

THÈSE

pour l'obtention du Diplôme de

Docteur de l'université Paris 7 – Denis Diderot

Spécialité : physique

par

Guillaume Grégoire

présentée et soutenue publiquement le 18 décembre 2002

Comportements collectifs d'animaux et physique hors-équilibre

Composition du jury

<i>Président :</i>	E. Karsenti
<i>Directeur :</i>	V. Hakim
<i>Responsable CEA :</i>	H. Chaté
<i>Rapporteurs :</i>	F. Graner W.-J. Rappel
<i>Examineur :</i>	P. Galatola

Mis en page avec la classe thloria.

À Stéphanie, ma correctrice la plus attentionnée

Remerciements

Remercier chaque personne et institution qui ont contribué à l'élaboration d'une thèse est une tâche difficile. Il faudrait être exhaustif afin de ne froisser personne, et original pour que cette première page ne rebute pas le lecteur de poursuivre dans ce mémoire. Hélas, je ne suis pas littéraire, peu s'en faut, et après trois années de travail je crains d'oublier des acteurs de ma thèse. Ces remerciements commencent donc par un *mea culpa*. Je prie le lecteur de m'excuser du manque d'originalité et des oublis possibles de cette page.

Cette thèse a pris corps sous l'impulsion et la direction de Hugues Chaté. Il m'a beaucoup apporté tant au niveau des connaissances que de la méthodologie.

Je tiens à remercier Vincent Hakim pour avoir accepté la responsabilité d'être mon directeur de thèse. Éric Karsenti et Paolo Galatola m'ont fait la gentillesse de faire partie de mon jury. Enfin la lourde tâche de rapporteur a été réalisée avec beaucoup de sympathie par François Graner et Wouter-Jan Rappel. Compte-tenu de l'éloignement géographique entre les différentes parties et du peu de temps qui leur était alloué, je ne les remercierai jamais assez.

Des collaborations et des interactions scientifiques ont été particulièrement fructueuses. À ce titre, je remercie Yuhai Tu, Xiao-Lun Wu et Albert Libchaber.

Le travail présenté ici a été réalisé au *Service de Physique de l'État Condensé* du *Commissariat à l'Énergie Atomique*, service dont Jacques-Michel Hamman avait la charge. Je tiens à le remercier. C'était un plaisir de venir travailler au *SPEC*, tant pour profiter des conditions matérielles que de l'ambiance régnant dans ce laboratoire. L'efficacité du secrétariat n'est pas étranger à cette atmosphère. Il faut pour cela en remercier successivement Raymonde Marciano et Sandrine Thunin.

Je dois associer aussi les collègues de *couloir* pour leur bonne humeur, leur intérêt porté à nos travaux et leurs conseils : Robert Conte, Roger Bidaux, Jean-Philippe Bouchaud, Marc-Antoine Dubois, Jean-Pierre Carton, François Daviaud, Bérengère Dubrulle, Arnaud Prigent et Olivier Dauchot avec qui nous avons collaboré.

Je tiens à remercier plus spécifiquement mes compères doctorants pour les multiples discussions scientifiques, informatiques voire politiques ou télévisuelles : Julien Kockelkoren, Julien Lamarcq, Charly Favier, Louis Marié et son pingouin, Nicolas Leprovost, et Éric Bertin avec qui nous avons collaboré pour le Chapitre 9.

Cette thèse a profité des moyens informatiques du *DRECAM*, du calcul centralisé du *CEA*, et du cluster de PCs expérimental *GOCRE*. Je remercie ces institutions, leurs représentants et les membres de leurs services techniques, notamment Anne Capedepont, l'équipe Star de Grenoble, Alain Billoire, Arnaud Leservot et Samuel Thoraval.

La thèse est en partie l'aboutissement d'un apprentissage et donc le résultat indirect de multiples rencontres. Parmi elles, je remercie Raymond Legaudu, Jean-Denis Guillaume, Anne Ast et Pascal Chaix.

Mais la thèse représente aussi beaucoup d'investissements personnels, ce qui nécessite une certaine atmosphère, un peu protectrice. Celle-ci m'a été dispensée par toute ma famille et mes amis. Je les en remercie tous chaleureusement. J'exprime ma gratitude pour leurs aides respectives à François Boulanger, Yves Le Guillou, la petite Nolwenn et Hannibal.

Table des matières

Table des figures	xi
Liste des tableaux	xv
Notations	xvii

Introduction : Biologie et Physique

Observations zoologiques et définitions	5
1 Définitions	5
2 De la sociabilité des bactéries et des amibes	7
3 Les Grandes Questions	8
Apport des physiciens et problèmes	11
1 Les modèles	11
2 Les ingrédients d'un modèle	13
3 La problématique de ce travail	15

Partie I Les mouvements collectifs d'animaux en densité homogène

Chapitre 1 Modèle de Vicsek

1.1	Présentation	19
1.1.1	Introduction	19
1.1.2	Description	20
1.1.3	Paramètres	21
1.1.4	Observations	22
1.2	Résultats de T. Vicsek <i>et al.</i>	23
1.3	Discussion	26
1.3.1	Conclusions des études précédentes	26
1.3.2	Problèmes et questions ouvertes	27

Chapitre 2

Modèles mésoscopiques

2.1	Dérivation des équations	31
2.2	Corrélations à longue portée	34
2.3	Diffusion	37

Chapitre 3

Généralisation du modèle de Vicsek

3.1	Bruit et échelle	40
3.1.1	Interactions	40
3.1.2	Bruits	41
3.2	Calculs numériques	43
3.3	Résultats et discussion	45
3.3.1	Bruit Br1	45
3.3.2	Bruit Br2	57
3.4	Conclusions et perspectives	62

Chapitre 4

Expérience de X.-L. Wu et A. Libchaber

4.1	Dispositif expérimental	65
4.2	Mesures et observations	67
4.3	Discussion	69

Chapitre 5**Modélisation de l'expérience**

5.1	Les règles d'interaction	74
5.2	Paramètres des simulations	76
5.3	Résultats préliminaires	78
5.4	Discrimination des meilleures règles microscopiques	80
5.5	Étude du régime intermédiaire	83
5.6	Influence des bruits	85

Partie II Comportements collectifs sur un espace ouvert**Chapitre 6****Diagramme des phases**

6.1	Description des modèles utilisés	91
6.2	Les différentes phases possibles	94
6.2.1	Description	94
6.2.2	Propriétés microscopiques	96
6.3	Détermination du diagramme	99
6.3.1	Définition des paramètres d'ordre et nature des transitions	99
6.3.2	Les diagrammes des phases	102

Chapitre 7**Limite du troupeau infini sur un espace ouvert**

7.1	Évaporation d'une gouttelette	107
7.2	Tension de surface des troupeaux	110
7.3	Les effets de taille finie	112
7.4	Une limite après l'autre	114

Chapitre 8**De l'agitation microscopique au mouvement macroscopique**

8.1	Dynamique des phases établies	119
-----	---	-----

8.1.1	Mouvements des troupeaux	119
8.1.2	Dans le gaz	121
8.2	Transition de forme	123
8.2.1	Anomalies sur les effets de taille finie	123
8.2.2	Déformations dynamiques des troupeaux	125
8.3	Troupeaux en rotation	130

Chapitre 9

Approches de champ moyen

9.1	Théorie cinétique	135
9.2	Gaz de van der Waals	138

Conclusion et résumé	143
-----------------------------	------------

État de l'art	145
---------------	-----

Perspectives	149
--------------	-----

Annexes	151
----------------	------------

Annexe A Les transitions continues	151
---	------------

Annexe B Études des effets de taille finie	155
---	------------

Annexe C Transition du premier ordre	159
---	------------

Annexe D Erreurs statistiques	163
--------------------------------------	------------

Annexe E Pavage de Voronoï	167
-----------------------------------	------------

E.1	Définition	167
-----	----------------------	-----

E.2	Algorithme	168
-----	----------------------	-----

Annexe F Statistique des évènements extrêmes	171
---	------------

Publications	173
---------------------	------------

Table des figures

1.1	Définition des voisinages d'interaction dans le modèle de Vicsek. . .	20
1.2	Images instantanées d'un vol d'oiseaux du modèle de Vicsek. . . .	22
1.3	Transition de phase dans le modèle de Vicsek.	24
2.1	Vitesse du son en fonction de l'anisotropie.	36
3.1	Influence de l'interaction à deux corps.	41
3.2	Influence de la nature du bruit.	42
3.3	Ajustements polynômiaux.	44
3.4	Temps d'autocorrélation du modèle Br1-Fr au point critique. . . .	46
3.5	Effets de taille sur le cumulatif de Binder du modèle Br1-Fr. . . .	47
3.6	Détermination du point critique des modèles Br1.	48
3.7	Effets de taille aux points critiques des modèles Br1, détermination de β/ν et γ/ν	49
3.8	Effets de taille aux points critiques des modèles Br1, détermination de $1/\nu$	50
3.9	Détermination des exposants β et γ au point critique des modèles Br1.	51
3.10	Détermination de l'exposant ν du modèle Br1-Fr.	52
3.11	Corrections aux effets de taille finie dans le modèle Br1-Fr.	54
3.12	Diffusion au point critique du modèle Br1-Fr.	55
3.13	Coexistence de phases au point de transition des modèles Br2. . . .	57
3.14	Temps d'autocorrélation du modèle Br2-Fr au point de transition. . .	58
3.15	Effets de taille finie sur le paramètre d'ordre du modèle Br2-Fr. . . .	59
3.16	Effets de taille finie sur la détermination du point de transition du modèle Br2-Fr.	60
3.17	Théorème de fluctuation–dissipation généralisé aux modèles Br1- Fr et Br2-Fr	63
4.1	Mesure de la diffusion de traceurs dans un bain de bactéries. . . .	68
4.2	Comportement du temps caractéristique t_c , de la longueur caracté- ristique l_c et du coefficient de diffusion D en fonction de la densité de bactéries n	69
5.1	Trajectoires d'un traceur et de deux bactéries.	78

5.2	Comparaison des courbes de diffusion des traceurs ou des bactéries avec chacune des règles d'interaction.	79
5.3	Comparaison des temps typiques de diffusion en fonction de la densité.	80
5.4	Étude de la loi de Stokes en fonction du choix des interactions . .	81
5.5	Étude de l'énergie cinétique en fonction de l'inverse du rayon des traceurs.	82
5.6	Caractéristiques statistiques de la vitesse des traceurs en fonction de la densité de bactéries.	83
5.7	Courbes du temps caractéristique, de la longueur caractéristique et du coefficient de diffusion.	84
5.8	Courbes du temps caractéristique, de la longueur caractéristique et du coefficient de diffusion en fonction des règles d'interaction. .	85
5.9	Comparaison des comportements des bactéries suivant le choix du bruit.	86
5.10	Variations du temps caractéristique en fonction de la longueur caractéristique de changement de régime.	87
6.1	Force utilisée pour étudier les propriétés de cohésion.	92
6.2	Les différents états cohésifs présents dans nos modèles.	95
6.3	Variations de l'écart relatif moyen.	97
6.4	Définitions des secteurs étudiés à l'intérieur d'un troupeau.	98
6.5	Nature des transitions de cohésion.	100
6.6	Coexistence de phases dans la transition vers l'ordre de position. .	101
6.7	Diagramme des phases du modèle Br2-Fh à bruit constant, densité globale non nulle et taille finie.	104
6.8	Diagramme des phases du modèle Br1-Fh à densité globale non nulle et taille finie.	105
7.1	Dispersion des troupeaux.	108
7.2	Tension de surface en fonction de la cohésion.	110
7.3	Effets de taille finie sur les transitions dues à la cohésion.	112
7.4	Détente des troupeaux à masse constante.	113
7.5	Limite thermodynamique des points de transition de la cohésion en espace ouvert.	115
8.1	Trajectoires du centre de masse dans les phases cohésives fixe ou volante.	118
8.2	Vitesse du troupeau en phase cohésive de part et d'autre de la transition de mouvement en fonction de la taille.	119
8.3	Diffusion du centre de masse pour des troupeaux cohésifs et ordonnés.	120
8.4	Déplacement carré moyen du centre de masse de troupeaux en mouvement.	121
8.5	Diffusion individuelle dans les troupeaux mobiles et immobiles. . .	123

8.6	Vitesse du plus gros agrégat en phase gazeuse de part et d'autre de la possible transition de mouvement en fonction de la taille. . .	124
8.7	Fluctuations de la vitesse moyenne du plus gros agrégat dans la phase gazeuse.	125
8.8	Désordre induit par la transition de mouvement dans le modèle Br2-Fh.	126
8.9	Formes des troupeaux en fonction du mouvement.	127
8.10	Impact des modes acoustiques sur la forme des troupeaux.	128
8.11	Comportement aux points de décohésion.	129
8.12	Troupeau en rotation.	131
8.13	Recherche des états de vortex.	132
8.14	Fonction de distribution des temps de vie des vortex.	133
9.1	Diagramme des phases issu du modèle cinétique.	137
9.2	Énergie libre au cours de la transition.	140
9.3	Diagramme des phases dans le modèle de gaz de van der Waals. .	141
1	Diagramme des phases asymptotique en densité nulle pour le modèle Br2-Fh en fonction des amplitudes d'alignement et de cohésion.	146
2	Diagramme des phases asymptotique en densité nulle pour le modèle Br2-Fh en fonction des amplitudes de bruit et d'alignement. .	147
3	Esquisse du diagramme des phases pour le modèle Br1-Fh	148
E.1	Définition des voisins selon le pavage de Voronoï.	167

Liste des tableaux

1.1	Table des paramètres utilisés lors des études du modèle de Vicsek.	21
1.2	Tableau récapitulatif des exposants critiques du modèle Vicsek.	27
3.1	Test du χ^2 appliqué aux ajustements polynômiaux.	45
3.2	Tableau récapitulatif des exposants critiques des modèles Br1.	56
5.1	Paramètres des simulations du bain de bactéries.	76
5.2	Jeux d'interactions testées pour la modélisation de l'expérience de X.-L. Wu et A. Libchaber.	77
6.1	Paramètres des simulations avec cohésion.	93

Notations

Modèles et règles

- Br1 modèle dont le bruit s'écrit sous la forme d'un angle aléatoire (éq. 1.1)
- Br2 modèle dont le bruit s'écrit sous la forme d'un vecteur aléatoire (éq. 3.4)
- F0 modèle ne possédant pas de force d'interaction à deux corps
- Fr modèle dont la force d'interaction à deux corps est seulement répulsive (éq. 3.3)
- Fh modèle dont la force d'interaction à deux corps est analogue à celle qui dérive d'un potentiel harmonique (éq. 6.1)
- A règle d'interaction des traceurs telle que $\mu_{\text{TB}} = 0$ et comprenant une force d'entraînement (tab. 5.2)
- B règle d'interaction des traceurs telle que $\mu_{\text{TB}} = 0,5$ et comprenant une force d'entraînement (tab. 5.2)
- C règle d'interaction des traceurs telle que $\mu_{\text{TB}} = 0,5$ et ne comprenant pas de force d'entraînement (tab. 5.2)

Fonctions usuelles

- arg direction d'un vecteur à deux composantes
- exp fonction exponentielle
- I_0 fonction de Bessel de première espèce
- ln logarithme népérien
- $\vec{\nabla}$ opérateur gradient
- $|\cdot|$ module d'un vecteur
- $\langle \cdot \rangle$ moyenne prise au cours du temps
- $\langle \cdot \rangle_i$ moyenne prise sur l'ensemble des animoïdes
- $\langle \cdot \rangle_{\mathcal{G}}$ moyenne prise au sens de Gibbs

Paramètres généraux

d	dimension de l'espace
i ou j	indices désignant un animoïde
L	taille de l'espace simulé
N	nombre total d'animoïdes
R_0	distance de coupure des interactions
r_{ij}	distance entre centre des particules simulées
T	temps maximal de simulations
T_{trans}	temps nécessaire à l'obtention du régime stationnaire
\vec{u}	bruit angulaire (éq. 3.4)
\vec{v}	vitesse
v_0	module de la vitesse d'un animoïde
$\vec{x} = (x, y)$	coordonnées spatiales
Δt	intervalle de temps élémentaire
η	amplitude du bruit
ξ	bruit angulaire (éq. 1.1)
θ	direction de la vitesse
$\rho = \frac{N}{L^2}$	densité globale

Modèle continu

\parallel	direction longitudinale à l'écoulement principal
\perp	direction transverse à l'écoulement principal
b	facteur d'échelle
c_{\pm}	vitesse des modes acoustiques
D_i	coefficient de diffusion
\vec{F}	force de locomotion des animaux
\vec{g}	champ de pesanteur
\vec{n}	vecteur directeur de l'axe principal des animaux
p ou P	pression
\vec{q}	vecteur d'onde
z	exposant dynamique
Δ	variance du bruit ou exposant du groupe de renormalisation du bruit
ζ	exposant du groupe de renormalisation de la direction transverse
λ_i	coefficients phénoménologiques d'advection
σ_i	coefficients du développement de la pression en fonction de la densité
ν	coefficient de viscosité
ω	pulsation
ω_0	pulsation de résonance
χ	exposant du groupe de renormalisation de la vitesse transverse

Transitions de mise en mouvement

d_c^{inf}	dimension critique inférieure
d_c^{sup}	dimension critique supérieure
G	cumulant de Binder
\vec{h}	champ extérieur
M	aimantation total
R_B	distance caractéristique du couplage Fr
U^*	valeur universelle du cumulant de Binder au point critique
z	exposant dynamique
α	exposant de la chaleur spécifique
β	exposant du paramètre d'ordre
β_f	paramètre de la force d'interaction à deux corps (éq. 3.1)
β_v	paramètre du couplage d'alignement (éq. 3.1)
γ	exposant de la susceptibilité ou des fluctuations du paramètre d'ordre
Δ	exposant du champ extérieur
ε	paramètre de contrôle réduit (éq. 3.2)
ξ	longueur d'autocorrélation
η_c	bruit critique
η_G	bruit de transition défini par le minimum du cumulant de Binder
η_t	bruit de transition
η_σ	bruit de transition défini par le maximum des fluctuations du paramètre d'ordre
η_φ	bruit de transition défini par $\varphi = \varphi_0$
η_χ	bruit de transition défini par le maximum de la susceptibilité
κ	exposant de la ligne critique dans l'espace densité-bruit
μ	exposant de diffusion anormale au point critique
$\tilde{\rho}$	fonction d'autocorrélation temporelle
ρ_c	densité critique
ρ_t	densité de transition
σ	fluctuations du paramètre d'ordre
τ	temps d'autocorrélation
ν	exposant de la longueur d'autocorrélation
φ	paramètre d'ordre
χ	susceptibilité
x^+	valeur de la variable x prise dans la phase ordonnée
x^-	valeur de la variable x prise dans la phase désordonnée

Expérience de X.-L. Wu et A. Libchaber

D	coefficient de diffusion effectif
l_0	échelle de similitude entre les expériences et les simulations
l_c	distance caractéristique de changement de régime diffusif
m	masse des traceurs
n	densité expérimentale de bactéries
R_B	taille caractéristique des bactéries simulées
$R_{\text{bact.}}$	taille caractéristique des bactéries expérimentales
R_T	taille caractéristique des traceurs simulés
$R_{\text{trac.}}$	taille caractéristique des traceurs expérimentales
t_c	temps caractéristique de changement de régime diffusif
t_0	temps de similitude entre les expériences et les simulations
β_g	coefficient de la répulsion de cœur dur
β_h	coefficient de la force d'entraînement
γ	coefficient d'amortissement des traceurs
η	coefficient de viscosité cinématique
μ_{ij}	masse réduite des particules simulées

Transitions de cohésion

n	nombre d'individus dans le plus gros troupeau
G	centre de masse du troupeau
\mathcal{N}	nombre de plus proches voisins
R_a	distance typique d'attraction du couplage Fh
R_c	rayon du cœur dur du couplage Fh
R_e	distance d'équilibre du couplage Fh
T_{ev}	temps moyen d'évaporation d'une gouttelette
α	paramètre du couplage d'alignement (éq. 6.2 et 6.3)
β	paramètre de la force d'interaction à deux corps (éq. 6.2 et 6.3)
γ	tension de surface d'un troupeau
Δ	paramètre d'ordre de la transition liquide–solide
κ	courbure d'une gouttelette
λ	équivalent de γ en nombre d'individus
ρ_{loc}	densité interne au troupeau
σ_C	fluctuations du paramètre d'ordre de mouvement calculé sur le troupeau principal
τ	temps de piégeage
φ_C	paramètre d'ordre de mouvement calculé sur le troupeau principal
ψ	angle défini entre la vitesse globale du troupeau et le vecteur du centre de masse à la particule considérée

Approches de champ moyen

a	volume exclu moyen du gaz de van der Waals
b	volume exclu du gaz de van der Waals
k	constante de Boltzmann
q	probabilité de présence d'un voisin
s	surface du disque d'interaction
R_c	rayon du volume exclu du gaz de van der Waals
S	surface totale du système
w	fonction de distribution du bruit
η	amplitude du bruit
λ	nombre de voisins moyen dans le disque d'interaction
σ	écart-type du bruit

Simili anseres quoque et olores ratione comitant, sed horum uolatus cernitur. Liburnicarum more rostrato impetu feruntur, facilius ita findentes aera quam si recta fronte inpellerent; a tergo sensim dilatante se cuneo porrigitur agmen largeque inpellenti praebetur aurae. Colla inponunt praecedentibus, fessos duces ad terga recipiunt.

Les oies et les cygnes voyagent de la même façon, mais leur vol se voit. Ils se portent en avant comme les liburnes en formant une pointe, ce qui leur permet de fendre l'air plus facilement que s'ils fonçaient en un front rectiligne; en arrière, ce coin s'élargissant peu à peu, la formation s'étend et offre une large surface au vent qui la pousse. Chacun pose le cou sur celui qui le précède; les guides fatigués sont reçus à l'arrière-garde.
Plin l'Ancien.

Introduction : Biologie et Physique

Observations zoologiques et définitions

Aussi éloigné de la nature soit-il, le citadin a déjà été confronté aux mouvements collectifs d'animaux, vols de pigeons ou d'étourneaux par exemple. Ces derniers, notamment, se déplacent en grand nombre de manière cohérente dans les trois directions de l'espace. Le vol change de direction, descend brutalement, tourne en remontant, puis se pose soudainement, pour repartir aussi rapidement. La cohésion du groupe est étonnante, le spectacle superbe. Il est d'autant plus facile d'observer les regroupements d'animaux qu'ils sont présents dans tout le règne animal, depuis les éléphants jusqu'aux bactéries [40] et dans tous les milieux : terrestre, aérien et marin, par exemple chez les caribous, les oies migratrices et les orques. Enfin à l'intérieur d'une même famille d'espèces c'est un phénomène très répandu. Ainsi 50% des jeunes poissons et 25% des adultes vivent en groupe [73].

1 Définitions

L'étude et la compréhension de ces formes si facilement observables sont des questions ouvertes depuis longtemps. Déjà au premier siècle de notre ère, Pline avait relaté ses observations sur les animaux [75]. Plus proche de nous, les zoologistes et les écologistes étudient de manière quantitative les regroupements d'animaux depuis plusieurs décennies. Les bancs de poissons sont ainsi scrutés depuis les années soixante [98]. Tous les groupes d'animaux ne constituent pas pour autant des comportements collectifs. Ainsi, plusieurs chats se repaissant d'une pouvelle dans une ruelle ont un comportement fondamentalement individuel.

Dans la littérature dédiée à l'écologie [73], des distinctions sont faites entre des comportements d'individus réunis par une contrainte physique externe et des comportements réellement collectifs. Les premiers, appelé *agrégations*, peuvent être passifs. Par exemple du phytoplancton concentré dans une veine de courant a été réuni par les processus physiques de la turbulence sans qu'il n'y ait eu aucune

action du plancton¹. L'agrégation peut être active, c'est le cas dans l'exemple précédents des chats. Les animaux ont été attirés par la source de nourriture et s'y sont retrouvés. Les agrégations d'animaux sont des comportements alors caractérisés par la nature individualiste de l'information. Chaque animal possède une information sur son environnement—le courant marin, la présence d'une source de nourriture—et ne la partage avec nul autre. C'est le fait que l'information est accessible à tous qui permet la réunion d'individus.

A contrario, dans les phénomènes collectifs, aussi appelés *congregation* dans la littérature anglo-saxonne [73], l'information est partagée entre tous les membres du groupe. Cette notion de partage ou de transfert d'information est au centre des théories actuelles en écologie, en biologie, et, comme nous le verrons par la suite, en physique. Comme dans le cas des agrégations, il existe une distinction entre les transferts d'information passifs et actifs, distinction qui est concomitante à celle faite entre animaux individualistes ou sociaux. Il est plus facile de définir un transfert actif d'information : les animaux vont s'informer auprès d'un de leurs congénères, par exemple chez les fourmis, par le contact mutuel des antennes. L'exemple typique de comportement collectif chez un animal asocial est le banc de poissons, qui est aussi décrit comme un troupeau d'individualistes [46]. Ils ne forment pas une colonie. Ainsi ils ont peu de liens génétiques entre individus, et peu de comportements sociaux.

Les comportements collectifs peuvent se traduire de différentes manières. La plus simple est le troupeau. Des individus, d'une dizaine à plusieurs milliers se rassemblent et sont connectés, le lien de connection restant à définir. Ces groupes sont caractérisés par des bords bien délimités, une densité interne, uniforme ou non. Le groupe peut être orienté, tous ses membres regardant dans la même direction, ou non. Il peut se mouvoir ou être au repos. Dans tous les cas, les individus y sont libres de se déplacer. Le troupeau peut donc être fixe, et les membres se déplacer de façon collective, par exemple en tournant autour du centre du groupe [74]. C'est ce qu'on appelle des *vortex* dans la littérature sur le sujet.

Les comportements collectifs peuvent mener aussi à la création de motifs physiques, de constructions. Les insectes sociaux construisent ainsi des nids, organisent leurs cimetières [9], créent et suivent des pistes [29].

¹C'est une description un peu simplifiée, car il existe des rétroactions de la croissance du phytoplancton sur l'écoulement [87]

2 De la sociabilité des bactéries et des amibes

Notons que le concept de sociabilité est difficile à utiliser et qu'il peut mener à des erreurs. L'une d'elle est l'hypothèse qu'un mouvement collectif ne peut exister sans la présence d'un chef ou d'un point d'attraction, un nid par exemple. Or, les conditions d'existence des groupes interdisent généralement l'unicité de la source d'information, soit que les circonstances physiques empêchent le repérage d'un chef (l'eau est trop sombre pour voir le meneur d'un banc de poissons), soit que le groupe soit trop grand pour que chaque membre soit en contact avec le chef. La sociabilité dans le cadre des mouvements collectifs est différente de la notion anthropomorphe. Il ne s'agit pas de trouver un chef, une hiérarchie etc., même s'ils existent par ailleurs.

Le transfert d'informations est le point central de la définition. Nous pouvons illustrer notre propos en observant le monde microscopique. Les bactéries et certaines amibes sont sensibles à certaines molécules qui les entourent. Elles les détectent et sont capables d'en remonter les gradients de concentrations [1, 6], c'est-à-dire qu'elles se dirigent vers les fortes densités d'agents chimiques. Cette propriété s'appelle le *chimiotactisme*. Mais elles produisent aussi certaines de ces molécules lorsque les conditions environnementales l'exigent. Nous reviendrons sur la définition de cette nécessité. Il y a alors une *communication* entre bactéries, communication qu'il est possible de schématiser de la manière suivante : une bactérie synthétise l'agent chimique ; celui-ci diffuse dans le milieu ; une autre bactérie rencontre le signal chimique et en remonte le gradient pour atteindre la bactérie-source. Ainsi peuvent naître des colonies de bactéries aux formes étonnantes de flocons de neige, vortex ou formes chirales [40, 62, 53, 7].

En fait, le chimiotactisme n'est qu'un facteur nécessaire à la croissance des colonies des bactéries. Les autres facteurs sont la reproduction des bactéries, leur mort, leur propre diffusion, l'espèce de la bactérie et la production d'un substrat lubrifiant nécessaire à leur déplacement. Ce dernier point éclaire la nécessité des comportements collectifs des bactéries. Leurs apparitions correspondent à des conditions de famine et de rugosité du substrat qui rendent plus difficile la recherche de nourriture. La présence de ce bain lubrifiant facilite les déplacements de toutes les bactéries et la recherche de nourriture.

Une situation semblable existe chez une amibe, le *Dictyostelium discoideum* [39, 10]. Ici, il ne s'agit pas de croissance, mais de formation d'un groupe et de sa mise en mouvement. En temps normal, *Dictyostelium* est une amibe individualiste. Lorsqu'il y a une famine, elle émet une molécule, l'adénosine monophosphate cyclique ou AMPc [54]. Lorsqu'il y a une population d'amibes réparties sur la boîte de Pétri, l'émission simultanée de l'AMPc crée un milieu excitable sur lequel se propage des ondes [41, 56]. Ce milieu finit par se déstabiliser, les amibes migrent

alors toutes vers un même point et s'agrègent en suivant des lignes de courant s'organisant plus ou moins en étoile. À la fin de l'agrégation, les amibes (entre une centaine et cent mille individus) sont réunies en un amas. D'abord cet amas est immobile, mais il peut se mettre en mouvement et explorer l'espace qui l'entoure. Il a alors l'aspect d'une limace munie d'une protubérance dans sa zone antérieure. Dans la suite de ce travail, nous appelons parfois *limace* un regroupement de *Dictyostelium discoideum*. À l'intérieur de cet être multicellulaire, chacune des amibes reste en mouvement. Le tas peut aussi se mettre transitoirement à tourner, une zone de déplétion se créant en son centre. Lorsque la limace a trouvé les *bonnes* conditions, en un certain sens nécessaires à la survie de l'espèce, elle cesse son mouvement et se met à pousser vers le haut. Les amibes s'empilent, formant une tige en haut de laquelle sont placées les spores. Les spores sont un état particulier de l'amibe, plus résistant aux conditions environnementales. Car en même temps que l'agrégat multicellulaire explore l'espace, les amibes, identiques avant l'agrégation, commencent une différenciation vers deux états distincts [11] : celles qui forment la tige et celles qui constituent les spores. Ensuite ces spores sont dispersées et peuvent donner naissance à des amibes-filles.

Ces deux exemples illustrent la richesse présente dans les comportements collectifs. Les études traitant du sujet montrent aussi la difficulté de déterminer l'ensemble des paramètres influençant l'existence des groupes ainsi formés. Pour le *Dictyostelium discoideum*, les paramètres suivants ont été étudiés : la présence de lumière et le phototactisme [10], les concentrations en dioxygène et en ammoniac [11, 12], la biochimie de l'amibe [54], la formation d'un liquide lubrifiant [10]. Cette liste n'est pas exhaustive.

3 Les Grandes Questions

Lorsque nous avons décrit le devenir du regroupement de *Dictyostelium* ou celui d'une colonie de bactéries, nous avons parlé de *bonnes* conditions environnementales, d'exploration de l'espace et de survie de l'espèce. Nous leur avons prêté des buts explicites. C'est exagéré. Ce qui l'est moins, c'est de considérer l'existence des mouvements collectifs dans la perspectives de l'évolution. Il s'agit de comprendre l'intérêt des différents modes de vie des animaux, qu'ils soient grégaires ou individualistes. À cette fin, J. Parrish et W. Hamner [73] définissent un ensemble de points à résoudre. Ce sont les *Grandes Questions* :

- quel est le coût et le bénéfice à faire partie d'une communauté ? Notamment, les pistes de réflexion concernent la protection vis-à-vis des prédateurs, la facilité à trouver de la nourriture et à assurer la procréation ;
- quelle est la dépendance spatiale des comportements collectifs ? On peut

- considérer la position de l'individu dans le groupe et/ou la trajectoire du groupe lui-même dans l'espace ;
- quelles informations sont échangées entre individus ?
- existe-t-il une taille de troupeau optimale ?

Ce dernier point permet d'introduire d'autres questions sur les échelles. Ainsi on peut se demander s'il existe des échelles privilégiées d'observation, si la dimension de l'espace a un impact sur l'existence des troupeaux. Elle rappelle aussi que les troupeaux ont une taille bien reconnaissable du fait que les bords sont abrupts sans qu'il y ait un confinement des troupeaux. Enfin la question concernant la nature de l'information échangée entre individus introduit le problème de la définition des interactions dans un modèle de comportements collectifs.

Outre les questions d'éthologie et d'évolution, l'exemple du *Dictyostelium discoideum* intéresse un grand nombre de scientifiques. En effet le comportement collectif de cette amibe peut être présenté comme la morphogénèse d'un être multicellulaire composé de cellules identiques qui se différencient au cours du temps. Cette présentation du problème permet une analogie immédiate avec le développement embryonnaire. Certes, la complexité entre les deux problèmes n'est pas la même et le *Dictyostelium* ne permettra pas de comprendre la gastrulation dans son ensemble. Cependant, c'est un système modèle à partir duquel nous pouvons tester des hypothèses sur les processus morphogénétiques. D'autres analogies possibles existent avec la biologie humaine. Ainsi l'apparition de métastases des cancers est susceptible d'être liée à des processus de chimiotactisme. De plus, *Dictyostelium* est capable de discriminer parmi deux isomères celui qui est carcinogénétique. Enfin l'apoptose des cellules de cet eukaryote a de nombreux points communs avec celle des mammifères. Ces deux dernières études n'ont pas de lien direct avec les mouvements collectifs mais expliquent le grand intérêt porté à *Dictyostelium discoideum* [86].

Apport des physiciens et problèmes

L'intérêt des physiciens pour les questions écologistes peut surprendre. Pourtant les *Grandes Questions* relèvent directement de leurs compétences. En effet, le travail d'un physicien théoricien est de déterminer les ingrédients minimaux nécessaires à un modèle tels que puissent être identifiées et mesurées des échelles caractéristiques de temps, d'espace, etc.

1 Les modèles

La première classe de modèles concerne l'agrégation d'animaux. Il s'agit d'étudier par exemple comment le thermotactisme des individus permet d'expliquer les migrations de thons dans le golfe du Mexique, comment un couplage entre la turbulence et la croissance du phytoplancton implique une présence plus élevée de belugas dans certaines parties du golfe de Maine [38]. Mais ces exemples ne sont pas des cas de comportement collectif.

Les comportements collectifs sont le résultat macroscopique des interactions microscopiques. Cette idée est apparue en écologie avec la notion de propriétés émergentes sous l'impulsion de A. Okubo [69]. Il s'agissait alors d'introduire une non-linéarité dans les équations modèles. Celle-ci couple les entités microscopiques du modèle entre elles et l'ordre local ainsi créé induit des propriétés macroscopiques inattendues, non banales. En fait, ces concepts existaient en physique statistique depuis les années soixante-dix [52] mais étaient appliqués aux systèmes physiques à l'équilibre, les systèmes magnétiques par exemple. La théorie du groupe de renormalisation utilise l'idée que l'ordre contamine toutes les échelles en même temps. T. Vicsek [92], en 1995, a appliqué ces théories à la biologie : en fixant les seules règles entre individus, un comportement collectif peut exister malgré le désordre microscopique [94] — bruit ou température — et donner lieu à des comportements dynamiques complexes. Ces notions d'auto-organisation et de complexité [95] naissant d'interactions simples au niveau microscopique ont été appliquées aux systèmes physiques, biologiques [93], et même aux comportements des hommes qu'ils soient piétons [47], ou au volant d'un véhicule [51].

Cependant la présence d'un chef, ou d'un point fixe (un nid, par exemple)

exerçant une force de rappel sur chacun des individus se retrouve dans la littérature comme un ingrédient inévitable des modèles de comportements collectifs [81]. Ces modèles sont formellement identiques à ceux dans lesquels le couplage est global [64]. Il n'y a pas réellement de propriété émergente dans ce cas. Si nous voulons obtenir des résultats plus probants sur les comportements collectifs, il faut alors s'assurer que les distances d'interaction entre individus soient petites devant la taille du troupeau, si celui-ci existe. Cette nécessité recouvre une réalité biologique, puisque les troupeaux peuvent atteindre des nombres de participants gigantesques, près de 10^5 dans l'amas de *Dictyostelium discoideum*. Il faut aussi que le désordre microscopique, sous la forme d'une température effective, d'un bruit ou d'un chaos, soit d'une amplitude significative. Ces deux critères sont très défavorables à l'apparition de comportements collectifs. S'ils existent malgré ces difficultés, ils seront qualifiés de *robustes*.

Une autre tentation est de vouloir ajouter le plus d'ingrédients possibles aux modèles afin d'obtenir des comportements les plus proches possibles de la réalité et les plus diverses. Par exemple on peut imaginer des interactions dont les paramètres varient de manière non linéaire au cours du temps [82]. On peut aussi coupler la dynamique des troupeaux à l'évolution démographique [2]. Or la complexité des comportements physiques ne naît pas forcément d'interactions compliquées.

Le dernier point important à souligner dans cette théorie de l'auto-organisation est la notion d'*universalité*. En physique elle désigne le fait que, quels que soient les détails microscopiques des systèmes étudiés, la mesure de certaines grandeurs macroscopiques fournira le même résultat. Tous ces systèmes peuvent alors être décrit par un seul et même modèle. Il serait satisfaisant pour un physicien de conserver cette notion en biologie. Nous avons déjà des indices de cette universalité biologique : les comportements collectifs traversent les espèces, les milieux. Les propriétés des groupes sont similaires d'un animal à un autre et les comportements possibles peuvent être classés en un petit nombre de catégories.

D'un point de vue mathématique, les modèles utilisés sont de trois types. Ils peuvent être continus et utiliser des variables mésoscopiques eulériennes. On étudie par exemple la densité et la vitesse du flux de bactéries [23, 62, 53], de fourmis ou d'oiseaux [88] en un point. Puis, il y a l'équivalent en suivant la particule fluide le long de sa trajectoire, on utilise alors les coordonnées lagrangiennes. Enfin, la troisième famille de modèle considère chaque animal individuellement. C'est à ce propos que C. Reynolds [79] a défini des oiseaux virtuels dont il suivait les trajectoires. Il les appela *boïd*, de l'anglais bird-oid. Dans la suite du texte, nous utilisons la traduction adaptée : *animoiïde*. Les travaux de T. Vicsek et de ses collaborateurs dont nous avons parlé précédemment font partie de cette classe.

2 Les ingrédients d'un modèle

Pour construire un modèle, il faut déterminer les ingrédients que nous voulons tester. Puisqu'il y a un choix à effectuer, chaque point peut être discuté, voire mener à des polémiques.

Nous allons concevoir des modèles et utiliser des concepts de physique statistique. Les théories les plus abouties concernent les systèmes à l'équilibre. Certains modèles de biophysique [42, 43] sont fondés à partir de la mécanique statistique hamiltonienne. Cependant, un animal est essentiellement un consommateur d'énergie chimique et il est capable, sans stimulus apparent, de la transformer en mouvement. En considérant le système qui n'est composé que des animaux, il n'y a donc pas forcément les conservations habituelles de l'énergie, de la quantité de mouvement et du moment cinétique : le système est hors d'équilibre. En revanche le système composé des animaux et de la nourriture disponible doit pouvoir être considéré comme étant à l'équilibre. Hors d'équilibre, il y a plus de liberté pour écrire un modèle puisqu'on peut s'affranchir alors de tout le formalisme hamiltonien. Cependant le cadre théorique est moins bien établi. Une voie de secours possible réside dans la comparaison des résultats obtenus par simulation numérique d'un système dynamique avec les prédictions à l'équilibre. Par exemple, il est possible de définir des comportements dynamiques ordonnés ou non, et d'étudier le passage des uns aux autres en effectuant une analogie formelle avec des phases à l'équilibre et avec les transitions associées [60].

À quelles forces faut-il soumettre les animoïdes ? Il peut y avoir des champs extérieurs : température, lumière, etc. L'étude d'un tel ingrédient peut être avantageuse, mais n'est pas essentielle. Car les comportements dus à de telles forces relèvent des phénomènes d'agrégations. Dans la suite de notre propos, nous n'utiliserons plus ce terme dans son acception écologique. Le mot *agrégation* servira à désigner *le processus de formation des troupeaux*.

Dès qu'il y a mouvement, il y a des chocs, des transferts de quantité de mouvement. Lorsque le milieu est assez dense, des couplages hydrodynamiques apparaissent donc. On peut définir un paramètre effectif réglant l'intensité de ces couplages : la viscosité. Nous analysons en détail l'intervention des couplages hydrodynamiques dans les Chapitres 1 et 2.

L'interaction qui a été rapidement considérée dans les problèmes de morphogénèse est l'adhésion [43, 80]. Ainsi, la différence de tension de surface intervient dans le tri cellulaire. De même on peut supposer que, si un banc de poissons est compact, c'est qu'il existe une force d'attraction entre les membres du groupe. Cette attraction doit s'accompagner d'un terme répulsif, sinon les animoïdes s'entasseraient les uns sur les autres. Dans les modèles de tri cellulaire, cette répulsion est comprise dans la conservation du volume de la cellule. Mais la compétition

entre attraction et répulsion chez les poissons est similaire à celle qui existe entre l'adhésion et la conservation du volume cellulaire. Elle doit donc pouvoir non seulement rendre compte de la cohésion du banc, mais aussi des différentes formes prises par le groupe.

Enfin il y a le chimiotactisme, ou tout autre lien social. Son rôle est prouvé dans de nombreux systèmes. Mais a-t-on compris l'implication de toutes les interactions physiques avant d'introduire le lien social ? La modélisation des colonies de bactéries a montré que de nombreux éléments sont explicables sans recourir au chimiotactisme [7]. De même, il est possible d'étudier *Dictyostelium* sans l'influence de l'AMPc. Ainsi, il existe une expérience [96] dans laquelle des mutants de *Dictyostelium discoideum* n'émettent pas l'AMPc et sont soumis à des comportements collectifs. De plus deux modèles [78] et [57] n'utilisant pas le chimiotactisme mais privilégiant l'adhésion entre amibes possèdent des phases de vortex. Pourtant, la plupart des modèles sur le *Dictyostelium* considèrent le chimiotactisme comme le centre du problème [66, 31, 72, 97] et lui attribuent la paternité de l'agrégation des amibes (ce qui semble par ailleurs prouvé), des mouvements de l'être multicellulaire, de la différence de comportements des individus suivant leur localisation dans la limace (ceux-ci sont plus actifs dans la partie antérieure du groupe), et de la différenciation des cellules. Ces études sont essentiellement tri-dimensionnelles et sont fondées sur la présence d'un motif spatio-temporel en forme d'hélice du champ de concentration de l'AMPc. Ce motif n'existe pas en dimension inférieure.

Une des tentations possibles lors de l'écriture d'un modèle est de vouloir rendre compte de la plus large palette de résultats et ainsi de vouloir faire intervenir le plus d'influences possibles. Dans l'exemple des amibes, il faudrait tenir compte de la locomotion, de la viscosité, de la traînée, de l'adhérence entre cellules, de l'adhérence entre les cellules et le substrat, des déformations et de l'élasticité de la paroi cellulaire, du chimiotactisme, etc. (voir [72])

Dans l'étude des modèles des animoïdes, l'outil principal est la simulation numérique. Cet outil a deux inconvénients. D'abord, l'interprétation des simulations nécessite un cadre théorique (nous revenons sur ce problème dans les Annexes A et C). Ensuite, il est difficile de fixer les conditions de simulations : taille des simulations et conditions aux limites. Une taille trop petite fausse les résultats par l'intermédiaire d'erreurs systématiques (voir l'Annexes B) et il est donc difficile de conclure [81]. Une condition aux bords mal choisie peut mener à l'observation d'artefacts. Par exemple, l'observation d'états de rotation en géométrie confinée ne permet pas de conclure à l'existence de vortex chez les animaux [48, 32].

Enfin, il y a le choix de la dimension. Par souci de simplicité, nous nous restreignons aux cas bidimensionnels. Ce n'est pas qu'une hypothèse simplificatrice puisqu'en effet des systèmes vivants se déplacent collectivement sur le plan. No-

tamment, J. T. Bonner a étudié l'être multicellulaire de *Dictyostelium* à l'interface d'une lamelle de verre et d'une couche d'huile [13]. Il en va de même pour tous les animaux terrestres.

3 La problématique de ce travail

Il y a essentiellement deux phénomènes dans les comportements collectifs : d'une part la formation des troupes, d'autre part la mise en mouvement des groupes. Nous désirons étudier la relation entre les deux pour des troupes de très grande taille dans un espace bidimensionnel aux conditions aux bords ouverts, comme c'est le cas des regroupements de *Dictyostelium discoideum* ou chez d'autres animaux. Mais les deux phénomènes peuvent être décorrélés par exemple si nous considérons un bain homogène de bactéries. Aussi allons-nous étudier successivement ces deux situations.

Tout d'abord nous présenterons le modèle de Vicsek lors d'une revue critique de la littérature et nous montrerons que certains effets dus aux couplages hydrodynamiques ont été sous-estimés. Nous introduirons des modèles, généralisations de celui de Vicsek, et nous en caractériserons les transitions vers la mise en mouvement des animoïdes en densité quasi-homogène. Nous porterons un soin tout particulier au contrôle de la qualité de nos résultats par la mesure des erreurs de toute provenance. Puis nous appliquerons ces résultats à la modélisation d'une expérience effectuée par X.-L. Wu et A. Libchaber [99].

La compréhension des couplages hydrodynamiques ayant été abordée à densité quasi-uniforme, nous pourrions envisager l'étude du problème avec agrégation. Nous nous placerons dans la perspective de la compréhension de *Dictyostelium discoideum*. Il s'agira de voir si nous pouvons obtenir, sans chimiotactisme, un grand troupeau dans un espace ouvert. Les propriétés microscopiques du mouvement de chacun des membres devront dépendre de leurs positions dans le groupe. Enfin ce troupeau devra pouvoir être immobile, en mouvement de translation ou de rotation. En ajoutant au modèle de Vicsek un terme comparable à une force d'adhésion, nous étudierons d'abord le lien entre mouvements microscopiques et comportements macroscopiques, puis les propriétés de cohésion du groupe. Enfin nous rechercherons les différents mouvements collectifs possibles.

Rappelons que nous ne recherchons pas ici à imiter la nature mais à comprendre les effets de la compétition entre seulement deux couplages parmi beaucoup d'autres. Nous verrons que, malgré la nature stochastique des équations utilisées, de leur simplicité et du caractère local des interactions, l'auto-organisation des individus a lieu et qu'elle peut mener à des comportements complexes.

Enfin la motivation de ce travail réside aussi dans l'observation de transi-

tions de phase dans des systèmes hors d'équilibre. Des travaux précédents [61] ont montré que parler de *transitions de phase* dans ces systèmes n'est pas un abus de langage ni une analogie utilisée seulement par commodité. Les comportements au point de transition ont toutes les caractéristiques des transitions de phase à l'équilibre. On peut distinguer trois catégories de systèmes hors d'équilibre. Certains de ces modèles possèdent des analogues stricts à l'équilibre et les classes d'universalité des deux systèmes analogues sont alors identiques, c'est le cas des modèles d'Ising hors d'équilibre. D'autres modèles n'ont aucun équivalent et possèdent leur propre classe d'universalité, par exemple la percolation dirigée. Enfin, dans la dernière catégorie, les modèles ont des analogies possibles avec des systèmes à l'équilibre, pour des raisons de symétrie par exemple, mais possèdent leurs propres classes d'universalité [60]. Cependant, nous ne pouvons que constater les résultats numériques, n'ayant pas de cadre théorique plus élaboré. Dans la suite de ce travail, nous prenons le parti de considérer les changements de comportements dynamiques comme des transitions de phase, et nous espérons vérifier *a posteriori* la validité de notre hypothèse.

