *Science* 325.5939 (2009), p. 487-490.
- [91] Thomas D POLLARD et Robert D GOLDMAN. « Overview of the cytoskeleton from an evolutionary perspective ». *Cold Spring Harbor perspectives in biology* 10.7 (2018), a030288.
- [92] Andrey POTOTSKY, Aljoscha M HAHN et Holger STARK. « Rectification of self-propelled particles by symmetric barriers ». *Physical Review E* 87.4 (2013), p. 042124.
- [93] Mathieu POUJADE et al. « Collective migration of an epithelial monolayer in response to a model wound ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 104.41 (2007), p. 15988-15993.
- [94] M. PULLICINO. *Thermodynamique - PCSI MPSI PTSI: ouvrage numérique PDF - 3,8 Mo*. Classe Prépa. NATHAN. ISBN : 9782098121522. URL : <https://books.google.fr/books?id=dgCmpU3LSUQC>.
- [95] RC RAINES. « Weather and the movements of locust swarms: a new hypothesis ». *Nature* 168.4286 (1951), p. 1057-1060.

- [96] Gabriel S REDNER, Michael F HAGAN et Aparna BASKARAN. « Structure and dynamics of a phase-separating active colloidal fluid ». *Physical review letters* 110.5 (2013), p. 055701.
- [97] CJ Olson REICHARDT et Charles REICHARDT. « Ratchet effects in active matter systems ». *Annual Review of Condensed Matter Physics* 8 (2017), p. 51-75.
- [98] Hannes RISKEN. « Fokker-planck equation ». *The Fokker-Planck Equation*. Springer, 1996, p. 63-95.
- [99] Thomas RISLER. « Cytoskeleton and Cell Motility ». *Encyclopedia of Complexity and Systems Science*. 2009.
- [100] David RUELLE. *Statistical mechanics: Rigorous results*. World Scientific, 1999.
- [101] Mark J SCHNITZER. « Theory of continuum random walks and application to chemotaxis ». *Physical Review E* 48.4 (1993), p. 2553.
- [102] Jan Arnoldus SCHOUTEN. *Tensor analysis for physicists*. Courier Corporation, 1989.
- [103] Ada SEDOVA et al. « High-performance molecular dynamics simulation for biological and materials sciences: challenges of performance portability ». *2018 IEEE/ACM International Workshop on Performance, Portability and Productivity in HPC (P3HPC)*. IEEE. 2018, p. 1-13.
- [104] Udo SEIFERT. « Entropy production along a stochastic trajectory and an integral fluctuation theorem ». *Physical review letters* 95.4 (2005), p. 040602.
- [105] Néstor SEPÚLVEDA et al. « Collective cell motion in an epithelial sheet can be quantitatively described by a stochastic interacting particle model ». *PLoS computational biology* 9.3 (2013), e1002944.
- [106] An-Chang SHI et Wenbing HU. *Understanding soft condensed matter via modeling and computation*. T. 3. World Scientific, 2010.
- [107] Jesse L SILVERBERG et al. « Collective motion of humans in mosh and circle pits at heavy metal concerts ». *Physical review letters* 110.22 (2013), p. 228701.
- [108] Andrey SOKOLOV et al. « Swimming bacteria power microscopic gears ». *Proceedings of the National Academy of Sciences* 107.3 (2010), p. 969-974.
- [109] Alexandre P SOLON, Michael E CATES et Julien TAILLEUR. « Active brownian particles and run-and-tumble particles: A comparative study ». *The European Physical Journal Special Topics* 224.7 (2015), p. 1231-1262.