Première partie

Les mouvements collectifs d'animaux en densité homogène

1

Modèle de Vicsek

Sommaire

1.1	Présentation	19
1.1.1	Introduction	19
1.1.2	Description	20
1.1.3	Paramètres	21
1.1.4	Observations	22
1.2	Résultats de T. Vicsek <i>et al.</i>	23
1.3	Discussion	26
1.3.1	Conclusions des études précédentes	26
1.3.2	Problèmes et questions ouvertes	27

Ce chapitre comporte une présentation du modèle inventé par T. Vicsek et ses collaborateurs. Nous y faisons une revue des résultats déjà parus sur le sujet. Et nous profitons de cette occasion pour introduire quelques questions qui sont issues de ces lectures. Nous abordons chacun de ces problèmes dans les chapitres suivants.

1.1 Présentation

1.1.1 Introduction

Ce premier modèle étudié prend en compte les remarques précédentes concernant la présence d'un chef dans le cadre de l'étude des oiseaux. Supposons que nous soyons un oiseau au sein d'une nuée d'autres congénères, il est pratiquement impossible que nous puissions voir soit les bords, soit un chef, soit même que nous puissions calculer la position du centre de masse du troupeau. Notre marge de manœuvre dans le troupeau est réduite par la présence de voisins. Plaçons-nous maintenant en observateur du vol. Lorsque le troupeau change de direction,

nous avons l'impression que les oiseaux situés sur les bords suivent le troupeau exactement.

Afin de ménager ces deux contraintes, T. Vicsek et ses collaborateurs [92] imaginent un modèle dans lequel chaque oiseau est représenté par un point libre de se déplacer dans l'espace. Lorsqu'il est seul, il vole aléatoirement. Dès qu'il a des voisins, il a tendance à les suivre, mais de façon imparfaite.

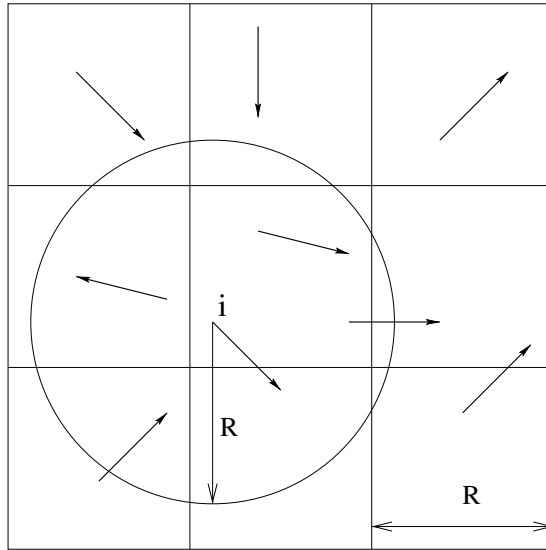


FIG. 1.1 – Définition des voisinages d'interaction dans le modèle de Vicsek.

1.1.2 Description

D'abord, il faut définir le voisinage d'un oiseau (voir figure 1.1 et [25]) : un voisin est un individu à l'intérieur d'un sous-espace caractérisé par une distance R_0 fixée et centré autour de l'individu dont on recherche le voisinage. Cette définition comporte une part d'arbitraire dans le choix de la forme du sous-espace de voisinage et de la distance R_0 .

Un premier choix est de dessiner sur l'espace un quadrillage. Nous attirons l'attention du lecteur sur le fait que ce réseau ne contraint en rien le mouvement des animoïdes : ils sont libres de se déplacer sur l'espace. Nous ne simulons pas un gaz sur réseau. Ce quadrillage, de pas R_0 , ne sert qu'à repérer les individus. Leurs voisins sont ceux qui appartiennent aux neuf cases voisines de la leur. Nous pouvons aussi restreindre cette définition au disque de rayon R_0 entourant chaque individu. Nous effectuerons un autre choix dans la Partie II. Dans la suite, le voisinage du i -ème point sera noté $j \sim i$.

Ensuite, T. Vicsek *et al* considèrent que l'oiseau est infatigable. Quoiqu'il arrive et à tout instant t , celui-ci vole avec une vitesse \vec{v}_i^t de module constant

v_0 . Nous verrons dans le paragraphe 2.1 que cette hypothèse peut aussi être la conséquence d'un milieu très visqueux. Enfin, l'imperfection du vol se traduit par la présence d'un bruit, pris blanc dans toute la suite de ce travail.

La direction de la vitesse pour le i -ème oiseau, entre les instants t et $t + \Delta t$, suit donc la loi d'évolution :

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\sum_{j \sim i} v_j^t \right] + \eta \xi_i^t, \quad (1.1)$$

où $\xi_i^t \in [-\pi; \pi]$ et $\eta \in [0; 1]$ sont le bruit angulaire et son amplitude. Puis la trajectoire est obtenue par intégration :

$$\vec{x}_i^{t+1} = \vec{x}_i^t + \vec{v}_i^t \Delta t. \quad (1.2)$$

Parution	Δt	v_0	R_0	L	ρ	η	T
[92]	1	3×10^{-2}	1	[3; 50]	[0,4; 10]	[0; 1]	—
[25]	1	10^{-1}	1	[20; 223]	[0,3; 4]	[0; 1]	$10^4 - 10^5$
ici	1	5×10^{-1}	1	[8; 512]	2	[0; 1]	$\sim 10^7$

TAB. 1.1 – Table des paramètres utilisés lors des études du modèle de Vicsek. T est le temps de calcul compté en nombre de pas de temps Δt , L est la taille du système, $\rho = N/L^2$ est la densité.

1.1.3 Paramètres

A priori, nous pouvons fixer le pas de temps d'intégration Δt , et faire varier v_0 sans changer la phénoménologie du problème. De même, nous pouvons fixer le rayon d'interaction, en prenant garde que $v_0 \Delta t < R_0$ afin de conserver le caractère local des interactions. Le système est observé au cours du temps. La durée des simulations dans [92] et [25] n'est pas discutée. Elle dépend de l'observable étudiée et doit être fixée en fonction du temps d'autocorrélation τ de celle-ci. Nous y revenons au Chapitre 3.

Quant à l'espace, nous le voudrions infini. Nous nous sommes contentés de tailles compatibles avec nos moyens informatiques et d'un système avec des conditions aux limites périodiques, et c'est ce que nous faisons tout au long de cette thèse. Cela implique des effets sur les observations, effets dont nous essayons de nous affranchir. La dimension de l'espace a aussi été considérée, et les cas unidimensionnel [26, 70, 93], bidimensionnel [92, 25] et tridimensionnel [27] ont été étudiés. Nous nous sommes restreints au cas bidimensionnel.

Des paramètres présentés dans la table 1.1, il ne reste que l'amplitude du bruit et la densité, qui sont les paramètres de contrôle de nos simulations.

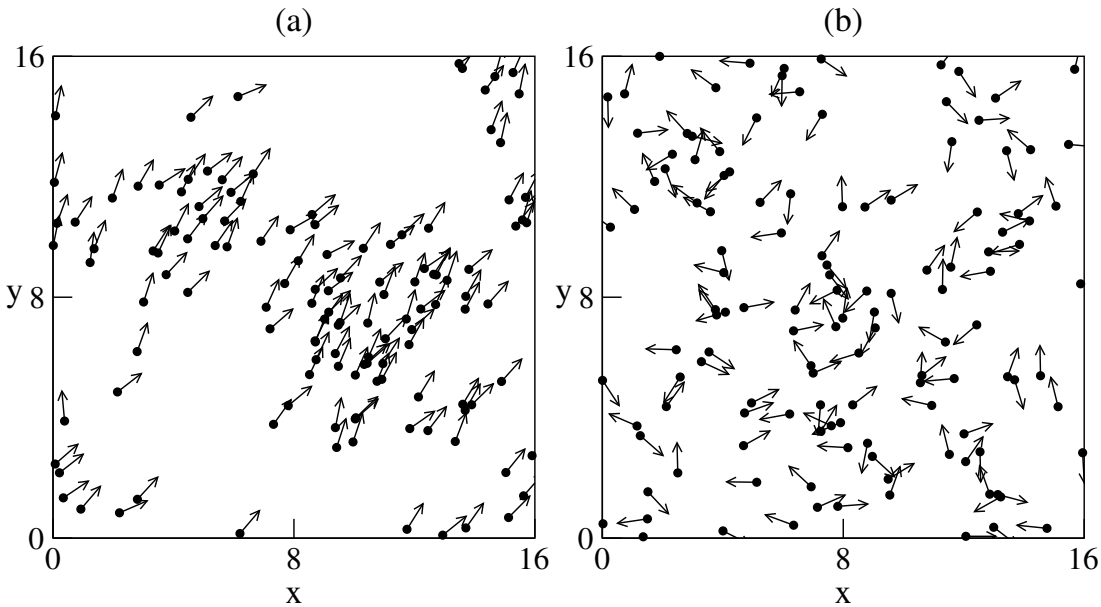


FIG. 1.2 – Images instantanées d’un vol d’oiseaux du modèle de Vicsek. La simulation est de taille $L = 16$, de densité $\rho = 2$. Pour des raisons de lisibilité, seuls 128 points sont portés sur cette figure. Les flèches représentent les vitesses instantanées. Le bruit est fixé à (a) : $\eta = 0,1$, (b) : $\eta = 0,9$, les autres paramètres sont donnés dans la table 1.1.

1.1.4 Observations

D’un point de vue général et avant tout calcul, nous pouvons ajouter deux points à cette présentation. Si nous interdisons le mouvement des oiseaux, par exemple en fixant $\Delta t = 0$ dans 1.2 ou en prenant la limite $v_0 \rightarrow 0$, nous obtenons un ensemble de points munis d’une grandeur caractéristique vectorielle et soumis à une interaction de type ferromagnétique. Il s’agit donc d’un analogue aux systèmes de spins de Heisenberg. La différence essentielle à vitesse non nulle est que le système est maintenu hors d’équilibre. En effet, le module de vitesse étant fixé, l’énergie cinétique reste constante à $E_c = Nv_0^2/2$ pour N oiseaux de masse $m = 1$, alors que l’énergie d’interaction fluctue. L’énergie totale du système n’est donc pas conservée.

T. Vicsek et collaborateurs observent qu’à bruit constant en variant la densité, ou réciproquement à densité constante en changeant le bruit, il y a un changement progressif de comportement de l’ensemble des points, c’est-à-dire l’analogue d’une transition de phase continue. Les états asymptotiques sont, à faible bruit (respectivement à densité élevée), un groupe d’oiseaux volant dans la même direction (figure 1.2(a)), à fort bruit (respectivement à basse densité) des individus qui se déplacent aléatoirement dans l’espace (figure 1.2(b)).

Ce résultat est a priori étonnant en basse dimension ($d \leq 2$), puisque Mermin et Wagner [63] ont démontré qu'un système à symétrie continue comme les analogues aux modèles XY ne peut subir une brisure spontanée de symétrie à longue portée. Le théorème de Mermin-Wagner concerne les systèmes à l'équilibre. Il ne s'applique donc pas au modèle étudié et cela ne constitue pas un paradoxe. Cependant, il est intéressant de comprendre le mécanisme qui stabilise l'état ordonné. Les travaux ultérieurs ont donc été dédiés à cette compréhension. Un autre point particulièrement intéressant est le devenir de cette transition à faible densité $\rho \ll 1$, toutes les simulations étant réalisées à densité non nulle.

1.2 Résultats de T. Vicsek *et al.*

Dans ce paragraphe, nous présentons les méthodes et les résultats obtenus par T. Vicsek *et al* et nous les discuterons dans le paragraphe suivant.

Conformément à la théorie des phénomènes critiques à l'équilibre (voir Annexe A), nous devons définir un paramètre d'ordre dont les valeurs reflètent le changement de symétrie entre les différentes phases. Au point de transition, appelé point critique pour une transition continue, les moyennes du paramètre d'ordre et de ses moments suivent des lois de puissance. Les exposants ainsi définis, mais aussi d'autres grandeurs comme certaines fonctions ou certains rapports d'amplitudes, sont constants pour de nombreux modèles. Ceux-ci sont regroupés en classes, appelées classes d'universalité (voir Annexes A et B). L'étude d'une transition continue correspond à la mesure des quantités universelles.

Le paramètre d'ordre utilisé pour étudier cette transition de phase a été choisi en suivant l'analogie aux modèles XY . L'analogie de la vitesse de l'animote étant le spin XY , la vitesse moyenne sur l'ensemble de la population, ce qui constitue ensuite notre paramètre d'ordre, est l'analogie de la moyenne spatiale de l'aimantation, paramètre d'ordre ferromagnétique.

D'une configuration du système à une autre, la direction de ce vecteur est différente. La moyenne d'ensemble du paramètre d'ordre est donc nulle. Pour briser cette ergodicité, la grandeur pertinente en est donc le module :

$$\varphi^t = \left| \frac{\langle \vec{v}_i^t \rangle_i}{v_0} \right| \quad (1.3)$$

Il faut ensuite moyenner les moments du paramètre d'ordre. Le plus facile à réaliser est de le faire au cours du temps; cependant, pour obtenir des configurations indépendantes, il faudrait le faire après une durée grande devant le temps d'autocorrélation du système. À notre connaissance, cette étude n'avait jamais été réalisée. Nous y revenons au Chapitre 3, mais nous pouvons déjà souligner que des temps de simulations de 10^5 (voir table 1.1) sont de l'ordre de grandeur

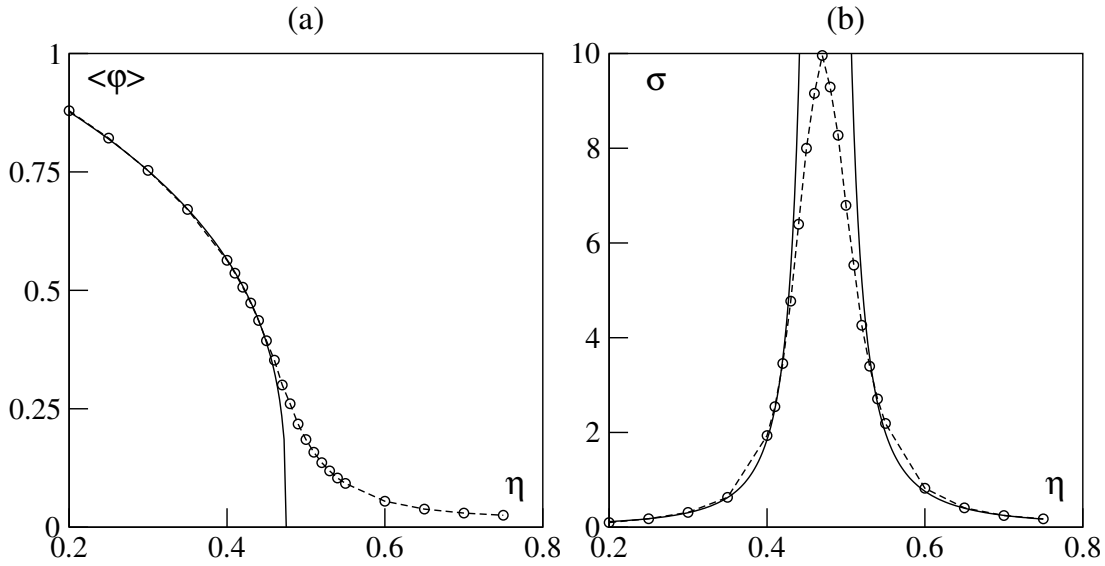


FIG. 1.3 – Transition de phase dans le modèle de Vicsek. Le paramètre d'ordre (a) et ses fluctuations (b) sont tracés le long de la transition à la taille $L = 32$ et pour la densité $\rho = 2$. Le bruit critique est estimé à $\eta_c(L) = 0,475$ et les exposants $\beta(L) \sim 0,34$, $\gamma^-(L) \sim 2,1$ et $\gamma^+(L) \sim 1,8$. Les points proviennent des simulations. Les traits continus sont les lois de puissance reconstruites à partir de la mesure des exposants.

du temps d'auto-corrélation, c'est-à-dire bien trop petits pour espérer une bonne qualité des moyennes statistiques. Ce commentaire doit être gardé à l'esprit pour une lecture critique des mesures des exposants.

Nous définissons enfin les fluctuations du paramètre d'ordre :

$$\sigma = N \left(\langle\varphi^2\rangle - \langle\varphi\rangle^2 \right) \quad (1.4)$$

T. Vicsek *et al.* ont vérifié que la transition étudiée est continue (voir figure 1.3), mais les lois d'échelle ne sont atteintes que pour un système infini. Les effets de taille ont deux effets : le point critique est déplacé et les singularités sont lissées. Toutes les grandeurs étudiées sont analytiques. Ces effets sont présentés de façon détaillée dans l'Annexe B. Le traitement que nous en montrons ici est réduit à l'étude des premières déviations vis-à-vis des comportements asymptotiques, et ne tient pas compte de possibles corrections.

La première difficulté est de déterminer le point critique. Le critère le plus intuitif, celui choisi dans [92, 25], est de dire que la loi de puissance n'est valable qu'au point critique. Pour chaque taille, et à densité constante :

$$\langle\varphi\rangle \propto (\eta_c(L) - \eta)^{\beta(L)}, \quad (1.5)$$

où $\eta_c(L)$ est choisi tel que les données portées sur un graphique $(\ln(\eta_c(L) - \eta), \ln(\langle\varphi\rangle))$

soient sur une droite, ou que la courbe obtenue soit le plus linéaire possible. Ensuite, les valeurs du bruit critique à chaque taille devraient converger vers le bruit critique de la limite thermodynamique selon une loi de puissance :

$$\eta_c(L) - \eta_c(\infty) \propto L^{-\frac{1}{\nu}}. \quad (1.6)$$

Le point critique étant défini, il est possible de mesurer, sur le système le plus grand qui a été calculé, les exposants $\beta = 0,42$ et $\gamma = \gamma^+ = \gamma^- \sim 2$ à densité constante. En effet, la courbe de fluctuations est symétrique par rapport au point critique.

Puisque le comportement près du point critique est universel, le paramètre d'ordre suivra la même loi de puissance quelle que soit la densité. Nous pouvons donc renormaliser l'aimantation :

$$\langle \varphi \rangle(\eta, \rho) = f\left(\frac{\eta}{\eta_c(\rho)}\right), \quad (1.7)$$

$$f(x) = (1 - x)^\beta. \quad (1.8)$$

T. Vicsek *et al* [25] vérifient le bien-fondé de cette assertion en vérifiant que les courbes critiques pour différentes densités se superposent. Il est ainsi possible de définir une ligne critique dans le plan (η, ρ) des paramètres de contrôle :

$$\eta_c(\rho) \propto \rho^\kappa, \quad (1.9)$$

où $\kappa \sim 0,5$. L'existence de cette ligne critique permet aussi de prédire la valeur de l'exposant critique de l'aimantation à bruit constant β_* : $\langle \varphi \rangle \propto (\rho_c(L) - \rho)^{\beta_*}$. En effet, la relation de renormalisation 1.7 permet d'écrire sur la ligne critique $\rho = \rho_c(\eta) + \varepsilon$:

$$\langle \varphi \rangle(\eta, \rho) = f\left(\frac{\eta}{\eta_c[\rho_c(\eta) + \varepsilon]}\right) = f\left(1 - \frac{1}{\eta} \frac{\partial \eta_c}{\partial \rho} \varepsilon\right) \sim \varepsilon^\beta. \quad (1.10)$$

On en déduit que $\beta = \beta_*$, ce qui est compatible avec les mesures.

Il reste à étudier le théorème de fluctuation-dissipation. Le système étant maintenu hors d'équilibre, il est pertinent de penser que ce théorème ne s'applique pas. T. Vicsek *et al* ont testé cette hypothèse. Par définition, dans les systèmes magnétiques : $\chi = \frac{\partial M}{\partial h}|_{h \rightarrow 0}$, où h est le champ conjugué de l'aimantation. Dans le modèle étudié, les précédents auteurs introduisent le champ h sous la forme :

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\sum_{j \sim i} \vec{v}_j^t + h \vec{e} \right] + \eta \xi_i^t, \quad (1.11)$$

où \vec{e} est un vecteur unitaire de direction fixée. L'aimantation et la susceptibilité suivent alors des lois de puissance :

$$\langle \varphi \rangle \propto h^{\frac{\beta}{\Delta}}, \quad (1.12)$$

$$\chi \propto \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-\gamma_*^-, \gamma_*^+}, \quad (1.13)$$

avec des exposants mesurés $\frac{\beta}{\Delta} \sim 1,1$, $\gamma_*^- \sim 4$ et $\gamma_*^+ \sim 1$.

Deux remarques découlent de ces mesures. D'abord, le théorème fluctuation-dissipation n'est pas vérifié. Ensuite, contrairement aux fluctuations du paramètre d'ordre, la susceptibilité n'est pas symétrique par rapport au point critique. Outre les difficultés numériques, et la qualité discutable des données analysées, ce test du théorème fluctuation-dissipation pose de nombreuses questions. La détermination du champ conjugué est liée à la connaissance du hamiltonien. Ici, l'existence du champ conjugué, sa définition et la détermination des équations du mouvement ne sont pas des évidences. Illustrons un problème lié à ces questions. Dans le cas du modèle XY , quelle que soit la valeur de la température, il existe toujours un champ capable d'aligner les spins du système. Dans le modèle de Vicsek, ce n'est pas le cas. La définition du champ peut donc être mis en défaut, ou bien nous pouvons nous demander si le bruit est correctement défini. Nous revenons sur ces questions dans le paragraphe 3.4.

1.3 Discussion

1.3.1 Conclusions des études précédentes

Les simulations ont montré que le modèle de Vicsek possède une transition de phase dynamique continue. Il y est possible de définir un jeu d'exposants analogues à ceux définis dans un système à l'équilibre. Leurs valeurs semblent non triviales, et différentes des exposants d'une théorie de champ moyen (voir tableau 1.2 et le Chapitre 9). Il est de plus possible de définir une ligne critique dans l'espace des paramètres (η, ρ) . L'existence de cette ligne de co-dimension 1 dans l'espace des paramètres est fondamentale : elle prouve qu'il existe un nombre infini de paramètres correspondants à l'établissement de mouvements collectifs. Quelle que soit la valeur du bruit (respectivement de la densité), il existe une valeur de la densité (respectivement du bruit) telle que les oiseaux volent en groupe. Même s'il est impossible de déterminer la similitude exacte reliant les paramètres expérimentaux à ceux du modèle, nous savons qu'ils existent. Ensuite la valeur de chacun des exposants semble constante tout au long de la ligne critique. Nous pouvons donc nous situer en un n'importe quel point de celle-ci.

C'est aussi un argument en faveur de ce modèle et de la pertinence qu'il y aurait à le confronter à l'expérience.

Parution	β	β_*	γ	γ_*^-	γ_*^+	$\frac{\beta}{\Delta}$	ν	κ
[92]	0,45(7)	0,35(6)	—	—	—	—	—	—
[25]	0,42(3)	0,40(5)	~ 2	~ 4	~ 1	~ 1	2	0,45(5)
champ moyen §9	1/2	1/2	1	1	1	1/3	1	—

TAB. 1.2 – Tableau récapitulatif des exposants critiques du modèle Vicsek.

1.3.2 Problèmes et questions ouvertes

Les études précédentes soulèvent un certain nombre de questions qui méritent d'être étudiées de manière plus approfondie.

Il y a tout d'abord des questions de méthode. La définition des temps de calcul n'est pas discutée, ni celle des conditions initiales, ni celle des temps d'établissement des régimes asymptotiques. La détermination des points critiques est liée à la maximalisation du régime sur lequel le comportement est en loi de puissance, ce qui est intrinsèquement difficile à réaliser. Cette méthode néglige le fait qu'il peut exister une taille L_{inf} en dessous de laquelle le comportement critique n'est jamais atteint. En effet, les tailles de tels systèmes étant très petites devant leurs longueurs d'autocorrélation, les fluctuations critiques sont lissées et le système reste dans un état proche de celui d'un champ moyen. Enfin, il est possible d'aller plus loin dans la comparaison de cette transition dynamique avec le formalisme développé pour les transitions de phase classique. Nous verrons au Chapitre 3, que ce cadre théorique permet de multiplier les mesures indépendantes d'un même exposant. Tous ces points permettent de mieux contrôler les erreurs dans la détermination des exposants.

Nous avons vu précédemment que le modèle de Vicsek a pour limite, quand les particules sont fixes, le modèle des spins XY de Heisenberg. Or le théorème de Mermin-Wagner interdit l'existence d'une brisure spontanée d'une symétrie continue. Que se passe-t-il quand le module de la vitesse v_0 tend vers zéro? D'après [92] et [25], la transition de phase continue à exister pour toute valeur $v_0 \in [3 \times 10^{-3}; 3 \times 10^{-1}]$. Est-ce que cela signifie que la ligne critique tend alors vers la ligne triviale : $\eta = 0$ pour toute valeur de ρ ? La valeur de v_0 peut intervenir aussi sur le temps de mise en place des comportements asymptotiques. En effet, dans la phase ordonnée, les oiseaux peuvent être vus comme un fluide qui s'écoule avec une vitesse moyenne $\langle \varphi \rangle$. Leur dynamique peut s'écrire comme une équation de Navier-Stokes modifiée (nous revenons sur ce point au paragraphe 2.1), et comporte donc un terme d'advection $\vec{v} \cdot \nabla$ qui dépend directement de v_0 . C'est

aussi ce terme qui propage l'information dans l'espace. Il est donc imaginable que l'établissement de la phase ordonnée dépende de la valeur de v_0 , en changeant la valeur des temps ou des distances d'autocorrélation. Une valeur élevée de v_0 permettrait donc d'augmenter l'efficacité du mélange hydrodynamique.

Si l'existence de la ligne critique (η_c, ρ_c) est fondamentale, comme nous l'avons souligné précédemment, elle pose aussi des questions. D'abord les valeurs de densité testées descendent très largement sous l'unité (voir table 1.1) et pourtant des mouvements collectifs y ont été observés. Pourquoi est-ce surprenant ? Deux points sont à rappeler : en premier lieu, un marcheur aléatoire dans un espace à deux dimensions a une probabilité non nulle de passer en un point quelconque du plan [50] ; deuxièmement, l'interaction subie par un oiseau du modèle est constante en tout point de son voisinage. Si nous considérons le vol d'oiseaux dans un état ordonné placé dans le référentiel du centre de masse du vol, chacun des oiseaux peut être vu comme un marcheur aléatoire, non biaisé à cause de la seconde remarque. Le premier point soulevé plus haut nous dit quant à lui qu'alors tout oiseau peut sortir de la nuée, et y revenir à un instant ultérieur. Cela est vrai quelle que soit l'intensité du bruit, seul le temps de récurrence dépend de celle-ci. A priori, à faible densité, tout groupe doit donc se disperser, pour reformer d'autres nuées, et le processus doit se poursuivre indéfiniment. Mais chacune des nuées peut prendre une direction propre. Pour quelle raison, dans la limite thermodynamique, la moyenne des vitesses ne serait-elle pas nulle ?

Il reste la possibilité que le raisonnement précédent concernant la fragmentation des nuées soit erroné. Or, il existe un argument de champ moyen en faveur de l'existence d'un seuil de percolation quelle que soit la valeur de la densité. Imaginons une population d'animoiïdes répartis sur le plan. La distance typique entre deux individus est alors $1/\sqrt{\rho}$. De plus, en considérant l'équation 1.1, le temps de cohérence varie comme $1/\eta$. Si l'on impose que deux particules se rencontrent en un temps de l'ordre du temps de cohérence, nous obtenons une condition de percolation :

$$\eta \sim \frac{\sqrt{\rho}}{v_0}. \quad (1.14)$$

Certes, cette relation est compatible avec les mesures présentées précédemment (voir table 1.2). Mais insistons sur le fait que cette relation est issue d'un raisonnement de champ moyen et ne prend en compte ni les fluctuations de densité ni celles du paramètre d'ordre. La coïncidence du résultat de champ moyen sur un phénomène critique n'est pas une vérification. Elle nous pousserait au contraire à la méfiance, au moins en ce qui concerne la valeur de l'exposant. Enfin le raisonnement de champ moyen ne dit rien sur l'établissement de l'ordre à longue distance. Nous testons l'existence de la phase ordonnée à faible densité au Chapitre 8.

La seconde difficulté soulevée par la forme de la ligne critique est qu'à densité

nulle, le bruit critique est nul. Il faut d'abord s'interroger sur la signification de la limite de densité nulle. S'agissant de l'étude de transitions de phase, ces dernières n'ont de sens qu'à la limite thermodynamique, c'est-à-dire pour un nombre infini d'éléments appartenant à l'ensemble statistique étudié, ici les animoïdes. Ayant un nombre d'oiseaux gigantesque, pour avoir une densité nulle, il faut avoir un espace gigantesque : $N \ll L^d$, ou un espace ouvert. Le travail [25] exclut donc l'existence de comportements collectifs en espace ouvert, ce qui est problématique vis-à-vis de la confrontation à l'expérience : les lions tournent en rond lorsqu'ils sont en cage, le font-ils dans leur biotope ?

Dans l'optique d'une confrontation à l'expérience, le modèle souffre de l'absence de taille caractéristique définissant les animaux. Sans taille microscopique, il est difficile de déterminer les échelles naturelles des simulations. Pour résoudre ce problème nous pouvons introduire une distance minimale entre animaux. Nous définissons ainsi un *volume exclu*. Notons qu'en géométrie confinée, dans les systèmes à l'équilibre, des cristaux liquides par exemple, il existe des transitions de phase induites par l'encombrement stérique. Ce n'est pas le type de transitions que nous voulons étudier ici. Pour les éviter, nous choisissons un volume exclu total petit devant le volume total du système étudié.

2

Modèles mésoscopiques

Sommaire

2.1	Dérivation des équations	31
2.2	Corrélations à longue portée	34
2.3	Diffusion	37

Ce chapitre est une revue des travaux réalisés sur les modèles continus des systèmes de particules auto-propulsées. Le but de ces modèles était d'abord de montrer analytiquement l'existence de la phase ordonnée en espace bi-dimensionnel et de comprendre l'apparent paradoxe avec le théorème de Mermin-Wagner. Les résultats ont été au-delà de ces espérances puisque des prédictions ont pu être faites concernant la dynamique d'ensemble de ces animoïdes. Certaines de ces prédictions nous aident à comprendre nos résultats. C'est pour cela que nous les citons. Mais nous ne désirons pas les redémontrer, nous conseillons donc au lecteur intéressé de se tourner vers les articles originaux. Quant au tout dernier paragraphe, il contient une conséquence, non publiée jusqu'à présent, de ces travaux.

2.1 Dérivation des équations

Il y a eu au moins trois études sur les modèles continus du problème posé par T. Vicsek *et al.* Si toutes utilisent les mêmes bases physiques, *i.e.* la mécanique des milieux continus et l'équation de Navier-Stokes, toutes ont une approche différente pour dériver les équations de leur modèle. Nous allons les présenter une par une succinctement car nous pensons que ces méthodes sont riches d'enseignements pour la suite de notre propos. Nous procédons en suivant l'ordre historique.

Les travaux réalisés par J. Toner, Y. Tu et M. Ulm [88, 89, 90] résident dans l'étude d'équations posées d'après des considérations de symétrie. Les paramètres nécessaires sont de toutes façons phénoménologiques et sont renormalisés lors de l'étude de la phase ordonnée. Leurs liens avec la réalité microscopique sont donc en grande partie ignorés.

La première symétrie concerne les rotations. Les équations doivent être telles que la phase ordonnée ne doit pas s'organiser selon une direction particulière, toutes les directions de l'espace doivent être équivalentes. Ensuite l'invariance galiléenne peut être violée dans les troupeaux. En effet, dans les systèmes physiques, cette symétrie assure la conservation des lois physiques dans des référentiels en translation uniforme. Or le modèle de Vicsek impose une interaction dépendant des vitesses. Si on effectue une transformation de Galilée, les vitesses de chacune des particules sont changées. Les interactions entre animoïdes le sont donc aussi. La seule manière de conserver l'interaction sur les vitesses est rompre l'invariance galiléenne. La dernière symétrie est la conservation de particules : on suppose que les animaux ne meurent pas, ni ne naissent durant les mouvements collectifs.

Le modèle est composé de trois équations. La première est formée à partir de l'équation de Navier-Stokes. La différence est que les auteurs de [90] autorisent tous les termes d'ordre équivalents. Il y a donc de nouveaux termes d'ordre $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ et $\nabla^2 \vec{v}$:

$$\begin{aligned} \partial_t \vec{v} + \lambda_1 (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + \lambda_2 (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \vec{v} + \lambda_3 \vec{\nabla} (|\vec{v}|^2) &= \alpha \vec{v} - \beta |\vec{v}|^2 \vec{v} - \vec{\nabla} P + D_B \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \\ &+ D_T \nabla^2 \vec{v} + D_2 (\vec{v} \cdot \vec{\nabla})^2 \vec{v} + \vec{f}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

La saturation des vitesses intervient *via* le terme $\alpha \vec{v} - \beta |\vec{v}|^2 \vec{v}$. Si α est négatif, c'est un terme d'amortissement. Il n'existe pas de phase désordonnée. Si α est positif, il y a mouvement global de vitesse $\sqrt{\alpha/\beta}$. C'est ce dans dernier cas qu'apparaît la phase ordonnée du modèle de Vicsek, alors que le cas $\alpha \leq 0$ ne correspond pas à la phase désordonnée de ce même modèle. La force de propulsion \vec{f} est aléatoire avec des corrélations ponctuelles en temps et en espace. La pression est calculée par un développement autour de la densité moyenne ρ_0 :

$$P = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n (\rho - \rho_0)^n. \quad (2.2)$$

Enfin la quantité totale d'individus est conservée :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0. \quad (2.3)$$

Nous avons commencé par le modèle le plus formel, tant au niveau de la présentation du modèle, de la résolution du problème physique que des applications biologiques. Les deux autres modèles ont été pensés plus spécifiquement pour les bactéries, notamment en tenant compte de leurs formes anisotropes. Ainsi le système d'équations développé par Z. Csahók et A. Czirók [23] est composé de l'équation de Navier-Stokes à laquelle les auteurs ont ajouté :

- une pression hydrostatique $\rho_0 g h$,
- une pression due à la capillarité $\gamma \nabla^2 h$,

- une pression extérieure p_{ext} ,
- une force de locomotion \vec{F} ,
- un frottement avec le substrat de temps caractéristique τ : $-\frac{1}{\tau}\vec{v}$,
- un bruit $\vec{\eta}$ gaussien de moyenne nulle et d'écart-type σ .

Dans un bain homogène de bactéries, on peut négliger la capillarité. La force de locomotion créée par les moteurs moléculaires de la bactérie est supposée constante :

$$\vec{F} = \rho_0 \frac{v_0}{\tau} \vec{e}_v, \quad (2.4)$$

où ρ_0 est la densité moyenne, v_0 la vitesse de saturation et \vec{e}_v le vecteur directeur de la vitesse de la bactérie. Les auteurs obtiennent alors le système d'équation suivant :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \quad (2.5)$$

$$\partial_t \vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -g \vec{\nabla} h - \frac{1}{\rho_0} \vec{\nabla} p_{ext} + \nu \nabla^2 \vec{v} + \frac{v_0}{\tau} \vec{e}_v - \frac{1}{\tau} \vec{v} + \vec{\eta}. \quad (2.6)$$

Ces équations ont des similitudes et des différences avec le modèle écrit par J. Toner et Y. Tu. Nous allons tourner notre propos vers les deux différences principales. Ce modèle ne tient compte de l'anisotropie des interactions que par la présence de la force de locomotion. Nous verrons par la suite que les constantes phénoménologiques de l'équation 2.1 λ_1 , λ_2 et λ_3 ont une signification physique. Le modèle de Z. Csahók et A. Czirók perd donc une partie des caractéristiques probablement présentes dans les bains de bactéries. Enfin la force de locomotion est ici constante en module, ce qui est assez réducteur pour un modèle continu.

Dans la suite de l'article [23], Z. Csahók et A. Czirók se demandent si leur modèle contient l'interaction d'alignement du modèle de Vicsek. Pour cela, ils effectuent un raisonnement de champ moyen dans lequel ils supposent que les bactéries sont des objets uniquement géométriques, en l'occurrence des cylindres de faible diamètre, et que la dynamique a lieu en milieu très visqueux. La contrainte géométrique permet de ne considérer que l'angle θ d'orientation des bactéries. Après calcul, les auteurs obtiennent que θ suit l'équation d'évolution suivante pour chacune des bactéries :

$$\frac{d\theta_i}{dt} \propto (\theta_i - \langle \theta \rangle), \quad (2.7)$$

où $\langle \theta \rangle$ est la moyenne des directions des bactéries voisines. En milieu très visqueux, la dynamique est très amortie, les variations du module de vitesse sont faibles et donc la direction du cylindre \vec{e}_θ peut être remplacée par la vitesse \vec{v} elle-même. Le terme d'interaction s'écrit alors $\langle \vec{v} \rangle - \vec{v}$. Dans la limite d'une dynamique très amortie, on retrouve donc l'interaction d'alignement 1.1. De plus,

si on effectue un développement de Taylor, on obtient :

$$\langle \vec{v} \rangle - \vec{v} = \frac{R_0^2}{6} \left(\nabla^2 \vec{v} + 2 \frac{\nabla \vec{v}}{\rho} \vec{\nabla} \rho \right) + \dots \quad (2.8)$$

Au premier ordre, l'équation 2.6 contient donc l'interaction d'alignement grâce au terme de viscosité $\nu \nabla^2 \vec{v}$.

Le dernier modèle, écrit par R. A. Simha et S. Ramaswamy [84, 85], provient directement de la théorie classique des cristaux liquides dans un écoulement hydrodynamique (voir par exemple le livre de S. Chandrasekhar [20]). Les auteurs font une analogie directe entre la forme allongée de ces molécules et la géométrie des bactéries. Ils attribuent à ces dernières un vecteur directeur \vec{n} et recherchent deux états particuliers. Le premier, appelé ordre nématique, est invariant sous la transformation $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$; pour le second, appelé ordre vectoriel, cette symétrie est rompue. Dans l'ordre nématique, les bactéries sont parallèles les unes aux autres mais elles peuvent se déplacer de manière équivalente dans les deux sens. L'ordre vectoriel tient compte de la direction et du sens de déplacement. Comme les auteurs ne sont intéressés que par les phases ordonnées, ils écrivent directement leur modèle développé au premier ordre autour de la direction principale n_{\parallel} et ne considèrent que les fluctuations dans la direction transverse $\delta \vec{n}_{\perp}$:

$$\left(\partial_t + \lambda_1 v_0 \partial_{\parallel} \right) \delta \vec{n}_{\perp} = \frac{1}{2} (\gamma_2 + 1) \partial_{\parallel} \vec{v}_{\perp} + \frac{1}{2} (\gamma_2 - 1) \vec{\nabla}_{\perp} v_{\parallel} - \sigma_1 \vec{\nabla}_{\perp} \delta \rho + O(\nabla \nabla). \quad (2.9)$$

Ici le terme d'advection est fixé par l'écoulement principal et la vitesse d'advection est égale à la vitesse des animoïdes v_0 . Le terme de pression ne contient que la pression osmotique. Observons que dans cette équation, nous retrouvons un des paramètres d'anisotropie présents dans l'équation 2.1. Et en effet, une partie des prédictions des articles [89] et [84] est similaire.

2.2 Corrélations à longue portée

Dans les trois modèles, la phase ordonnée existe. Mais ce problème d'existence a été le plus étudié dans les travaux de J. Toner et Y. Tu. Nous allons donc nous appuyer sur leurs résultats.

Pour déterminer la stabilité de la phase ordonnée, c'est-à-dire la phase pour laquelle il y a un écoulement global spontané, les auteurs ont considéré le système d'équations 2.1-2.3. Ils ont posé l'existence d'un mouvement de direction v_{\parallel} , de module v_0 et ont supposé que les fluctuations de module sont négligeables. Les variations pertinentes sont alors les fluctuations de directions suivant \vec{v}_{\perp} . La technique utilisée est de développer les équations autour de l'écoulement principal,

puis d'effectuer un changement d'échelle suivant les directions transverses, ce qui se traduit par la renormalisation de toutes les échelles :

$$x_{\perp} \rightarrow bx_{\perp}, \quad (2.10)$$

$$x_{\parallel} \rightarrow b^{\zeta}x_{\parallel}, \quad (2.11)$$

$$t \rightarrow b^z t, \quad (2.12)$$

$$v_{\perp} \rightarrow b^{\chi}v_{\perp}, \quad (2.13)$$

$$\delta\rho \rightarrow b^{\chi\rho}\delta\rho. \quad (2.14)$$

Dans le cas où $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$, les auteurs observent que les équations obtenues en dimension deux sont symétriques sous une transformation galiléenne généralisée : $x_{\perp} \rightarrow x_{\perp} - \lambda_1 v_{\perp} t$. Cela a pour effet de rendre exactement soluble la détermination des exposants de changement d'échelle en utilisant le groupe de renormalisation :

$$z = \frac{2(d+1)}{5}, \quad (2.15)$$

$$\zeta = \frac{d+1}{5}, \quad (2.16)$$

$$\chi = \frac{3-2d}{5}. \quad (2.17)$$

Le dernier exposant est particulièrement intéressant puisque, si $d = 2$, alors $\chi = -1/5$. Les fluctuations de vitesse sont amorties quelle que soit l'échelle à laquelle on observe le système : la phase ordonnée est stable. Ce résultat diffère fondamentalement de celui obtenu pour des systèmes magnétiques, puisque dans ce cas $\chi = 1 - d/2$ quelle que soit la dimension. Les fluctuations sont toujours présentes en dimension $d \leq 2$. C'est le théorème de Mermin-Wagner [63]. Ensuite, les auteurs discutent des corrections aux lois d'échelle en dimensions différentes de deux. Ils montrent ainsi que les dimensions critiques supérieure et inférieure sont respectivement 4 et $3/2$. Ce dernier résultat pose problème. En effet, sous la dimension critique inférieure, il n'y a plus de brisure spontanée de symétrie. Or des phénomènes collectifs ont été observés sur des systèmes unidimensionnels (voir [70, 26, 93]). Ce modèle ne s'applique donc pas à ces exemples.

Notons que le modèle que nous avons présenté au paragraphe précédent est le modèle le plus général écrit par J. Toner et Y. Tu. Lors de publications antérieures [88, 89], les auteurs n'avaient pas mentionné les termes en λ_2 et λ_3 . A posteriori, dans le cas bidimensionnel, ces termes n'interviennent que par des corrections aux lois d'échelle. Le terme prédominant est inclus dans $\lambda_1 (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}$. De plus les exposants varient peu lorsque $\lambda \sim 1$, même lorsqu'il s'agit de λ_1 .

Dans [89], la forme des corrélations de densité et de vitesse sont particulièrement étudiées. Dans l'espace de Fourier, elles s'écrivent :

$$\langle |\delta\rho(\vec{q}, \omega)|^2 \rangle = \frac{\Delta q_{\perp}^2 \rho_0}{S(\vec{q}, \omega)}, \quad (2.18)$$

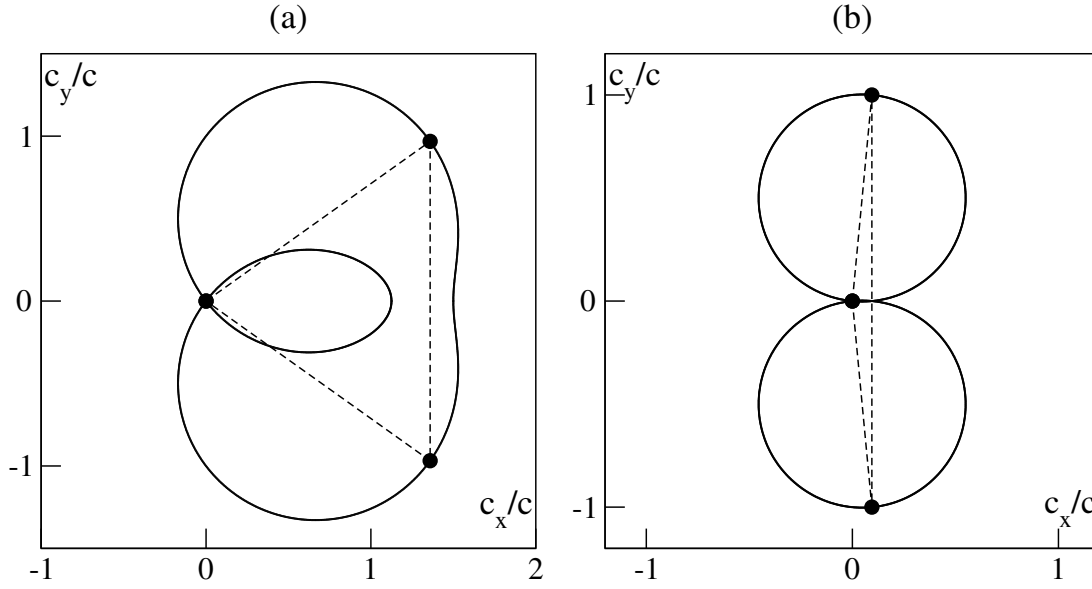


FIG. 2.1 – Vitesse du son en fonction de l’anisotropie. (a) : forte anisotropie $\lambda_1 = 0,75$, $v_0/c = 1,5$. Nous mesurons $\theta_m = 35,5^\circ$. (b) : faible anisotropie $\lambda_1 = 0,9$, $v_0/c = 0,1$. Nous mesurons $\theta_m = 84,6^\circ$. Nous nous sommes placés en coordonnées polaires.

$$\langle |\vec{v}_\perp(\vec{q}, \omega)|^2 \rangle = \frac{\Delta [(\omega - v_0 q_\parallel)^2 + D_\rho q_\parallel^4]}{S(\vec{q}, \omega)}, \quad (2.19)$$

où (q_\parallel, q_\perp) est le vecteur d’onde et ω la pulsation utilisés dans la transformation de Fourier, Δ est la variance du bruit, ρ_0 est la densité moyenne et v_0 est la valeur de la vitesse globale de la phase ordonnée. Enfin D_ρ est une constante de diffusion des équations linéarisées et peut s’écrire en fonction des paramètres de diffusion de l’équation 2.1. Quelques conséquences sont à tirer de la forme des corrélations. Le dénominateur $S(\vec{q}, \omega)$ permet de déterminer une pulsation de résonance ω_0 du système. Il existe donc des modes acoustiques qui se propagent dans le milieu. On définit la vitesse du son : $\omega_0 = c_\pm q$. L’expression de $S(\vec{q}, \omega)$ fournit la relation de dispersion et permet de calculer la vitesse :

$$\frac{c_\pm(\theta_q)}{c} = \frac{1}{2} (1 + \lambda_1) \frac{v_0}{c} \cos(\theta_q) \pm \left[\frac{1}{4} (1 - \lambda_1)^2 \left(\frac{v_0}{c} \right)^2 \cos^2(\theta_q) + \sin^2(\theta_q) \right]^{1/2},$$

où l’angle θ_q est défini par $(q_\parallel, q_\perp) = (\cos(\theta_q), \sin(\theta_q))$. La constante $c = \sqrt{\sigma_1 \rho_0}$ est la vitesse du son définie par la pression moyenne du système. Nous avons tracé sur la figure 2.1 deux comportements possibles de la vitesse du son en coordonnées polaires. La direction principale du mouvement ($\theta_q = 0$) est l’axe des abscisses. Le premier cas correspond aux mesures effectuées dans [89]. Le facteur d’anisotropie est alors de 0,75. Dans la direction transverse, un seul mode apparaît alors qu’il y

en a deux dans la direction longitudinale. Imaginons maintenant que l'anisotropie soit faible, c'est-à-dire que la vitesse globale normalisée par la vitesse du son c soit petite et que $\lambda_1 \sim 1$. On obtient alors $c_{\pm}(\theta_q)/c \sim |\sin(\theta_q)|$. La courbe est quasiment symétrique par rapport à la direction longitudinale (figure 2.1(b)). Nous pouvons déterminer l'angle θ_m tel que la vitesse du son soit maximale. Dans le cas faiblement ordonné, $\theta_m \sim 90^\circ$. Dans le cas fortement anisotrope, les modes les plus rapides s'orientent dans la direction du mouvement.

Nous avons présenté deux autres modèles. Nous utilisons peu leurs résultats. Cependant, notons que chacun d'entre eux possède une phase ordonnée stable. Le modèle fondé sur la théorie des cristaux liquides montre en plus qu'un ordre nématique est instable : certes toutes les bactéries se déplacent sur le même axe mais il faut aussi qu'elles aillent dans le même sens. Dans ce même modèle, il existe des modes acoustiques se propageant dans une phase gouvernée par l'ordre vectoriel.

Enfin le modèle de Z. Csahók et A. Czirók possède des phases dans lesquelles les lignes de courant ont la forme de cercles, mais cela n'apparaît qu'en géométrie confinée. Ces vortex ont déjà été observés dans d'autres simulations avec une condition de réflexion aux bords [32, 48].

2.3 Diffusion

Dans l'article [89], J. Toner *et al* s'intéressent aussi à la diffusion des particules dans la phase ordonnée. Il s'agit de mesurer le chemin moyen parcouru par chacun des animoïdes d'indice i et de vitesse $v_i(t)$:

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle (t) \sim \int_0^t \int_0^t \langle \vec{v}_i(t') \cdot \vec{v}_i(t'') \rangle dt' dt'' . \quad (2.20)$$

Nous désirons relier cette diffusion aux exposants déterminés plus haut. Pour cela, il faut passer du point de vue langrangien à la représentation eulérienne :

$$\langle \vec{v}_i(t') \cdot \vec{v}_i(t'') \rangle = \langle \vec{v}(t', \vec{x}(t')) \cdot \vec{v}(t'', \vec{x}(t'')) \rangle . \quad (2.21)$$

Le terme de droite de cette relation est la corrélation des vitesses, dont nous avons déjà une expression dans l'espace de Fourier. Les auteurs de [89] se sont intéressés à la diffusion anormale des particules dans la phase ordonnée. Dans ce cas, seules les corrélations transverses sont intéressantes; on considère le mouvement des particules dans le référentiel lié au centre de masse. On effectue le changement de référentiel selon la vitesse globale, puis on calcule la transformation de Fourier inverse des corrélations de vitesses :

$$\langle v_i^\perp(0) v_i^\perp(t) \rangle \sim \int \frac{\exp [i(\omega - v_0 \varphi q_{||})t] \Delta(\omega - v_0 q_{||})^2 d^2 q d\omega}{S(\vec{q}, \omega)} \sim t^{1-1/\zeta} . \quad (2.22)$$

On en déduit que la diffusion anormale suit la loi :

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle (t) \propto t^{3-1/\zeta}, \quad (2.23)$$

or $\zeta = 3/5$, l'exposant de diffusion vaut donc $4/3$. Ce résultat est confirmé par les mesures réalisées d'après les simulations numériques [89].

Tout ce que nous avons vu dans ce chapitre concerne la phase ordonnée. Nous pouvons aussi nous placer au point critique du modèle de Vicsek. La théorie des phénomènes critiques impose alors la forme des corrélations à temps égaux :

$$\langle \vec{v}(t, \vec{q}) \cdot \vec{v}(t, -\vec{q}) \rangle \sim q^{-\frac{z}{\nu}}. \quad (2.24)$$

D'après [90], les corrélations de vitesse prennent la forme dans l'espace de Fourier :

$$C(\omega, \vec{q}) = A_{LL} \frac{q^\Delta}{\omega - c^2 q^2 / \omega + q^{2z}} + A_{TT} \frac{q^\Delta}{\omega^2 + q^{2z}}, \quad (2.25)$$

où A_{LL} et A_{TT} sont des amplitudes indépendantes de ω et de q , et Δ est l'exposant nécessaire à la renormalisation du bruit ; il est obtenu dans [90] en fonction des autres exposants. On obtient alors les corrélations à temps égaux :

$$\langle \vec{v}(t, \vec{q}) \cdot \vec{v}(t, -\vec{q}) \rangle \propto q^{\Delta-z}, \quad (2.26)$$

donc, au point critique :

$$\gamma/\nu = z - \Delta. \quad (2.27)$$

Revenons maintenant au problème de la diffusion. Nous avons vu que nous pouvons calculer la diffusion des particules grâce au modèle continu en effectuant un changement de coordonnées. Nous l'avons fait dans la phase ordonnée, utilisons le même procédé au point critique sans séparer les directions transverses de la direction longitudinale :

$$\langle \vec{v}(t', \vec{x}(t')) \cdot \vec{v}(t'', \vec{x}(t'')) \rangle = C(t' - t'', \vec{x}(t') - \vec{x}(t'')), \quad (2.28)$$

Si nous n'étudions que la diffusion au petit temps, alors $C(t' - t'', \vec{x}(t') - \vec{x}(t'')) \sim C(t' - t'', 0)$. Par intégration, nous obtenons alors :

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle (t) \propto t^{2 - \frac{\Delta + d - z}{z}}. \quad (2.29)$$

En utilisant la relation obtenue précédemment 2.27 et la relation d'échelle B.15, l'exposant de diffusion anormale peut s'écrire en fonction des exposants critiques :

$$\mu = 2 \left(1 - \frac{1}{z} \frac{\beta}{\nu} \right). \quad (2.30)$$

La relation de diffusion anormale n'a été dérivée que pour les temps courts. Mais si la diffusion anormale est une manifestation des phénomènes critiques, nous nous attendons à ce que la gamme de validité de cette relation diverge comme le temps de corrélation. Au point critique d'un système thermodynamique, la diffusion serait alors anormale d'exposant μ pour toutes les valeurs prises par le temps t . Nous testons ce résultat au Chapitre 3.

3

Généralisation du modèle de Vicsek

Sommaire

3.1	Bruit et échelle	40
3.1.1	Interactions	40
3.1.2	Bruits	41
3.2	Calculs numériques	43
3.3	Résultats et discussion	45
3.3.1	Bruit Br1	45
3.3.2	Bruit Br2	57
3.4	Conclusions et perspectives	62

Ce chapitre vise à répondre aux critiques et aux questions soulevées par les deux précédents. Pour cela nous définissons des modèles, généralisations du modèle de Vicsek.

Tout d’abord, nous introduisons une échelle caractérisant les animoïdes. Outre une meilleure adéquation aux expériences, nous avons pour objectif de tester l’universalité de ces modèles. Rappelons que deux modèles appartiennent à la même classe d’universalité s’ils possèdent un certain nombre de grandeurs caractéristiques communes, quels que soient les détails microscopiques des modèles. Cette condition se traduit ici par l’indépendance des résultats vis-à-vis de l’échelle caractérisant les animoïdes.

Les résultats sur l’application du théorème de fluctuation–dissipation [25] nous ont faits nous interroger sur la définition du bruit introduit dans le modèle. Aussi nous définissons une autre forme de désordre et nous étudions les comportements de ce nouveau modèle.

Enfin, nous avons obtenu des prédictions sur le comportement diffusif des animoïdes. Nous avons calculé l’exposant de diffusion anormale à partir des corrélations des vitesses déterminées dans le cas des faibles variations de densité. Pour nous placer dans le cadre de cette hypothèse et mesurer l’exposant de la diffusion μ , nous effectuons la plus grande partie de notre étude à densité quasi-homogène.

L'étude des phénomènes critiques, la détermination des points de transition et la mesure des exposants sont des exercices difficiles et nous portons une attention soutenue aux différentes sources d'erreurs.

3.1 Bruit et échelle

3.1.1 Interactions

La manière la plus naturelle d'introduire une échelle caractéristique est de définir une interaction à deux corps dépendant de la distance entre particules. Soit \vec{f}_{ij} la force que subit i sous l'influence de j , nous écrivons la nouvelle règle d'interaction comme la compétition entre le terme d'alignement, introduit par T. Vicsek [92], et cette force :

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\sum_{j \sim i} (\beta_v \vec{v}_j^t + \beta_f \vec{f}_{ij}^t) \right] + \eta \xi_i^t. \quad (3.1)$$

$j \sim i$ désigne le voisinage de i . Celui-ci est défini comme l'ensemble des individus dont la distance au i -ème animoïde est inférieure à R_0 . Comme dans le Chapitre 1, cette distance est fixée à 1. Les deux paramètres β_f et β_v assurent l'homogénéité de l'équation et permettent de régler le poids relatif des interactions. Soulignons cependant qu'un seul de ces paramètres est indépendant. Nous maintenons dans ce chapitre $\beta_v = 1$.

Le couplage \vec{f}_{ij} est présenté comme une force. Mais nous ne sommes pas dans un formalisme hamiltonien : \vec{f}_{ij} ne dérive pas d'un potentiel, la détermination des équations d'évolution ne provient pas non plus des équations de Hamilton ou de la relation de Newton. Cependant l'action résultante de \vec{f}_{ij} est équivalente à celle d'une force classique. Supposons que ce couplage est dirigé selon l'axe entre chacun des centres des particules de i vers j , alors l'action du couplage est d'orienter les vitesses respectives vers chacune des particules : il y a attraction. Si le couplage est dans l'autre sens, les animoïdes se repoussent ; enfin, la position correspondant à un zéro de \vec{f}_{ij} est une position d'équilibre dynamique.

Nous nous attendons à ce que cette nouvelle forme d'interaction donne des comportements critiques semblables à ceux observé au Chapitre 1 pour des points de transitions différents. Pour les comparer, nous pouvons utiliser le bruit réduit :

$$\varepsilon = 1 - \frac{\eta}{\eta_c}, \quad (3.2)$$

où η_c est le point critique de la transition.

Nous observons effectivement des courbes similaires en fonction ε sur la figure 3.1. Pour être plus précis, il faut comparer les valeurs des quantités univer-

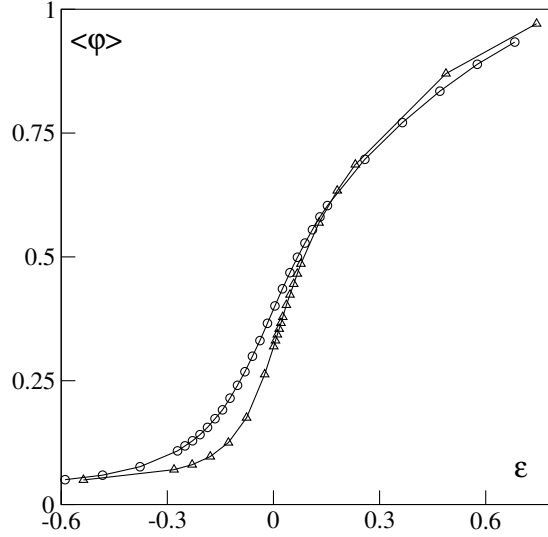


FIG. 3.1 – Influence de l'interaction à deux corps. Les paramètres d'ordre pour les modèles Fr (Δ) et F0 (\circ) sont représentés en fonction du bruit réduit, $L = 32$.

selles, ou attendues comme telles. Nous effectuons cette comparaison au paragraphe 3.3.

Afin de se placer à densité quasi-homogène, une possibilité est de prendre une force seulement répulsive, par exemple :

$$\vec{f}_{ij} = - \left[1 + \exp \left(\frac{r_{ij}}{R_B} - 2 \right) \right]^{-1} \vec{e}_{ij}, \quad (3.3)$$

où r_{ij} est la distance entre les centres des particules, \vec{e}_{ij} le vecteur unitaire dirigé de i à j . La distance R_B est la distance telle que la force est diminuée de moitié. Les modèles contenant cette force sont notés Fr, ceux qui en sont dépourvus sont notés F0. Nous étudions dans la seconde Partie l'impact d'une force ayant un terme attractif.

Les valeurs des paramètres utilisés sont les mêmes que dans le tableau 1.1, les paramètres supplémentaires sont $R_B = 0,127$ et $\beta_f = 2,5$; ces choix sont discutés dans le Chapitre 5.

3.1.2 Bruits

Lorsque nous étudions un milieu quasi-continu, une approximation généralement admise est de considérer que chacune des particules est soumise à une force aléatoire, ce que nous nommons communément *bruit*. Nous modélisons ainsi l'impact de la température sur le milieu en écrivant une équation de Langevin. Le bruit présenté dans le Chapitre 1, noté Br1 dans la suite de ce travail, est un angle aléatoire (voir l'équation 1.1 et l'article [92]), et il trouve sa justification

dans l'analogie avec le modèle XY sans champ magnétique. Si, en revanche, nous prenons l'optique d'une équation de Langevin, les variations de la vitesse sont proportionnelles à une force aléatoire. Nous utilisons le parallèle entre bruit et force pour écrire une nouvelle source de désordre. Ainsi nous suivons ce que nous avons déjà fait pour les couplages à deux corps. Pour l'animoïde i à l'instant t , nous obtenons :

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\sum_{j \sim i} \vec{v}_j^t + \mathcal{N}_i^t \eta \vec{u}_i^t \right], \quad (3.4)$$

où \vec{u}_i^t est un vecteur aléatoire de module unitaire, dont la direction moyenne est nulle et qui est décorréolé en temps et en espace, *i.e.* :

$$\vec{u}_i^t \cdot \vec{u}_j^{t'} = \delta(t - t', i - j). \quad (3.5)$$

\mathcal{N}_i^t est le nombre de voisins de i et η l'amplitude du bruit. Nous notons cette forme de bruit Br2.

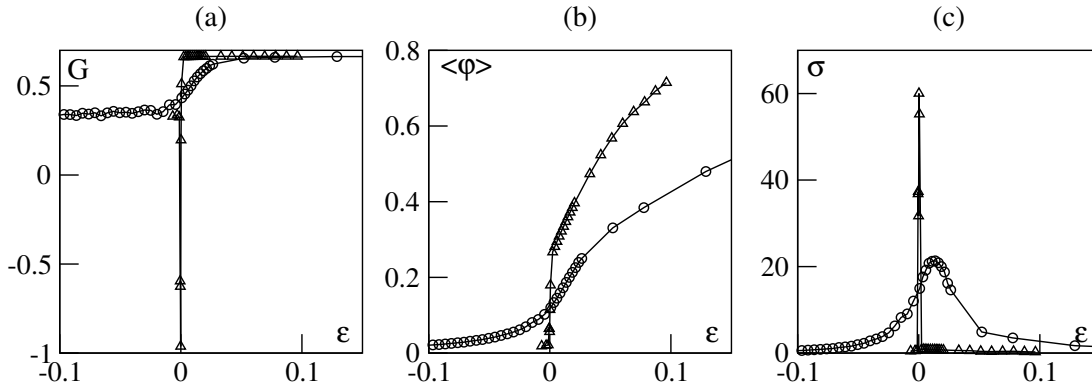


FIG. 3.2 – Influence de la nature du bruit. Les cumulants de Binder (a), les paramètres d'ordre (b) et leurs fluctuations (c) des modèles Br1 (o) et Br2 (Δ) sont représentés en fonction du bruit réduit, $L = 128$.

Un raisonnement naïf serait d'admettre que ces deux modèles appartiennent à la même classe d'universalité, en supposant que les points-clefs de cette classe ne seraient que l'interaction d'alignement et le maintien hors d'équilibre du système. À petite taille, en effet, les différences sont ténues. Mais, lorsque la taille est suffisamment grande, par exemple sur la figure 3.2, il est flagrant que les deux formes de bruit donnent lieu à des comportements complètement différents.

Sur cette figure, en plus du paramètre d'ordre et de ses fluctuations, nous étudions le cumulant de Binder défini par :

$$G(\epsilon, L) = 1 - \frac{\langle \varphi^4 \rangle}{3 \langle \varphi^2 \rangle^2}, \quad (3.6)$$

où ε est le bruit réduit. Le cumulante de Binder est introduit dans l'Annexe B. Il est généralement utilisé dans la détermination des points de transition pour les transitions continues, car sa valeur en $\varepsilon = 0$ est universelle, ou pour les transitions du premier ordre car le cumulante possède un minimum en $\varepsilon = 0$.

Pour le bruit Br1, chacune des grandeurs mesurées est continue. En revanche, pour Br2, toutes ont un comportement très abrupt, probablement discontinu. Et le cumulante de Binder n'est pas monotone. Il est visible que la nature des transitions change en fonction du bruit. De plus, comme nous l'avons noté précédemment, la taille du système simulé a un impact direct sur la forme des courbes, qu'il faut quantifier. Dans les Annexes B et C, nous avons fait une revue des effets de taille pour les transitions continues et pour les transitions du premier ordre. Pour une étude plus approfondie des transitions de nos modèles, nous comparons les résultats obtenus à l'équilibre avec nos données.

3.2 Calculs numériques

Nous devons tout d'abord élaborer une stratégie pour l'étude numérique des transitions. Le point crucial de tout travail numérique réside dans l'équilibre entre le temps de calcul que nous sommes prêts à investir et la précision que nous désirons atteindre. Cette précision est limitée par les erreurs systématiques et les erreurs statistiques. Les premières sont dues aux effets de taille, et sont traitées dans les Annexes B et C. Les secondes proviennent de l'échantillonnage des données récoltées, et leurs déterminations sont abordées dans l'Annexe D. Les effets de taille finie nécessitent l'étude des systèmes les plus grands possibles, un bon échantillonnage requiert d'intégrer les équations du mouvement sur de longues périodes. Il faut concilier les deux exigences en fonction du temps de calcul disponible. La totalité de l'étude qui suit a requis près de 4,5 ans de calcul. Ce temps équivaut au temps nécessaire à une machine mono-processeur ALPHA cadensée à 850MHz.

D'abord, il faut déterminer le point de transition, en utilisant l'observation des effets de taille comme précédemment définie. Pour cela nous considérons un état initial dans lequel les positions des N animoïdes et les directions de leurs vitesses sont choisies au hasard. Puis nous intégrons les équations d'évolution durant un temps T_{trans} pendant lequel aucune mesure n'est effectuée, l'état asymptotique se mettant en place. La durée du régime transitoire est égale au temps de décorrélation du système, c'est-à-dire le temps au bout duquel le système a perdu toute mémoire d'une configuration de départ. Mais n'en ayant aucune mesure à ce stade de l'étude, nous avons supposé que $T_{\text{trans}} \leq 2N$, hypothèse fondée sur la connaissance des comportements dynamiques des systèmes ferro-magnétiques

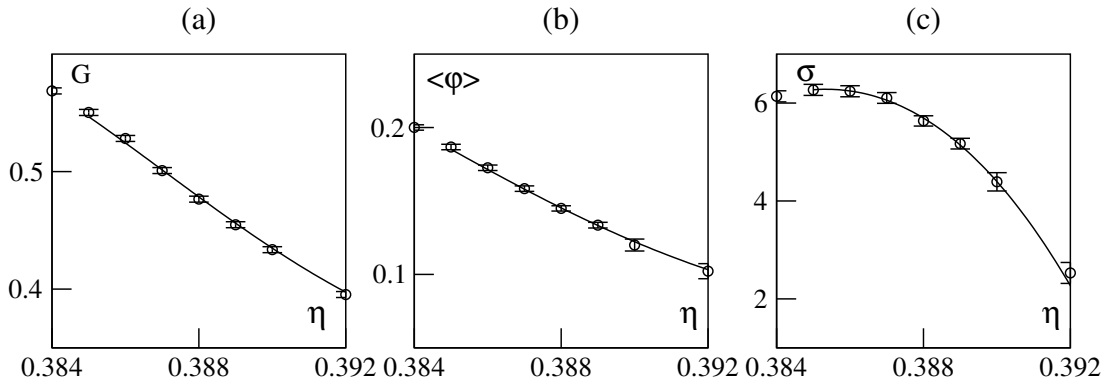


FIG. 3.3 – Ajustements polynômiaux. Les courbes du cumulante de Binder (a), du paramètre d'ordre (b) et des ses fluctuations (c) pour le modèle Br1-Fr sont représentées. Les ajustements sont en ligne continue et ont été déterminés pour le voisinage $\eta \in [0,385; 0,392]$. $L = 128$.

(voir par exemple [59]) et que nous testons *a posteriori*.

Une fois le voisinage du point de transition repéré, nous pouvons calculer le temps d'autocorrélation, l'exposant dynamique et les erreurs statistiques, tels que définis dans l'Annexe D. Cependant, pour extraire ces différentes grandeurs, une bonne répartition des points de mesure est nécessaire. Afin de pallier cette difficulté et calculer, notamment, les dérivées et dérivées logarithmiques, nous avons ajusté les différentes courbes par des polynômes au voisinage du point de transition via la méthode des moindres carrés. Le choix du degré du polynôme est de même fait par minimisation de l'écart relatif, noté traditionnellement χ^2 et à ne pas confondre avec la notation habituelle de la susceptibilité (voir Annexe A). Mais, pour deux valeurs proches du χ^2 , nous ne conservons que le polynôme de degré le plus bas. Il est de plus possible de tester la qualité de ces ajustements grâce à la loi de Pearson ² $\chi^2_{\nu,\alpha}$ en considérant que les points numériques sont des variables aléatoires d'écart-type valant les erreurs statistiques déterminées précédemment. Nous avons porté dans le tableau 3.1 les résultats du test et la figure 3.3 montre trois exemples d'ajustement sur les trois grandeurs étudiées principalement : le cumulante de Binder, le paramètre d'ordre et ses fluctuations. Plus le rapport $\chi^2/\chi^2_{\nu,\alpha}$ est petit, meilleur est l'ajustement. Les ajustements sont de bonnes qualités, particulièrement pour le paramètre d'ordre. Les fluctuations du paramètre d'ordre et le cumulante de Binder ont des variations plus importantes et sont donc plus difficilement ajustables. Ajoutons que nous n'avons cherché un ajustement que pour le voisinage du point de transition.

Cependant, cette méthode n'est facilement réalisable que dans le cas des tran-

²Il s'agit de la loi de probabilité régissant la somme des carrés de ν variables aléatoires gaussiennes indépendantes.

L	16	24	32	48	56	64	96	112	128	144	200	256
G	0,48	0,59	0,66	0,75	0,79	0,62	0,71	0,77	0,89	0,76	0,81	0,83
$\langle\varphi\rangle$	0,05	0,04	0,13	0,03	0,01	0,02	0,02	0,03	0,01	0,03	0,01	0,03
σ	0,004	0,03	0,09	0,07	0,11	0,15	0,48	0,16	0,06	0,19	0,20	0,54

TAB. 3.1 – Test du χ^2 appliqué aux ajustements polynômiaux. Le cumulante de Binder, le paramètre d'ordre et leurs fluctuations ont été testés avec un risque de première espèce $\alpha = 0,05$, pour le modèle Br1-Fr. Chaque nombre correspond au rapport $\chi^2/\chi_{\nu,\alpha}^2$

sitions continues. Quant aux transitions discontinues, les grandeurs thermodynamiques ont des variations trop importantes au point de coexistence, même à petite taille. Dans ce cas, si nous voulons interpoler une valeur, nous effectuons une interpolation linéaire, si nous avons besoin de dériver ces courbes, nous utilisons un schéma numérique centré.

Enfin le seul algorithme nécessaire dans les simulations présentées concerne le repérage du voisinage. En effet, le déplacement des animoïdes étant entièrement libre sur un espace continu, une recherche directe des voisins d'un individu implique un algorithme d'ordre N^2 , où N est le nombre d'individus. Pour accélérer l'algorithme, l'espace est découpé en boîtes, dans lesquelles les particules sont distribuées en fonction de leurs coordonnées. Mais il ne s'agit que d'un repérage, les particules ne se meuvent pas sur un réseau. L'algorithme pour trouver les voisins nécessite alors nN opérations, où n est le nombre d'individus dans une boîte. La taille des boîtes est fixée à R_0 .

3.3 Résultats et discussion

3.3.1 Bruit Br1

Nous nous sommes penchés sur deux modèles appartenant à cette catégorie. Le premier, celui que nous avons étudié de la façon la plus intensive, comporte une force seulement répulsive comme définie au paragraphe 3.1.1 et ainsi répond le mieux à notre exigence d'étudier le système en densité quasi-uniforme. La densité globale est fixée à $\rho = 2$, et la vitesse $v_0 = 0,3$. Nous le notons Br1-Fr. Le second modèle est le modèle originel de Vicsek. Il est étudié à relativement haute densité ($\rho = 2$), et haute vitesse $v_0 = 0,5$, en comparaison des études précédentes (voir le tableau 1.1). Nous espérons ainsi profiter plus efficacement du mélange hydrodynamique. Nous notons ce modèle Br1-F0.

Avant la présentation des résultats, nous devons discuter de la qualité statistique de nos données en utilisant le cadre de l'Annexe D. Pour cela, nous avons

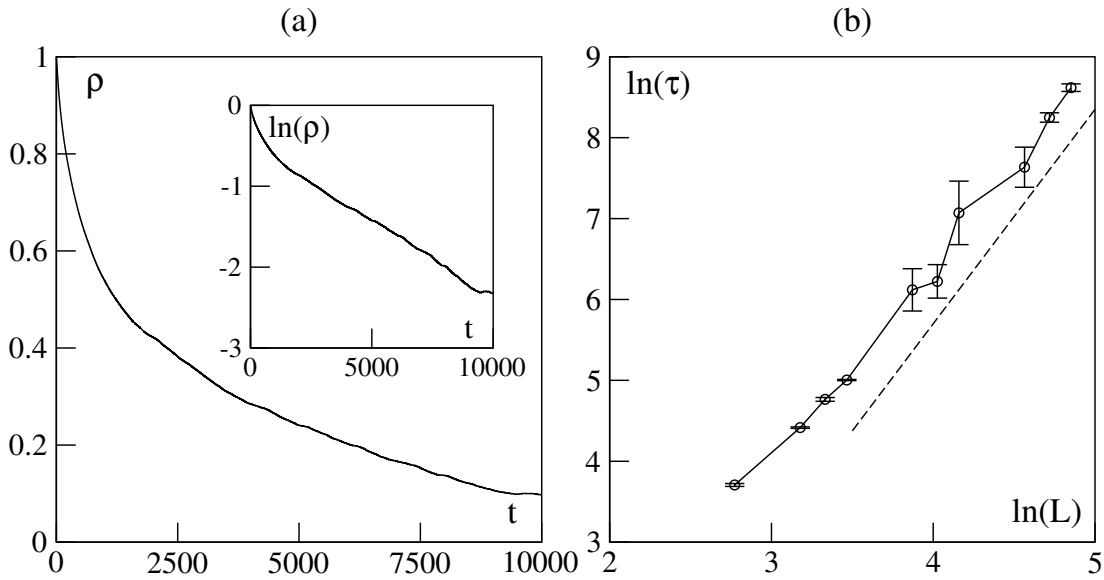


FIG. 3.4 – Temps d'autocorrélation du modèle Br1-Fr au point critique. (a) fonction d'autocorrélation en échelle linéaire et en échelle semi-logarithmique (encart), $L=128$. (b) temps d'autocorrélation en fonction de la taille. La ligne discontinue correspond à la mesure de l'exposant dynamique z .

calculé la fonction d'autocorrélation temporelle $\tilde{\rho}(t)$ en $\varepsilon \sim 0$ pour Br1-Fr. Nous vérifions que, excepté à très petit temps, $\tilde{\rho}(t)$ a un comportement exponentiel. Cette analogie au système magnétique permet la définition et la mesure du temps d'autocorrélation τ (voir figure 3.4(a)).

τ diverge effectivement de façon algébrique en fonction de la taille : $\tau \propto L^z$, et l'exposant dynamique vaut $z = 2,65(15)$. Le nombre de mesures indépendantes, comme défini par l'équation D.3, pour les tailles $L \in [16; 64]$ est de l'ordre 5000 ; pour $L \in [96; 144]$, il est environ de 200 ; pour $L = 200$ et 256, il est inférieur à 50. Nous n'avons pas effectué l'ensemble de ces mesures dans le cas de Br1-F0. Mais nous avons comparé quelques temps d'autocorrélation pour les plus petites tailles ($L = 8, 16$) à ceux de Br1-Fr. Ils sont du même ordre de grandeur. Nous en déduisons le nombre de mesures indépendantes : environ une centaine pour $L \leq 64$, une cinquantaine pour les plus grandes tailles. En ce qui concerne l'étude des effets de taille, pour le modèle Br1-Fr, nous avons choisis douze tailles réparties entre 16 et 256. Pour Br1-F0, nous en avons six, depuis $L = 8$, jusqu'à 128.

N'ayant ni une bonne qualité statistique des données, ni suffisamment de mesures, nous ne pouvons déterminer directement le point critique et les corrections aux effets de taille pour ce dernier modèle. Nous allons donc supposer que les deux modèles appartiennent à la même classe d'universalité, déterminer le point critique et le cumulante de Binder universel U^* d'après Br1-Fr, puis nous servir de

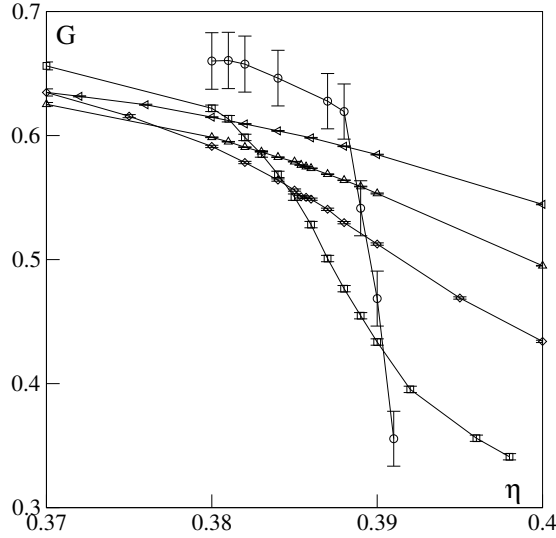


FIG. 3.5 – Effets de taille sur le cumulante de Binder du modèle Br1-Fr. Les tailles 16, 32, 64, 128 et 256 ont été représentées (de haut en bas à fort bruit).

la mesure de U^* pour fixer le point critique de Br1-F0. Enfin, nous testons cette hypothèse par la comparaison des exposants de chacun des modèles.

Sur le graphique 3.5, nous pouvons observer les effets de taille finie sur le cumulante de Binder G de Br1-Fr. En observant les intersections de ces courbes sur les plus grandes tailles, par exemple entre les courbes calculées à $L = 128$ et à $L = 256$, nous en déduisons le voisinage possible du point critique $\eta_c \sim 0,39$. Nous avons représenté ensuite les valeurs de G à différents bruits η en fonction de la taille L sur la figure 3.6(a). Nous observons sans ambiguïté possible de fortes corrélations écartant le cumulante de Binder de sa valeur universelle U^* . Il est important de noter que, dans la phase désordonnée $G(\eta \gg \eta_c) \sim 0,34$ et que cette valeur est atteinte, pour un système de taille $L = 256$, à $\eta = 0,3906$. Il s'agit donc d'une borne supérieure pour la valeur du bruit critique. Considérant la convergence des courbes à $\eta = 0,3902$ et à $\eta = 0,3904$, il est raisonnable de penser que $\eta_c \sim 0,3903$.

Cependant, aucune mesure de correction algébrique comme montré dans l'étude des effets de taille n'a été possible, c'est-à-dire qu'aucun ajustement suivant l'équation B.13 ne s'est révélé raisonnable. Cela peut provenir de la pauvre qualité statistique des données obtenues pour les plus grands systèmes. Nous pouvons imaginer que les termes correctifs d'ordre plus élevé ne sont pas négligeables et qu'il faille faire intervenir d'autres exposants non pertinents. Les tailles les plus petites sont peut-être aussi inférieures à la taille limite au-dessus de laquelle l'équation B.13 est vérifiée.

En prenant la valeur du bruit critique $\eta_c = 0,3903(3)$, nous mesurons le cu-

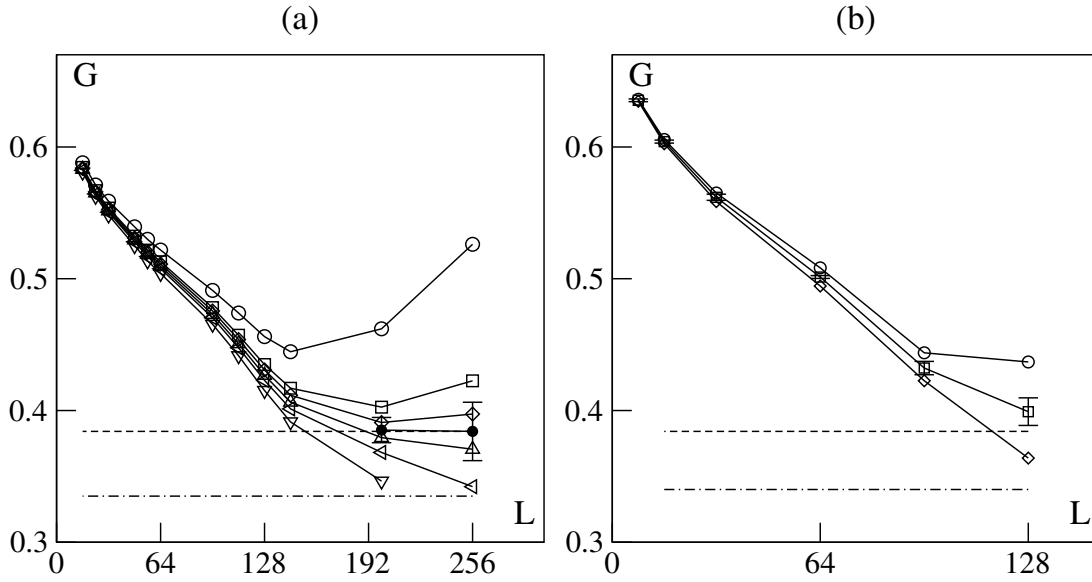


FIG. 3.6 – Détermination du point critique des modèles Br1. (a) : Br1-Fr, pour les bruits $\eta = 0,3890, 0,3900, 0,3902, 0,3903, 0,3904, 0,3906, 0,3910$, de haut en bas (b) : Br1-F0, pour les bruits $\eta = 0,471, 0,472, 0,473$. La ligne discontinue représente la valeur possible du cumulante critique $U^* \sim 0,384$, le trait mixte figure la valeur du cumulante dans la phase désordonnée. Les barres d'erreur portées sur ces figures sont celles aux points critiques estimés.

mulant de Binder $U^* = 0,385(20)$ d'après Br1-Fr. Pour déterminer le bruit critique de Br1-F0, nous considérons la convergence du cumulante de Binder vers U^* (fig. 3.6(b)). Ici non plus, aucune convergence algébrique n'a été clairement établie. Nous pouvons cependant définir un voisinage du point critique : $\eta_c \in]0,471; 0,473[$. Dans la suite, nous supposons $\eta_c = 0,472$, et nous ne nous référons qu'au bruit réduit $\varepsilon = 1 - \frac{\eta}{\eta_c}$.

Nous n'avons plus qu'à mesurer les exposants définis par les équations B.7-B.10. Pour cela, nous traçons les données en échelles logarithmiques et nous en effectuons un ajustement linéaire. Toute droite passant par les barres d'erreur des graphiques est jugée acceptable. Ceci nous permet de définir des erreurs de mesure des différents exposants. Nous avons aussi pris en compte l'erreur sur la détermination du point critique en effectuant la même analyse pour des points de transition compris dans les intervalles de confiance définis plus haut.

En ce qui concerne le paramètre d'ordre, la figure 3.7(a) montre que les deux modèles ont des exposants compatibles. Pour Br1-Fr, $\frac{\beta}{\nu} = 0,44(4)$, pour Br1-F0, $\frac{\beta}{\nu} = 0,45(4)$.

Les courbes des effets de taille suivantes, concernant les fluctuations 3.7(b), les dérivées du cumulante de Binder 3.8(a) et les dérivées logarithmiques du para-

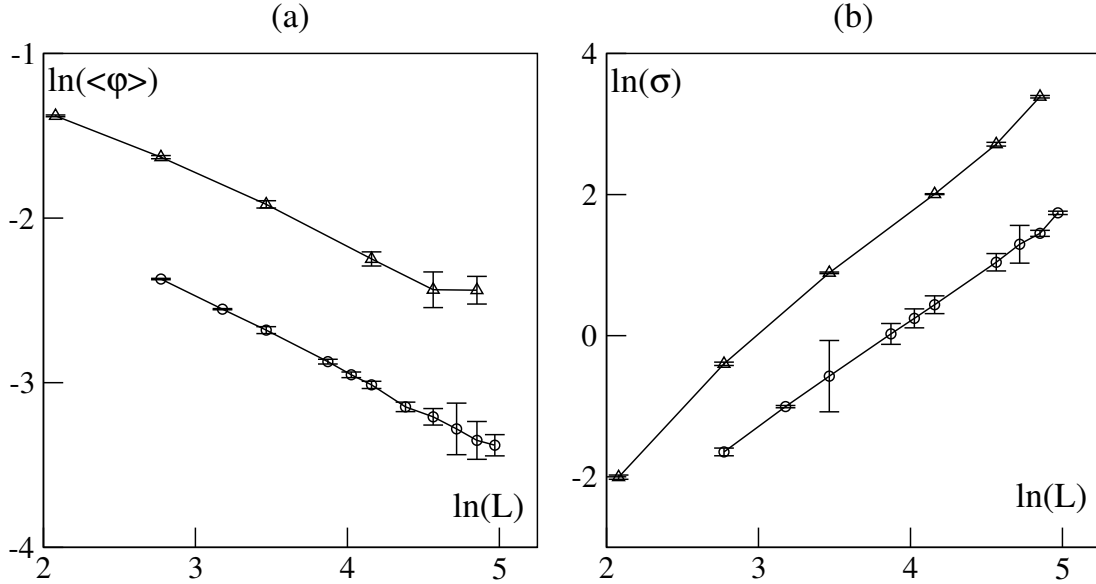


FIG. 3.7 – Effets de taille aux points critiques des modèles Br1, détermination de β/ν et γ/ν . (a) : paramètre d'ordre, (b) : fluctuations du paramètre d'ordre, en échelle logarithmique, pour les modèles Br1-Fr (\circ), Br1-F0 (\triangle).

mètre d'ordre 3.8(b) ne permettent de conclure de manière aussi catégorique et les mesures des exposants qu'elles procurent sont plus entachées d'erreurs. Quant à la dérivée des fluctuations, aucune mesure n'est raisonnablement possible. Il y a deux raisons principales à ces difficultés. D'abord, il y a les erreurs statistiques. Nous avons vu que la susceptibilité magnétique souffrait d'un manque d'auto-moyennage, il est donc difficile de l'obtenir numériquement sur de grands systèmes et nous pensons qu'il en est de même dans ces modèles hors d'équilibre. Il y a d'autre part les erreurs produites lors des ajustements polynômiaux. La pente du cumulante de Binder et de la susceptibilité divergent avec la taille au voisinage du point critique. Il est donc d'autant plus difficile de l'ajuster que le système est grand. Nous obtenons l'exposant des fluctuations, pour le modèle Br1-Fr, $\frac{\gamma}{\nu} = 1,40(15)$, pour Br1-F0, $\frac{\gamma}{\nu} = 1,70(20)$, ce qui reste compatible.

Nous avons deux mesures de $\frac{1}{\nu}$ par les figures 3.8(a) et (b). Étudions d'abord les données concernant Br1-Fr. Par la dérivée du cumulante de Binder, si nous considérons toutes les tailles, nous obtenons $\frac{1}{\nu} = 1,2(4)$. Toutefois, si nous nous restreignons à $L \in [24; 96]$, nous mesurons $0,9(1)$. La mesure d'après la dérivée logarithmique du paramètre d'ordre fournit la valeur $1,0(2)$. Ces deux mesures sont cohérentes entre elles. Le modèle Br1-F0 donne des résultats apparemment plus nets et plus cohérents : nous mesurons respectivement $1,04(4)$ et $1,00(7)$. La facilité avec laquelle ces deux derniers résultats ont été obtenus trouve certainement sa source dans la valeur de ν_0 et le plus grand mélange hydrodynamique

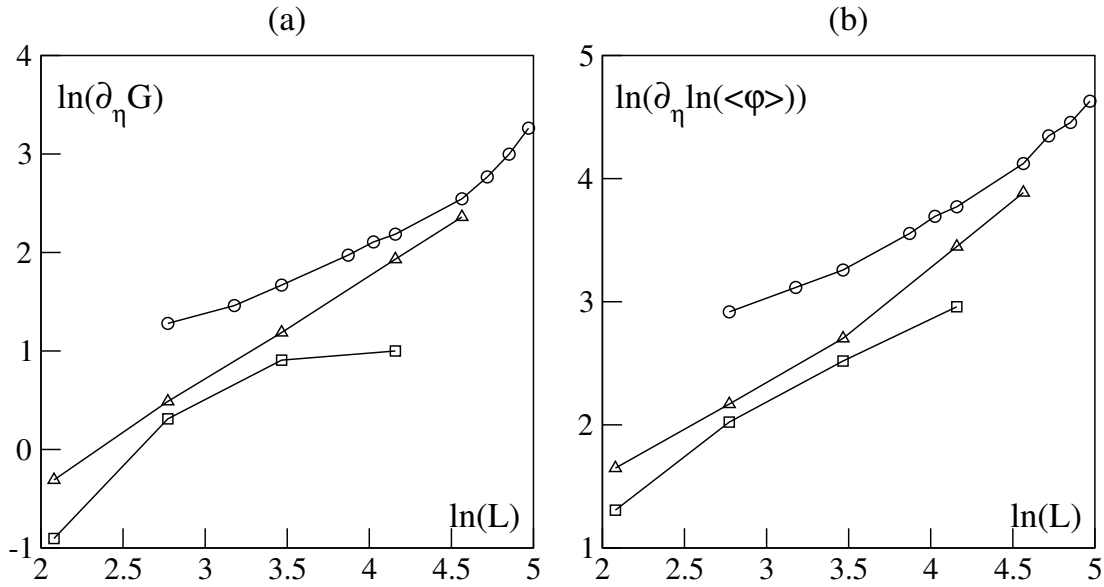


FIG. 3.8 – Effets de taille aux points critiques des modèles Br1, détermination de $1/\nu$. (a) : dérivée du cumulante de Binder, (b) : dérivée logarithmique du paramètre d'ordre, en échelle logarithmique, pour les modèles Br1-Fr (o) et Br1-F0 (Δ) et Br1-F0 (\square) pour $v_0 = 0,3$.

présent dans le second modèle. Pour tester cette hypothèse, nous avons réalisé des mesures à une vitesse inférieure : $v_0 = 0,3$. Effectivement, les courbes obtenues sont de moindre qualité et il peut être hasardeux de mesurer l'exposant $1/\nu$. Sur la figure 3.8(b), nous mesurons $1/\nu \sim 0,7$, ce qui est comparable aux résultats antérieurs, voir la table 1.2.

Enfin, nous pouvons effectuer des mesures directes de β et γ d'après les variations des grandeurs thermodynamiques en fonction du bruit réduit comme écrit dans les équations A.5 et A.6. Nous observons effectivement les lois d'échelles attendues et mesurons les exposants sur la figure 3.9. Dans Br1-Fr (fig. 3.9(a) et (b)), $\beta = 0,40(2)$ et $\gamma = 1,38(5)$; dans Br1-F0 (fig. 3.9 (c) et (d)), $\beta = 0,34(6)$ et $\gamma = 1,40(7)$. Les fluctuations sont symétriques de part et d'autre du point critique, ce qui signifie que nous n'avons besoin que d'un seul exposant γ pour caractériser la discontinuité. À nouveau et pour les mêmes raisons, les fluctuations du paramètre d'ordre sont les plus difficiles à mesurer. Mais, d'un modèle à l'autre, les exposants ont des valeurs compatibles avec l'hypothèse d'universalité.

Nous avons également essayé de mesurer directement l'exposant ν de la longueur d'autocorrélation ξ . En remplaçant dans l'équation B.1 le produit scalaire des spins par celui des vitesses de chacun des animoïdes, nous obtenons une fonction de corrélation spatiale, en coordonnées lagrangiennes, $\langle \vec{v}_i^t \cdot \vec{v}_j^t \rangle (|\vec{r}_{ij}|)$ représentée sur la figure 3.10(a) pour le modèle Br1-Fr. Nous y observons une anti-corrélation

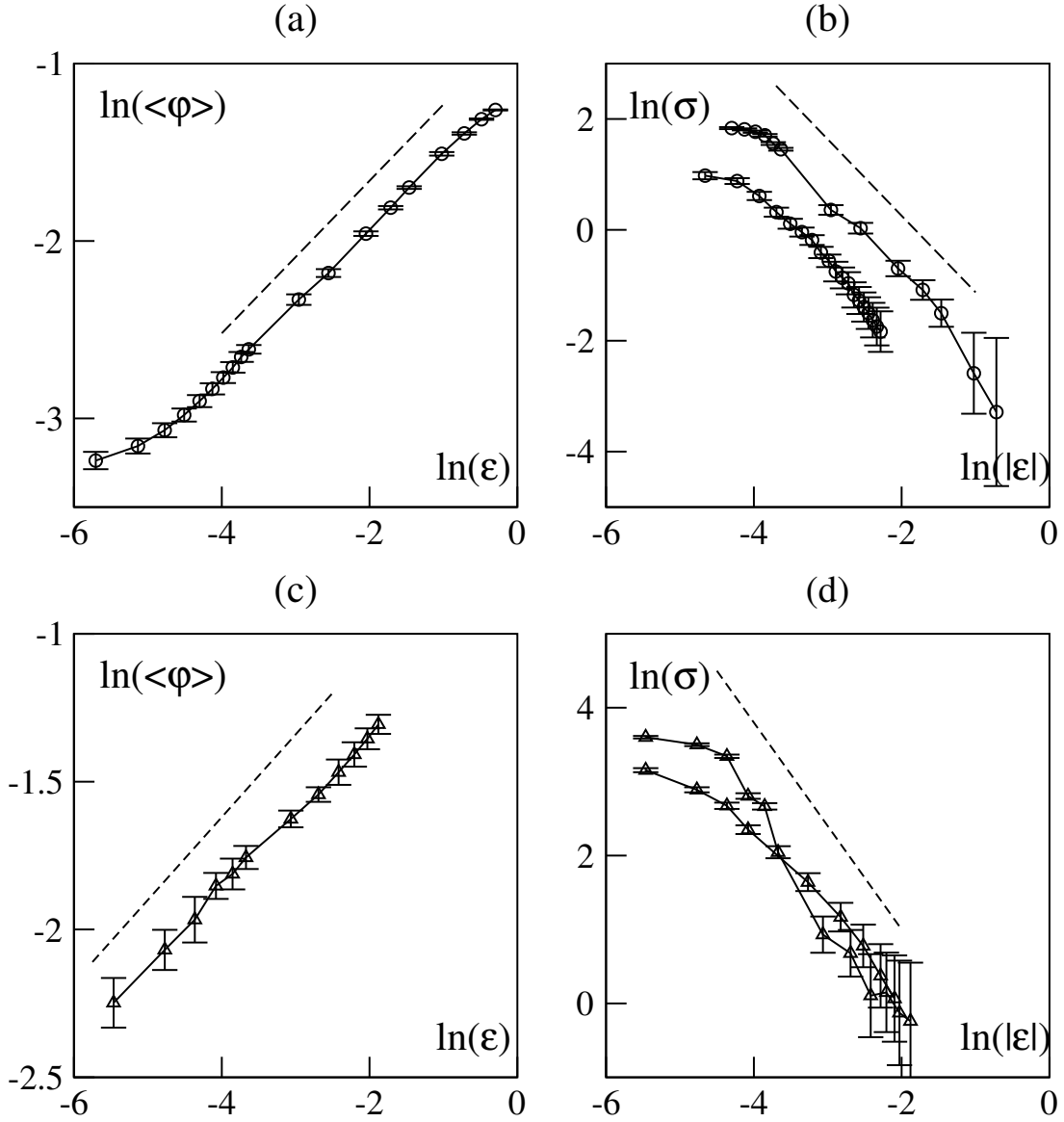


FIG. 3.9 – Détermination des exposants β et γ au point critique des modèles Br1. Les courbes (a) et (b) concernent le modèle avec force de répulsion Br1-Fr, les courbes (c) et (d) présentent les phénomènes critiques du modèle Br1-F0. (a) et (c) : paramètre d'ordre ; (b) et (d) : fluctuations du paramètre d'ordre, en échelle logarithmique en fonction de la température réduite. Les deux courbes de chaque figure (b) et (d) correspondent, de haut en bas, à $\varepsilon < 0$ et à $\varepsilon > 0$. Les traits discontinus correspondent à la mesure des exposants. $L = 128$.