- [110] Alexandre P SOLON et al. « Generalized thermodynamics of motility-induced phase separation: phase equilibria, Laplace pressure, and change of ensembles ». *New Journal of Physics* 20.7 (2018), p. 075001.
- [111] Alexandre P SOLON et al. « Generalized thermodynamics of phase equilibria in scalar active matter ». *Physical Review E* 97.2 (2018), p. 020602.
- [112] Rodrigo SOTO et Ramin GOLESTANIAN. « Run-and-tumble dynamics in a crowded environment: Persistent exclusion process for swimmers ». *Physical Review E* 89.1 (2014), p. 012706.
- [113] Rodrigo SOTO et Ramin GOLESTANIAN. « Self-assembly of catalytically active colloidal molecules: Tailoring activity through surface chemistry ». *Physical review letters* 112.6 (2014), p. 068301.
- [114] AJM SPENCER. « A note on the decomposition of tensors into traceless symmetric tensors ». *International Journal of Engineering Science* 8.6 (1970), p. 475-481.
- [115] Joakim STENHAMMAR et al. « Light-induced self-assembly of active rectification devices ». *Science advances* 2.4 (2016), e1501850.
- [116] Ruslan Leontievich STRATONOVICH. « On the probability functional of diffusion processes ». *Selected Trans. in Math. Stat. Prob* 10 (1971), p. 273-286.
- [117] Raimon SUNYER et al. « Collective cell durotaxis emerges from long-range intercellular force transmission ». *Science* 353.6304 (2016), p. 1157-1161.
- [118] Grzegorz SZAMEL. « Self-propelled particle in an external potential: Existence of an effective temperature ». *Physical Review E* 90.1 (2014), p. 012111.
- [119] J TAILLEUR et ME CATES. « Statistical mechanics of interacting run-and-tumble bacteria ». *Physical review letters* 100.21 (2008), p. 218103.
- [120] Julien TAILLEUR et ME CATES. « Sedimentation, trapping, and rectification of dilute bacteria ». *EPL (Europhysics Letters)* 86.6 (2009), p. 60002.
- [121] Sho C TAKATORI et al. « Acoustic trapping of active matter ». *Nature communications* 7.1 (2016), p. 1-7.
- [122] Isaac THEURKAUFF et al. « Dynamic clustering in active colloidal suspensions with chemical signaling ». *Physical review letters* 108.26 (2012), p. 268303.
- [123] John TONER et Yuhai TU. « Long-range order in a two-dimensional dynamical XY model: how birds fly together ». *Physical review letters* 75.23 (1995), p. 4326.
- [124] Marjolein N VAN DER LINDEN et al. « Interrupted motility induced phase separation in aligning active colloids ». *Physical review letters* 123.9 (2019), p. 098001.

- [125] Gábor VÁSÁRHELYI et al. « Optimized flocking of autonomous drones in confined environments ». *Science Robotics* 3.20 (2018).
- [126] Ganesh K VENAYAGAMOORTHY, Lisa L GRANT et Sheetal DOCTOR. « Collective robotic search using hybrid techniques: Fuzzy logic and swarm intelligence inspired by nature ». *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 22.3 (2009), p. 431-441.
- [127] Tamás VICSEK et al. « Novel type of phase transition in a system of self-driven particles ». *Physical review letters* 75.6 (1995), p. 1226.
- [128] Caleb G WAGNER, Michael F HAGAN et Aparna BASKARAN. « Steady-state distributions of ideal active Brownian particles under confinement and forcing ». *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2017.4 (2017), p. 043203.
- [129] MB WAN et al. « Rectification of swimming bacteria and self-driven particle systems by arrays of asymmetric barriers ». *Physical review letters* 101.1 (2008), p. 018102.
- [130] Xianhui WANG et al. « The locust genome provides insight into swarm formation and long-distance flight ». *Nature communications* 5.1 (2014), p. 1-9.
- [131] Raphael WITTKOWSKI et al. « Scalar φ 4 field theory for active-particle phase separation ». *Nature communications* 5.1 (2014), p. 1-9.
- [132] Hideki YAMAGUCHI, Jeffrey WYCKOFF et John CONDEELIS. « Cell migration in tumors ». *Current opinion in cell biology* 17.5 (2005), p. 559-564.
- [133] Xingbo YANG, M Lisa MANNING et M Cristina MARCHETTI. « Aggregation and segregation of confined active particles ». *Soft matter* 10.34 (2014), p. 6477-6484.
- [134] Ehud YARIV et Ory SCHNITZER. « Ratcheting of Brownian swimmers in periodically corrugated channels: A reduced Fokker-Planck approach ». *Physical Review E* 90.3 (2014), p. 032115.
- [135] Robert ZWANZIG. *Nonequilibrium statistical mechanics*. Oxford university press, 2001.