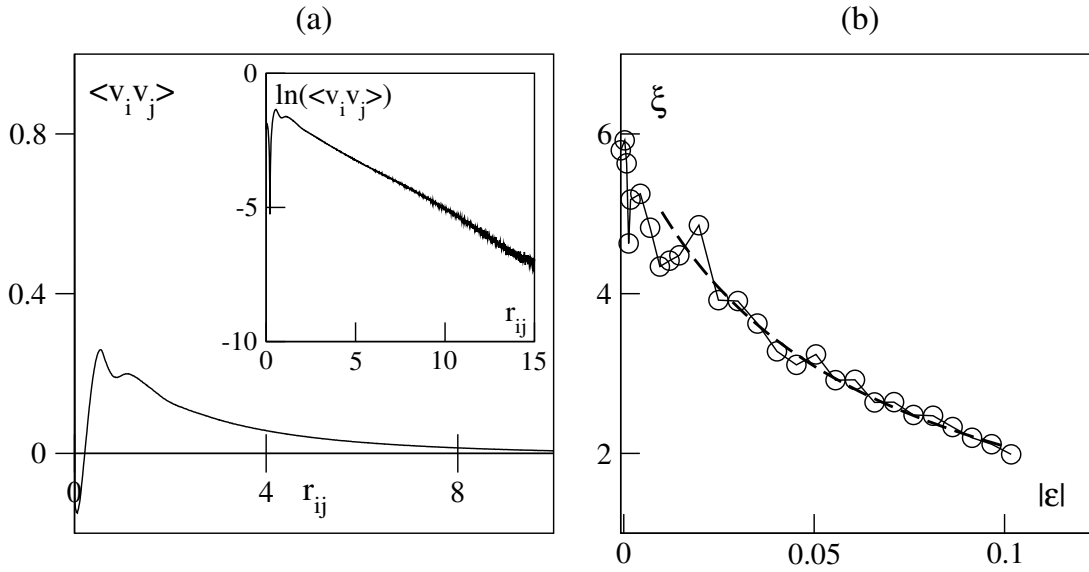


FIG. 3.10 – Détermination de l'exposant ν du modèle Br1-Fr. (a) : corrélation spatiale des vitesses en échelle linéaire et semi-logarithmique (dans l'encart) au point $\varepsilon = 0,05$, (b) : longueur de corrélation en fonction de la température réduite, $L = 128$. Le trait discontinu gras est un ajustement suivant l'inverse de la taille.

à courte distance, signature de la force de répulsion entre chaque particule. Puis il y a de fortes variations provenant de la distance R_0 de coupure des interactions. Le comportement devient ensuite exponentiel, comme son analogue magnétique, ce qui nous permet la définition de la distance de corrélation comme dans l'équation B.1. La figure 3.10(b) représente les variations de cette distance en fonction du bruit réduit. Elles sont cohérentes avec un comportement en $1/|\varepsilon|$ que nous attendrions d'après les mesures précédemment réalisées de $\frac{1}{\nu}$. Cependant, la taille du système utilisé ($L = 128$) semble trop petite pour observer le comportement à petite valeur de ε . Ainsi la divergence observée ne permet pas de mesures plus précises.

La théorie des phénomènes critiques fixe le nombre d'exposants indépendants à deux, les autres s'en déduisant comme des combinaisons linéaires de ces deux-là, les équations A.11 à A.13 en sont des illustrations. Nous avons réalisé des mesures croisées de β , γ et ν . Suivant cette même théorie, ces exposants sont reliés par l'équation B.15. Pour le modèle Br1-Fr, les valeurs mesurées fournissent : $2\beta + \gamma = 2,18(9)$ et $d\nu = 2,0(4)$; pour le modèle Br1-F0 : $2\beta + \gamma = 2,08(19)$ et $d\nu = 2,00(14)$. En faisant intervenir les rapports d'exposants, nous pouvons aussi écrire cette relation d'échelle sous la forme :

$$2\frac{\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = d. \quad (3.7)$$

En utilisant les mesures des rapports d'exposants, cette équation prend les va-

leurs numériques, dans le cas Br1-Fr : $2\frac{\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = 2,28(23)$, et, dans le cas Br1-F0 : $2\frac{\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = 2,60(28)$. Les trois premiers tests numériques de l'équation d'échelle sont satisfaisants. Le dernier l'est moins, mais il s'agit du cas où nous maîtrisons le moins bien les erreurs. Nous pouvons donc en conclure que les relations d'échelle B.15 et 3.7 sont vérifiées.

À partir de cette même équation, nous pouvons raisonner encore d'une manière différente. Notre but est de déterminer la valeur du jeu d'exposants de la classe d'universalité des modèles de type Br1, classe à laquelle appartiennent les modèles Br1-Fr et Br1-F0, au vu des différents tests réalisés précédemment. Tout d'abord, nous pouvons fixer $\nu = 1$ sans faire une hypothèse hardie. D'autre part, en tenant compte des diverses erreurs, $\beta \in [0,32; 0,42]$ et $\gamma \in [1,33; 1,47]$. La borne inférieure de chacun des intervalles permet de réduire la borne supérieure de l'exposant complémentaire via la relation d'échelle. Ainsi, les intervalles deviennent : $\beta \in [0,32; 0,34]$ et $\gamma \in [1,33; 1,36]$. Un jeu d'exposants convenant à l'équation diophantienne B.15 peut être :

$$\beta = \frac{1}{3}, \quad (3.8)$$

$$\gamma = \frac{4}{3}, \quad (3.9)$$

$$\nu = 1. \quad (3.10)$$

L'exercice de trouver des rationnels en guise d'exposants critiques est amusant. Sur un système bi-dimensionnel ce n'est pas qu'un exercice académique, puisque l'analyse par la théorie de l'invariance conforme a montré que les exposants critiques dans ces cas sont effectivement des rationnels. Sur ce sujet, on pourra lire la revue de J. L. Cardy dans [30] et l'article original [19]. Il existe un autre argument en faveur de ce choix. Les valeurs obtenues pour les exposants sont *systématiquement* dans la fourchette basse de nos mesures.

Reconsidérons les effets de taille tels que définis dans l'Annexe B. Nous avons vu que l'énergie libre, au point critique, peut s'écrire sous une forme homogène, dépendant d'une infinité de champs, certains pertinents, d'autres non. Grâce à cette équation B.4, nous dérivons la forme des premiers termes correctifs aux lois de puissance du paramètre d'ordre et de ses fluctuations en fonction de la taille en $\varepsilon = 0$:

$$\langle \varphi \rangle \sim L^{-\frac{\beta}{\nu}} \left(a + bL^{-\frac{\alpha}{\nu}} \right), \quad (3.11)$$

$$\sigma \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}} \left(a' + b'L^{-\frac{\alpha}{\nu}} \right), \quad (3.12)$$

où a , b , a' et b' sont des constantes.

Pour visualiser ces corrections, nous avons tracé $\langle \varphi \rangle . L^{\frac{\beta}{\nu}}$ et $\sigma . L^{-\frac{\gamma}{\nu}}$ en fonction de la taille sur la figure 3.11. Les courbes résultantes semblent converger

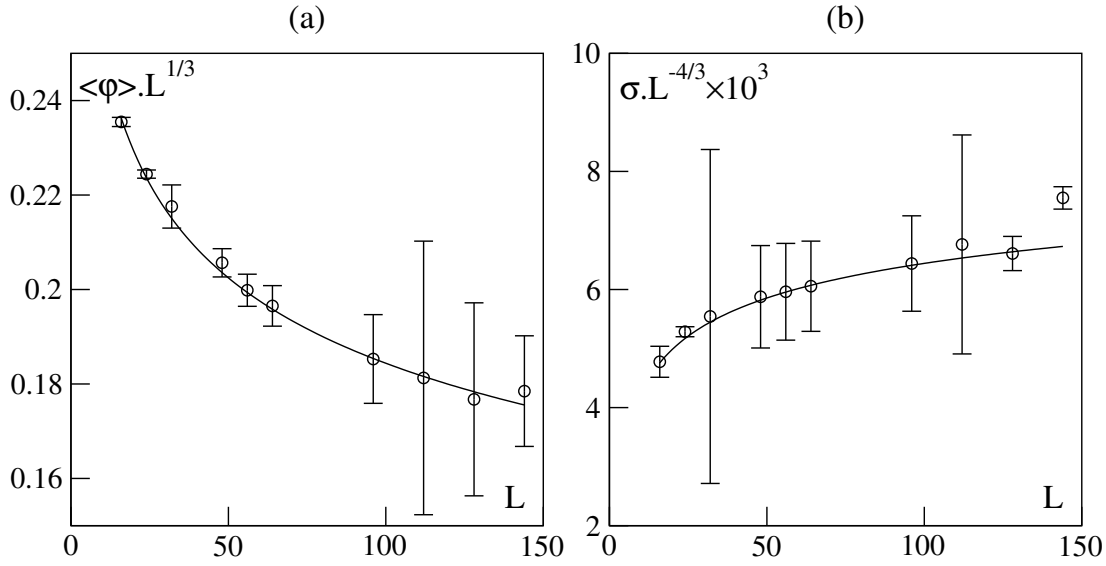


FIG. 3.11 – Corrections aux effets de taille finie dans le modèle Br1-Fr. En $\varepsilon = 0$, le trait continu est un ajustement des données avec $\frac{\omega}{\nu} = 0,14$: (a) : le paramètre d'ordre, (b) : les fluctuations du paramètre d'ordre, $L = 128$.

algébriquement et il est possible de les ajuster conformément aux équations 3.11 et 3.12. Nous trouvons un exposant semblable pour les deux grandeurs : $\frac{\omega}{\nu} \sim 0,14$. Cela peut être une heureuse coïncidence, car les mesures des termes correctifs sont, dans d'autres systèmes, très difficiles. Elles sont notamment sensibles à la précision de la détermination du point critique (pour exemple, voir la thèse de P. Marcq [60]). Pour lever ce doute, il faudrait améliorer les statistiques sur les deux plus grandes tailles et/ou effectuer d'autres mesures sur de plus grandes tailles. L'exposant des premières corrections ω/ν est petit devant $1/\nu$, ce qui signifie que ces corrections se font sentir même pour les grandes tailles. C'est typiquement ce qui est observé sur les figures 3.5 et 3.6 impliquant le cumulants de Binder.

Formellement, à partir des équations d'échelles A.11 et A.13, nous pouvons calculer les exposants Δ/β , reliant l'aimantation et le champ magnétique, et α , exposant de la chaleur spécifique :

$$\frac{\Delta}{\beta} = 5, \quad (3.13)$$

$$\alpha = 0. \quad (3.14)$$

La première valeur est surprenante vis-à-vis des études réalisées précédemment [25] (voir tab. 1.2). Cependant elle est d'un ordre de grandeur plus conforme à ce qui est observé dans les phénomènes critiques à l'équilibre. Par exemple, un système tridimensionnel de spins XY possède un exposant $\Delta/\beta \sim 4.78$ [18].

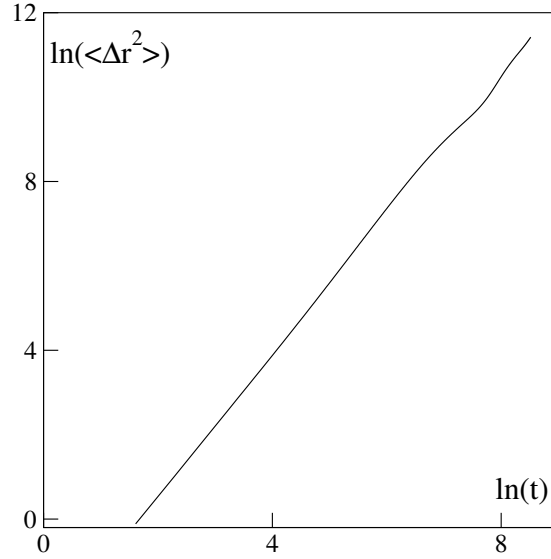


FIG. 3.12 – Diffusion au point critique du modèle Br1-Fr. $L = 512$, $\rho = 2$.

Le fait de considérer l'exposant α est plus sujet à caution. La chaleur spécifique est la dérivée de l'énergie par rapport au paramètre de contrôle à champ nul. Ici, il semble difficile de définir une énergie. Cependant, si nous ne considérons que le modèle Br1-F0 en taille infinie, dans la phase désordonnée, le terme d'interaction entre les individus est strictement nul, puis augmente continûment dans la phase ordonnée. Nous pouvons donc imaginer une énergie d'interaction moyenne dont la dérivée est discontinue au point critique. Cette discontinuité est habituellement traduite par un exposant nul.

Dans le paragraphe 2.3, nous avons vu que la diffusion au point critique est anormale et qu'elle suit une loi de puissance :

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle (t) \propto t^\mu, \quad (3.15)$$

où l'exposant μ de diffusion dépend des exposants critiques par la relation 2.30. Pour mesurer cet exposant et vérifier cette relation, nous nous sommes placés au point critique du modèle Br1-Fr, dans un système de grande taille $L = 512$ et nous avons enregistré la diffusion des animoïdes au cours du temps. Effectivement, nous vérifions sur la figure 3.12 que le comportement diffusif suit une loi d'échelle et nous mesurons $\mu = 1,66(6)$. En prenant les valeurs mesurées de l'exposant de diffusion μ et de l'exposant dynamique z , ainsi que la valeur rationnelle de $\beta/\nu = 1/3$ déterminée à partir des considérations sur les lois d'échelle, nous vérifions avec une bonne précision l'équation 2.30 :

$$\mu - 2 \left(1 - \frac{1}{z} \frac{\beta}{\nu} \right) = -0,09(7) \quad (3.16)$$

	$\frac{\beta}{\nu}$	$\frac{\gamma}{\nu}$	$\frac{1}{\nu_1}$	$\frac{1}{\nu_2}$	β	γ	ν	z	μ
Br1-Fr	0,44(4)	1,40(15)	1,2(4)	1,0(2)	0,40(2)	1,38(5)	~ 1	2,65(15)	1,66(6)
Br1-F0	0,45(4)	1,70(20)	1,04(4)	1,00(7)	0,34(6)	1,40(7)			
Br1	1/3	4/3	1	1	1/3	4/3	1		

TAB. 3.2 – Tableau récapitulatif des exposants critiques des modèles Br1. Les deux premières lignes sont les valeurs mesurées hors terme correctif. $\frac{1}{\nu_1}$ et $\frac{1}{\nu_2}$ sont respectivement les valeurs obtenues de l'étude de la dérivée du cumulante de Binder et de la dérivé logarithmique du paramètre d'ordre. La troisième ligne contient un jeu d'exposants compatibles avec les mesures après soustraction des premières corrections et avec les relations d'échelles.

Pour conclure, les modèles Br1 subissent une transition continue lorsque le bruit varie. Par un traitement identique à celui effectué sur un système à l'équilibre, nous avons pu nous soustraire des effets de taille finie. Ainsi, nous avons déterminé les points critiques et les exposants de deux modèles, rassemblés au sein de la table 3.2. Nous observons que, qu'elle que soit la force agissant sur les distances inter-particules, les quantités universelles, exposants et cumulante de Binder au point critique, sont conservées. Il est donc probable que nous ayons défini une classe d'universalité. Les mesures des exposants statiques ont été réalisées avec une précision jusqu'à présent inégalée. Quant à l'exposant dynamique, il s'agit de sa première mesure. C'est la première fois aussi qu'ont été observés et mesurés le comportement diffusif critique et l'exposant associé.

Nous nous sommes convaincus d'autre part que les effets du mélange hydrodynamique avaient été sous-estimés dans les précédentes études, et par la même les corrections aux lois d'échelle et le temps d'autocorrélation. La valeur de v_0 , si elle ne change que peu les courbes d'aimantation et de ses fluctuations en fonction du bruit, influe très fortement sur la détermination de l'exposant ν . En utilisant les relations d'échelle, nous avons pu déduire un jeu probable d'exposants. Des corrections aux effets de taille sont compatibles avec ces valeurs. Une question reste en suspens : les corrections sur le cumulante de Binder.

Enfin, les mesures des exposants critiques permettent de calculer l'exposant Δ/β . La valeur obtenue (tab. 3.2) est très différente de ce qui avait été mesuré précédemment (tab. 1.2). Ce désaccord remet en question les travaux réalisés sur l'application du théorème de fluctuation–dissipation dans le modèle de Vicsek. Ce théorème mériterait donc d'être testé à nouveau.

3.3.2 Bruit Br2

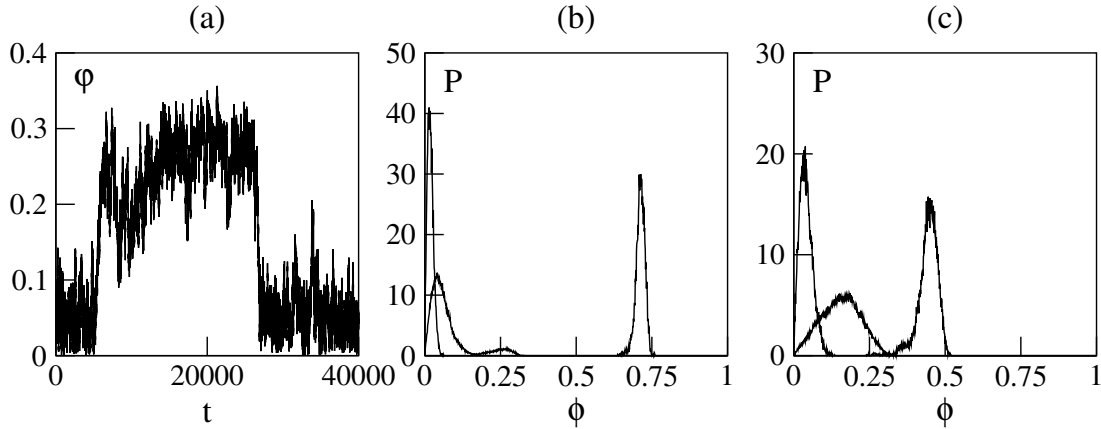


FIG. 3.13 – Coexistence de phases au point de transition des modèles Br2. Valeurs instantanées du paramètre d'ordre pour le modèle Br2 (a) et fonction de distribution des probabilités du paramètre d'ordre φ des modèles Br2 (b) et Br1 (c). Les bruits réduits utilisés sont $\varepsilon \sim 0,1, 0,0$ et $1,1$. $L = 64$

Concernant les modèles avec un bruit Br2, le premier élément à préciser est la nature de la transition. Nous avons vu en introduction à ces modèles que les grandeurs thermodynamiques ont un comportement très abrupt (fig. 3.2). De plus, la fonction de distribution des probabilités du paramètre d'ordre est bimodale au voisinage du point de transition. Les figures 3.13(b) et (c) comparent les bruits Br2 et Br1. Lors d'une transition continue, la fonction de distribution se déforme et change de moyenne continûment, mais reste monomodale (fig. 3.13(c)), contrairement à une transition du premier ordre. Si nous traçons le paramètre d'ordre de Br2 instantané au cours du temps (fig. 3.13(a)), nous remarquons deux valeurs autour desquelles il reste bloqué durant de longues périodes. Il y a donc coexistence des phases : nous sommes en présence d'une transition du premier ordre.

Contrairement aux systèmes magnétiques, nous n'avons pas observé de domaines spatiaux dans lesquels l'aimantation est bloquée. La coexistence est ici un phénomène temporel : il existe deux états de stabilités comparables qui sont alternativement visités au cours du temps. La conséquence immédiate est que nous pouvons éviter l'hystérèse, dès que le temps de simulation est grand devant le temps d'autocorrélation. Nous avons mesuré la fonction d'autocorrélation au point de transition ; la détermination de ce point en est discutée plus loin dans ce paragraphe. Nous observons sur la figure 3.14 (a) que la fonction d'autocorrélation décroît bien exponentiellement. Comme pour le modèle Br1-Fr, nous en déduisons une mesure du temps d'autocorrélation τ . Celle-ci est raisonnablement

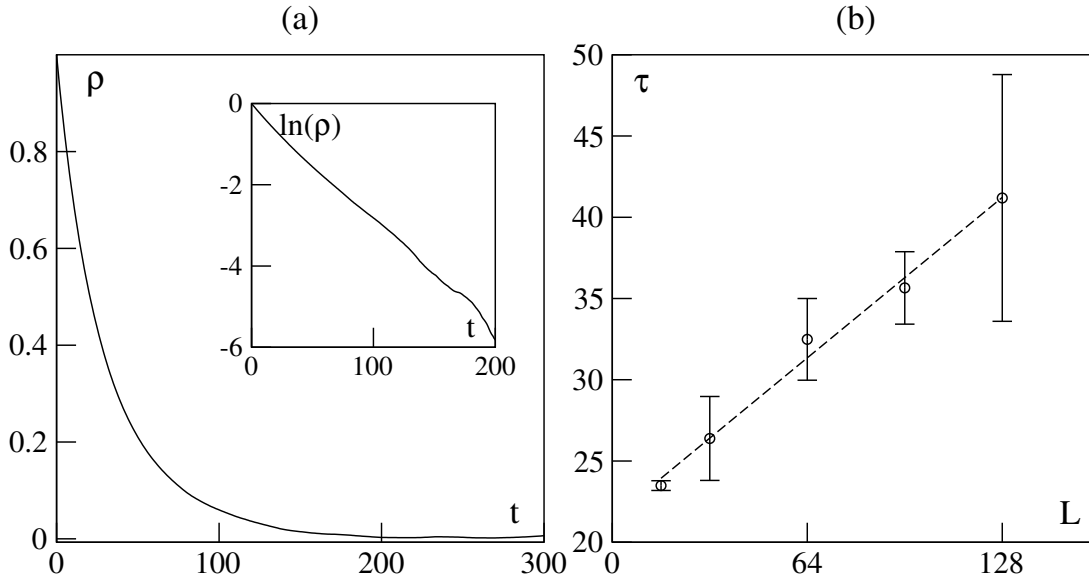


FIG. 3.14 – Temps d'autocorrélation du modèle Br2-Fr au point de transition. (a) fonction d'autocorrélation en échelle linéaire et en échelle semi-logarithmique (encart), $L=128$. (b) temps d'autocorrélation en fonction de la taille. La droite en trait discontinu est un ajustement linéaire des données numériques.

linéaire (fig. 3.14 (b)). Dans le cadre des systèmes à l'équilibre (voir Annexe C), le temps d'autocorrélation dépend de la tension de surface σ des états métastables :

$$\tau = L^{\frac{d}{2}} \exp(\sigma L^{d-1}), \text{ ici } d = 2. \quad (3.17)$$

Si τ est linéaire, alors cela signifie que la tension de surface est négligeable. C'est donc une confirmation de l'absence de domaine. Certes, cette conclusion est pertinente aux tailles étudiées. Mais si la tension de surface n'est pas rigoureusement nulle, le temps d'autocorrélation peut diverger. Il suffit que la taille du système vérifie :

$$L \gg \sigma^{1/(1-d)}. \quad (3.18)$$

Afin de clore cette discussion, il faudrait déterminer ou le temps de corrélation, ou la longueur de corrélation pour des systèmes de grandes tailles.

Pour contrôler la qualité de nos données, nous avons utilisé le calcul d'erreur présenté dans l'Annexe D. En général, les erreurs statistiques sont ici petites. Par exemple, sur la figure 3.15, elles sont de la taille des symboles. La plus grande source d'imprécision avec le bruit Br2 provient des erreurs systématiques et du nombre de mesures effectuées.

Nous avons ensuite étudié la transition sur le seul modèle Br2-Fr. Une comparaison préliminaire avec d'autres forces nous suggère que la transition est du

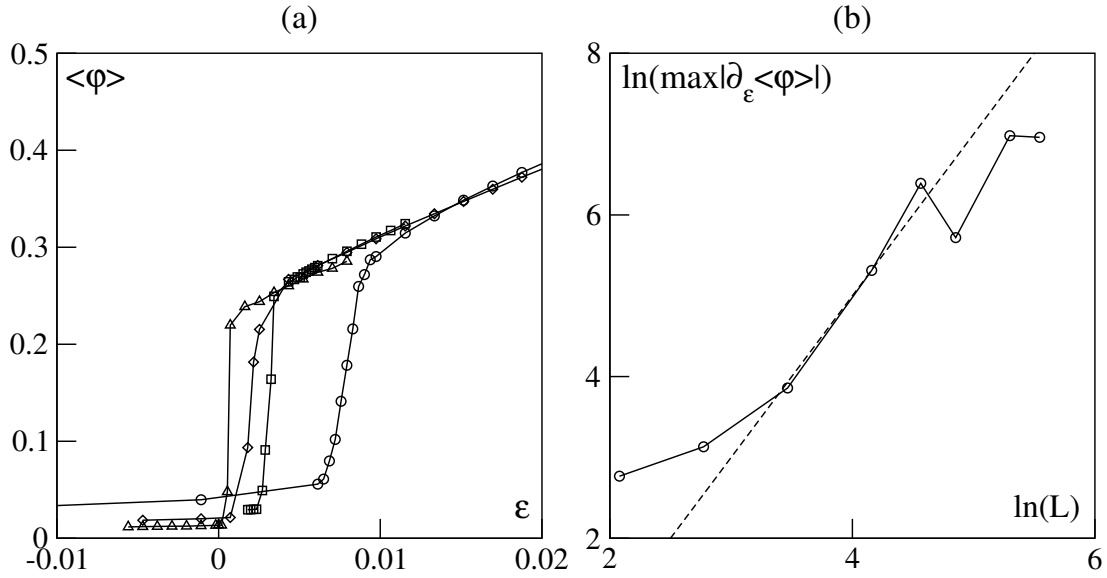


FIG. 3.15 – Effets de taille finie sur le paramètre d'ordre du modèle Br2-Fr. (a) $\langle \varphi \rangle$ en fonction du bruit réduit pour différentes tailles $L = 64$ (o), 96 (\square), 128 (\diamond) et 200 (\triangle), (b) maximum de la dérivée de $\langle \varphi \rangle$ en fonction de la taille en échelle logarithmique. Le trait discontinu correspond à une loi d'échelle d'exposant $d = 2$.

même type. Les résultats sur la transition continue et leur universalité ajoutent un argument dans ce sens.

Le second terme de l'équation C.4 développée par Borgs *et al* est la réponse linéaire du système au champ. Ici, le champ appliqué est le bruit. Nous observons aussi un régime linéaire du paramètre d'ordre, régime indépendant de la taille comme le suggère la figure 3.15(a).

Le terme suivant de cette même équation est une tangente hyperbolique dont l'argument dépend du volume du système, ce qui signifie que la pente de la courbe au point de transition croît comme L^d . De plus cette pente est maximale en ce point. Nos données n'ont pas la qualité requise pour une mesure précise de cette loi de puissance. Nous observons tout de même que le maximum de la dérivée du paramètre d'ordre croît avec la taille. Une loi de puissance en L^d est compatible avec nos données (figure 3.15(b)).

Sur les cinq déterminations possibles du point de transition présentées dans l'Annexe C, nous pouvons en tester trois. Soit φ_0 la valeur du paramètre d'ordre au point de transition :

$$\varphi_0 = \frac{1}{2} \left[\langle \varphi \rangle (\eta_t^+) + \langle \varphi \rangle (\eta_t^-) \right]. \quad (3.19)$$

D'après l'équation C.6, les bruits η_φ tels que $\langle \varphi \rangle (\eta_\varphi) = \varphi_0$ convergent expo-

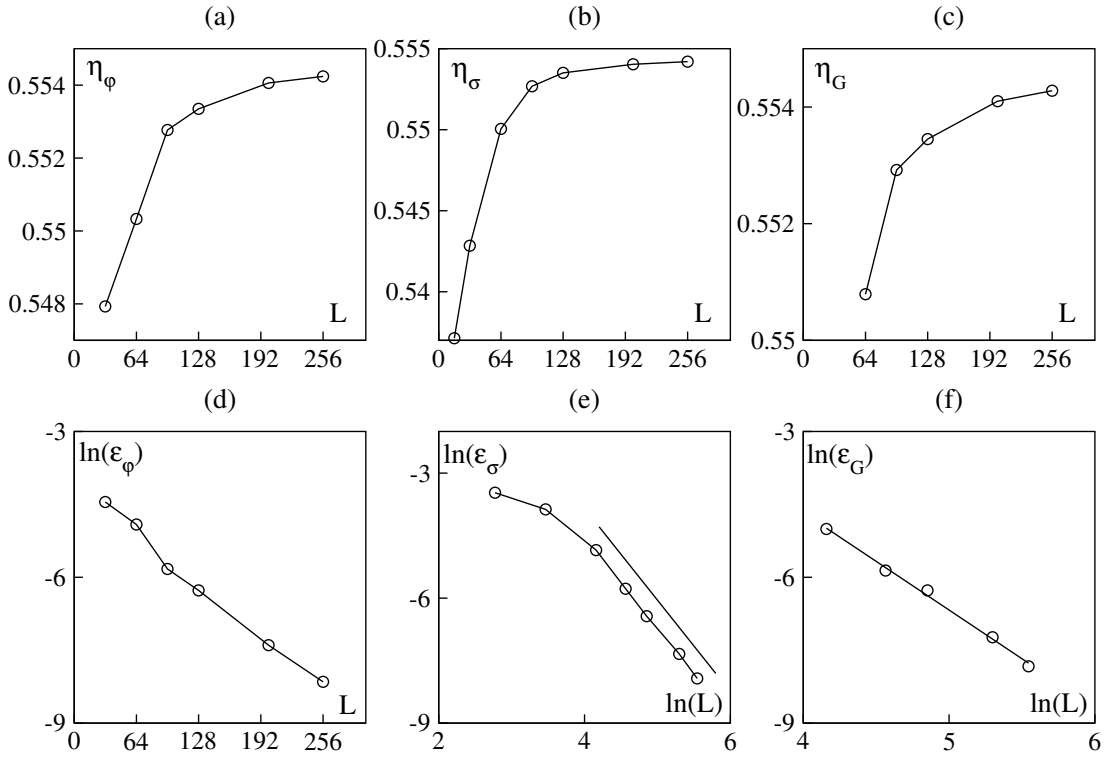


FIG. 3.16 – Effets de taille finie sur la détermination du point de transition du modèle Br2-Fr. De droite à gauche : η_φ obtenu d'après les courbes du paramètre d'ordre, η_σ d'après les minima de la susceptibilité, η_B d'après les minima du cumuland de Binder. La rangée du haut montre les données brutes, celle du bas présente les dépendance du bruit réduit en fonction de la taille. Les droites portées au figure (e) et (f) en sont les ajustements linéaires. Les exposants mesurés sont : (e) : 2,2(2), (f) : 1,95(5).

mentiellement avec la taille vers le point de transition η_t . La première difficulté réside en la mesure de φ_0 . Nous avons opté pour effectuer cette mesure sur la taille la plus grande que nous avons à notre disposition ($L = 256$). L'erreur en ce point est de l'ordre de L^{-d} , d'après ce que nous avons vu au sujet de la pente en η_t . Nous mesurons alors $\varphi_0 = 0,1163(3)$. Grâce à cette valeur, nous traçons les courbes 3.16(a) et (d). Nous réalisons un ajustement exponentiel sur la figure 3.16(a) et mesurons ainsi la valeur asymptotique $\eta_t = 0,5544$. La figure 3.16(d) représente la convergence du bruit réduit en fonction de la taille en échelle semi-logarithmique. La dépendance exponentielle est bien vérifiée pour $L \geq 64$.

Nous avons de même étudié les valeurs du bruit telles que les fluctuations du paramètre d'ordre, *i.e.* la susceptibilité si le théorème de fluctuation–dissipation est conservé, et le cumuland de Binder soient extrémaux, respectivement notées η_σ

et η_B . Nous vérifions que ces valeurs convergent avec la taille vers une valeur compatible avec notre précédente mesure. Nous mesurons respectivement $\eta_\sigma \rightarrow 0,5543$ et $\eta_B \rightarrow 0,5545$ (figures 3.16(b) et (c)); nous admettons $\eta_t = 0,5544(1)$. Si les mesures effectuées d'après le cumulante de Binder suivent la décroissance proportionnelle à l'inverse du volume du système prédite dans le cadre des ferromagnétiques à l'équilibre (fig. 3.16(f)), la conclusion est moins évidente en ce qui concerne les valeurs tirées de l'étude des fluctuations du paramètre d'ordre. Certes, sur la figure 3.16(e) nous observons une loi de puissance, mais l'exposant est proche de $d = 2$.

Or, l'étude de Borgs *et al* prédit un exposant égal à $2d$, dans le cas diphasique. D'où provient un tel écart entre les mesures et le cadre théorique? Bien sûr, nous ne sommes pas à proprement parler dans le champ d'application des travaux [14]. Cependant, les observations précédentes concordent avec la théorie. Nous pouvons nous demander alors s'il existe une explication permettant à cette théorie de rendre compte de chacune des mesures.

Il est peu probable que nous fassions une erreur de mesure de l'exposant à cause d'une imprécision sur le point critique : nous en avons trois mesures indépendantes égales à 0,02% près. Ensuite, il ne semble pas qu'il y ait de corrections supplémentaires intervenant sur les mesures dues au paramètre d'ordre ou au cumulante de Binder, dès que $L \geq 64$. Cette limite inférieure semble d'ailleurs la même qu'elle que soit la méthode utilisée (voir les figures 3.16(d), (e) et (f)). Si une erreur de mesure du simple au double semble exclue, qu'elle est la raison de cette différence avec la théorie à l'équilibre?

Remarquons que, dans le même article [14], sont présentés les résultats concernant les transitions vers les systèmes à deux phases, ou plus. Toutes les dépendances en fonction de la taille sont identiques quel que soit le nombre de phases au point de coexistence, toutes sauf celle portant sur la susceptibilité. Lorsqu'il y a au moins trois phases en présence, $|\eta_\sigma(L) - \eta_t| \sim L^{-d}$. Dans nos modèles, nous avons fait une distinction entre une phase désordonnée, dans laquelle chaque particule suit une marche au hasard, et une phase ordonnée, dans laquelle tous les individus se dirigent dans la même direction, quelle qu'elle soit puisqu'elle est aléatoire. Cependant, au point de coexistence, nous pouvons imaginer que chacune des directions possibles entre mutuellement en compétition. Il n'y aurait donc pas deux phases possibles, mais une infinité. La levée de cette dégénérescence permettrait d'appliquer à nouveau les résultats des systèmes à l'équilibre.

En conclusion, les modèles Br2 possèdent une transition de phase du premier ordre en variant l'intensité du bruit. Les résultats démontrés par C. Borgs *et al* [14] pour les effets de taille des transitions asymétriques, à un nombre arbitraire de phases à l'équilibre, s'appliquent étonnamment bien à notre cas hors d'équilibre. Une zone d'ombre reste à lever concernant la position du maximum de la

susceptibilié.

3.4 Conclusions et perspectives

Les modèles Br1 et Br2 donnent lieu à deux comportements possibles : soit chaque individu ignore en grande partie ces voisins et se déplace aléatoirement, soit il y a un mouvement d'ensemble des animoïdes. Le passage d'un cas à l'autre possède toutes les propriétés des transitions de phase à l'équilibre.

Pour le modèle Br1, la transition est du second ordre. Nous avons pu mesurer le point critique, les exposants critiques et l'exposant dynamique (voir table 3.2). Puis nous avons vérifié les lois d'échelle. Nous avons constaté l'identité des exposants critiques sur deux modèles possédant des lois microscopiques différentes, ce qui va dans le sens d'une universalité des phénomènes. Nos résultats sont sensiblement différents de ceux obtenus dans le passé par d'autres équipes [92, 25] , mais nous pensons que les temps de corrélation et les corrections aux lois d'échelle y avaient été sous-estimés.

Le modèle Br2 possède une transition du premier ordre. Ici aussi, tous les résultats sont similaires à ceux d'une transition classique : régime linéaire, nature des discontinuités, convergence exponentielle des différentes définitions des points de transition...

On peut donc remettre en cause l'intuition selon laquelle le théorème de fluctuation–dissipation ne serait pas valable (voir Chap. 1), et penser plutôt qu'il s'applique. Nous avons réalisé une étude préliminaire du théorème de fluctuation–dissipation généralisé, dont nous donnons un énoncé dans l'Annexe A.

D'abord nous définissons le champ \vec{h} respectivement pour les modèles Br1-Fr et Br2-Fr :

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\sum_{j \sim i} (\beta_v \vec{v}_j^t + \beta_f \vec{f}_{ij}^t) + \mathcal{N}_i^t \vec{h} \right] + \eta \xi_i^t, \quad (3.20)$$

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\sum_{j \sim i} (\vec{v}_j^t + \beta_f \vec{f}_{ij}^t) + \mathcal{N}_i^t \vec{h} + \mathcal{N}_i^t \eta \vec{u}_i^t \right], \quad (3.21)$$

où \mathcal{N}_i^t est le nombre de voisins du i -ème animoïdes à l'instant t . Puis nous définissons la réponse du système à chaque instant à partir du moment t_0 auquel le système est soumis au champ \vec{h} :

$$\chi_{xx}(t - t_0) = \frac{\langle \varphi_x(t) - \varphi_x(t_0) \rangle_{t_0}}{h_x}, \quad (3.22)$$

et la corrélation temporelle :

$$C_{xx}(t - t_0) = \langle \varphi_x(t_0) \varphi_x(t) \rangle - \langle \varphi_x(t_0) \rangle_{t_0}^2, \quad (3.23)$$

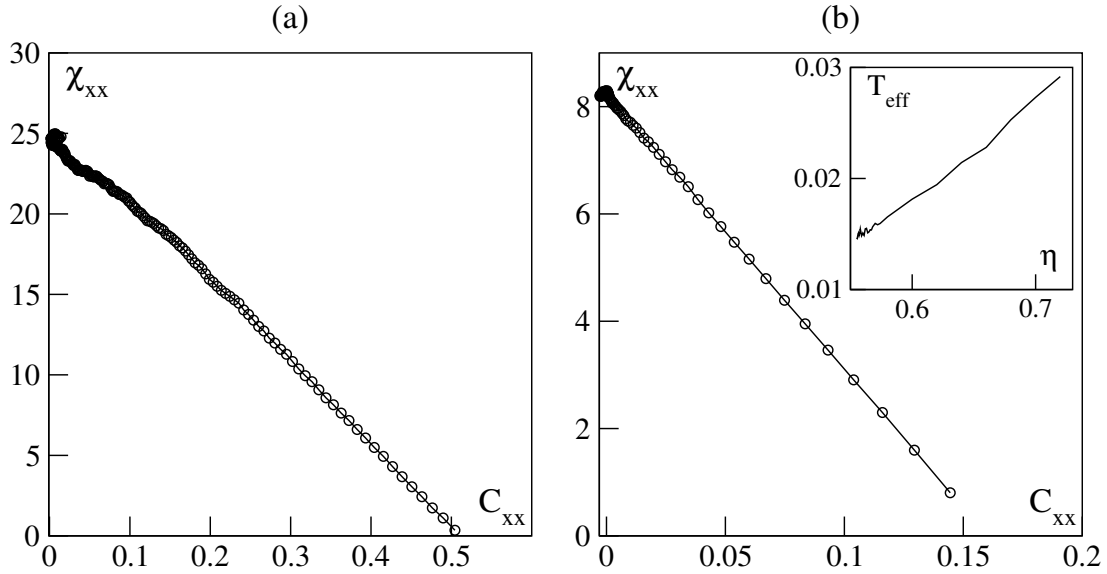


FIG. 3.17 – Théorème de fluctuation–dissipation généralisé aux modèles Br1-Fr et Br2-Fr. (a) : modèle Br1 pour un bruit $\eta = 0,44$ (un bruit réduit $\varepsilon \sim -0,13$) et un champ $h = 0,010$. (b) : modèle Br2 pour un bruit $\eta = 0,62$ (un bruit réduit $\varepsilon \sim -0,13$) et un champ $h = 0,005$. En encart : mesure de la température effective en fonction du bruit pour le modèle Br2-Fr avec un champ $h = 0,005$. Le système utilisé a une taille $L = 128$ et une densité $\rho = 2$.

où nous avons utilisé la définition vectorielle du paramètre d'ordre : $\vec{\varphi} = \langle \vec{v}_i \rangle / v_0$ et l'indice x désigne la composante selon la direction du champ. Avant que le système soit soumis à l'influence du champ, il est dans une phase désordonnée, c'est-à-dire $\varepsilon < 0$.

Alors d'une part, nous trouvons dans chacun des modèles un régime de champ tel que la réponse est linéaire ; d'autre part, sur la figure 3.17, les courbes de la réponse en fonction de la corrélation sont effectivement linéaires. Cela signifie que le théorème est vérifié et qu'il est possible de définir une température effective. Nous en montrons une mesure préliminaire sur la figure 3.17 (b). Il faudrait affiner l'étude : diminuer les erreurs, regarder ce qui se passe dans la phase ordonnée.

Ce résultat, même partiel, indique que l'exposant γ mesuré sur les fluctuations du paramètre d'ordre pour le modèle Br1 est aussi celui de la divergence de la susceptibilité. Nous aurions ainsi caractérisé entièrement les transitions.

4

Expérience de X.-L. Wu et A. Libchaber

Sommaire

4.1	Dispositif expérimental	65
4.2	Mesures et observations	67
4.3	Discussion	69

L'expérience que nous allons maintenant décrire a été réalisée par messieurs X.-L. Wu et A. Libchaber [99]. La problématique posée est celle du mélange de nutriments passifs au sein d'un milieu biologique. Par exemple, si nous considérons du phytoplancton confiné dans une zone particulière de l'espace, sur la surface de l'eau, alors nous savons que celui-ci va diffuser. Imaginons maintenant qu'une grande quantité de bactéries est en contact avec cette zone, nous voudrions savoir quel sera l'impact du mouvement incessant des bactéries sur la diffusion du phytoplancton. Pour le mesurer, des traceurs passifs ont été placés dans un bain de bactéries et leur diffusion a été étudiée.

La présentation de cette expérience introduit le chapitre 5 dédié à la modélisation des comportements expérimentaux.

4.1 Dispositif expérimental

Pour faciliter les mesures, l'expérience a été réalisée dans le plan. Ainsi les traceurs ont été plongés dans un film de savon. Un film a l'avantage, sur un système biphasique, de diminuer les pertes par dissipation hydrodynamique, la viscosité de l'air étant une centaine de fois inférieure à celle du milieu étudié. Pour stabiliser le film, un surfactant non ionique est dilué à la solution. Diverses concentrations de savon, de part et d'autre de la concentration micellaire critique, ont été testées afin d'observer d'éventuels effets sur le milieu actif et de s'en affranchir. Le film est placé sous une atmosphère saturée d'eau pour éviter son

dessèchement. Le dispositif expérimental est conservé dans une cuve. Le fait de placer l'expérience dans une cuve permet aussi de la protéger des mouvements de l'air ambiant. Cette cuve est carrée et son côté mesure 0,4cm. L'épaisseur du film est de la taille des traceurs, les expérimentateurs s'en sont assurés en changeant la focale d'un microscope de telle manière à faire le point sur l'interface du film et sur un traceur. La diffusion des traceurs est donc bien bi-dimensionnelle.

Le milieu actif est constitué d'un grand nombre de bactéries *Escherichia coli*. Leur géométrie, leur mode de déplacement et leur physiologie ont été longuement étudiés par le passé, et on pourra en trouver une revue dans le livre de H. C. Berg [6]. Les bactéries sont de forme cylindrique, la base ayant un diamètre d'environ $1\mu\text{m}$, la longueur étant de $2 - 3\mu\text{m}$. Leurs déplacements consistent en des périodes de translation d'une durée moyenne de 1s et de rotation durant dix fois moins longtemps que les translations. Les bactéries bougent grâce à des flagelles qui, schématiquement, se comportent comme des fouets secoués par des moteurs implantés à la base de la bactérie. Lorsque les moteurs tournent dans le sens horaire, les flagelles s'enroulent sur une hélice. Par la conservation du moment cinétique, nous pouvons écrire une force résultante longitudinale s'appliquant à la bactérie. Lorsque les moteurs changent de sens de rotation, la bactérie se met à tourner sur elle-même. L'angle moyen de rotation d'une *Escherichia coli* est de 68° . Les propriétés de ce type de déplacement ont été longuement étudiées, vis-à-vis notamment du biais qu'il applique à la marche aléatoire de la bactérie, voir par exemple [35]. La description énoncée précédemment correspond à une bactérie solitaire et n'ayant pas subi de mutation.

Les bactéries ont aussi des comportements collectifs. Dans des conditions environnementales particulières, elles sont soumises au chimiotactisme (voir la référence [1] et le Chapitre introductif). Les implications en ont été largement étudiées en ce qui concerne la croissance de leurs colonies. À ce sujet, on pourra lire l'article des découvreurs de ces phénomènes [40], et la revue très détaillée [7]. Dans l'expérience présentée, ses auteurs [58] ont voulu s'affranchir des comportements collectifs habituellement étudiés chez les *Escherichia coli*, et les ont donc placées dans des conditions environnementales telles que le chimiotactisme n'est pas attendu. Plusieurs concentrations de bactéries sont utilisées et elles sont obtenues par dilution d'une concentration à $5,4\text{cellules.cm}^{-3}$.

Les traceurs sont des billes de polystyrène de 10 et $4\mu\text{m}$ de diamètre.

Deux types de mesures ont été réalisés. Tout d'abord, la distribution des vitesses des bactéries est accessible en utilisant des mutants qui produisent une protéine émettant une fluorescence verte. De telles bactéries sont observées sous un microscope à fluorescence. Les images sont enregistrées par une caméra, dont le temps de pose est de 0,03s, numérisées, puis traitées par ordinateur pour en extraire les vitesses des bactéries. Ensuite le mouvement des traceurs passifs peut

de même être enregistré par l'intermédiaire d'un microscope à contraste de phase. Les expérimentateurs ont choisi le déplacement carré moyen $\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle (t)$ pour l'analyser.

4.2 Mesures et observations

A. Libchaber et X.-L. Wu ont mesuré la distribution des vitesses des bactéries. Conformément aux mesures déjà réalisées sur *Escherichia coli* [6], c'est une maxwellienne :

$$P(v) = \frac{2v}{v_0^2} \exp\left(-\frac{v^2}{v_0^2}\right), \quad (4.1)$$

où $v_0 = 20\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$. Qualitativement, les expérimentateurs observent que les bactéries semblent se déplacer aléatoirement. En variant la densité de bactéries, l'aspect du film change. Le nombre de chocs augmentent lorsque la densité croît, ce qui semble désordonner encore plus le mouvement individuel des cellules. Cependant, de manière temporaire et intermittente, pour de fortes densités, on peut voir des mouvements collectifs apparaître sous la forme de lignes de courants et de tourbillons. Ces structures, composées par les bactéries mêmes, ont des tailles transverses de l'ordre de 10 à $20\mu\text{m}$.

Les traceurs, quant à eux, subissent une diffusion anormale à temps court (figure 4.1) :

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle \propto t^\mu, \quad (4.2)$$

où $\mu \in [1,5; 2]$ pour des instants $t < 1\text{s}$. À temps long, c'est-à-dire $10 < t < 300\text{s}$, la diffusion est normale : $\mu = 1$.

La première question à élucider est de savoir quel est le mécanisme responsable de ces deux régimes diffusifs. Une première cause envisageable est purement physique. Il s'agit de l'inertie. En milieu peu visqueux, un mouvement amorcé a besoin d'un temps t_0 avant d'être significativement amorti. L'équation du mouvement est du type :

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\gamma \vec{v}. \quad (4.3)$$

On en déduit donc le temps d'amortissement $t_0 = m/\gamma$, m étant la masse du traceur. γ est déterminé par la relation de Stokes : $\gamma = 6\pi\eta R$, où η est la viscosité du milieu. Dans cette expérience, il a été mesuré $t_0 \sim 10^{-5}\text{s}$. Ce temps est négligeable devant le temps de pose des caméras utilisées et ne peut donc pas intervenir ici. Par conséquent l'inertie n'est pas la source du comportement observé. De plus, les expérimentateurs n'observent aucun mouvement des traceurs sans la présence des bactéries. Lorsque les bactéries se déplacent, elles entrent en collision avec les traceurs et leur fournissent de la quantité de mouvement. Tout comme dans

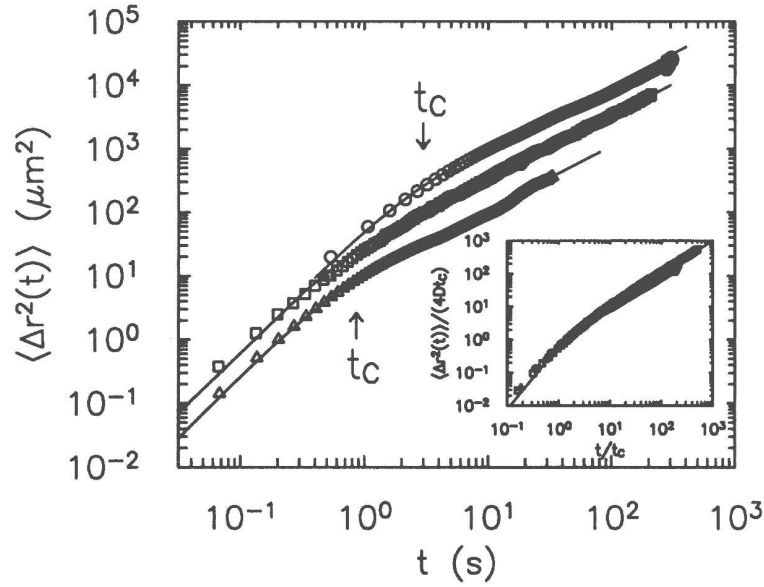


FIG. 4.1 – Mesure de la diffusion de traceurs dans un bain de bactéries : déplacement moyen au cours du temps pour différentes valeurs de la densité bactérienne $n = 0,67, 1,34$ et $5,35 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. En encart : les abscisses et les ordonnées ont été renormalisées par $4Dt_c$ (Avec l’aimable autorisation de X.-L. Wu et A. Libchaber).

un fluide classique, il doit être possible de définir une température effective due aux collisions. Si ce sont les bactéries qui sont responsables du comportement anormale, la température trouvée devra être très différente de la température ambiante.

Dans le régime brownien, il est possible de définir un coefficient de diffusion effectif :

$$D = \frac{1}{4} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d \langle \Delta r^2 \rangle}{dt} \quad (4.4)$$

Par la relation de Stokes-Einstein [34], le coefficient de diffusion dépend directement de la température effective du bain dans lequel se trouve le traceur :

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta R}. \quad (4.5)$$

Il a été réalisé des mesures de diffusion à densité de bactéries fixée et pour deux diamètres de traceurs différents. Premièrement, le coefficient de diffusion semble suivre la loi 4.5 : $D \propto R^{-1}$. Deuxièmement, on en déduit la valeur approximative de la température effective : elle est cent fois plus grande que la température ambiante. En conclusion, les bactéries sont bien le moteur du phénomène observé.

Affinons l’étude. Les auteurs de cet article définissent un temps caractéristique de changement de régime t_c , figuré par les flèches sur la figure 4.2, ainsi qu’une

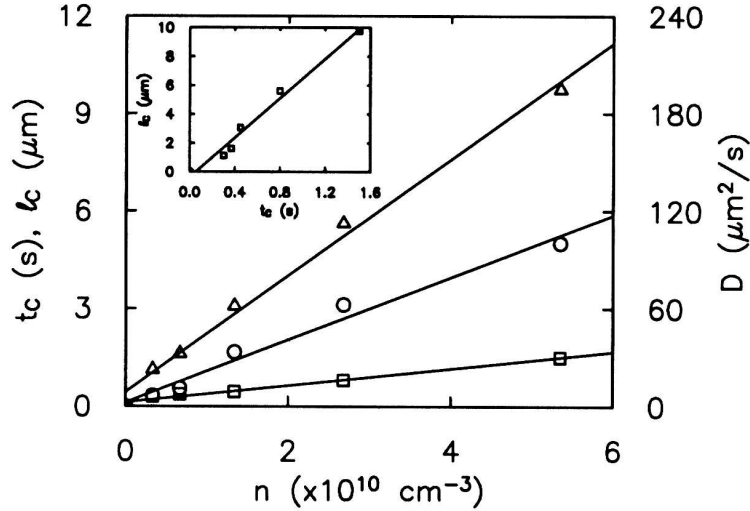


FIG. 4.2 – Comportement du temps caractéristique t_c , de la longueur caractéristique l_c et du coefficient de diffusion D en fonction de la densité de bactéries n . En encart : longueur caractéristique l_c en fonction du temps caractéristique t_c . (Avec l’aimable autorisation de X.-L. Wu et A. Libchaber.)

longueur caractéristique de diffusion définie par :

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle (t_c) = l_c^2. \quad (4.6)$$

Cette longueur est du même ordre de grandeur que les structures organisées des bactéries observées auparavant. De plus, en variant la densité des bactéries, les temps et longueurs caractéristiques et le coefficient de diffusion varient dans le même sens. Le régime superdiffusif des temps court serait donc dû aux mouvements collectifs des bactéries.

4.3 Discussion

Pour analyser de manière quantitative les mesures effectuées, il faut avoir une forme mathématique modélisant le comportement à deux pentes du déplacement carré moyen des traceurs. Les paramètres d’une telle équation seraient le temps caractéristique t_c et la diffusion D . La modélisation choisie par les auteurs de l’expérience est la suivante.

Il s’agit d’écrire une équation de Langevin adaptée à l’expérience, l’origine du bruit étant le mouvement des bactéries. À temps long, le mouvement des traceurs est brownien, le bruit doit donc être décorrélé dans cette gamme de temps. En revanche, la sur-diffusion implique un bruit corrélé à temps court. Il a été choisi

une corrélation de type exponentiel. On obtient alors les équations :

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\gamma\vec{v} + \vec{f}(t), \quad (4.7)$$

$$\langle \vec{f}(t) \rangle = 0, \quad (4.8)$$

$$\langle \vec{f}(0) \cdot \vec{f}(t) \rangle = \frac{4D\gamma^2}{t_c} \exp\left(-\frac{t}{t_c}\right). \quad (4.9)$$

Ce qui permet de déterminer le déplacement carré moyen :

$$\langle \Delta\vec{r}^2(t) \rangle = 4Dt \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{t_c}\right) \right] \quad (4.10)$$

Grâce à cette équation, les auteurs ajustent les courbes et déterminent les paramètres D et t_c . Les ajustements obtenus sont présentés comme satisfaisants. Pour les tester, les auteurs présentent les courbes renormalisées pas $4Dt_c$. En effet, on obtient alors :

$$\frac{1}{4Dt_c} \langle \Delta\vec{r}^2(t) \rangle = \frac{t}{t_c} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{t_c}\right) \right] \quad (4.11)$$

Toutes ces courbes doivent donc se superposer quand elles sont représentées en fonction de t/t_c . C'est ce qui est observés dans les marges d'erreur de l'expérience (voir l'encart de la figure 4.2). L'hypothèse d'une corrélation exponentielle du bruit est particulièrement forte puisqu'elle fixe le comportement à temps court comme étant balistique :

$$\langle \Delta\vec{r}^2(t) \rangle \rightarrow 4D \frac{t^2}{t_c}, \text{ pour } t \ll t_c, \quad (4.12)$$

$$\rightarrow 4Dt, \text{ pour } t \gg t_c. \quad (4.13)$$

Or les mesures ne sont pas aussi restrictives. Dans une publication ultérieure [100], les auteurs donnent une estimation de l'exposant de sur-diffusion : $\mu = 1,7(3)$. Certes, une croissance quadratique n'est pas exclue, mais elle n'est pas formellement prouvée. Dans la suite, nous distinguons la diffusion balistique, pour laquelle l'exposant de diffusion est $\mu = 2$, de la sur-diffusion, pour laquelle :

$$1 < \mu < 2.$$

Les trois grandeurs, D , t_c et l_c varient linéairement en fonction de la densité de bactéries, comme le suggère la figure 4.2. Si le comportement à temps court est effectivement balistique, alors cette distance se déduit de la vitesse moyenne initiale : $l_c = t_c \sqrt{\langle \vec{v}^2(0) \rangle}$. Or, cette vitesse se déduit des équations 4.7, 4.8 et 4.9 :

$$\langle \vec{v}^2(0) \rangle = \frac{2D}{t_c}. \quad (4.14)$$

Puisque le coefficient de diffusion et le temps caractéristique augmentent linéairement avec la densité de bactéries, et puisque la diffusion des traceurs n'a pas été détectée en l'absence de bactéries, c'est-à-dire :

$$\lim_{n \rightarrow 0} D = 0, \quad (4.15)$$

$$\lim_{n \rightarrow 0} t_c = 0, \quad (4.16)$$

le rapport D/t_c doit rester constant. Dans ce cas, $\langle \vec{v}^2(0) \rangle$ doit aussi être constant lorsque varie la densité n de bactéries. Les auteurs rapportent que c'est le cas, dans les limites fixées par les erreurs : $\sqrt{\langle \vec{v}^2(0) \rangle} = 5,0(1,5)\mu\text{m}$. Autre conséquence, la longueur caractéristique doit dépendre linéairement du temps caractéristique. L'encart de la figure 4.2 droite montre que cette dépendance peut effectivement être linéaire, et la pente mesurée sur cette figure ($6,2\mu\text{m}$) est compatible avec la précédente mesure.

Enfin les auteurs discutent de l'équipartition de l'énergie dans ce système. À l'équilibre, l'énergie cinétique des traceurs passifs est directement proportionnelle à la température du bain. Ici, cela se traduit par la relation :

$$\frac{\langle \vec{v}^2(0) \rangle}{v_B^2} = \left(\frac{R_B}{R_T} \right)^\beta, \quad (4.17)$$

où v_B et R_B sont la vitesse et le rayon effectif des bactéries, et R_B est le rayon des traceurs. Lorsque l'équipartition de l'énergie est vérifiée, l'exposant β vaut 3. Précédemment, nous avons vu que, probablement, la diffusion suit la loi de Stokes 4.5. En utilisant la relation 4.14, nous obtenons le lien entre la vitesse et le rayon des traceurs d'une part, et le temps caractéristique d'autre part :

$$\langle \vec{v}^2(0) \rangle . t_c \propto \frac{1}{R}. \quad (4.18)$$

Le temps caractéristique, quant à lui, est la manifestation des comportements collectifs des bactéries : $t_c = f(v_B, R_B)$. Il est donc raisonnable de penser que l'équipartition de l'énergie n'est pas vérifiée et que l'exposant $\beta = 1$. Les auteurs en déduisent l'existence d'interactions hydrodynamiques. Cependant le raisonnement qui mène à cette conclusion est fondé sur le postulat d'une corrélation exponentielle du bruit. Aussi faudrait-il mesurer les vitesses des traceurs pour différents rayons de billes.

Nous ne remettons pas en cause l'existence des corrélations à temps court, mais la nature de celles-ci. Outre la forme mathématique, ici postulée, l'origine biologique ou physique de cette corrélation est indéterminée. Des comportements collectifs sont observés et ils produisent une diffusion anormale des traceurs. Mais par quel biais apparaissent-ils ? Différents gradients peuvent agir sur les bactéries :

gradient d'agent chimique, de température, de lumière. Ici aucun d'eux n'est présent. Des instabilités d'origine physique peuvent mener à une auto-organisation du milieu étudié. La convection en est un exemple fameux. Ici elle est à exclure. De même la pesanteur peut créer des instabilités. Mais la faible épaisseur du film semble les limiter. Les auteurs mettent en avant des interactions d'ordre hydrodynamique comme le moteur de l'instabilité.

Il faut rappeler que le contexte physique de cette expérience est très riche, riche de comportements différents, riche de questions et riche de polémiques. Tout d'abord, le problème du traceur passif au sein d'un fluide tri-dimensionnel, ce qui se traduit par l'étude de l'équation de Navier-Stokes scalaire, et celui des propriétés de mélange d'une substance inerte sont ouverts depuis près de cinquante ans et occupent de nombreux physiciens encore aujourd'hui. Le lecteur pourra en trouver une revue dans [83]. La dimensionnalité de l'expérience n'en simplifie pas l'étude physique, puisque les comportements d'un fluide en volume ou en surface sont différents [5]. Par exemple, la vorticité d'un fluide turbulent peut être amplifiée par les fluctuations de vitesse dans le cas tri-dimensionnel, pas en dimension deux. Enfin la diffusion de traceurs dans un fluide bi-dimensionnel non-turbulent doit, elle aussi, être étudiée avec circonspection. Dans l'article [21], des traceurs, de plus petites tailles que ceux utilisés par X.-L. Wu et A. Libchaber, sont suivis au cours du temps et il a été observés des comportements collectifs parmi les traceurs : des paires se forment et entrent dans une sorte de danse, chacun des traceurs tournant autour de son compère. Cependant la diffusion reste brownienne, et les comportements collectifs n'apparaissent quantitativement que sous la forme de corrections logarithmiques en fonction de la distance entre les membres d'une paire. En conclusion, l'appel à l'hydrodynamique pour expliquer l'expérience de biophysique que nous venons de décrire n'est pas un *deus ex machina*.

5

Modélisation de l'expérience

Sommaire

5.1	Les règles d'interaction	74
5.2	Paramètres des simulations	76
5.3	Résultats préliminaires	78
5.4	Discrimination des meilleures règles microscopiques	80
5.5	Étude du régime intermédiaire	83
5.6	Influence des bruits	85

Le but du présent chapitre n'est pas de reproduire les résultats de l'expérience présentée précédemment, mais de montrer que ce sont effectivement les comportements collectifs qui sont la source de la diffusion anormale des traceurs. L'idée sous-jacente à ce travail est la suivante : les conditions expérimentales sont telles qu'il n'y a pas de phénomènes collectifs à grande échelle. Cependant, en variant la densité de bactéries, nous nous approchons du point de transition vers la phase ordonnée. Cette approche modifie les propriétés de diffusion des bactéries.

Nous allons de plus comparer la diffusion individuelle des bactéries à celle des traceurs. Enfin nous allons étudier l'impact de la densité de bactéries sur les grandeurs caractéristiques de diffusion. Mais il ne s'agit pas ici de trouver une adéquation quantitative entre les simulations et l'expérience, d'une part parce que nous travaillons à déplacement élémentaire constant, d'autre part parce que nous ne connaissons pas les paramètres naturels exacts du couplage entrant en jeu entre les bactéries. Cependant, nous montrons que nous pouvons attendre de ce cadre théorique mieux qu'un accord qualitatif. Le travail que nous présentons ici a fait l'objet de deux publications [44, 45].

La pertinence de la modélisation d'un bain de bactéries par des particules auto-propulsées réside en deux points. Au niveau microscopique d'abord, le mode de déplacement des bactéries est composé de périodes de translation suivie de périodes de rotation durant dix fois moins longtemps. Le modèle de Vicsek correspond à la simplification qui consiste à négliger les variations de la vitesse et

le temps nécessaire à la rotation. Le second point provient des études présentées dans le paragraphe 2.1. Nous y avons vu que des nématiques auto-propulsés en milieu visqueux sont soumis à une interaction équivalente au couplage d'alignement utilisé dans le modèle de Vicsek.

5.1 Les règles d'interaction

Fixons tout d'abord les règles d'interaction entre les différents types de particules en présence. Sur un espace bi-dimensionnel sont placés des particules actives, les bactéries, et des traceurs passifs, les billes de polystyrène. Nous avons donc quatre types d'interactions à fixer suivant les agents : une bactérie agissant sur une bactérie, une bactérie agissant sur un traceur, un traceur agissant sur une bactérie, et un traceur agissant sur un traceur. Ensuite nous notons par un indice une bactérie B et un traceur T. Un indice i ou j représente une particule sans présumer de sa nature. S'il y a deux indices, le premier représente la particule qui subit l'action du second indice. Nous avons fait l'hypothèse que toutes les interactions sont isotropes. Les voisinages sur lesquels elles sont définies sont des disques de rayon $R_i + R_j$ pour deux particules i et j . La distance entre les centres de chacune des particules est notée en minuscule r_{ij} .

Les interactions entre bactéries et leurs règles d'évolution sont présentées au Chapitre 3 et notées Br1-Fr et Br2-Fr. Elles comprennent donc un terme d'alignement, une force de répulsion et un bruit. La force d'alignement est ce que nous pensons être le résultat des interactions hydrodynamiques. Nous avons vu que le choix de la force d'interaction à deux corps ne changent pas les résultats concernant les transitions de phase de ces modèles. Cependant sa présence est nécessaire pour la définition d'une taille caractéristique des bactéries. Nous avons choisi une force seulement répulsive car elle simule la présence d'une pression osmotique. De plus l'aspect du bain expérimental est homogène en bactéries. La nature du bruit est discutée au paragraphe 5.6. D'ici là, nous n'utilisons que le modèle Br1, c'est-à-dire celui pour lequel le bruit est introduit sous la forme d'un angle aléatoire.

Considérons maintenant les traceurs et les interactions qu'ils peuvent avoir entre eux ou avec les bactéries. Les traceurs sont passifs. En tant que tels ils n'ont pas de vitesse intrinsèque mais celle-ci est calculée en fonction des interactions auxquelles ils sont soumis. Ils n'ont donc pas de vitesse initiale. En accord avec l'expérience [99], ils sont dépourvus d'inertie. Dès que les interactions cessent, le traceur est immobile.

La première interaction, la plus simple aussi, est une répulsion de cœur dur, c'est-à-dire que nous imposons un volume, dit volume exclu, à l'intérieur du-

quel il n'est pas possible de pénétrer. De manière pratique, dès que la distance entre centre des deux particules considérées est inférieure à la somme de leur rayon caractéristique, nous répartissons à chacune d'entre-elles un déplacement tel qu'après l'interaction les particules soient tangentes l'une à l'autre. Cependant le déplacement imposé n'est pas forcément égal pour chacune des particules. Imaginons qu'une particule soit très massive devant l'autre, la première restera quasiment immobile, alors que la seconde s'écartera entièrement. C'est ce que dicte l'expérience des collisions classiques entre particules. Nous introduisons donc un paramètre μ_{ij} , appelé masse réduite, mesurant l'aptitude d'une particule à répercuter une collision en mouvement. Formellement, si $r_{ij} < R_i + R_j$, alors le déplacement est :

$$\vec{g}_{ij} = \mu_{ij} (r_{ij} - (R_i + R_j)) \vec{e}_{ij} , \quad (5.1)$$

avec soit $i = T$ ou $j = T$, ou les deux. La masse réduite dépend de la nature des particules en présence. Si ce sont deux traceurs, le déplacement est équiréparti : $\mu_{TT} = 0,5$. Dans le cas d'un traceur et d'une bactérie, les déplacements sont symétriques $\mu_{TB} = 1 - \mu_{BT}$.

L'interaction suivante provient des considérations mésoscopiques. En quelque sorte, il y a deux fluides : le film de savon, très visqueux, et le fluide biologique constitué des bactéries en mouvement. Les traceurs peuvent être alors vus comme emportés, ou entraînés par le fluide biologique. Le flux ainsi défini est la moyenne locale des vitesses des bactéries. Mais pour tenir compte du fait que plus la distance entre un traceur et une bactérie est petite, plus la force d'entraînement est grande, nous avons ajouté des poids à cette moyenne. Le flux biologique local autour du traceur T s'écrit alors :

$$\vec{v}_T^{\text{loc}} = \frac{1}{\mathcal{N}_T} \sum_{\substack{j = B \\ r_{Tj} < R_T + R_B}} \left(1 - \frac{r_{Tj}}{R_T + R_B} \right) \vec{v}_j , \quad (5.2)$$

où tous les j sont des bactéries voisines du traceurs, et au nombre de \mathcal{N}_T . Aucun traceur ne peut participer à ce fluide. Le déplacement effectif du traceur dépend aussi de la viscosité du fluide physique, de l'adhérence des bactéries à la surface du traceur, et peut-être d'autres effets que nous oublions encore. Aussi définissons-nous un coefficient d'efficacité de la force d'entraînement β_h ; la vitesse du traceur due à cette force est :

$$\vec{v}_T = \beta_h \vec{v}_T^{\text{loc}} \quad (5.3)$$

Résumons les différentes interactions :

- La direction de la vitesse d'une bactérie i à l'instant $t + 1$ a un module constant v_0 et sa direction suit la loi :

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\sum_{\substack{j = \text{B} \\ r_{ij} < R_0}} (\vec{v}_j^t + \beta_f \vec{f}_{ij}) + \sum_{\substack{j = \text{T} \\ r_{ij} < R_B + R_T}} \beta_g \vec{g}_{ij} \right] + \eta \xi_i^t, \quad (5.4)$$

- La vitesse du traceurs i au même instant est :

$$\vec{v}_i = \sum_{\substack{j = \text{B}, \text{T} \\ r_{ij} < R_T + R_j}} \beta_g \vec{g}_{ij} + \beta_h \vec{v}_i^{\text{loc}}. \quad (5.5)$$

Dans chacune des équations précédentes, nous avons introduit un paramètre dimensionnel β_g .

5.2 Paramètres des simulations

R_0	Δt	v_0	R_B	R_T	β_f	β_g	β_h	η	ρ	taille
1,0	1,0	0,3	0,127	0,381	2,5	1,0	1,0	0,5	[0;10]	[32;512]

TAB. 5.1 – Paramètres des simulations du bain de bactéries.

Notre but est d'obtenir des simulations aussi proches que possibles des conditions expérimentales. Une partie des paramètres en sont facilement déductibles. Il s'agit des paramètres géométriques et cinématiques. Il n'est pas possible de simuler directement les populations de bactéries, ce qui représente environ 8×10^6 individus, alors que nos plus grosses simulations comptent $5,2 \times 10^5$ particules. Pour éviter ce problème, nous avons effectué une similitude. Pour cela, nous introduisons une longueur caractéristique l_0 et un temps caractéristique t_0 qui permettent de ré-introduire les dimensions adéquates dans nos paramètres de simulation :

$$R_{\text{bact.}} = l_0 R_B, \quad (5.6)$$

$$R_{\text{trac.}} = l_0 R_T, \quad (5.7)$$

$$v_{\text{bact.}} = \frac{l_0}{t_0} v_0, \quad (5.8)$$

où $R_{\text{bact.}}$, $R_{\text{trac.}}$ et $v_{\text{bact.}}$ sont les valeurs expérimentales des rayons des bactéries et des traceurs et celle de la vitesse moyenne des bactéries. Le rayon des bactéries est

	masse réduite μ_{TB}	entraînement
A	0	oui
B	0,5	oui
C	0,5	non

TAB. 5.2 – Jeux d’interactions testées pour la modélisation de l’expérience de X.-L. Wu et A. Libchaber.

défini comme étant celui d’une sphère de même volume qu’une bactérie typique. Seule la distance l_0 est définie de manière univoque par l’intermédiaire des densités surfaciques de bactéries dans l’expérience et dans les calculs numériques :

$$l_0 = \sqrt{\frac{\rho_B}{\rho_{\text{bact.}}}} . \quad (5.9)$$

La plus faible densité surfacique utilisée dans les travaux [99] est de l’ordre de $5 \times 10^6 \text{cellules.cm}^{-2}$, la densité utilisée dans nos simulations est de 2 animoïdes par unité de surface. Cela nous permet de fixer le rayon des bactéries numériques $R_B = 0,127$ et des traceurs $R_T = 0,381$. Le temps t_0 reste ajustable et est lié au choix de v_0 . Nous avons vu dans le chapitre que cette valeur influence l’apparition des phénomènes critiques. Nous sommes donc devant l’alternative suivante : utiliser une vitesse la plus petite possible pour que la dynamique soit la plus continue possible, ou une vitesse proche de l’unité pour amplifier les couplages hydrodynamiques. Nous avons fixé $v_0 = 0,3$.

Le bruit et la densité minimale ont été choisis tels que le système soit désordonné. Le nombre de traceurs ne devant pas perturber le bain de bactéries, nous avons fixé $\rho_T \sim 1\% \rho_B$.

Enfin, il faut considérer les paramètres intervenant dans le calcul des interactions. Arbitrairement, nous avons fixé certains d’entre eux. Ainsi le facteur devant la force inter-bactéries a été choisi pour que le bain ait un aspect homogène lorsque nous nous situons dans la phase désordonnée ($\beta_f = 2,5$). Le paramètre de la force d’entraînement a été fixé à l’unité ($\beta_h = 1$), ainsi que celui de la force de cœur dur ($\beta_g = 1$). Concernant la présence d’une force d’entraînement et de la valeur de la masse réduite, nous avons réalisé trois tests, que nous notons A, B et C. Les cas A et B tiennent compte de la force d’entraînement, C n’en possède pas. Dans le test A, les traceurs sont considérés comme étant beaucoup plus massifs que les bactéries³ : $\mu_{TB} = 0$. Pour B et C, l’impact des chocs est équi-réparti : $\mu_{TB} = \mu_{BT} = 0,5$. Tous les paramètres et les différents cas considérés sont résumés dans les tables 5.1 et 5.2.

³Cela semble le cas dans l’expérience rapportée en [99]. En considérant les données fournies dans l’article, nous en déduisons que $\frac{m_{\text{trac}}}{m_{\text{bact.}}} \sim 200$.

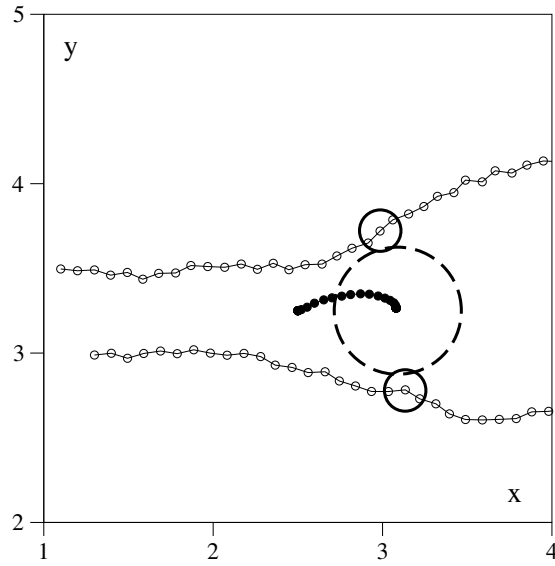


FIG. 5.1 – Trajectoires d'un traceur et de deux bactéries. L'interaction choisie est A. Le modèle utilisé est Br1-Fr avec le bruit $\eta = 0,1$. Les trajectoires vont de gauche à droite. Les cercles représentent les voisinages d'interaction au moment où les bactéries (trait plein) quittent le traceur (trait interrompu).

5.3 Résultats préliminaires

D'un point de vue microscopique, les trajectoires des traceurs sont conformes à ce que nous attendions. Sur la figure 5.1, nous avons représenté une collision entre deux bactéries et un traceur. Nous y voyons le traceur immobile tant que les bactéries ne l'ont pas atteint et dès qu'elles le quittent. On y observe que les particules actives s'écartent du traceur et semblent l'entraîner sur quelques pas de temps. Durant ces instants, le mouvement des traceurs reflète celui des bactéries. Notons encore que les mesures de la distribution des vitesses des bactéries n'a pas de sens dans notre problème puisque leurs vitesses sont fixées. Nous ne pouvons donc pas les comparer aux mesures expérimentales.

Au niveau macroscopique maintenant, nous avons étudié de façon approfondie la transition de phase du mouvement collectif en fonction du bruit à densité constante. La même transition existe en variant la densité à bruit constant, la phase ordonnée apparaissant à densité élevée. À faible densité, le mouvement des bactéries est aléatoire de façon homogène sur tout le plan. Nous nous attendons à ce que celui des traceurs le soit aussi. Alors leurs diffusions respectives sont normales : $\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle = 4Dt$. À haute densité, les mouvements de toutes les particules sont corrélés. Leur diffusion est balistique : $\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle \propto t^2$. En s'approchant du point de transition ρ_t à partir de la phase désordonnée, la longueur de corrélation entre les individus va croître jusqu'à atteindre la taille du système. Dans

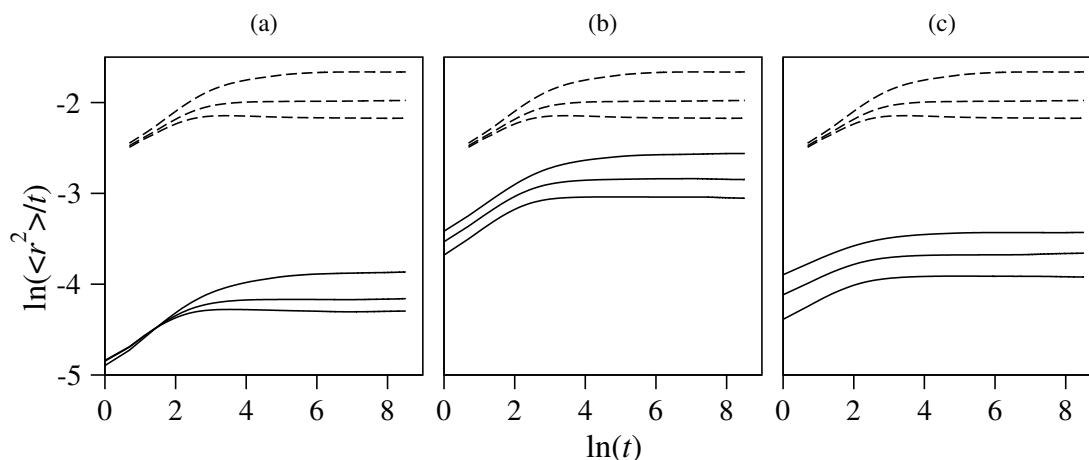


FIG. 5.2 – Comparaison des courbes de diffusion des traceurs ou des bactéries avec chacune des règles d’interaction. (a) règle A, (b) règle B et (c) règle C. Trois valeurs de densité sont représentées, de bas en haut, $\rho = 2,0, 2,5$ et $3,0$. Les courbes en trait continu sont les courbes concernant les traceurs, en trait discontinu sont celles concernant les bactéries, $L = 32$.

ces régimes intermédiaires, nous pourrions observer alors des fluctuations de densité, des structures transitoires sous la forme de jets ou de tourbillons. Nous y constatons aussi des courbes de diffusion à deux comportements. À temps long, la diffusion est normale ; à temps court, elle est sur-diffusive : $\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle \propto t^\mu$, avec $\mu \sim 1,7$, voir la figure 5.2.

Qualitativement, les courbes de diffusion pour les bactéries ou les traceurs, quelle que soit l’interaction choisie, sont identiques. Il existe un décalage sur les représentations en échelle logarithmique. Celui-ci provient d’écarts sur la valeur du coefficient de diffusion effectif :

$$D = \frac{1}{4} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d \langle \Delta \vec{r}^2 \rangle}{dt}, \quad (5.10)$$

mais ces différences ne peuvent pas être considérées de manière quantitative puisque de nombreux paramètres ont été fixés arbitrairement. Le coefficient de diffusion, mais aussi la vitesse élémentaire moyenne $\langle |\vec{v}|(t=0) \rangle$ des traceurs dépendent des règles microscopiques d’interaction. Nous construisons alors dimensionnellement un temps typique de diffusion :

$$\tau_T = \frac{D_T}{\langle |\vec{v}| \rangle^2}, \quad (5.11)$$

que nous espérons indépendant du choix des règles. Sur la figure 5.3, nous observons ces temps en fonction de la densité. Même s’ils sont du même ordre de grandeur, surtout dans la phase décorrélée, il y a des différences entre chacune

des interactions. La comparaison de chacun de ces temps avec celui défini pour les bactéries montre une autre facette de ces différences (encart de la figure 5.3). Alors que les traceurs suivant l'interaction A gardent une diffusion très comparable à celle des bactéries, ceux régis par les règles B et C ont des comportements qui s'écartent de celui des particules actives au fur et à mesure que nous approchons de la transition.

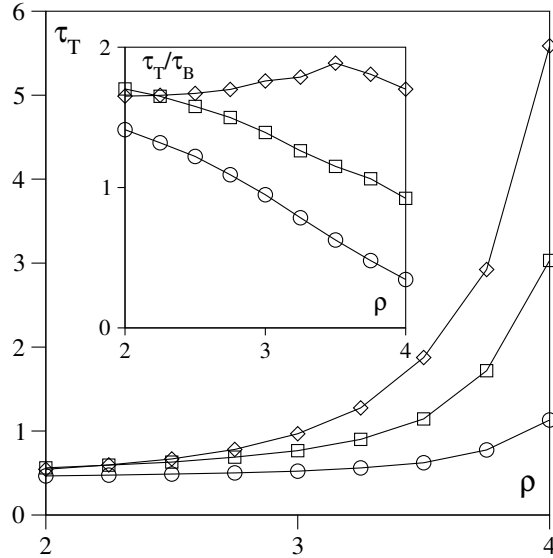


FIG. 5.3 – Comparaison des temps typiques de diffusion en fonction de la densité. Sont représentés les cas A (◇), B (□) et C (○), de même dans l'encart pour leur rapport au temps de diffusion des bactéries

5.4 Discrimination des meilleures règles microscopiques

Les dernières remarques nous poussent à creuser davantage la comparaison entre les règles microscopiques s'appliquant aux traceurs. Le but d'une telle comparaison serait de définir la *meilleure* règle. Mais en quel sens serait-elle meilleure? Meilleure devrait signifier plus naturelle, plus proche de l'expérience. Pour cela, nous allons réaliser des tests similaires à ceux réalisés dans l'expérience de X.-L. Wu et A. Libchaber, et les comparer entre eux. Insistons sur le fait que nous ne recherchons pas un accord parfait entre expérience et simulations. D'une part, parce que ce n'est pas possible, mais d'autres parts, parce que ce n'est pas souhaitable. Nous ne cherchons pas à imiter la nature, ce qui impliquerait l'introduction de pléthore d'autres phénomènes, mais à la comprendre.

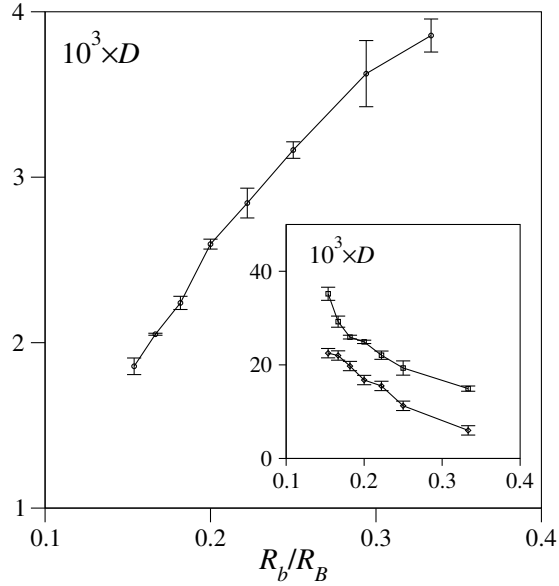


FIG. 5.4 – Étude de la loi de Stokes en fonction du choix des interactions : coefficient effectif de diffusion des traceurs en fonction de l'inverse du rayon des traceurs suivant la règle A (\diamond), et, dans les encarts, suivant les règles B (\square) et C (\circ), $L = 32$.

Nous avons réalisé des simulations visant à tester l'emploi de la loi de Stokes. Les expérimentateurs n'ont recherché qu'une tendance en utilisant deux rayons de traceurs différents. Nous pouvons faire mieux en explorant toute une gamme de rayons. Nous obtenons des résultats concordant avec la loi de Stokes uniquement avec l'interaction A. Dans ce cas, la courbe du coefficient de diffusion effectif (figure 5.4) est raisonnablement linéaire en fonction de l'inverse du rayon des traceurs. Les barres d'erreur que nous avons portées sur ce graphique proviennent de la qualité de la régression linéaire effectuée sur les courbes du déplacement carré moyen. Les autres règles voient leur diffusion augmenter avec le rayon. Ce qui est assez compréhensible, si l'on considère que le module de l'interaction de cœur dur croît avec le rayon (voir l'équation 5.1). Or le mouvement des traceurs régi par les règles B et C est essentiellement gouverné par les chocs.

Puis nous avons mesuré les caractéristiques statistiques de la vitesse des traceurs : moyenne $\langle |v| \rangle$ et variance v_{rms}^2 . Les variations de v_{rms}^2 en fonction du rayon des traceurs fournissent un test au théorème de l'équipartition de l'énergie. Certes celui-ci ne doit pas être nécessairement conservé, puisque les modèles étudiés sont hors d'équilibre. Cependant nous pouvons observer ce qu'il devient et comparer nos résultats aux résultats expérimentaux. À nouveau, seule la règle A a un comportement compatible avec l'expérience. D'une part, nous trouvons que le rapport

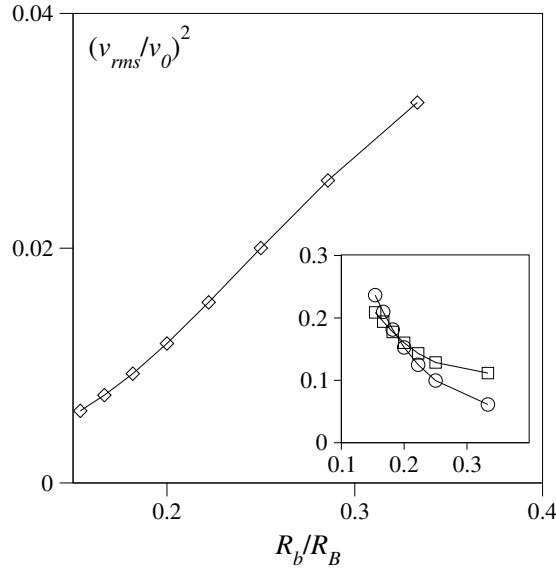


FIG. 5.5 – Étude de l'énergie cinétique en fonction de l'inverse du rayon des traceurs : variance de la vitesse des traceurs suivant la règle A (\diamond), et, dans les encarts, suivant les règles B (\square) et C (\circ), $L = 32$.

carré des vitesses est linéaire en fonction du rapport des rayons (fig. 5.5), ce qui confirmerait les conclusions rapportées dans [99]. D'autre part, les deux autres règles ont un comportement anormal vis-à-vis de l'équipartition de l'énergie. La vitesse v_{rms} croît avec le rayon, c'est-à-dire avec la masse.

Enfin, nous avons étudié la vitesse moyenne et sa variance lorsque varie la densité de bactéries (figure 5.6). Celles-ci augmentent avec la densité pour les règles B et C. Pour A, les courbes sont légèrement décroissantes. Les faibles variations de v_{rms} sont en accord avec les expériences. En revanche, il n'y pas d'argument a priori pour déterminer comment doivent varier les grandeurs statistiques en fonction de la densité.

Les trois études, respectivement de loi de Stokes, de l'équipartition de l'énergie, et du comportement en fonction de la densité, sont symptomatiques de l'additivité de la force due au volume exclu. Les deux premiers tests nous font penser que l'interaction A est plus adéquate. D'autres règles auraient pu être testées. Notamment, le paramètre de masse réduite μ_{TB} peut être relié à la taille des particules en présence : $\mu_{TB} = (R_B/R_T)^\zeta$. Dans la suite, nous allons étudier les propriétés de diffusion à rayon de traceur constant et nous préférons la règle A aux autres règles.

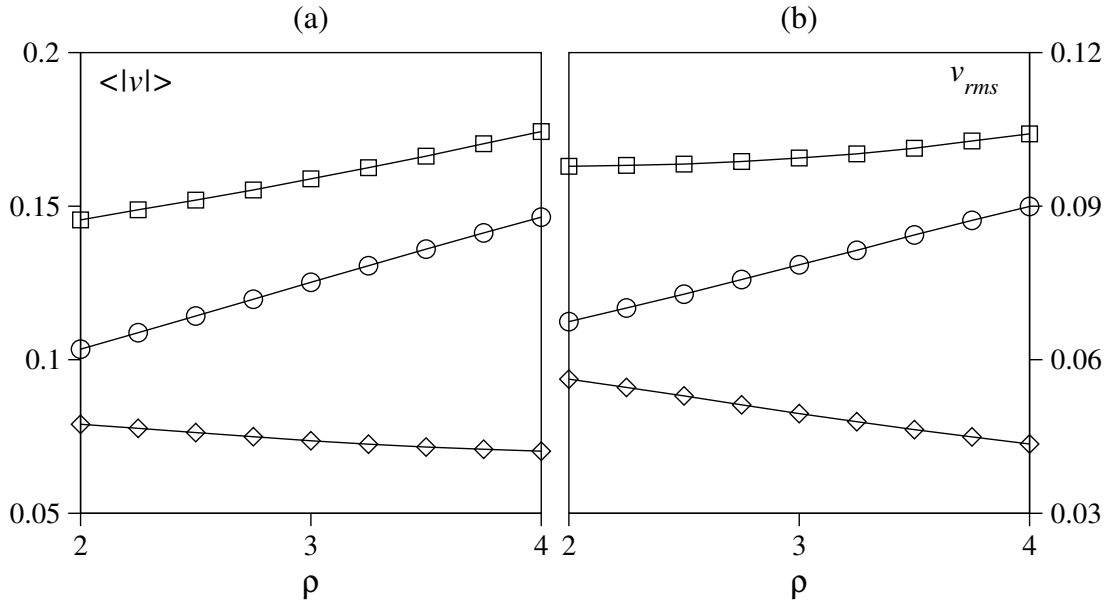


FIG. 5.6 – Caractéristiques statistiques de la vitesse des traceurs en fonction de la densité de bactéries. A (\diamond), B (\square) et C (\circ), $L = 32$.

5.5 Étude du régime intermédiaire

Un des points que nous avons soulevé lors de la lecture de l'article de X.-L. Wu et A. Libchaber était que l'analyse des courbes de diffusion a été réalisée en fixant le comportement à temps court comme étant balistique. Pour éviter ce biais, nous modélisons les courbes par l'équation suivante :

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle(t) \simeq \frac{4Dt}{(t/t_c)^{1-\mu} + 1}. \quad (5.12)$$

À temps long, nous retrouvons la diffusion brownienne $\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle(t) \simeq 4Dt$, alors qu'à temps court nous autorisons n'importe quel comportement anormal, dès que $\mu > 1$:

$$\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle(t) \simeq \frac{4Dt^\mu}{t_c^{\mu-1}}. \quad (5.13)$$

L'équation 5.12 ajuste très raisonnablement nos courbes de diffusion. Cela nous permet de déterminer le temps caractéristique de changement de régime t_c , la diffusion à temps long D et la longueur caractéristique de changement de régime $l_c = \sqrt{\langle \Delta \vec{r}^2 \rangle(t_c)}$. Cette dernière se déduit directement de l'équation 5.12 :

$$l_c^2 = 2Dt_c \quad (5.14)$$

Nous obtenons aussi les valeurs de l'exposant de diffusion $\mu \sim 1,7$.

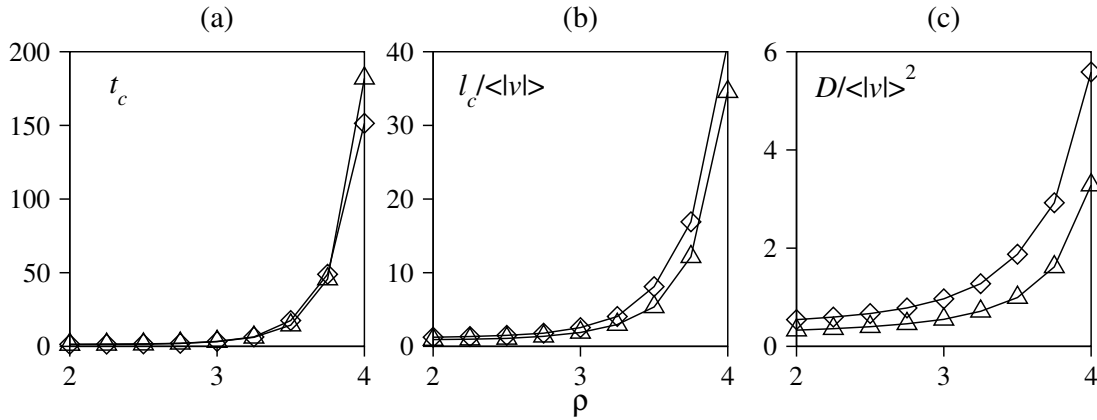


FIG. 5.7 – Courbes du temps caractéristique, de la longueur caractéristique et du coefficient de diffusion. Sont représentées les données correspondant aux bactéries (Δ) et aux traceurs suivant la règle A (\diamond), $L = 32$.

Les temps caractéristiques sont très similaires entre les bactéries et les traceurs régis par la règle A (voir la figure 5.7(a)). Pour comparer les autres grandeurs, nous les avons normalisées de manière à obtenir des temps, par l'intermédiaire de la moyenne des vitesses. Deux conclusions sont à tirer des figures 5.7(b) et (c). D'abord ces temps mesurés sur les bactéries ou sur les traceurs sont très semblables. Ceci renforce notre sentiment que le comportement des traceurs reflète parfaitement celui des bactéries. Ensuite, ces temps sont très différents des mesures directes du temps caractéristique. Or $l_c / \langle |v| \rangle$ et $D / \langle |v| \rangle^2$ correspondent à un régime microscopique balistique. Ceci confirme que les comportements collectifs ne mènent pas à une dynamique balistique des traceurs.

En changeant de règles d'interaction, nous obtenons des résultats qualitativement semblables (figure 5.8). Mais l'écart quantitatif entre les grandeurs des bactéries et des traceurs s'accroît si nous considérons la règle A, B ou C.

Dans l'article [99], les auteurs observent une dépendance quasi-linéaire des grandeurs caractéristiques de changement de régime en fonction de la densité de bactéries. Or nous obtenons des courbes qui divergent à densité croissante. Ces résultats sont-ils conciliables ? Nous pensons qu'ils le sont. Lors des simulations, nous pouvons approcher aussi près que nous le voulons du point de transition ρ_t . Dans l'expérience, nous ne savons pas à quelle distance de ρ_t nous nous situons. Ainsi, nous pensons que l'expérience a été réalisée loin du point de transition. Les grandeurs mesurées ne varient alors que très lentement, quasi-linéairement. De plus les longueurs caractéristiques ne dépassent pas la valeur du diamètre des traceurs. Lorsque nous nous approchons plus près du point de transition, la divergence des échelles apparaît. Exactement au point de transition, il ne subsiste plus que la diffusion anormale : le temps t_c , la longueur l_c et le coefficient de

diffusion D sont infinis. La nature des divergences ainsi que la valeur de l'exposant de diffusion μ sont quant à elles caractéristiques du type de transition en œuvre dans le système.

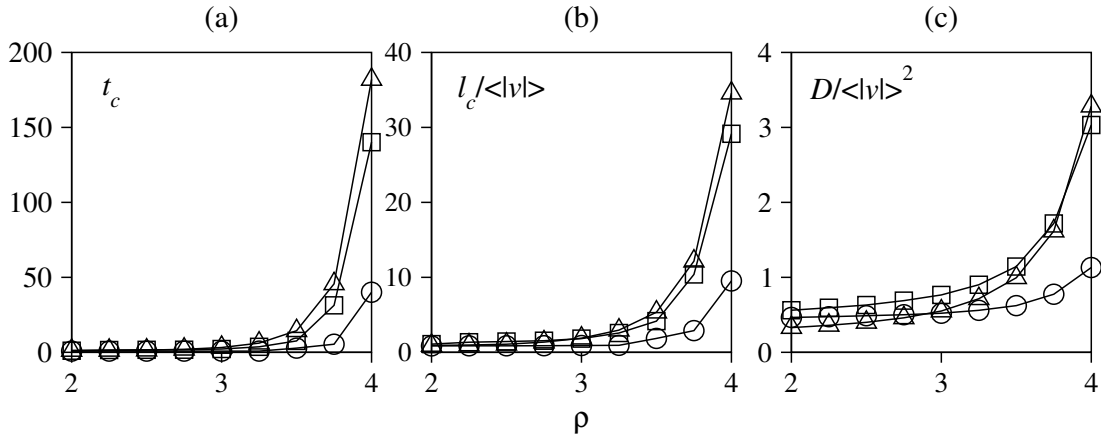


FIG. 5.8 – Courbes du temps caractéristique, de la longueur caractéristique et du coefficient de diffusion en fonction des règles d'interaction. Nous avons fait figurer les bactéries (Δ) et les traceurs suivant les règles B (\square) et C (\circ), $L = 32$.

5.6 Influence des bruits

Nous avons vu dans le Chapitre 3 que le choix du bruit n'était pas sans conséquence sur les transitions. Les deux modèles ont des transitions de phase dans le plan $(\eta; \rho)$. Mais, quand il s'agit de Br1 la transition est continue, alors qu'elle est discontinue avec Br2. Cependant toute la phénoménologie ne change pas quand on passe d'un modèle à l'autre. Ainsi le comportement à temps court, les définitions de t_c , l_c et D et les propriétés microscopiques des traceurs sont conservées.

Les différences apparaissent lorsque nous approchons de la densité de transition ρ_t . Si nous étudions les grandeurs caractéristiques du régime intermédiaire en fonction de la densité réduite $\varepsilon = 1 - \rho/\rho_t$, nous observons (figure 5.9) que celles-ci suivent des divergences algébriques en s'approchant de $\varepsilon = 0$ dans le modèle Br1-Fr. Ces divergences sont beaucoup plus rapides avec Br2-Fr. Notons que toutes les simulations présentées dans ce chapitre ont été réalisées à petites tailles et donc soumises à des erreurs systématiques. La nature exacte des divergences peut donc être difficile à mettre en lumière. Nous ne pouvons que constater la différence de comportement et supposer que, dans un système à la limite thermodynamique, les divergences algébriques sont conservées, et que les divergences dues au bruit

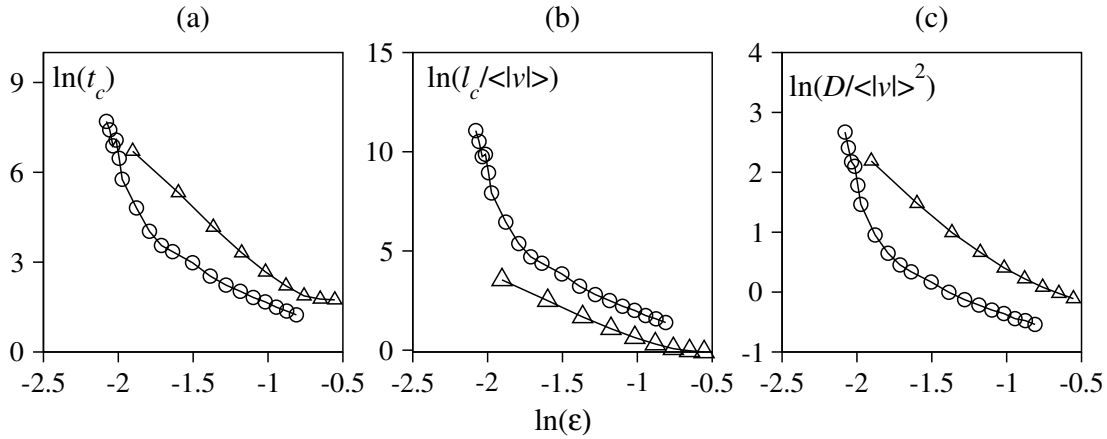


FIG. 5.9 – Comparaison des comportements des bactéries suivant le choix du bruit. (a) temps caractéristique, (b) longueur caractéristique de changement de régime et (c) coefficient de diffusion en fonction de la densité réduite en échelle logarithmique pour les modèles Br1-Fr (\triangle) et Br2-Fr (\circ), $L = 32$. Nous avons ajouté un décalage sur les ordonnées des différentes courbes réalisées à partir du modèle Br1-Fr afin d'améliorer la lisibilité de la figure.

Br2 se transforment en discontinuités. Cette hypothèse provient directement de l'étude des effets de taille présentée dans le Chapitre 3.

Le temps t_c et la longueur l_c sont des manifestations des corrélations entre bactéries à temps court. Ce sont donc des mesures du temps d'autocorrélation τ et de la longueur d'autocorrélation ξ . Ces mesures sont indirectes, réalisées sur de petits systèmes, nous ne devons donc pas en attendre des résultats très précis. En règle générale, on observe que les variations du temps en fonction de la longueur d'autocorrélation suivent une loi algébrique. Dans le cas des phénomènes critiques (voir Annexe D), c'est une loi d'échelle d'exposant z . Nous avons vu précédemment qu'une bonne mesure de l'exposant dynamique dans nos modèles est : $z = 2,65(15)$. Nous avons mesuré ici que $t_c \propto l_c^\zeta$ avec $\zeta \sim 1,5$; cette relation est vérifiée sur les bactéries et sur les traceurs qu'elles que soient les règles microscopiques utilisées (figure 5.10(a) et encart).

Dans les transitions du premier ordre, il y a aussi une loi de puissance mais dont l'exposant s'écrit en fonction de la dimension du système [67] :

$$\tau \propto \xi^{\frac{d}{2}}. \quad (5.15)$$

Ici $d = 2$, nous devons donc observer une dépendance linéaire. Nous le vérifions par mesure directe (voir figure 3.14) et indirecte avec une précision raisonnable (figure 5.10(b)).

Enfin, le comportement diffusif au point critique d'un système thermodynamique est différent d'un modèle à l'autre. Dans les chapitres 2 et 3, nous avons

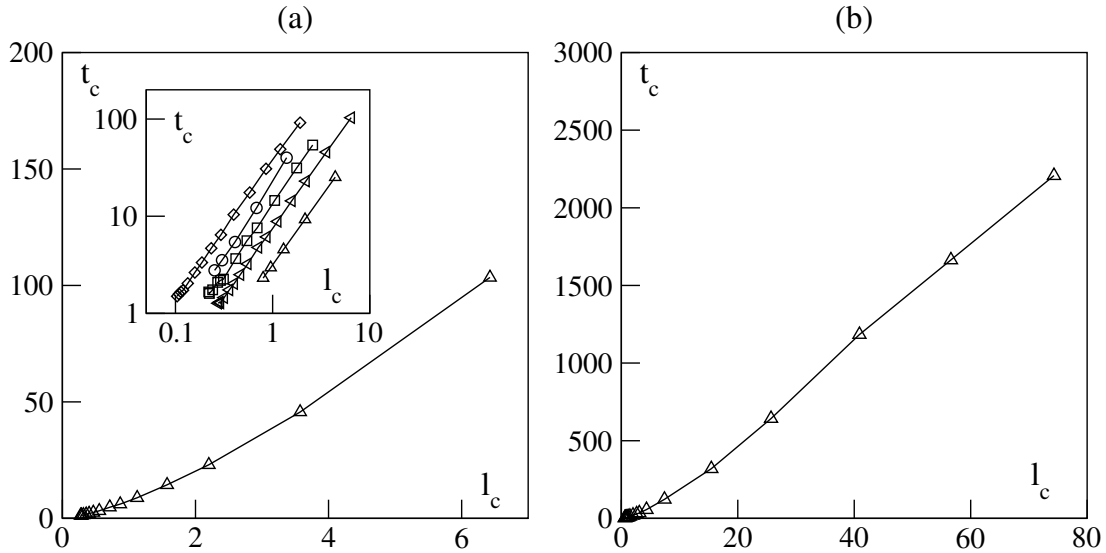


FIG. 5.10 – Variations du temps caractéristique en fonction de la longueur caractéristique de changement de régime. (a) bactéries suivant le modèle Br1-Fr, en encart : courbes concernant les bactéries (Δ) et les traceurs suivant les règles A (\diamond), B (\square) et C (\circ), en échelle logarithmique. (b) modèle Br2-Fr. $L = 32$.

montré que la diffusion critique du modèle Br1 n'est pas banale et que l'exposant de diffusion μ est relié aux exposants critiques par la relation d'échelle 2.30. Nous avons mesuré sa valeur $\mu = 1,66(6)$.

Au point de transition du modèle Br2, nous avons vu qu'il y a coexistence des phases. Si la tension de surface due à l'interaction d'alignement est nulle, cette coexistence est uniquement temporelle. Cela signifie que le système passe alternativement d'une phase ordonnée à une phase désordonnée. C'est ce qui a été observé jusqu'à la taille $L = 512$. Pour un système de taille infini, celui-ci reste bloqué dans une des deux phases. Si la mesure est effectuée dans la phase ordonnée, alors $\mu = 2$. Si elle est réalisée dans la phase désordonnée, alors $\mu = 1$.

La diffusion d'un tel système en grande taille, bien que finie, doit être calculée avec prudence. Si aucune précaution n'est prise, par exemple si la diffusion est mesurée sur des périodes comprenant plusieurs alternances de phase, la mesure en échelles logarithmiques fournira un exposant non banal. Or la diffusion d'un marcheur qui alterne des périodes égales de marche aléatoire et de trajectoire balistique est simplement polynomiale.

En conclusion deux modèles sont possibles. Les comportements des grandeurs caractéristiques de la diffusion dans l'expérience de X.-L. Wu et A. Libchaber correspondent à l'approche du point de transition des modèles. Dans chacun de ceux-ci, il y a divergence des grandeurs caractéristiques avec l'augmentation de la densité de bactéries. Ce n'est pas observé dans l'expérience. Nous supposons

que cela est dû au fait que les conditions expérimentales sont trop éloignées du point de transition. Ce pose ensuite la question du choix de modèles pour décrire l'expérience. Dans le modèle Br1, toutes les divergences sont algébriques, d'exposants non banales. Dans Br2, la courbe du temps d'autocorrélation en fonction de la longueur d'autocorrélation doit rester linéaire. De plus, la diffusion au point de transition doit être soit brownienne, soit balistique. Seules de nouvelles expériences pourraient permettre un choix sur la nature du bruit.

Deuxième partie

Comportements collectifs sur un espace ouvert

6

Diagramme des phases

Sommaire

6.1	Description des modèles utilisés	91
6.2	Les différentes phases possibles	94
6.2.1	Description	94
6.2.2	Propriétés microscopiques	96
6.3	Détermination du diagramme	99
6.3.1	Définition des paramètres d'ordre et nature des transitions	99
6.3.2	Les diagrammes des phases	102

6.1 Description des modèles utilisés

Dans la nature, il est rare que nous puissions considérer le système étudié comme étant à densité homogène. Nous l'avons rappelé dans l'introduction, le problème biologique est d'abord la formation d'un groupe, puis celui de sa mise en mouvement. Après avoir étudié cette transition de phase de l'immobile vers le mobile, nous allons maintenant étudier l'existence du groupe et ses évolutions possibles lors de la mise en mouvement ⁴ .

Nous cherchons donc deux ingrédients à appliquer à chacun des animoïdes : l'aptitude à suivre ses voisins et la possibilité de rester proche de ses voisins. Pour cela, nous conservons la base des modèles précédemment présentés **Br1** et **Br2**, terme d'alignement et bruit. Nous y ajoutons un couplage d'interaction à deux corps. Celui-ci doit posséder une partie répulsive, définissant le volume exclu de chacun des individus, une partie attractive, introduisant la cohésion dans notre modèle. Nous avons choisi une force linéaire par morceaux, ainsi le potentiel dont elle dérive est harmonique (figure 6.1).

⁴Ce chapitre, ainsi que le suivant, a donné lieu à un article qui est actuellement en phase de lecture par un comité de rédaction de la revue *Physica D*.

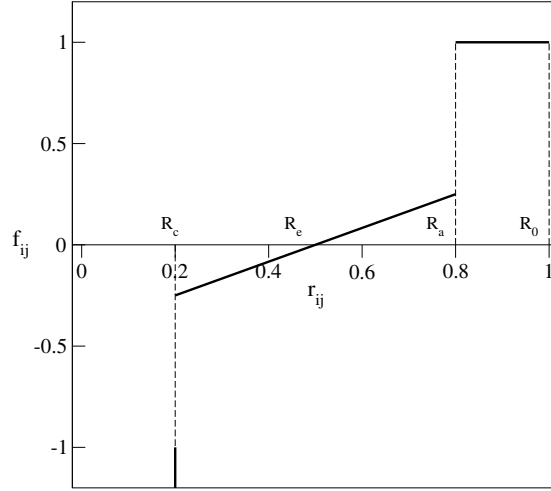


FIG. 6.1 – Force utilisée pour étudier les propriétés de cohésion.

La force appliquée s'écrit, en fonction de la distance entre les centres des animoïdes r_{ij} et le vecteur \vec{e}_{ij} , unitaire et dirigé de l'individu numéroté i vers l'individu j :

$$\vec{f}_{ij} = \vec{e}_{ij} \begin{cases} -\infty & \text{si } r_{ij} < R_c, \\ \frac{1}{4} \frac{r_{ij} - R_e}{R_a - R_e} & \text{si } R_c < r_{ij} < R_a, \\ 1 & \text{si } R_a < r_{ij} < R_0. \end{cases} \quad (6.1)$$

Nous avons ainsi défini un animoïde comme un disque impénétrable de rayon R_c . La gamme suivante de distances voit l'existence d'une position d'équilibre en R_e . Au-delà de R_a , l'interaction est purement attractive. Comme dans les modèles précédent, nous avons introduit une distance de coupure R_0 . Nous avons fixé les valeurs des rayons $R_c = 0,2$, $R_e = 0,5$, $R_a = 0,8$ et $R_0 = 1,0$. Nous notons Fh les modèles comprenant ce couplage. L'orientation de la vitesse dans chacun des modèles, avec la force ainsi définie, devient :

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\alpha \sum_{j \sim i} \vec{v}_j^t + \beta \sum_{j \sim i} \vec{f}_{ij} \right] + \eta \xi_i^t, \quad \text{pour Br1 - Fh}, \quad (6.2)$$

$$\theta_i^{t+1} = \arg \left[\alpha \sum_{j \sim i} \vec{v}_j^t + \beta \sum_{j \sim i} \vec{f}_{ij} + \mathcal{N}_i \eta \vec{u}_i^t \right], \quad \text{pour Br2 - Fh}. \quad (6.3)$$

Les bruits scalaire et vectoriel ont les mêmes propriétés que dans le Chapitre 3. Nous avons introduit deux nouveaux paramètres α et β permettant de régler le poids relatif des termes d'alignement et de cohésion. Ils assurent aussi l'homogénéité des équations précédentes. Il ne faut pas confondre ces notations avec celles des exposants critiques définie dans la Partie I.

Toutes les interactions et les sommes des équations 6.2 et 6.3 sont calculées sur un voisinage $j \sim i$. Nous désirons éviter tout couplage global, nous avons donc

modèle	Δt	v_0	R_0	R_a	R_e	R_c	η	α	β	ρ	N
Br1-Fh	1	0,05	1	0,8	0,5	0,2	[0; 1]	[0; 1]	1	2^{-4}	$[2^{10}; 2^{13}]$
Br2-Fh	1	0,05	1	0,8	0,5	0,2	1	[0; 3]	[0; 10^2]	$[2^{-4}; 2^{-10}]$	$[2^5; 2^{14}]$

TAB. 6.1 – Paramètres des simulations avec cohésion.

porté une attention toute particulière à la définition de ces voisinages. Le premier critère utilisé est l'appartenance à un disque de rayon R_0 . En observant des films de nos simulations, nous avons observé que les particules peuvent condenser en phase cristalline avec plusieurs couches de particules voisines. Outre le fait qu'à petite taille le rayon d'interaction peut alors contenir une grande part de la population, le couplage devenant alors global, ces modèles présentent aussi de multiples phases pour lesquelles le nombre de couches de voisins intervient comme paramètre. En quelque sorte, le résultat était trop complexe, pas assez régulier et l'interaction n'était peut-être pas assez globale. Nous avons donc décidé de restreindre la définition du voisinage aux plus proches voisins. Dans une dimension supérieure à l'unité, en espace continu, leur détermination n'est pas simple. Nous avons utilisé un pavage de Voronoï et avons construit un algorithme permettant de le dessiner. Les définitions de l'un et l'autre sont fournies dans l'Annexe E.

Comme dans la Partie I, le module de vitesse est constant et nous sommes donc toujours devant la même alternative pour le choix de la valeur de v_0 . De plus nous avons une contrainte supplémentaire, nous recherchons des états cohésifs en espace ouvert. Pour cela, il faut que le déplacement élémentaire $v_0\Delta t$ soit petit devant la distance d'équilibre R_e . Ainsi il sera plus difficile à un animoïde de s'échapper de ses voisins. Conservant le pas de temps élémentaire fixé à l'unité, nous avons choisi $v_0 = 0,05$. Cette vitesse est très petite. Mais les transitions de mise en mouvement étant déjà caractérisées, la nécessité d'un fort mélange hydrodynamique ne se fait pas autant sentir. Cependant, les effets de taille sur les transitions de cohésion pourraient dépendre de v_0 . Ce point reste à explorer.

Avant d'étudier les comportements dynamiques des modèles présentés, ajoutons une remarque d'ordre méthodologique. Par la suite, nous allons suivre des troupeaux de taille N au cours du temps en choisissant un jeu de paramètres géométriques et dynamiques. L'espace aura une taille L et des conditions aux bords périodiques. Cela nous fixera une densité globale $\rho = N/L^2$. Les paramètres dynamiques, inclus dans les équations 6.2 et 6.3, quant à eux, ne sont pas tous indépendants. En effet, la fonction \arg est homogène. Pour toute constante réelle non nulle λ , et tout vecteur \vec{u} , l'argument du vecteur vérifie :

$$\arg(\lambda\vec{u}) = \arg(\vec{u}) . \quad (6.4)$$

Parmi le triplet (α, β, η) , seuls deux paramètres sont libres. Mais, nous ne pouvons pas les choisir de manière équivalente, suivant le modèle considéré. Dans

Br1-Fh, voir l'équation 6.2, le bruit est ajouté après le calcul de la direction de l'interaction. Il est donc indépendant et les paramètres α et β sont liés. On peut choisir l'un ou l'autre et fixer le second. Nous avons choisi de faire varier α en maintenant fixé $\beta = 1,0$. Dans le modèle Br2-Fh, nous pouvons en choisir arbitrairement deux parmi les trois ; ce sera α et β , le bruit étant fixé $\eta = 1,0$. L'ensemble des paramètres est résumé dans le tableau 6.1.

6.2 Les différentes phases possibles

Quel que soit le modèle considéré, nous observons que les comportements typiques sont semblables, que les changements de comportements sont aussi très similaires. Seules changent réellement les propriétés de mise en mouvement. Mais nous le savons déjà d'après ce qui précède. Notre étude porte donc essentiellement sur l'un de ces modèles, Br2-Fh.

6.2.1 Description

À petite taille, nous avons répertorié six catégories de comportements possibles. Quatre d'entre elles sont portées sur la figure 6.2. Commençons par celle qui n'y est pas représentée : le gaz. Il est constitué de particules qui suivent une marche aléatoire, semblant ignorer leurs voisins. En augmentant la cohésion, nous avons observé l'existence de groupes. D'abord, ils n'y a pas d'ordre particulier à l'intérieur de ceux-ci. Nous les avons appelés *gouttelettes*, ou *phase liquide* (figures 6.2(c) et (d)). Un état encore plus cohésif implique l'apparition d'un ordre au sein des troupeaux. Nous y reconnaissons une symétrie d'ordre six sur les positions des individus (figures 6.2(a) et (b)). Nous nommerons cette phase *solide* ou *cristalline*.

Les deux états cohésifs présentés précédemment existent pour des troupeaux fixes (figures 6.2(a) et (c)), ou en mouvement (figures 6.2(b) et (d)). Rappelons que les particules simulées sont en mouvement permanent. Dans le solide immobile, elles oscillent donc sans cesse autour de leur position d'équilibre.

Enfin, à petite taille, la phase gazeuse semble posséder aussi deux états distincts de mouvement. Le gaz *mobile* est composé de petits agrégats se déplaçant rapidement. Les petits troupeaux ne semblent pas figés, mais s'échangent des individus. Au Chapitre 8, nous étudions plus précisément cet état et nous essayons de répondre à la question de son existence à la limite thermodynamique.

Notre point de vue n'a été jusque là que descriptif. Sur de petites simulations, à densité fixée, il semble exister différentes phases de cohésion et de mouvement. Il faut maintenant étudier les propriétés physique de chacun d'entre-elles, puis

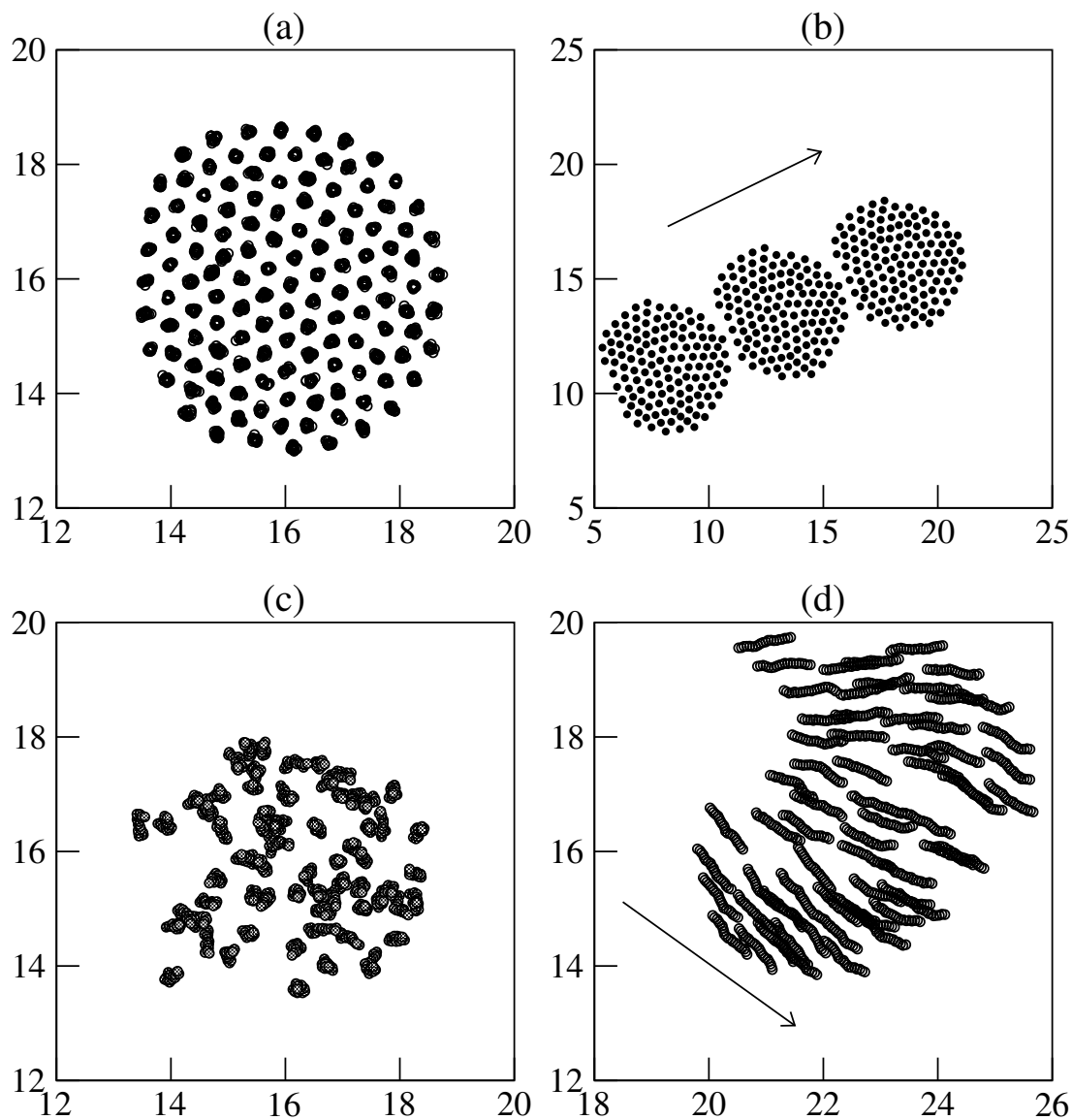


FIG. 6.2 – Les différents états cohésifs présents dans nos modèles. Les simulations présentées comptent 128 animoïdes sur un espace de taille $L = 32$ et ont été réalisées avec le modèle Br2-Fh à bruit constant $\eta = 1,0$. (a) cristal immobile : $\alpha = 1,0$, $\beta = 100,0$, 20 pas de temps successifs sont tracés. (b) cristal volant : trois instants séparés de 120 pas de temps sont représentés, $\alpha = 3,0$, $\beta = 100,0$. (c) gouttelette immobile : $\alpha = 1,0$, $\beta = 2,0$, 20 pas de temps successifs sont tracés. (d) gouttelette volante : $\alpha = 3,0$, $\beta = 3,0$, 20 pas de temps successifs sont représentés. Les flèches indiquent la direction du mouvement

définir le type de transition qui permet de passer des unes aux autres. Enfin, nous devons pouvoir dessiner un diagramme des phases.

6.2.2 Propriétés microscopiques

Certaines propriétés sont visuelles. Ainsi nous pouvons voir facilement s'il existe un groupe ou non. En revanche, les propriétés de mouvement à l'intérieur du groupe ne sont compréhensibles qu'à partir des mesures de diffusion. De plus, certains mouvements ont des temps caractéristiques très lents, l'observation qualitative ne suffit alors plus. Pour étudier les phases cohésives, nous introduisons une grandeur dérivée de l'étude des traceurs passifs [21]. Nous prenons à un instant donné deux voisins au sens de Voronoï, nous mesurons au cours du temps la distance entre ces deux individus et nous moyennons cette quantité :

$$\langle r_{ij}^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{\mathcal{N}_i(t_0)} \sum_{\substack{j \sim i \\ j < i}} \vec{r}_{ij}^2(t + t_0) \right\rangle_{t_0}. \quad (6.5)$$

Cet écart, que nous appellerons *écart relatif moyen*, à l'avantage d'être indépendant du référentiel dans lequel on observe le troupeau. De plus, dans le cas d'un solide idéal, nous nous attendons à ce que l'écart relatif moyen soit constant et égal au carré de la distance d'équilibre R_e^2 . Dans la phase liquide, il doit croître comme le déplacement carré moyen lors d'une diffusion brownienne.

C'est effectivement ce que nous observons dans le cas du liquide fixe à temps long (voir figure 6.3(a)). À temps court, nous observons une sous-diffusion : les particules restent prisonnières de leurs voisins durant un temps τ , dit de piégeage. Lorsque le système approche du point de transition, ce temps diverge. Nous avons défini τ comme étant le temps nécessaire pour que l'écart relatif soit supérieur ou égal à la distance de coupure au carré R_0^2 . Dans l'encart de la figure 6.3(a), nous montrons que les courbes se superposent parfaitement lorsque nous renormalisons le temps par τ . Toutes ces propriétés confirment notre intuition quant au bien-fondé de l'existence de la transition étudiée.

Enfin, ce que nous avons décrit dans la phase fixe est observable aussi dans la phase en mouvement (voir la figure 6.3(b) et l'encart associé). Cependant, la croissance de l'écart relatif moyen n'est pas linéaire, mais elle est plus rapide. Nous étudions cette différence au Chapitre 8.

Contrairement à la plupart des systèmes à l'équilibre, il n'y a pas d'invariance par translation dans notre problème. Il n'y a donc pas de raison pour que les comportements observés soient isotropes à l'intérieur des troupeaux. Pour étudier cette possible anisotropie, nous divisons le troupeau en secteurs. Nous définissons tout d'abord le centre de masse G du troupeau, puis le rayon carré moyen $\langle r^2 \rangle$;

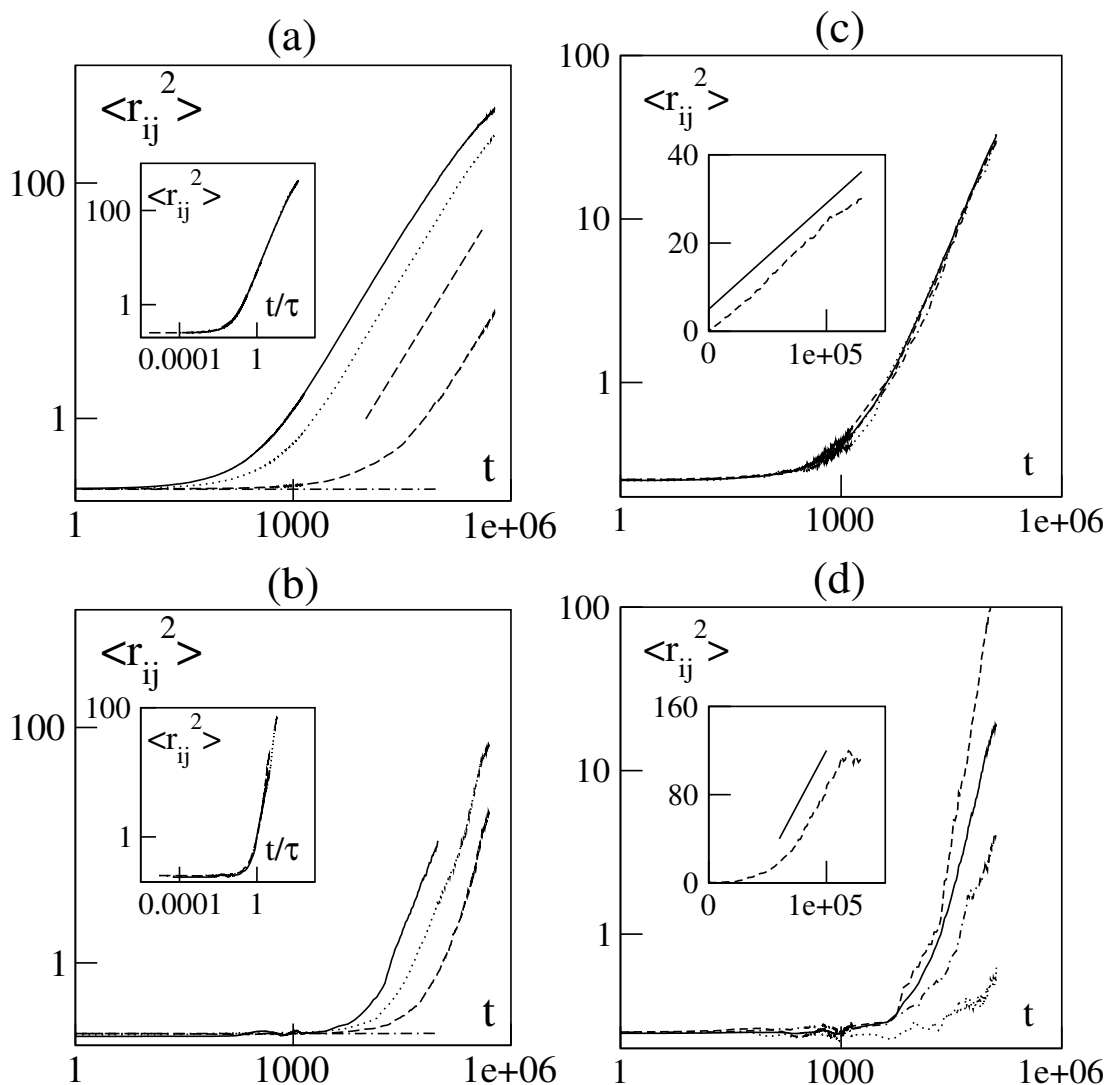


FIG. 6.3 – Variations de l'écart relatif moyen. 10000 animoïdes ont été suivis au cours du temps sur un espace $L = 400$, $\rho = 1/16$ le long des transitions ((a) et (b)) ou en fonction de leur localisation dans le troupeau ((c) et (d)), en échelle logarithmique. Pour chacune des courbes, le modèle Br2-Fh a été utilisé avec un bruit constant $\eta = 1,0$. (a) gouttelette fixe ($\alpha = 1,0$) du liquide vers le solide (du haut vers le bas : $\beta = 25,0, 35,0, 45,0$ et $150,0$). La ligne discontinue a une pente unité. (b) gouttelette en mouvement ($\alpha = 3,0$) du liquide vers le solide (du haut vers le bas : $\beta = 40,0, 55,0, 75,0$ et $150,0$). En encart : renormalisation des courbes par le temps de piégeage. (c) gouttelette liquide fixe, $\alpha = 1,0$ et $\beta = 40,0$. (d) gouttelette liquide volante, $\alpha = 3,0$ et $\beta = 40,0$. Dans ces deux dernières figures, les lignes continues concernent la globalité du troupeau, les lignes pointillées la région centrale, les lignes discontinues la tête, les traits mixtes l'arrière du troupeau. En encart, les mêmes courbes en échelle linéaire pour la région de tête, la droite continue sert de comparaison.

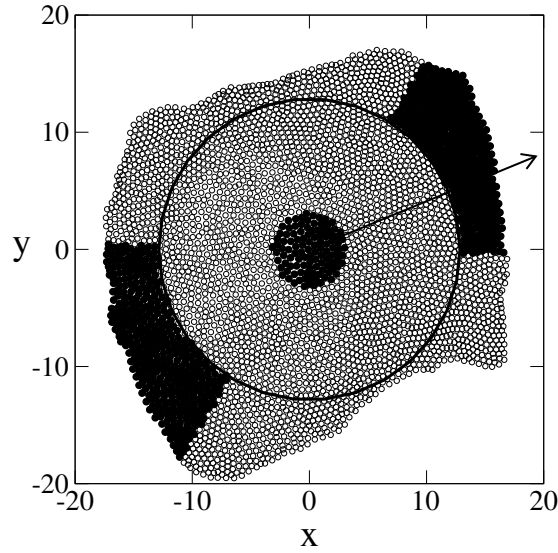


FIG. 6.4 – Définitions des secteurs étudiés à l’intérieur d’un troupeau. Le troupeau montré possède 4096 membres. Il vole et la flèche figure la direction de sa vitesse. Le cercle en trait gras correspond au rayon carré moyen $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$. Les points noirs sont les membres des secteurs du cœur, de la tête et de la queue du troupeau.

si r_i est la distance entre l’individu numéroté i et le point G :

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_i r_i^2, \quad (6.6)$$

alors le cœur du troupeau est composé des individus dont la distance au centre de masse est telle que $r_i \leq \sqrt{\langle r^2 \rangle}/4$. Pour définir la tête et la queue du troupeau, nous nous servons d’un critère sur la distance au centre ($r_i \geq \sqrt{\langle r^2 \rangle}$) et d’un autre sur l’angle polaire défini entre la vitesse globale du troupeau et le vecteur du centre de masse à la particule considérée :

$$\psi_i = (\overrightarrow{GM}_i, \vec{\varphi}). \quad (6.7)$$

Si $\psi_i \in [-\frac{\pi}{8}; \frac{\pi}{8}]$, l’individu est dans la tête, si $\psi_i \in [\frac{7\pi}{8}; \frac{9\pi}{8}]$, il est à l’arrière. La figure 6.4 est un exemple de ce découpage.

L’analyse en secteurs nous montre qu’il n’y a pas d’anisotropie tant que le troupeau est fixe (figure 6.3(c)). En effet, pour ceux-ci la symétrie par translation est conservée. En revanche, l’anisotropie est forte dès qu’il y a mouvement global. La diffusion la plus rapide a lieu pour les individus qui se trouvent dans la tête, viennent ensuite l’arrière et le centre du groupe. Ces données sont intéressantes, car au niveau expérimental il doit être possible d’effectuer le même type de distinction.

Les bords contraignent donc fortement la dynamique des individus. Dans l'optique de la recherche de comportements asymptotiques, le cœur seul nous intéresse. En augmentant la taille du troupeau, l'extension d'une zone plus *agitée* reste confinée sur les limites du troupeau. L'influence des bords s'estompe donc. Nous avons là une présomption pour l'existence d'effets de taille finie concernant la transition de phase liquide-solide, et un argument pour penser qu'une limite thermodynamique existe. Tout d'abord, déterminons le diagramme des phases à taille finie.

6.3 Détermination du diagramme

6.3.1 Définition des paramètres d'ordre et nature des transitions

En ce qui concerne la transition gaz-liquide, le paramètre d'ordre utilisé est le nombre n de participants au plus gros agrégat normalisé par le nombre N total d'individus. Nous définissons un agrégat comme l'ensemble des individus connectés par une relation de voisinage. L'algorithme implanté dans nos programmes est l'algorithme de J. Hoschen et R. Kopelman [49]. Le nombre d'individus dans un groupe pourra aussi être appelé *masse* de l'agrégat.

Dans la phase gazeuse, il n'y a pas de groupe macroscopique. Ainsi, on observe que $\langle n/N \rangle \sim 0$, avec des corrections en N^{-1} . Dans la phase cohésive, le paramètre d'ordre atteint toujours le maximum : $n/N = 1$.

Pour définir la transition liquide-solide, un premier critère possible est la divergence du temps de piégeage. Nous avons vu qu'il est bien défini. Mais l'inconvénient de la mesure d'un temps qui diverge est qu'il est difficile de prévoir le temps de calcul nécessaire à sa mesure. Cet argument pratique nous a fait préférer une grandeur construite dans le même esprit que l'écart relatif moyen (voir l'éq. 6.5) :

$$\Delta = \left\langle \frac{1}{\mathcal{N}_i(t)} \sum_{j \sim i} \left(1 - \frac{r_{ij}^2(t)}{r_{ij}^2(t+T)} \right) \right\rangle_i, \quad (6.8)$$

où les individus indicés par j sont les $\mathcal{N}_i(t)$ voisins du i -ème point à l'instant t . Le temps T est une constante, à taille de troupeau fixée. Pour fixer cette constante, nous avons mesuré τ dans la phase liquide à $N = 1024$. Puis nous avons choisi T tel que $T \gg \tau$. Enfin, à chaque taille de troupeau, nous calculons ce temps tel que $T \propto N$. L'idée est de laisser le temps à un marcheur aléatoire de traverser son propre troupeau de part en part. Ainsi, dans la phase liquide, $\langle \Delta \rangle = 1 + O(1/N)$. Dans la phase solide, les écarts relatifs moyens sont quasiment constants, donc $\langle \Delta \rangle \sim 0$.

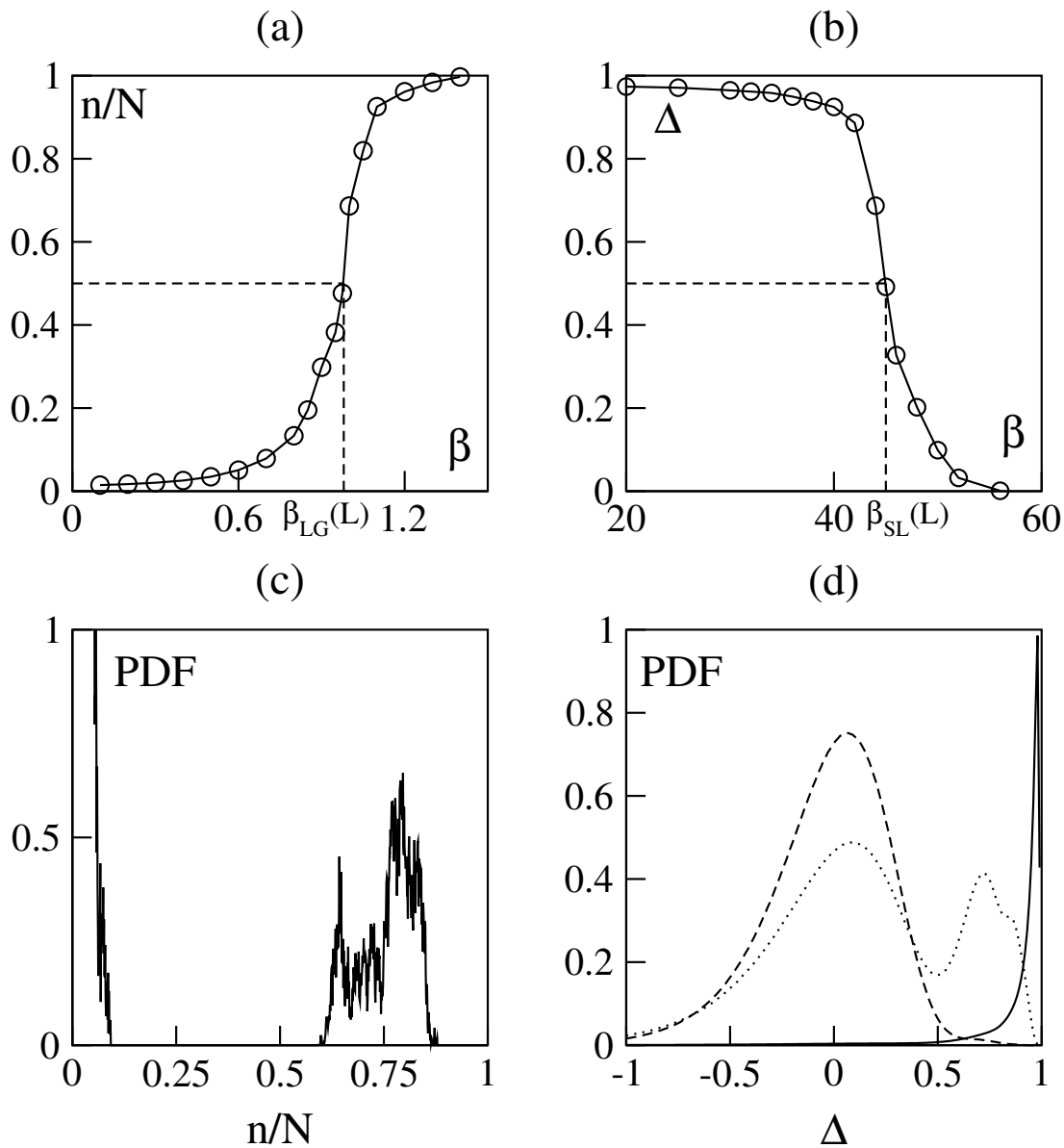


FIG. 6.5 – Nature des transitions de cohésion. Nous nous sommes placés à $\rho = 1/16$, $L = 128$, $\alpha = 1,0$, c'est-à-dire en phase fixe, $\eta = 1,0$ et avec le modèle Br2-Fh. (a) paramètre d'ordre de la transition gaz-liquide. (b) paramètre d'ordre de la transition liquide-solide. Nous avons fait figurer les seuils des transitions $\beta_{GL}(L)$ et $\beta_{LS}(L)$. (c) distribution des masses des différents agrégats au point de coexistence gaz-liquide, $\beta = 1,0$. (d) distribution du paramètre d'ordre Δ le long de la transition du liquide vers le solide, $\beta = 36,0$ (trait continu), $\beta = 48,0$ (trait pointillé) et $\beta = 60,0$ (trait discontinu).

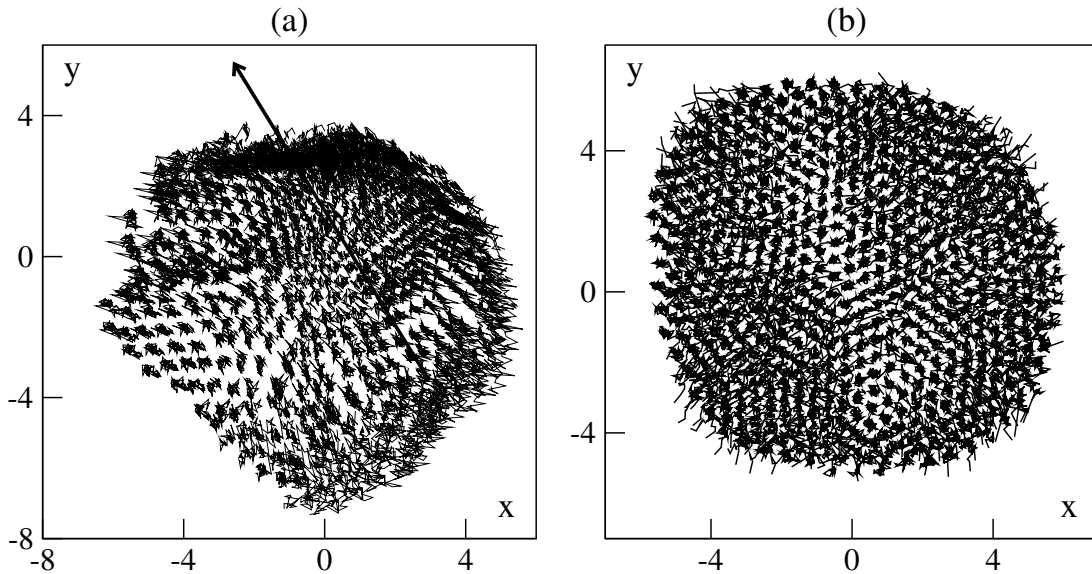


FIG. 6.6 – Coexistence de phases dans la transition vers l'ordre de position. Nous observons 5000 pas de temps des trajectoires de 512 animoïdes dans le référentiel lié à leur centre de masse et duquel nous avons enlevé les mouvements de rotations globales. Le modèle utilisé est Br2-Fh à bruit constant, $\eta = 1,0$. (a) : dans la phase mobile, $\alpha = 3,0$, $\beta = 70,0$. La flèche représente la direction du mouvement. (b) : dans la phase fixe, $\alpha = 1,0$, $\beta = 50,0$.

Sur les figure 6.5(a) et (b), nous observons les paramètres d'ordre de cohésion pour les transitions du modèles Br2-Fh, mais les comportements obtenus avec l'autre modèle sont similaires. Les courbes sont abruptes, mais rien de particulier ne nous permet de préjuger de la nature de ces transitions. Si nous étudions la distribution des valeurs du paramètre d'ordre au voisinage de la transition (figures 6.5(c) et (d)), nous observons une zone de coexistence de phase, ce qui est typique des transitions du premier ordre, comme nous le rappelons dans l'Annexe C. Ce résultat est assez satisfaisant vis-à-vis des transitions d'états de la physique à l'équilibre puisque les transitions de liquéfaction (réciproquement d'évaporation) et de solidification (réciproquement de fusion) sont des transitions du premier ordre.

Lors de la transition de cohésion des troupeaux, la coexistence est essentiellement spatiale : il existe sur l'espace des troupeaux de tailles différentes. Mais c'est aussi un processus dynamique, dans le sens où, à taille finie et à densité non nulle, il y a des échanges entre les troupeaux et le gaz d'individus indépendants qui les entoure et qui constitue une vapeur de pression saturante.

La coexistence de phases dans la transition liquide-solide se traduit par la présence dans le même troupeau de zones liquides et de zones solides. Elle est liée à

la présence des bords et à l'anisotropie du troupeau. En effet la présence des bords induit une certaine frustration sur la position des animoïdes du fait que la position de plus grande stabilité pour un membre d'un cristal est au centre de la maille cristalline, *i.e.* au centre d'un hexagone dans le cas présent. Cette configuration est impossible aux bords du troupeau. Lorsque la cohésion est assez forte, cette frustration est gelée. Mais à l'approche de la fusion du cristal, le désordre apparaît là où la frustration est la plus grande. Les troupeaux immobiles ont des propriétés microscopiques isotropes (figure 6.3(c)). Les parties liquides apparaissent donc d'abord à la périphérie, alors que le cœur reste cristallin (figure 6.6(b)). Lorsqu'il y a mouvement, la partie la plus agitée est située dans la tête (figure 6.3(d)). Les bords latéraux peuvent donc être solides tandis que la tête a déjà fondu (fig. 6.6(a)).

Enfin, il y a les transitions de mouvement. Nous conservons la même méthode que celle utilisée dans la Partie I. Le paramètre d'ordre est la vitesse moyenne sur la totalité des individus φ . Sur les visualisations directes des phases du modèle Br2-Fh, nous observons un changement de comportement du gaz en augmentant le terme d'alignement α . Des petits groupes apparaissent plus souvent, et se déplacent aussi plus rapidement. La phase reste gazeuse, puisque le paramètre d'ordre reste petit $n/N \ll 1$. Mais les groupes formés ont un mouvement plus rapide qu'une simple marche aléatoire. Pour savoir si nous sommes face à une phase particulière, nous définissons un nouveau paramètre : la vitesse moyenne calculée sur le plus gros agrégat C présent dans le gaz : φ_C . Bien sûr, les transitions de mise en mouvement gardent les propriétés que nous avons étudiées dans la Partie I. En revanche, les liens entre cohésion et mouvement n'ont rien d'évident et sont étudiés au Chapitre 8.

6.3.2 Les diagrammes des phases

Les transitions étudiées étant du premier ordre, nous utilisons le cadre théorique des transitions discontinues dans les systèmes à l'équilibre (voir Annexe C). Nous avons vu dans le Chapitre 3 que cette analogie fonctionne bien pour les transitions de mise en mouvement et nous supposons qu'il en est de même pour les transitions dues à la cohésion. Pour cela, il faut d'abord déterminer les propriétés asymptotiques du paramètre d'ordre, et notamment ses valeurs de part et d'autre de la transition et au point de transition (voir Annexe C).

Dans aucune des simulations réalisées nous n'avons observé de régime linéaire s'appliquant aux paramètres d'ordre concernant la cohésion ou l'ordre interne des troupeaux en fonction de chacun des paramètres de contrôle. Nous sommes donc enclins à penser que les transitions sont symétriques et que les valeurs asymptotiques des paramètres d'ordre de part et d'autre de chacune de ces transitions

sont 1 et 0, et que la valeur seuil telle que définie dans l'équation C.4 vaut $1/2$. C'est donc ce critère que nous utilisons pour déterminer les points de transitions (voir figure 6.5(a) et (b)) :

$$\left\langle \frac{n}{N} \right\rangle (\beta_{\text{GL}}) = \frac{1}{2}, \text{ pour la transition gaz - liquide,} \quad (6.9)$$

$$\langle \Delta \rangle (\beta_{\text{LS}}) = \frac{1}{2}, \text{ pour la transition liquide - solide.} \quad (6.10)$$

La difficulté première de ces simulations est de se placer dans le régime asymptotique. Pour étudier la transition liquide-solide, il suffit de former un troupeau, les positions et les vitesses de chacun des individus étant choisies aléatoirement à l'intérieur de celui-ci, et d'attendre sa thermalisation. Nous avons fixé le temps de transitoire sous la forme $T_{\text{trans.}} \propto N$.

Dans le cas de la transition de cohésion, nous cherchons à déterminer les paramètres tels qu'un troupeau existe, ce qui est légèrement différent de chercher ceux tels qu'un troupeau se forme. Dans la première version, nous cherchons la limite de cohésion, dans le second, il s'agit d'un problème d'agrégation. Ici, nous partons donc d'un troupeau déjà formé, sans ordre intérieur. Dans la phase cohésive, une dynamique interne se met en place, mais les individus ne quittent pas le troupeau. Dans la phase gazeuse, le troupeau se désagrège. Dans le chapitre suivant, nous établissons une analogie avec une goutte qui s'évapore et nous conservons ce vocabulaire tout au long de notre propos. La fin du régime transitoire correspond à la fin de l'évaporation.

Les transitions étant du premier ordre, il est imaginable que le système reste bloqué dans un état métastable. Lors de la transition vers le solide, le bruit intrinsèque au modèle est suffisamment fort pour obliger le système à explorer tout l'espace des phases. Dans la transition de cohésion, les états métastables possibles sont soit un troupeau qui est trop massif par rapport à sa valeur asymptotique, soit un troupeau qui est moins gros, le complément étant regroupé en une autre région de l'espace. Dans le monde physique, il s'agirait de sur-évaporation. Ce dernier cas est le plus défavorable. Pour le quitter, il faut que les deux groupes se rejoignent. Dans le cas des gouttelettes immobiles, celles-ci suivent une marche aléatoire avec une vitesse petite, non nulle puisque le paramètre d'ordre φ converge vers zéro comme $L^{-d/2}$ (nous vérifions cette assertion au Chapitre 8). Le temps nécessaire pour quitter cet état métastable peut donc être très grand. Dans la phase volante, le problème est moins crucial, la vitesse des agrégats étant de l'ordre de v_0 . Comme nous travaillons en système bidimensionnel, nous sommes sûrs de visiter tous les états possibles pourvu que nous attendions assez longtemps. Ceci signifie aussi que le problème de la cohésion tridimensionnelle est autrement plus difficile.

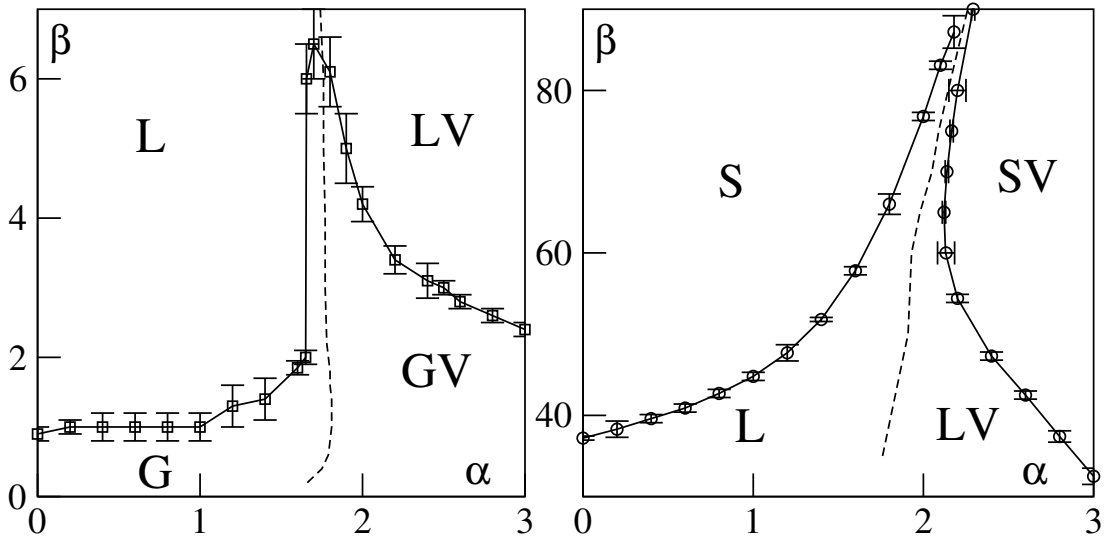


FIG. 6.7 – Diagramme des phases du modèle Br2-Fh à bruit constant, densité globale non nulle et taille finie. $\eta = 1,0$, $\rho = 1/16$, $N = 2025$, $L = 180$. Nous avons utilisé les notations suivantes : G pour gaz, L pour liquide, S pour solide et V pour volant. Les diagrammes de gauche et de droite sont réalisés avec le même système mais pour des échelles du terme de cohésion β différentes. Les lignes discontinues correspondent au transition de mouvement.

Si on ne comprime pas trop le troupeau à l'instant initial, l'évaporation n'est pas explosive : ce sont plutôt des petits groupes qui quittent le troupeau principal. Nous minimisons alors les risques d'obtenir un état sur-évaporé. Le régime stationnaire atteint, nous calculons les paramètres d'ordre. Les moyennes peuvent être effectuées au cours du temps. Mais il est aussi possible d'effectuer des moyennes sur les réalisations différentes en changeant la condition initiale, avant évaporation. Au Chapitre 7, nous vérifions que l'évaporation d'une gouttelette mène effectivement à l'état d'équilibre. Pour déterminer les lignes de transition, nous procédons en fixant deux paramètres et en variant le troisième par dichotomie. La précision de ce processus est portée dans les barres d'erreur.

Avec le modèle Br2-Fh, à taille finie $N = 2025$, à densité globale fixée $\rho = 1/16$, et à bruit constant $\eta = 1,0$, nous obtenons le diagramme de la figure 6.7. Nous y retrouvons les traits principaux décrits précédemment : toutes les phases dont le gaz *volant*. À toutes les lignes correspond une transition du premier ordre. Le seul point vraiment étonnant concerne la déformation des lignes limitant les zones de cohésion et d'ordre à l'approche de la transition de mouvement. Le Chapitre 8 est dédié à l'étude et à la compréhension de cette région du diagramme des phases.

Le modèle Br1-Fh possède les mêmes phases que le modèle Br2-Fh. Nous vérifions aisément le lien entre les paramètres α et β . Conformément à nos remarques

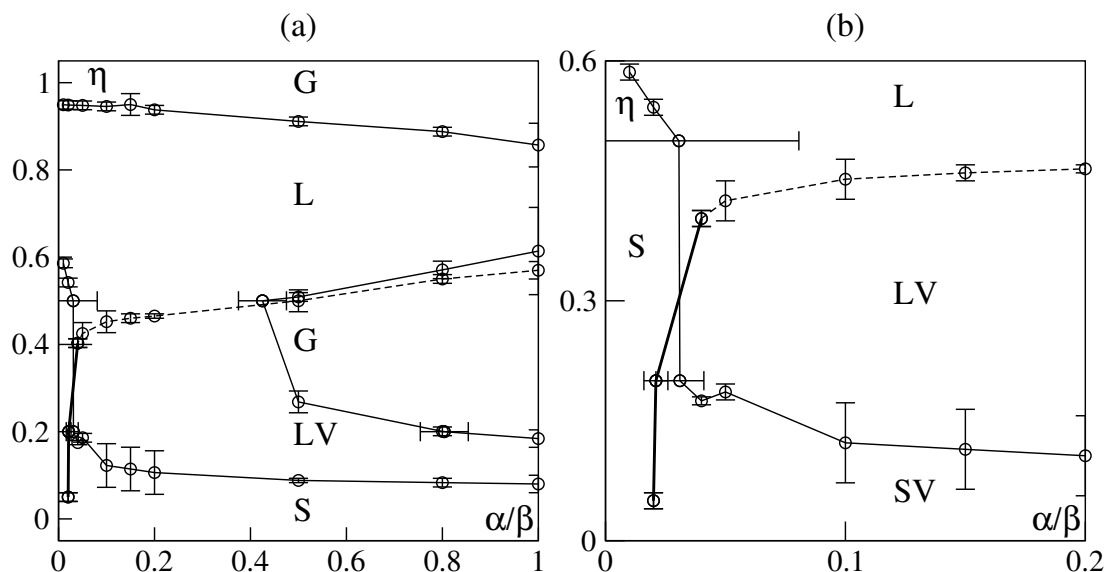


FIG. 6.8 – Diagramme des phases du modèle Br1-Fh à densité globale non nulle et taille finie. $\rho = 1/16$, $N = 1024$, $L = 128$, à paramètre de cohésion constant $\beta = 1,0$. Nous avons utilisé les notations suivantes : G pour gaz, L pour liquide, S pour solide et V pour volant. Les transitions de mouvement sont continues le long des lignes en trait interrompu et elles semblent être du premier ordre le long de la ligne en trait gras. La figure (b) est un agrandissement de la figure (a)

concernant les équations 6.2 et 6.4, les transitions ont lieu à $\frac{\beta}{\alpha} = \text{cste}$. Cette constante dépend de l'amplitude du bruit. Lorsque nous fixons l'amplitude de la cohésion β , nous obtenons des transitions vers la cohésion et vers l'ordre de position qui sont aussi du premier ordre. La mise en mouvement, quant à elle, correspond à une transition continue, comme nous l'attendions. Cependant, il existe une partie du diagramme pour laquelle cette transition est du premier ordre. Il s'agit de la zone cristalline de la figure 6.8, à faible bruit η et faible alignement α . À petite taille, la ligne de la transition de mise en mouvement des cristaux est quasiment verticale, *i. e.* s'effectue à bruit constant, elle correspond donc à une transition du premier ordre comme celle du modèle Br2-Fh.

Enfin, notons que, dans chacun des diagrammes représentés sur les figures 6.7 et 6.8, à certaines parties de la ligne de la transition de mise en mouvement des troupeaux semblent correspondre des transitions de cohésion ou d'ordre de position. Ainsi est-il possible de passer d'un liquide fixe à un liquide mobile en passant par la phase gazeuse et d'un solide fixe à un cristal volant en passant par la phase liquide. La route vers le mouvement semble donc passer par une phase moins ordonnée. Le Chapitre 8 est destiné à comprendre cette remarque.

Limite du troupeau infini sur un espace ouvert

Sommaire

7.1	Évaporation d'une gouttelette	107
7.2	Tension de surface des troupeaux	110
7.3	Les effets de taille finie	112
7.4	Une limite après l'autre	114

Dans le chapitre précédent, nous avons mis en évidence l'existence de phases sur des systèmes de tailles restreintes et à densité globale ρ fixée. Tout d'abord, nous devons prouver que ces phases, cohésives et ordonnées, existent dans la limite thermodynamique et que ce ne sont pas de purs *artefacts* numériques. Cela nécessite l'étude des effets de taille. Ensuite nous devons nous demander si un troupeau, dont les membres suivent un ordre positionnel ou non, peut perdurer dans un espace ouvert. Nous appelons ce cas la limite à densité nulle, au sens où un espace ouvert est assimilé à un espace infini. Cette limite peut être vue à nombre fixé d'individus dans un troupeau. Mais nous pouvons nous demander aussi s'il existe une limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) sur un espace ouvert ($\rho \rightarrow 0$). Le but de ce chapitre est de montrer qu'il existe un diagramme des phases dans de telles conditions. Nous n'utilisons que le modèle Br2-Fh, mais nous pensons que cette étude est généralisable.

7.1 Évaporation d'une gouttelette

Nous avons imaginé deux méthodes pour parvenir à nos fins. La première ne permet pas de conclure mais apporte des informations intéressantes sur notre système. Voilà pourquoi nous la présentons.

Dans le monde physique, un liquide isolé n'existe pas à densité nulle. Il est toujours en équilibre avec une vapeur de pression saturante. Diminuer la densité glo-

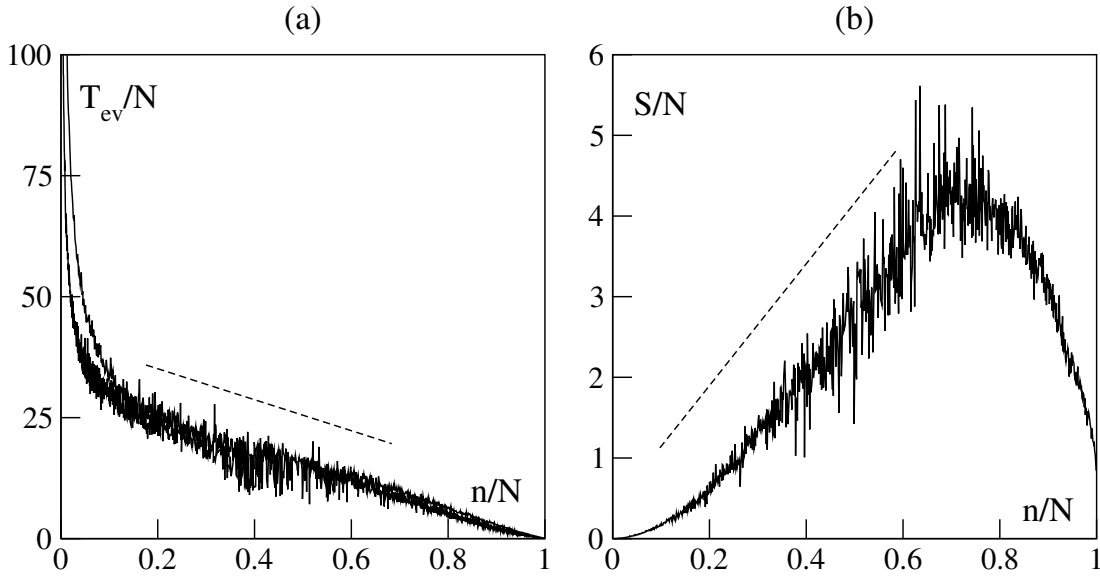


FIG. 7.1 – Dispersion des troupeaux. Nous avons placés des gouttelettes dans la phase immobile gazeuse du modèle Br2-Fh ($\alpha = 1,0$, $\beta = 0,2$ et $\eta = 1,0$) à faible densité $\rho = 1/256$. (a) : temps moyen d'évaporation en fonction de la masse du troupeau. Deux tailles sont représentées, $L = 512$ et $L = 1024$. (b) : surface d'un troupeau en fonction de sa masse au cours d'une dispersion. Abscisses et ordonnées ont été normalisées par la masse initiale. Les droites discontinues sont portées à titre de comparaison.

bale, c'est effectuer une détente. Par la thermodynamique classique, nous savons alors qu'il y a évaporation du liquide de telle manière à atteindre un nouvel équilibre des pressions, ayant gardé la température constante. Précédemment, nous avons observé l'existence de triplets de paramètres telles qu'une goutte contienne la totalité des individus présents dans le système. Mais au point de transition il y a coexistence du liquide et du gaz, donc existence d'une pression d'équilibre.

Nous voulons atteindre l'état stationnaire de la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) sur un espace ouvert ($\rho \rightarrow 0$), ce qui signifie employer des système de taille $L \gg \sqrt{N}$. Il y a donc deux difficultés pour l'étude numérique de cet état. La première est une question de temps de calcul. L'accession à l'état stationnaire nécessite un temps de thermalisation de l'ordre de N . Le second problème est dû à la mémoire nécessaire qui varie comme L^2 .

Une autre méthode possible est de considérer le régime transitoire. Qu'elle que soit la taille de la goutte, qu'elle que soit la taille de la boîte qui entoure la goutte, si elle est plongée dans des conditions qui sont opposées à son existence, elle s'évaporerait. Notre idée première est de dire que les effets de taille et les effets de confinement sont négligeables dans la dynamique d'évaporation.

D'abord que peut-on dire de cette dynamique ? Dans le cas des systèmes phy-

siques classiques, par exemple un composé binaire, nous savons que la dynamique d'une goutte d'un alliage dans un autre est gouvernée par le conflit entre les termes d'énergie volumique et surfacique. La résolution de ce problème a mené S. Allen et J. Cahn [3] à écrire l'équation suivante :

$$v_n = -\gamma\kappa, \quad (7.1)$$

où v_n est la vitesse normale de l'interface de la gouttelette, κ est son rayon de courbure et γ la tension de surface associée. La cohésion implique dans nos modèle l'existence d'une tension de surface. Supposons que l'équation 7.1 s'applique, supposons aussi que la densité locale d'animoïdes dans un troupeau est constante, alors la masse d'un troupeau est proportionnelle à sa surface (en dimension $d = 2$) : $n = \rho_{\text{loc}}\pi R^2$, où R est le rayon de la goutte. En intégrant l'équation 7.1 à partir du temps initial $t = 0$ où la goutte de taille initiale N est abandonnée, nous obtenons :

$$n(t) = N - \lambda t, \text{ avec } \lambda = 2\pi\rho_{\text{loc}}\gamma. \quad (7.2)$$

Nous attendons donc une décroissance linéaire de la taille de la goutte au cours du temps.

En pratique, nous utilisons une goutte que nous avons déjà thermalisée dans un état entièrement cohésif, proche du point de transition. Nous changeons les paramètres qui lui sont appliqués pour des valeurs correspondant à l'état gazeux. À chaque taille de troupeau, nous calculons le temps moyen T_{ev} nécessaire pour atteindre cette masse. Grâce à l'algorithme du pavage de Voronoï, nous calculons aussi le périmètre moyen de la goutte à chaque taille, ce qui nous donne accès à la surface de la goutte.

À première vue, l'évaporation est conforme à toutes nos hypothèses, sauf le comportement à temps court qui est gouverné par la dilatation de la goutte (voir figure 7.1(b) au voisinage de $n/N \sim 1$) et la fin du processus pour laquelle la pression de vapeur saturante a un impact sur la dynamique (fig. 7.1(a)). Ainsi, la masse décroît linéairement avec le temps. Aux mêmes moments, masse et surface sont proportionnelles. Cette dernière remarque valide l'hypothèse nécessaire à l'obtention de l'équation 7.2. De plus, les courbes pour différentes tailles semblent se superposer, ce qui signifierait que cette méthode serait une bonne manière d'obtenir le point de transition sans effet de taille. enfin, la figure présentée concerne des troupeaux fixes mais ces résultats sont généralisables aux phases mobiles.

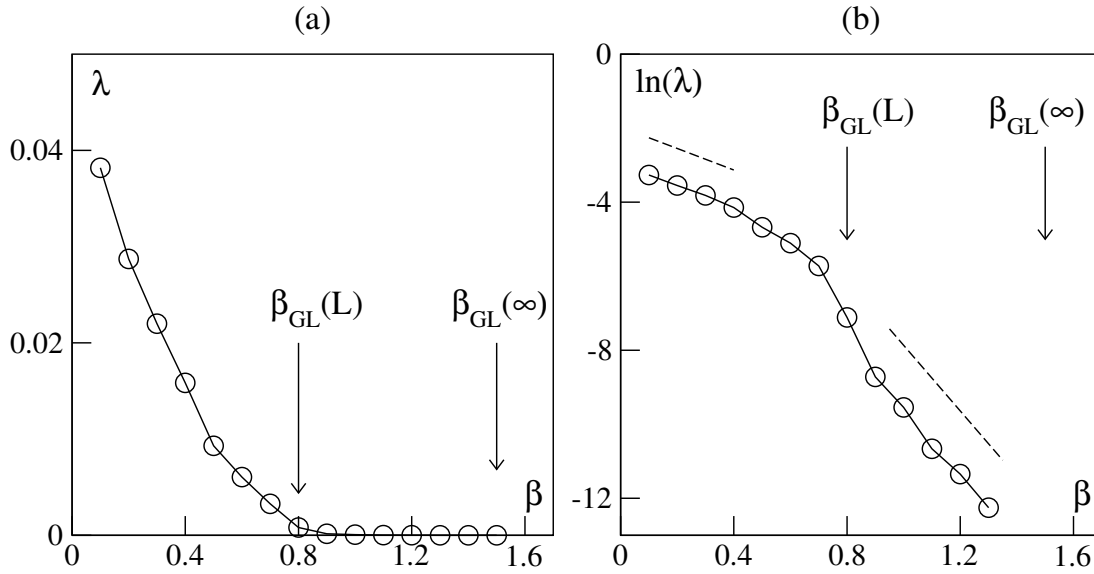


FIG. 7.2 – Tension de surface en fonction de la cohésion. (a) : en échelle linéaire, (b) en échelle semi-logarithmique, dans le cas d'une goutte immobile régie par le modèle Br2-Fh avec les paramètres suivants : $\alpha = 1,0$, $\eta = 1,0$, $\rho = 1/256$ et $L = 512$. Les points de transitions portés correspondent aux valeurs déterminées dans les paragraphes 7.3 et 7.4

7.2 Tension de surface des troupeaux

Comme attendu, la tension de surface λ mesurée tend vers zéro lorsque β augmente (fig. 7.2(a)). Cependant, il est difficile de déterminer numériquement la forme de cette dépendance, le temps d'évaporation typique divergeant à l'approche de la transition. Nous observons aussi des effets de taille sur les mesures de λ .

Pour pallier ces difficultés, nous pouvons construire un argument modélisant les variations de λ . Considérons que la décroissance de la masse n'est que linéaire. Entre le temps initial $t = 0$ et le temps final T , la taille du troupeau décroît depuis le nombre total d'individus N jusqu'à la masse d'équilibre $\langle n \rangle$:

$$\frac{n(t)}{N} = 1 - \frac{t}{T} \left(1 - \frac{\langle n \rangle}{N} \right). \quad (7.3)$$

Supposons que le temps total d'évaporation est proportionnel à la taille initiale N ; cette hypothèse est assez bien vérifiée sur la figure 7.1(a). Alors $\tilde{T} = T/N$ est le temps typique nécessaire pour que deux particules se séparent. En fonction de \tilde{T} , nous déduisons des équations 7.2 et 7.3 :

$$\lambda = \frac{1}{\tilde{T}} \left(1 - \frac{\langle n \rangle}{N} \right). \quad (7.4)$$

Au début de la Partie II, nous avons construit une force de cohésion équivalente à un potentiel harmonique. Le temps typique nécessaire à un marcheur aléatoire pour quitter un tel puits est donné par : $\tilde{T} \propto \exp(\Delta U)$, où ΔU est la profondeur du potentiel. Avec l'expression de la cohésion 6.1, $\Delta U \sim \beta (R_a - R_0)$.

Le second facteur de l'équation 7.4 est directement lié au paramètre d'ordre. D'après les effets de taille des transitions discontinues des systèmes à l'équilibre (voir l'Annexe C), celui-ci varie comme la tangente hyperbolique en fonction du champ, ce qui est assez bien vérifié dans nos transitions (fig. 6.5) :

$$\left\langle \frac{n}{N} \right\rangle \sim \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(aL^d (\beta - \beta_{\text{GL}}(L)) \right) \right], \quad (7.5)$$

où a est une constante et $\beta_{\text{GL}}(L)$ le point de transition gaz-liquide à densité fixée. Nous avons intégré les corrections d'ordre supérieur en fonction de la taille dans la valeur du point de transition. Nous avons donc maintenant tous les éléments pour déterminer les dépendances de λ . En développant de part et d'autre de β_{GL} , nous obtenons :

$$\lambda \sim \frac{1}{2} \exp \left[-aL^d (\beta - \beta_{\text{GL}}(L)) \right] \exp(-\beta \Delta R), \text{ pour } \beta \gg \beta_{\text{GL}}(L),$$

$$\lambda \sim -\frac{1}{2} \left\{ 1 - \exp \left[aL^d (\beta - \beta_{\text{GL}}(L)) \right] \right\} \exp(-\beta \Delta R), \text{ pour } \beta \ll \beta_{\text{GL}}(L).$$

La première expression est gouvernée par les effets de taille à la fois par le terme de volume et par la valeur du point de transition. En système infini, nous attendons à ce que l'évaporation soit de plus en plus difficile : $\lambda \rightarrow 0$. La seconde relation ne dépend que marginalement de la taille, ce qui explique la superposition des courbes sur la figure 7.1(a).

Les mesures de la tension de surface confirment en partie notre calcul dimensionnel. Nous observons nettement le changement de régime autour de la valeur $\beta_{\text{GL}}(L)$. Les dépendances exponentielles apparaissent aussi mais nous n'avons pas pu vérifier la dépendance en fonction de la taille. En tout cas, l'argument initial qui nous a menés à étudier le régime transitoire pour déterminer la transition asymptotique à la limite de densité nulle se révèle trop naïf. Mais cette étude nous a permis la mesure de la tension de surface. De plus, elle prouve le bien-fondé de notre méthode pour thermaliser un troupeau dans le régime de coexistence gaz-liquide, puisque nous observons que l'évaporation n'est pas explosive. Mais, à partir d'une trempe douce des troupeaux depuis un état cohésif, nous atteignons en moyenne l'état d'équilibre.

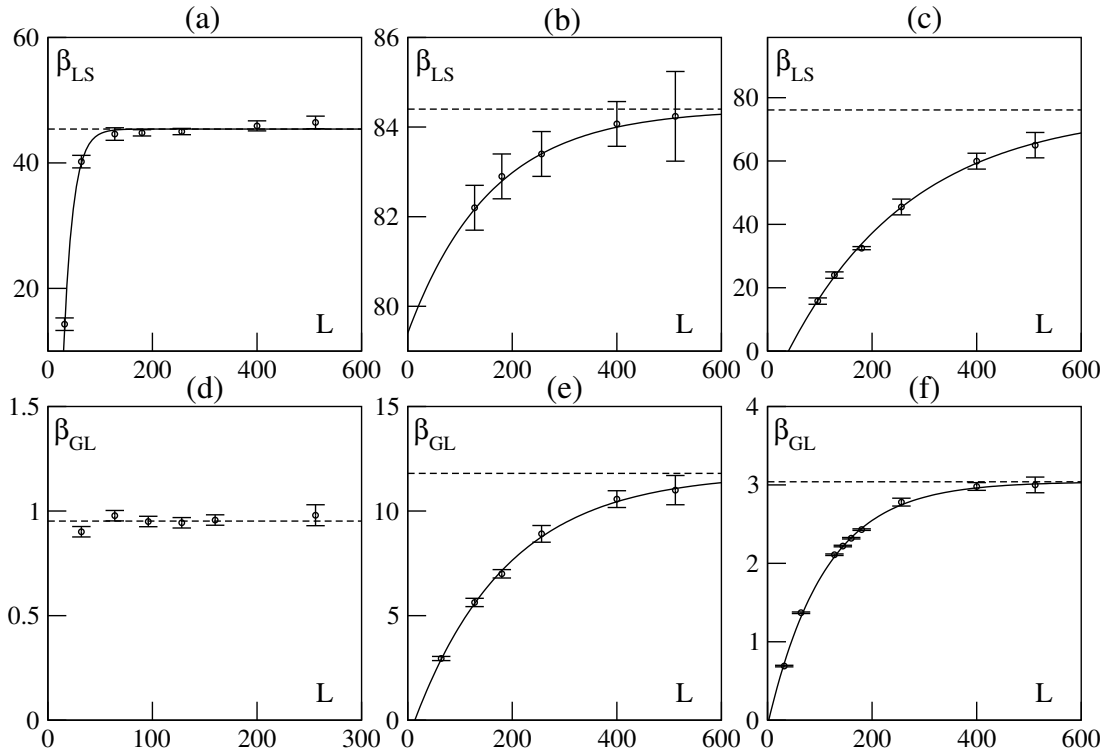


FIG. 7.3 – Effets de taille finie sur les transitions dues à la cohésion. La ligne du haut présente les résultats concernant la transition liquide-solide, celle du bas la transition gaz-liquide à densité fixée $\rho = 1/16$, pour le modèle **Br2-Fh** à $\eta = 1,0$. (a) et (d) les troupeaux sont fixes ($\alpha = 1,0$); (c) et (f) ils sont mobiles ($\alpha = 3,0$); (b) et (e) ils sont mobiles, mais proches de la transition de mouvement. (b) : $\alpha = 2,1$. (e) : $\alpha = 1,75$. Les lignes continues sont des ajustements exponentiels, les lignes discontinues sont les valeurs asymptotiques.

7.3 Les effets de taille finie

Puisqu'une méthode indirecte ne permet pas de mesurer le point limite d'existence des troupeaux de taille infinie sur un espace ouvert, nous avons procédé à une étude plus systématique des effets de taille. Nous considérons maintenant le diagramme du modèle **Br2-Fh** tel qu'il a été déterminé dans le chapitre précédent : à petite taille et à densité fixée $\rho = 1/16$. Nous avons vu que les transitions vers la cohésion et vers l'ordre interne sont discontinues. Nous avons à notre disposition dans ce cas des prédictions concernant les systèmes à l'équilibre (voir Annexe C). De plus, nous avons vu dans le Chapitre 3 que celles-ci semblent bien s'appliquer à la transition de mouvement du modèle **Br2**. Nous avons donc étudié les transitions présentes avec le même cadre. Plus particulièrement, nous nous attendons à ce que la valeur du paramètre de contrôle β telle que le paramètre

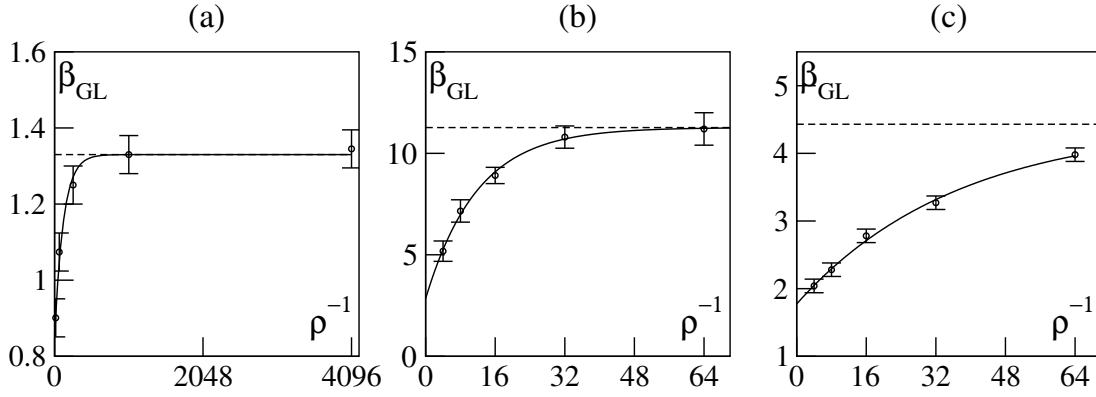


FIG. 7.4 – Détente des troupeaux à masse constante. Nous étudions les points de transition gaz-liquide du modèle Br2-Fh à bruit $\eta = 1,0$ en fonction de l'inverse de la densité globale. (a) : phase immobile, $\alpha = 1,0$, $N = 64$. (b) : près de la transition vers le mouvement, $\alpha = 1,75$, $N = 4096$. (c) : phase mobile, $\alpha = 3,0$, $N = 4096$. Les lignes continues sont des ajustements exponentiels, les lignes discontinues sont les valeurs asymptotiques.

d'ordre prenne sa valeur à la transition :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{n}{N} \right\rangle (\beta_{\text{GL}}) &= \frac{1}{2}, \text{ pour la transition gaz - liquide,} \\ \langle \Delta \rangle (\beta_{\text{LS}}) &= \frac{1}{2}, \text{ pour la transition liquide - solide,} \end{aligned}$$

converge exponentiellement avec la taille vers sa valeur asymptotique.

Nous avons réalisé cette étude pour six points bien choisis du diagramme. Elle a requis près de deux ans et demi de calcul ; il n'était donc pas question de déterminer le diagramme asymptotique dans son ensemble. Les points retenus sont pris dans les phases immobile ($\alpha = 1,0$) et mobile ($\alpha = 3,0$). Nous avons choisi aussi deux points proches de la transition vers le mouvement ($\alpha = 1,75$ pour la transition gaz-liquide, et $\alpha = 2,1$ pour la transition liquide-solide). Cela nous permet d'étudier la zone de forte déformation.

Dans tous les cas, nous observons une convergence des points de transition $\beta_{\text{GL}}(N, \rho)$ et $\beta_{\text{LS}}(N, \rho)$ (voir figure 7.3). La convergence est exponentielle, sauf lors de la transition du gaz vers le liquide fixe pour laquelle les effets de taille ont un faible impact. Cela s'explique mieux en considérant les phases mobiles et les travaux qui s'y rapportent, travaux présentés dans le Chapitre 2. Dans la phase mobile, les effets de taille sont beaucoup plus prononcés. En effet, nous y avons vu que la mise en mouvement des troupeaux implique des corrélations à longue portée, qui se traduisent par des modes acoustiques. Une perturbation sera alors propagée dans le milieu. Dans le Chapitre 6 nous avons vu que les effets de taille sont dus aux frustrations aux bords. Celles-ci créent des mouvements plus

désordonnés. Ces perturbations sont rapidement amorties dans un troupeau fixe, alors qu'elles sont propagées dans tout le système lorsqu'il bouge.

7.4 Une limite après l'autre

L'autre effet jouant sur la détermination du point asymptotique de la cohésion en espace ouvert est la pression de vapeur saturante. Pour en mesurer l'impact, nous pouvons nous placer à taille de troupeau N constante et varier la taille de l'espace L . Bien sûr ce problème ne se pose que pour la détermination de la ligne gaz-liquide. Lorsque la transition liquide-solide apparaît, il n'y a déjà plus de gaz résiduel.

Lorsque le volume de la simulation augmente, c'est-à-dire lorsque ρ^{-1} augmente, les points de transition sont déplacés vers des valeurs plus élevées de la cohésion (figure 7.4). De nouveau, nous remarquons que les variations enregistrées sont plus importantes parmi les troupeaux mobiles. Par des ajustements exponentiels, nous modélisons raisonnablement bien ces courbes et extrapolons la valeur à densité nulle $\beta_{\text{GL}}(N)$.

Pour connaître le point de transition thermodynamique en espace ouvert, il y a deux façons de raisonner. On peut considérer qu'il s'agit de détendre un système thermodynamique, ou qu'il s'agit de prendre en compte les effets de taille d'un troupeau en espace ouvert. Nous avons utilisé les deux méthodes. Pour cela nous calculons un ensemble de systèmes à des tailles de troupeaux différentes et à des densités globales différentes. Ensuite, dans la première méthode, nous déterminons pour chaque densité ρ la valeur thermodynamique $\beta_{\text{GL}}(\rho)$ et nous en observons les variations. On constate sur la figure 7.5 que la détente a un comportement exponentiel, nous pouvons donc en mesurer la valeur asymptotique.

La seconde méthode consiste à mesurer la valeur du point de transition après détente pour chaque masse de troupeau : $\beta_{\text{GL}}(N)$. Ces valeurs convergent aussi exponentiellement (fig. 7.5). Les points de transition obtenus par l'une ou l'autre méthode sont très proches. Nous pouvons raisonnablement penser qu'ils sont identiques. Il faut souligner que les sources d'erreur sont triples. D'abord il y a la mesure des valeurs $\beta_{\text{GL}}(\rho, N)$ qui dépend de la qualité statistique de chacun des points des paramètres d'ordre. Ensuite, intervient la qualité de la dichotomie, méthode employée pour mesurer $\beta_{\text{GL}}(\rho, N)$. Enfin il y a la qualité des ajustements nécessaires à la détermination de $\beta_{\text{GL}}(\rho)$, $\beta_{\text{GL}}(N)$ et β_{GL} . Compte-tenu de toutes ces sources d'erreurs l'accord entre les deux méthodes est très bon (fig. 7.5).

En conclusion, nous avons défini et étudié la tension de surface du modèle Br2-Fh. Nous avons écrit un argument montrant qu'elle est soumise aux effets de taille mais n'avons pas pu en vérifier l'acuité. Puis nous avons étudié les effets de

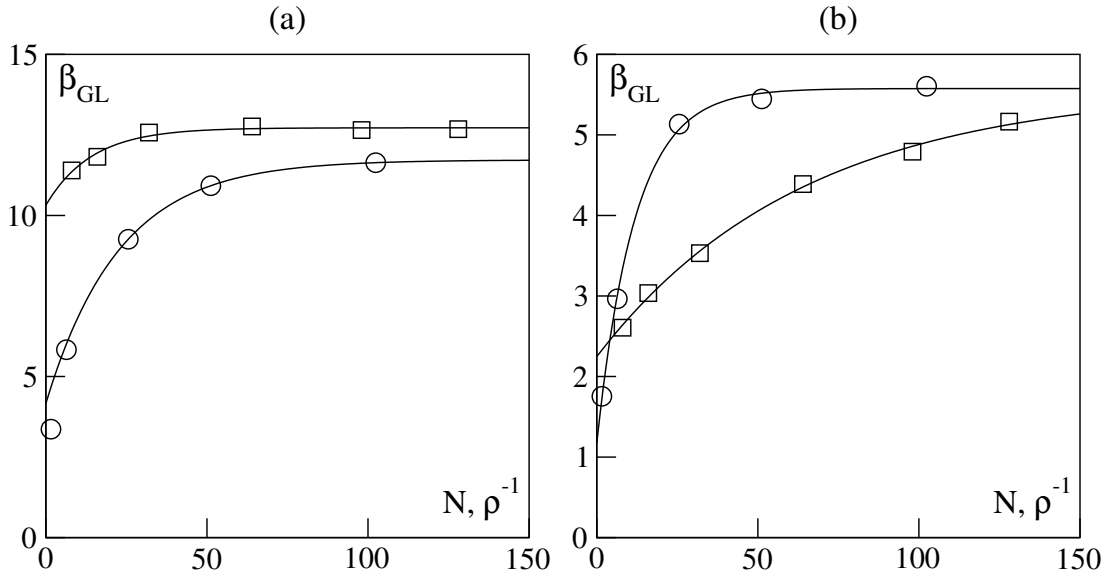


FIG. 7.5 – Limite thermodynamique des points de transition de la cohésion en espace ouvert. Nous avons renormalisé les abscisses des courbes pour pouvoir les comparer. Nous étudions les courbes la limite de densité nulle étant déjà prise (\circ) en fonction de la masse N , ou la limite thermodynamique étant faite pour différentes densités ρ (\square). (a) : $\alpha = 1,75$, on obtient les valeurs asymptotiques suivantes $\beta_{GL}(\rho) \rightarrow 12,7$ et $\beta_{GL}(N) \rightarrow 11,7$. (b) : $\alpha = 3,0$, on obtient les mêmes valeurs asymptotiques par les deux méthodes $\beta_{GL} \sim 5,6$. Les lignes continues sont des ajustements exponentiels.

taille finie sur les points de transition de cohésion et d'ordre interne. Ils sont du même type que dans les systèmes à l'équilibre. Nous avons observé les effets d'une détente sur l'existence de la phase liquide : malgré la disparition de la vapeur de pression saturante, les troupeaux perdurent, non seulement à petite taille de système mais aussi dans la limite thermodynamique que nous nous sommes efforcés d'atteindre.

8

De l'agitation microscopique au mouvement macroscopique

Sommaire

8.1	Dynamique des phases établies	119
8.1.1	Mouvements des troupeaux	119
8.1.2	Dans le gaz	121
8.2	Transition de forme	123
8.2.1	Anomalies sur les effets de taille finie	123
8.2.2	Déformations dynamiques des troupeaux	125
8.3	Troupeaux en rotation	130

Lors des deux chapitres précédents, nous avons décrit les différentes phases présentes dans nos deux modèles. Puis nous avons montré l'existence d'une tension de surface, ce qui assure la cohésion des troupeaux. Enfin, nous nous sommes placés dans la limite des troupeaux infinis à densité nulle pour laquelle un troupeau cohésif reste regroupé, même dans un espace ouvert, et un cristal reste ordonné. Les mouvements des phases n'ont jusqu'alors pas été prises en considération. C'est le sujet du chapitre présent.

Nous étudions d'abord les propriétés des mouvements des phases cohésives. Puis nous nous intéressons à la phase gazeuse et nous discutons l'existence d'un gaz volant. Ensuite nous étudions la transition vers le mouvement et ses relations avec la structure interne du troupeau. Enfin nous observons sous certaines conditions des états de rotation, appelés *vortex*, et nous présentons une caractérisation de ces états.

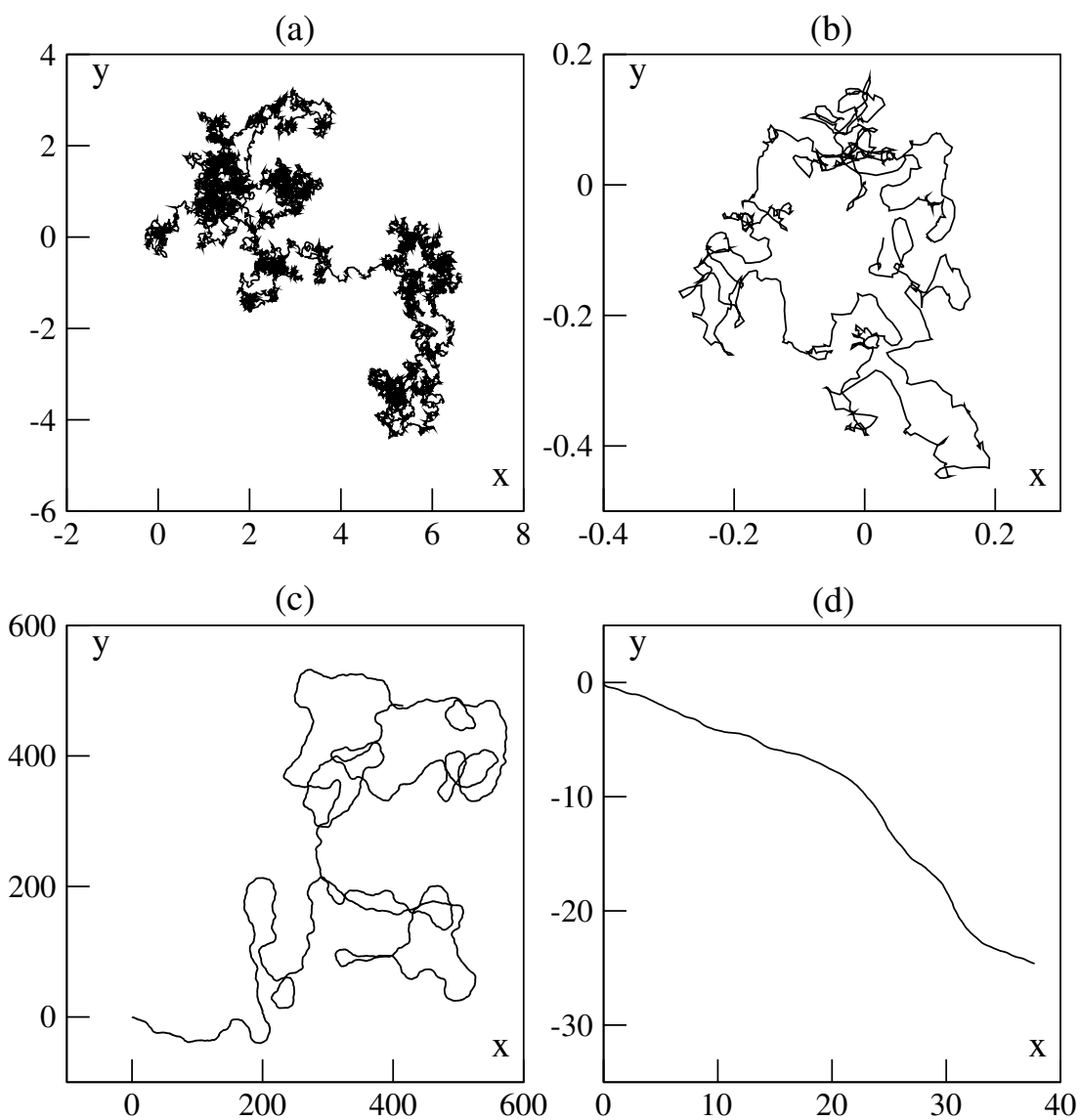


FIG. 8.1 – Trajectoires du centre de masse dans les phases cohésives fixe ou volante. (a) et (b) gouttelette fixe $\alpha = 1,0$ et $\beta = 40$. (c) et (d) gouttelette volante $\alpha = 3,0$ et $\beta = 40$. (a) et (c) sont des trajectoires totalisant 10^5 pas de temps. (b) et (d) en sont les mille premiers pas de temps. Le troupeau utilisé comporte 32 individus soumis au modèle Br2-Fh, à une densité de $\rho = 32$.

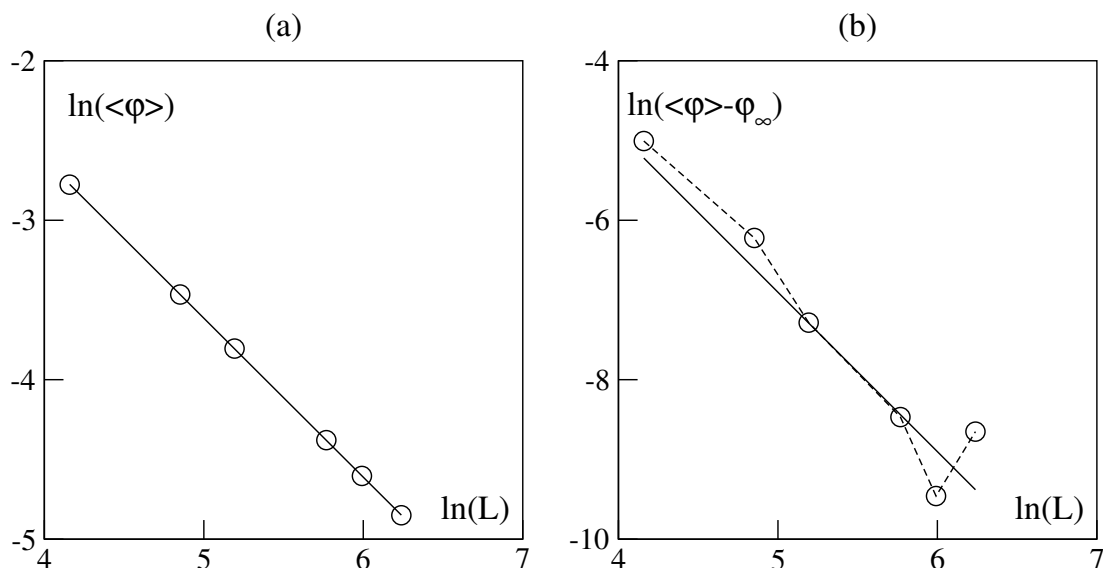


FIG. 8.2 – Vitesse du troupeau en phase cohésive de part et d’autre de la transition de mouvement en fonction de la taille. Le système suit le modèle Br2-Fh à une densité globale $\rho = 1/16$. (a) $\alpha = 1,0, \beta = 20$. (b) $\alpha = 3,0, \beta = 20$ Les droites correspondent aux mesures des exposants. Les échelles sont logarithmiques.

8.1 Dynamique des phases établies

8.1.1 Mouvements des troupes

L’observation de la dynamique macroscopique dans les états cohésifs, qu’ils soient cristallins ou non, est aisée. Il y a les troupes fixes, il y a les troupes en mouvement.

Cependant un troupeau fixe ne l’est pas vraiment. Il se déplace avec une vitesse normalisée $\varphi = |\langle \vec{v}_i \rangle|/v_0$ petite, mais non nulle tant que la taille des systèmes est finie. Et sa direction fluctue beaucoup tant et si bien que le troupeau réalise une marche aléatoire (fig. 8.1(a) et (b)). En revanche un troupeau mobile se déplace visiblement. Pour s’en convaincre, il suffit de comparer les distances parcourues sur chacune des trajectoires de la figure 8.1. Quantitativement, dans la phase fixe, le paramètre d’ordre tend vers 0, en fonction de la taille à densité globale fixée, suivant une loi algébrique d’exposant -1 . De même dans la phase mobile, il tend vers sa valeur asymptotique φ_∞ avec un exposant $-2,00(25)$. Ces exposants confirment les propriétés d’automoyennage du paramètre d’ordre (voir Annexe D).

Les mesures que nous présentons (figure 8.2) se sont avérées valables pour tout troupeau ordonné ou non. Les exposants sont les mêmes, les préfacteurs peuvent être différents. Ainsi un troupeau a un mouvement brownien dans la phase fixe,

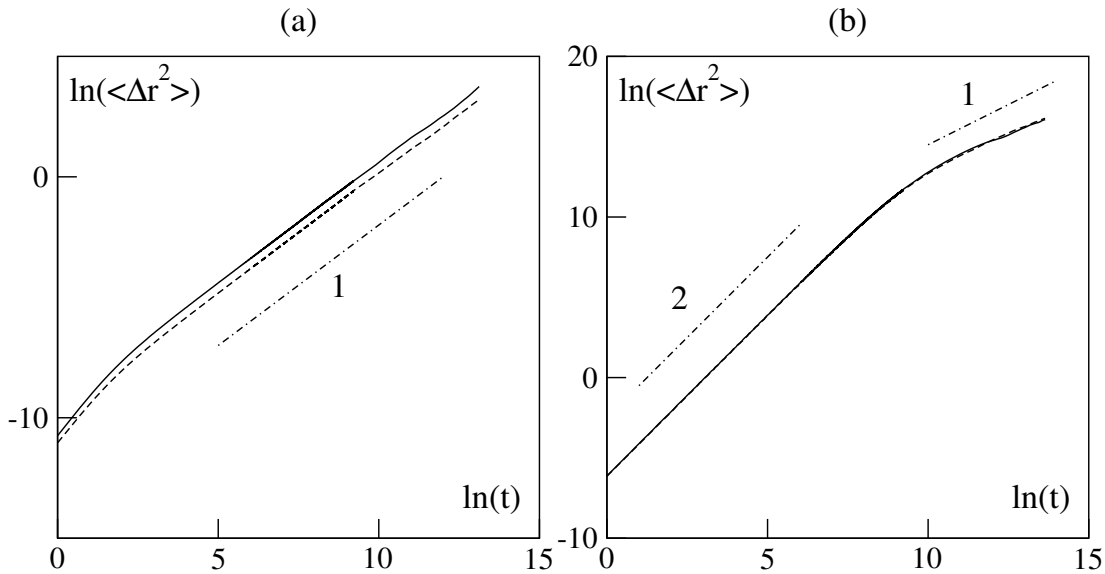


FIG. 8.3 – Diffusion du centre de masse pour des troupeaux cohésifs et ordonnés. Déplacement moyen carré en fonction du temps pour un troupeau de 32 individus dans la phase liquide (traits continus) et cristalline (traits discontinus) avec une densité globale $\rho = 1/16$ dans le modèle Br2-Fh. (a) troupeaux immobiles $\alpha = 1,0$, respectivement $\beta = 40$ et $\beta = 65$. (b) troupeaux en mouvement $\alpha = 3,0$, respectivement $\beta = 40$ et $\beta = 95$. Les droites en traits mixtes sont portées à titre de comparaison. Les pentes sont indiquées sur la figure. Les échelles sont logarithmiques.

mais un cristal fixe diffusera plus lentement qu'une gouttelette fixe, comme nous pouvons l'observer sur la figure 8.3(a). La différence de mouvement macroscopique pour les troupeaux mobiles et de cohésions différentes est marginale (fig. 8.3(b)).

Nous avons parlé des effets de taille sur la valeur de la vitesse initiale du troupeau. Il y en a aussi sur la trajectoire des troupeaux en mouvement dans la limite des temps longs. À temps court (figure 8.1(d)), elle est quasiment balistique, mais à temps long, elle semble brownienne (fig. 8.1(c)). Si nous comparons la diffusion de troupeaux volants de tailles croissantes, nous observons que le régime brownien est atteint pour des temps de plus en plus longs (fig. 8.4). Nous avons vu que, dans la phase mobile, les variations de la vitesse sont d'ordre N . On s'attend à ce qu'il en soit de même sur la direction de la vitesse. Pour le vérifier, nous avons défini un temps caractéristique de changement de régime en suivant la définition 5.12 mais en fixant l'exposant de diffusion à temps courts $\mu = 2$. Nous trouvons alors une dépendance de t_c linéaire avec la taille du troupeau N (figure 8.4(b)).

Le lien entre trajectoire macroscopique et mouvement microscopique n'a rien d'évident. Nous avons regardé la diffusion des individus d'un troupeau dans le

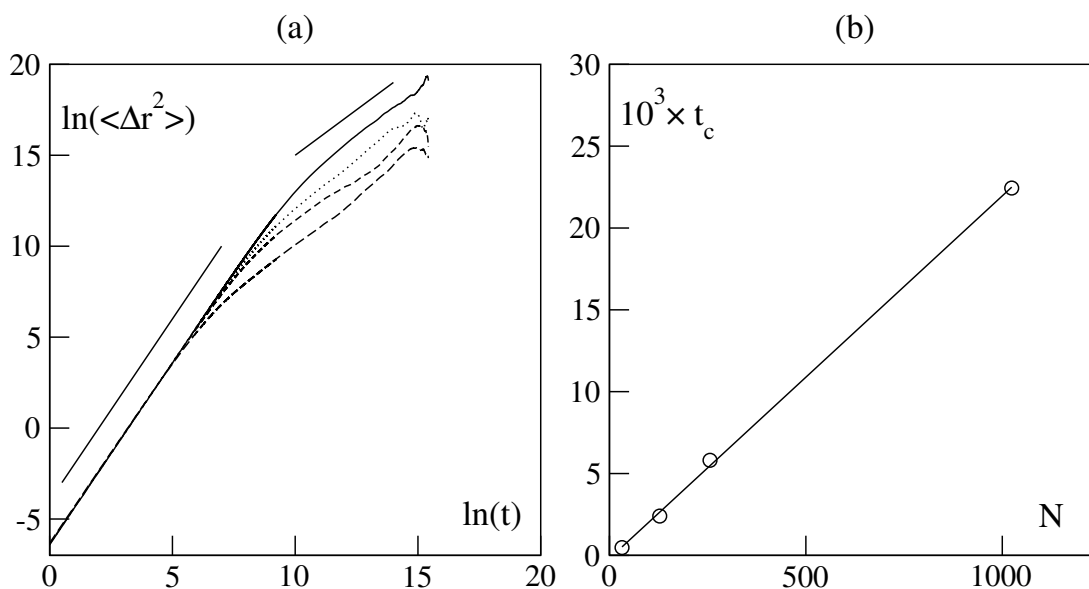


FIG. 8.4 – Déplacement carré moyen du centre de masse de troupeaux en mouvement. (a) différentes tailles de troupeaux sont portées sur la figure : $N = 1024$, 256, 128 et 32, de haut en bas, à une densité globale $\rho = 1/64$ et avec le modèle Br2-Fh. Les droites ont pour pentes respectives deux et un, de gauche à droite. Les échelles sont logarithmiques. (b) : temps caractéristique de changement de régime. Le trait continu est un ajustement linéaire des données (\circ).

référentiel du centre de masse. Lorsque le troupeau est cristallin, le mouvement des individus se limite à de petites oscillations autour de leur position d'équilibre. Dans la phase liquide, il y a diffusion des membres du troupeau. Elle est parfaitement brownienne en l'absence de mouvement global. En revanche, elle est non triviale lorsque le troupeau se meut. Comme l'ont montré les auteurs de [89], les trajectoires individuelles sont corrélées, même dans le référentiel du centre de masse, et la diffusion associée est anormale d'exposant $4/3$. Nous mesurons sur la figure 8.5 un exposant de $1,37(3)$, ce qui est tout-à-fait compatible.

8.1.2 Dans le gaz

Quelle est la problématique de ce paragraphe ? Nous désirons montrer qu'il existe, ou non, une phase gazeuse en mouvement dans nos modèles. Nous avons vu au Chapitre 1 que les études précédentes du modèle de Vicsek sans cohésion acceptaient l'existence de mouvement d'ensemble en faible densité. Celles-ci présentaient des résultats jusqu'à $\rho \sim 0,3$. Et la forme de la ligne critique, lors des mêmes travaux, laissait supposer qu'il en était de même qu'elle que soit la densité. Le bruit critique tendrait vers zéro lorsque la densité diminuait. Nous avons vu précédemment (voir les chapitres 1 et 3) que ces études sont numériquement plus

difficiles que ce que les auteurs des études originales ne le prévoyaient. Fort de notre expérience, nous allons aborder la question du gaz volant. Si cette transition existe dans les modèles sans cohésion, elle doit être présente dans les modèles comportant une force de rappel entre individus. La formule contraposée est vraie aussi. C'est pourquoi nous nous plaçons à cohésion faible, mais non nulle.

Nous avons déjà soulevé certains problèmes à la présence d'une telle phase. Suivant la définition du gaz, posée au Chapitre 6, les particules sont dispersées dans le volume. Elles peuvent néanmoins former de petits agrégats. Pour que la transition gaz-liquide soit bien définie, la taille de ceux-ci doit rester à peu près constante. Nous observons dans les encarts de la figure 8.6 que le paramètre d'ordre de la cohésion $\langle n/N \rangle$ décroît effectivement comme L^{-d} . Nous avons donc de petits troupeaux, sans interaction entre eux et qui ont chacun leur trajectoire propre. A priori, il n'y a aucune raison pour que la vitesse globale φ soit différente de zéro dans la limite thermodynamique. En fait, même à petites tailles, φ est marginalement différente de zéro et reste petite quelle que soit l'amplitude du terme d'alignement.

Nous avons donc défini un nouveau paramètre d'ordre de mouvement. Il s'agit de $\varphi_{\mathcal{C}}$ défini comme la moyenne des vitesses prise sur le plus gros agrégat \mathcal{C} du gaz. Nous définissons les fluctuations associées :

$$\begin{aligned}\varphi_{\mathcal{C}} &= \frac{\langle \vec{v}_i \rangle_{i \in \mathcal{C}}}{v_0}, \\ \sigma_{\mathcal{C}} &= n \left(\langle \varphi_{\mathcal{C}}^2 \rangle - \langle \varphi_{\mathcal{C}} \rangle^2 \right).\end{aligned}$$

Au premier regard, ce paramètre d'ordre a le comportement attendu pour chacune des transitions. De même, les fluctuations $\sigma_{\mathcal{C}}$ semblent avoir une discontinuité à petite taille. On peut regarder par exemple les simulations à $N = 256$ sur la figure 8.7.

Mais, puisque la taille du plus gros agrégat ne croît que très peu avec la taille du système, les effets de taille finie ne sont plus correctement définis. Sur la figure 8.6, nous observons $\varphi_{\mathcal{C}}$ dans chacune des phases, fixe ou mobile, définies par le comportement à petite taille sur le modèle Br2-Fh. Dans les deux cas, cette grandeur diminue algébriquement vers 0, mais très lentement. L'exposant mesuré est de l'ordre de 0,1.

Dans une transition du premier ordre, nous nous attendons à ce que les fluctuations soient représentées par un pic de Dirac (pour exemple voir la figure 3.2). Les effets de taille sont tels que le pic est de plus en plus net au fur et à mesure que la taille augmente. Ici la discontinuité a tendance à disparaître lorsque la taille augmente (fig. 8.7). La forme asymptotique semble plus proche d'un saut.

Certes, il y a un changement de comportement. Mais nous ne pouvons pas y attribuer une transition de phase. Notons que ce point de vue vaut pour la densité

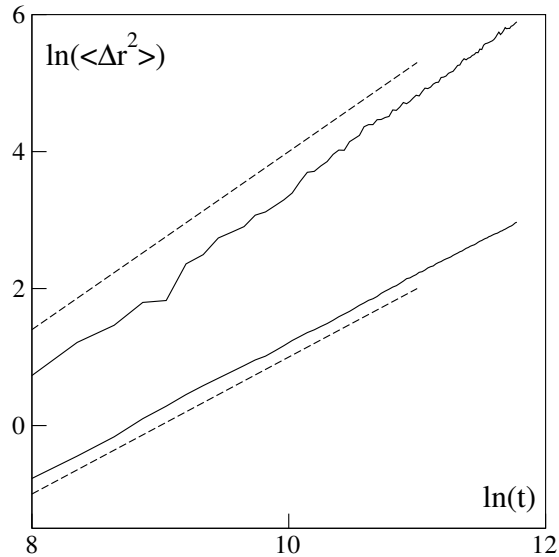


FIG. 8.5 – Diffusion individuelle dans les troupeaux mobiles et immobiles. Déplacement carré moyen des 10000 membres d’une gouttelette ($\beta = 40,0$) fixe (courbe du bas : $\alpha = 1,0$) et en mouvement (courbe du haut : $\alpha = 3,0$). Nous avons utilisé le modèle Br2-Fh. Les lignes discontinues correspondent aux prédictions théoriques : pente 1 dans le liquide fixe, pente $4/3$ dans la gouttelette volante.

globale $\rho = 1/16$. On pourrait imaginer qu’il y ait une densité seuil $\rho_s \geq 1/16$ telle qu’au-dessus de celle-ci existe un gaz volant.

8.2 Transition de forme

8.2.1 Anomalies sur les effets de taille finie

Puisque les phases cohésives et cristallines existent sous la forme de troupeaux fixes ou en mouvement, nous pouvons chercher à caractériser la transition vers le mouvement dans chacune de ces phases avec chacun des deux modèles. Après avoir lu le Chapitre 3, nous pourrions tout aussi bien nous dire que c’est complètement inutile. Les transitions ont été étudiées en densité homogène. Nous y avons vu que ni les effets de taille, ni les caractéristiques des quantités thermodynamiques ne varient en changeant la force d’interaction. Il y a cependant un point fondamentalement différent entre ces deux études : ici chaque individu évolue dans un espace à surface libre qui est contrainte par une tension de surface. Cette dernière est elle-même intrinsèque aux troupeaux. En revanche, dans le Chapitre 3, l’espace infini était uniformément rempli d’animaux. Au point de vue méthode, nous n’avons étudié que le modèle Br2-Fh, mais nous pensons que les phénomènes montrés existent avec Br1-Fh.

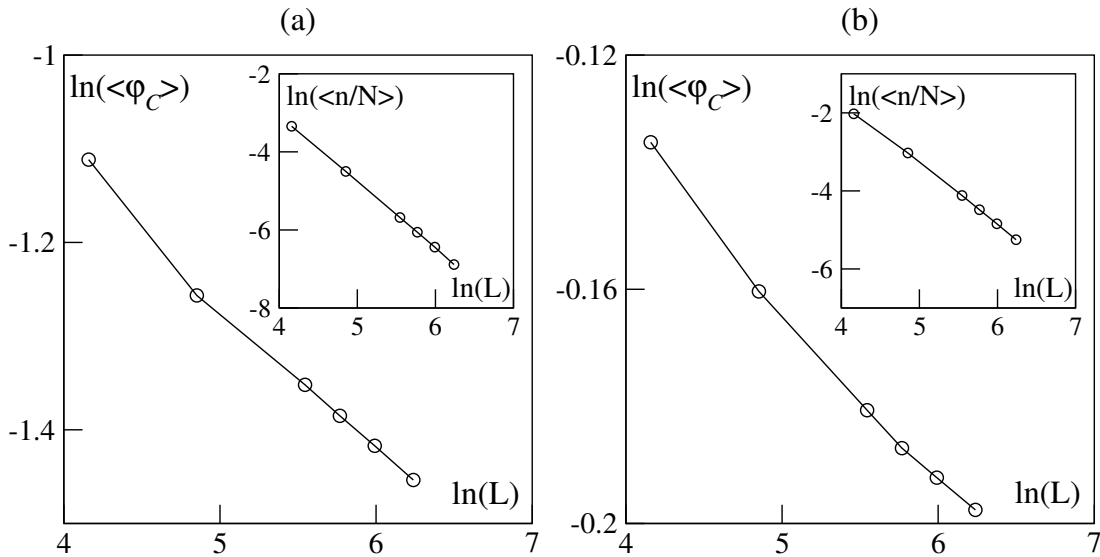


FIG. 8.6 – Vitesse du plus gros agrégat en phase gazeuse de part et d'autre de la possible transition de mouvement en fonction de la taille. Le système suit le modèle Br2-Fh à une densité globale $\rho = 1/16$. (a) $\alpha = 1,0$, $\beta = 0,5$. (b) $\alpha = 3,0$, $\beta = 0,5$. Les encarts représentent les effets de taille sur la valeur du paramètre d'ordre de la cohésion. Les échelles sont logarithmiques.

Tant que nous étudions les petites tailles, rien de particulier ne se passe. Le paramètre d'ordre de mouvement suit une ligne caractéristique d'une transition du premier ordre avec des effets de taille compatibles avec ceux que nous avons déjà vus (encart de la figure 8.8(a)). À partir d'une certaine taille de troupeaux apparaissent deux résultats nouveaux. La figure 8.8 les illustre. Dans la zone de transition vers le mouvement, il n'y a plus cohésion parfaite ni d'ordre cristallin. Lorsque nous considérons une gouttelette liquide, celle-ci se désagrège, lorsqu'il s'agit d'un cristal, il se liquéfie. L'apparition de ce désordre retarde la transition de mouvement. Sur la figure 8.8(a), φ possède un pic. Il correspond au début de la transition lorsque le troupeau reste cohésif. Ensuite il semble qu'il y ait un régime linéaire en fonction de l'alignement, régime qui n'existait pas en densité quasi-homogène. Enfin, la transition a brusquement lieu ; la gouttelette est à nouveau cohésive. Dans un solide, les phénomènes en jeu sont moins discontinus. Mais nous observons aussi que le désordre apparaît à l'approche de la mise en mouvement, et que l'ordre cristallin ré-apparaît lorsque le troupeau est en mouvement.

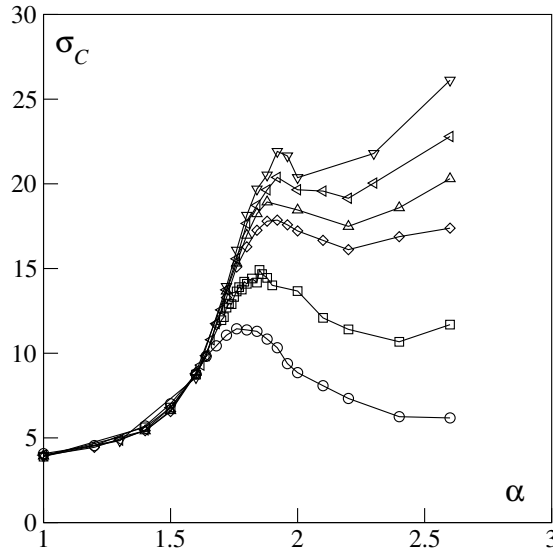


FIG. 8.7 – Fluctuations de la vitesse moyenne du plus gros agrégat dans la phase gazeuse. Nous avons représenté les tailles $N = 256, 1024, 4096, 6400, 10000$ et 16384 de bas en haut, à densité globale $\rho = 1/16$ avec le modèle Br2-Fh

8.2.2 Déformations dynamiques des troupeaux

Afin de mieux comprendre ce qui se passe, nous avons suivi visuellement le devenir d'un grand troupeau au cours du temps à partir d'une condition initiale pour laquelle le troupeau est entièrement regroupé et nous nous sommes placés dans la gamme de paramètres correspondant à une gouttelette liquide. En l'absence de mouvement d'ensemble, le troupeau semble stable, isotrope et circulaire (figure 8.9(a)). En s'approchant du point de transition, de grandes fluctuations sur la forme du troupeau apparaissent. L'enveloppe se déforme, s'allonge sur un axe, se rétracte, puis se déforme sur l'axe perpendiculaire au premier. Tous les mouvements d'enveloppe ne sont pas de symétrie deux. Lorsque le troupeau est en mouvement, sa symétrie est plutôt d'ordre trois comme sur la figure 8.9(b). Au point de transition du modèle Br2-Fh, il y a coexistence entre les phases mobiles et fixes. Nous pouvons donc voir des troupeaux fixes avec des déformations de symétrie deux, ou des troupeaux mobiles de symétrie trois. La distribution des vitesses globales est effectivement bimodale, mais avec un pic à petites vitesses très large.

Si nous sommes à suffisamment grande taille et suffisamment près du point de transition, les déformations observées deviennent de l'ordre de la taille du troupeau. Pour un troupeau fixe, une contraction plus grande que les précédentes mène à un troupeau en forme d'haltère, comme montré sur la figure 8.9(c). Ensuite, plusieurs scénarii sont possibles. Si la masse des troupeaux formés aux

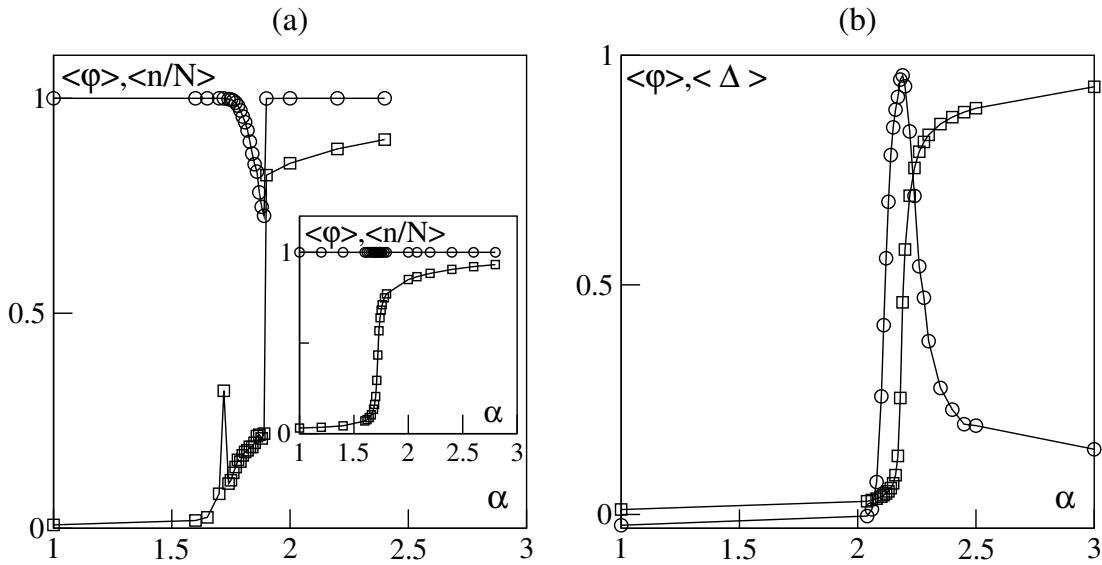


FIG. 8.8 – Désordre induit par la transition de mouvement dans le modèle Br2-Fh. Nous nous sommes placés dans les phases : (a) liquide $\beta = 20,0$ pour un troupeau $N = 16384$ à densité $\rho = 1/16$, de même dans l'encart pour un troupeau $N = 4096$, (b) cristalline $\beta = 84,4$ pour un troupeau $N = 4096$. Nous avons représenté le paramètre d'ordre du mouvement (\square) et ceux de la cohésion ou de l'ordre cristallin (\circ).

extrémités de l'haltère est encore suffisamment grande, le processus de filamentation décrit précédemment se répète. La masse de chaque sous-groupe décroissant, ceux-ci deviennent plus mobiles, comme montré dans l'étude des effets de taille précédente. Ils sont cependant reliés élastiquement. Des enchevêtrements de filaments supportant des petits groupes d'animoïdes peuvent alors prendre naissance (voir figure 8.9(d)). Si la mobilité d'un sous-groupe est plus forte que l'élasticité du filament, ce dernier se rompt. Le troupeau initial se désagrège. Il peut y avoir aussi fusion de filaments, puis formation d'autres sous-groupes, etc. Ce processus mène à des géométries très variées, une distribution des masses des troupeaux large et une distribution des vitesses globales large.

Pour une parfaite compréhension, il faut revenir en arrière, jusqu'au moment où le troupeau est encore entier et nous demander ce qui est la cause des fluctuations subies par l'enveloppe du troupeau. Nous nous sommes placés à des valeurs de paramètres et de taille de troupeau tels que nous ayons une gouttelette liquide cohésive. Nous enregistrons la distance moyenne des individus au centre de masse à chaque instant $r_{\text{moy}}(t)$. Cette distance fluctue aléatoirement mais varie peu dans la phase fixe (fig. 8.10(a)). Cela est dû au bruit introduit. Dans la phase en mouvement, r_{moy} oscille régulièrement. Nous attribuons ces battements aux modes acoustiques dus aux corrélations hydrodynamiques, comme l'ont montré Y. Tu,

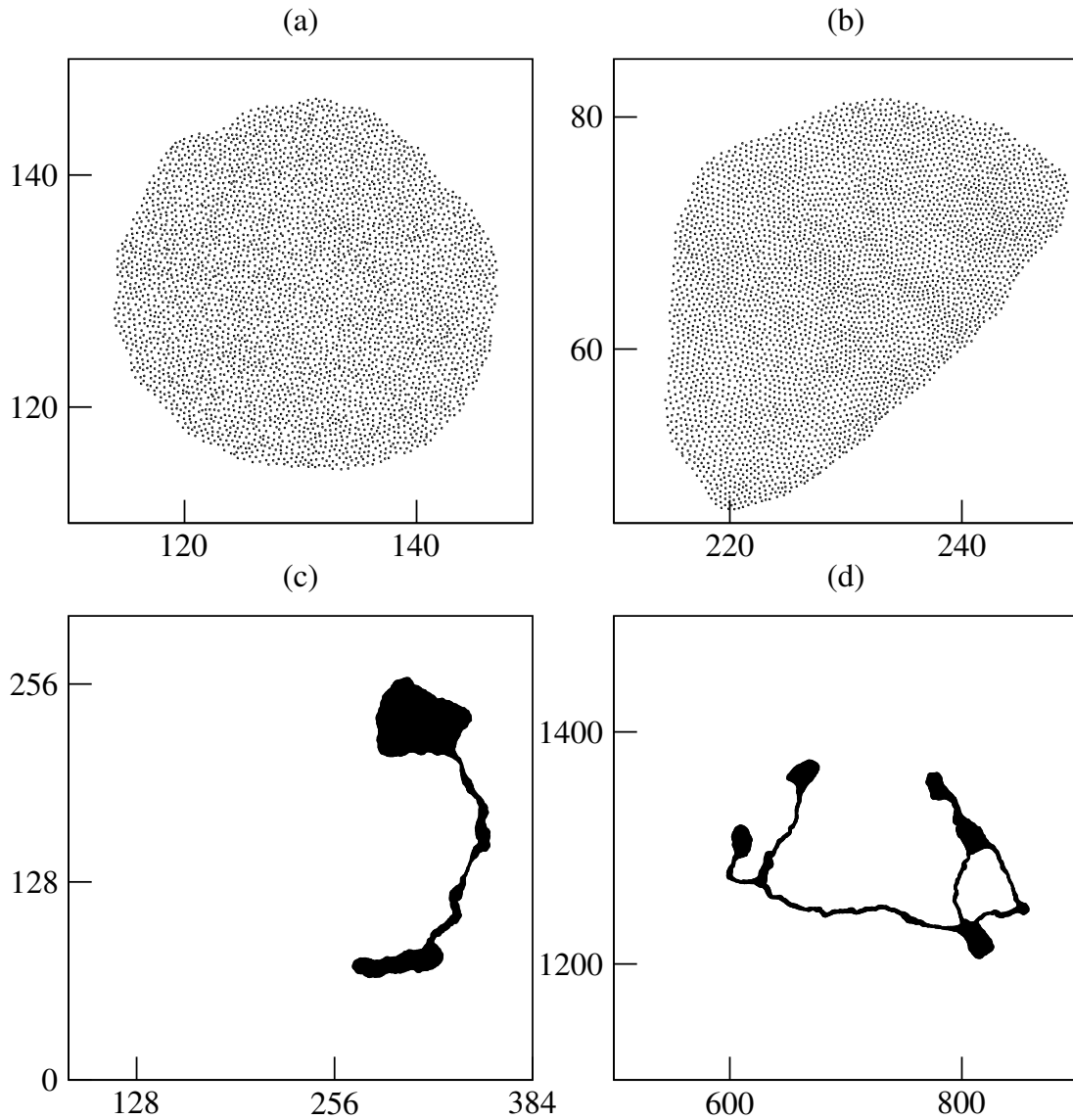


FIG. 8.9 – Formes des troupeaux en fonction du mouvement. (a) : troupeau liquide fixe, $N = 4096$, $\rho = 1/16$, $\alpha = 1,0$, $\beta = 20,0$. (b) troupeau liquide en mouvement, $N = 4096$, $\rho = 1/16$, $\alpha = 3,0$, $\beta = 20,0$. (c) et (d) à la transition de mouvement. (c) $N = 16384$, $\rho = 1/16$, $\alpha = 1,72$, $\beta = 20,0$. (d) $N = 16384$, $\rho = 1/64$, $\alpha = 1,83$, $\beta = 20,0$, et pour toutes les figures $\eta = 1,0$.

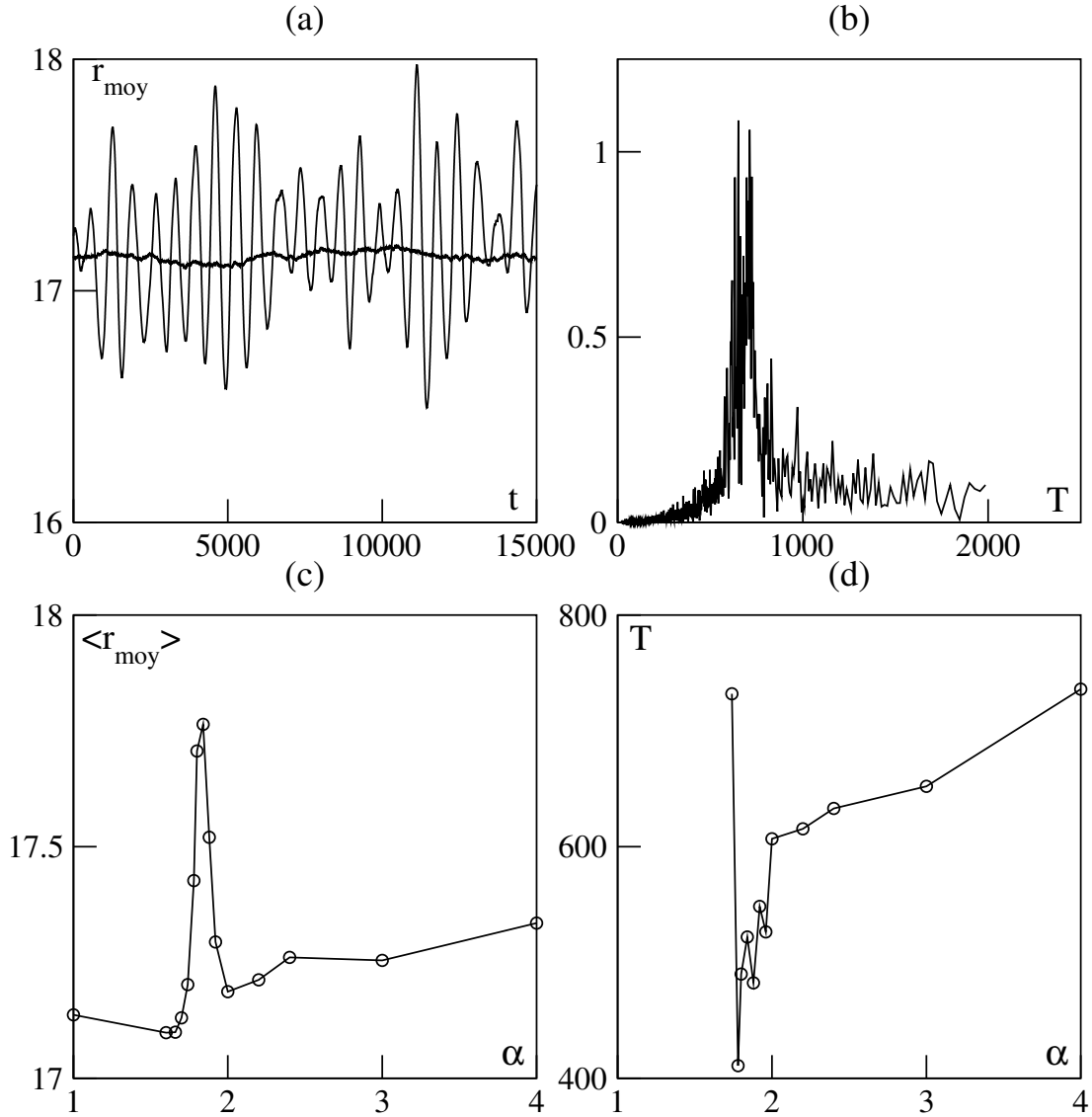


FIG. 8.10 – Impact des modes acoustiques sur la forme des troupeaux. (a) : distance moyenne au centre de masse pour des gouttelettes ($\beta = 40,0$) fixe ($\alpha = 1,0$) et mobile ($\alpha = 3,0$). (b) : transformée de Fourier de r_{moy} dans le cas du troupeau en déplacement ($\alpha = 3,0$). (c) : moyenne temporelle de r_{moy} autour du point de transition à cohésion fixée $\beta = 40,0$. (d) : mode principal de la transformée de Fourier, mesuré en pas de temps. Les simulations ont été réalisées pour un troupeau de 10000 individus pour une densité globale $\rho = 1/16$ et soumis au modèle Br2-Fh.

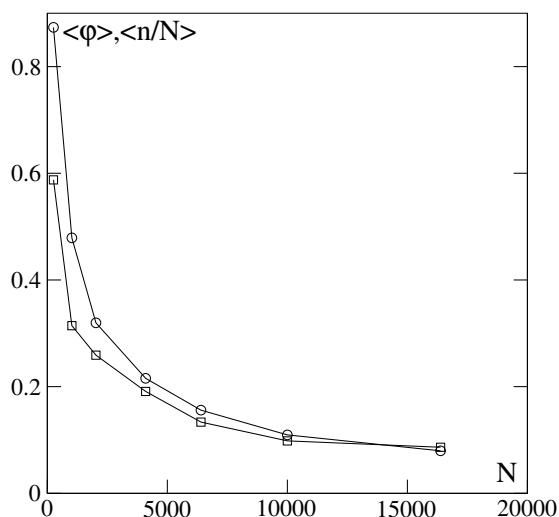


FIG. 8.11 – Comportement aux points de décohésion. À chaque taille, nous déterminons la valeur de l’alignement α tel que le paramètre de cohésion soit minimal. En cette valeur de α , nous mesurons conjointement les paramètres d’ordre du mouvement $\langle \varphi \rangle$ (\circ) et de la cohésion $\langle n/N \rangle$ (\square). Nous nous sommes placés dans le cas d’une gouttelette $\beta = 5,0$.

J. Toner et M. Ulm [89]. Le son se propage au sein du troupeau et se réfléchit sur les parois produisant les battements observés sur l’enregistrement temporel de r_{moy} et sa transformée de Fourier (figures 8.10(a) et (b)). Cette interprétation éclaire aussi la différence de forme entre un troupeau proche de la transition et quasiment immobile et un troupeau en mouvement. Pour le premier, le maximum de la vitesse du son a lieu pour une direction presque perpendiculaire à sa vitesse globale. La vitesse du son du second possède deux maxima dirigés de part et d’autre de son mouvement (voir la figure 2.1). Notons au passage les échelles de temps impliquées dans les phénomènes étudiés (figure 8.10(b)). La période du mode principal correspond à 500 pas de temps, ce qui est long et nécessite donc de longues simulations. Il est probable que une valeur plus élevée de v_0 aurait simplifié notre travail.

Les mesures du mode principal des battements T ainsi que celles de la moyenne temporelle de r_{moy} nous fournissent de nouveaux critères pour situer la transition. À l’approche de celle-ci, les deux quantités étudiées ont une singularité. Le rayon moyen diverge au point de transition, ce qui confirme nos observations. Le mouvement microscopique des animoïdes devient plus aléatoire : la période T diminue rapidement.

En conclusion, l’anisotropie du mouvement implique l’existence de modes acoustiques se propageant dans les troupeaux. Au point de transition, les fluctuations du paramètre d’ordre φ se traduisent par l’émission d’ondes de fortes

amplitudes et de direction fluctuant avec celle de φ . Dès que la taille est assez grande pour que les fluctuations soient significatives, les ondes acoustiques détruisent l'ordre microscopique : un liquide s'évapore, un solide fond. En fait, à la limite thermodynamique, il est probable que, même à forte cohésion, un solide soit sublimé. En d'autres termes, un troupeau infini entièrement regroupé n'existerait pas au point de transition vers le mouvement.

Dans cette description intervient une taille à partir de laquelle le désordre apparaît. Il est alors légitime de se demander si ce processus ne sélectionne pas une taille de troupeau, taille définie par les amplitudes de cohésion β et du bruit η . Ceci impliquerait une variation continue de la taille typique des troupes. La difficulté de vérifier une telle assertion est qu'il faut suivre cette ligne pour de grandes tailles. C'est une tâche qui demanderait d'énormes temps de calcul. Nous ne l'avons pas réalisée, mais, sur la figure 8.11, nous observons les effets de taille sur les différents paramètres d'ordre à une valeur du terme de cohésion fixée et au point où le désordre est maximal, c'est à dire $\langle n/N \rangle$ est minimal ou $\langle \Delta \rangle$ maximal. Nous constatons une dépendance de $\langle n/N \rangle$ en N^{-1} . Donc la taille du troupeau résiduel est quasiment constante, ici $n \sim 1000$. C'est la même dépendance que nous avons observée dans le gaz (encarts de la fig. 8.6). La différence constatée entre les deux situations réside dans les échelles des tailles de troupeau : de l'ordre de 20 à 50 individus dans la phase gazeuse. La seconde différence serait la nature des variations des tailles de troupeau en changeant la cohésion.

Le dernier point à retenir de cette étude concerne les formes des troupes : isotropes dans la phase fixe, triangles plus ou moins allongés lorsqu'il y a mouvement. Elles proviennent de l'équilibre entre la force d'interaction à deux corps, ce qui se traduit par une pression d'équilibre dans la description mésoscopique, et l'alignement. Ces résultats pourraient faire l'objet d'études complémentaires en relation avec des systèmes biologiques.

8.3 Troupes en rotation

Nous nous sommes ensuite intéressés à l'existence de troupes en rotation appelés *vortex* dans la littérature. Nous avons vu dans les chapitres introductifs que ces comportements existent dans la nature. Des modèles physiques en contiennent, voir par exemple les publications [57, 48, 32, 23]. Nous espérons donc que notre modèle les décrivent aussi. Effectivement, nous en observons, par exemple sur la figure 8.12 avec le modèle Br2-Fh. Les résultats que nous présentons ont été obtenus avec ce modèle. Mais nous avons vérifié que les vortex sont présents dans les deux modèles. L'exemple de la figure 8.12 montre que la rotation peut s'accompagner de déformations, ici suivant l'axe principal, et de

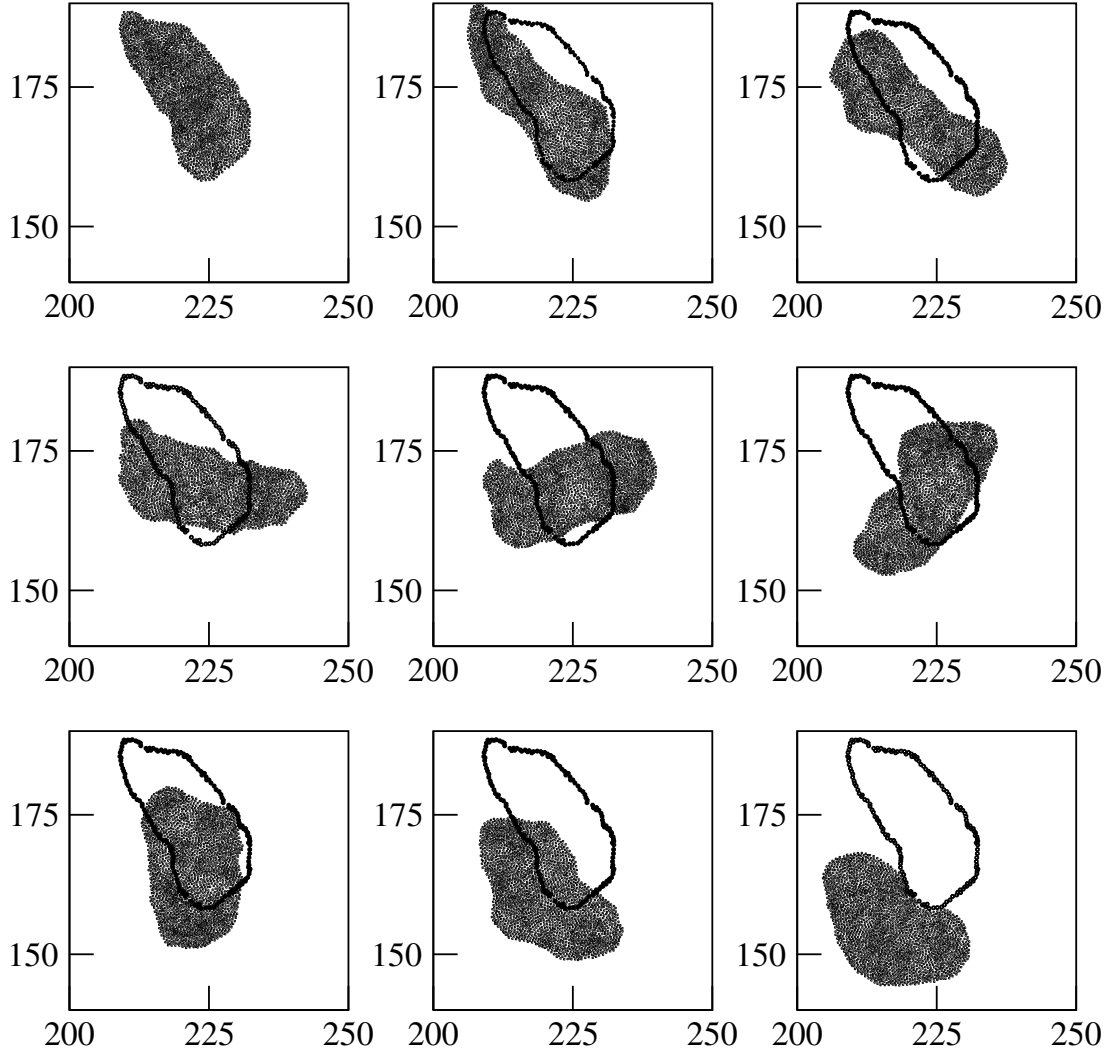


FIG. 8.12 – Troupeau en rotation. Nous observons 2048 individus dans la phase liquide ($\beta = 30,0$) du modèle Br2-Fh, à bruit et densité fixés $\eta = 1,0$, $\rho = 1/32$. Les neuf images se succèdent de gauche à droite, de haut en bas, et sont séparées de 250 pas de temps. Le trait plein représente l'enveloppe du troupeau à l'instant initial.

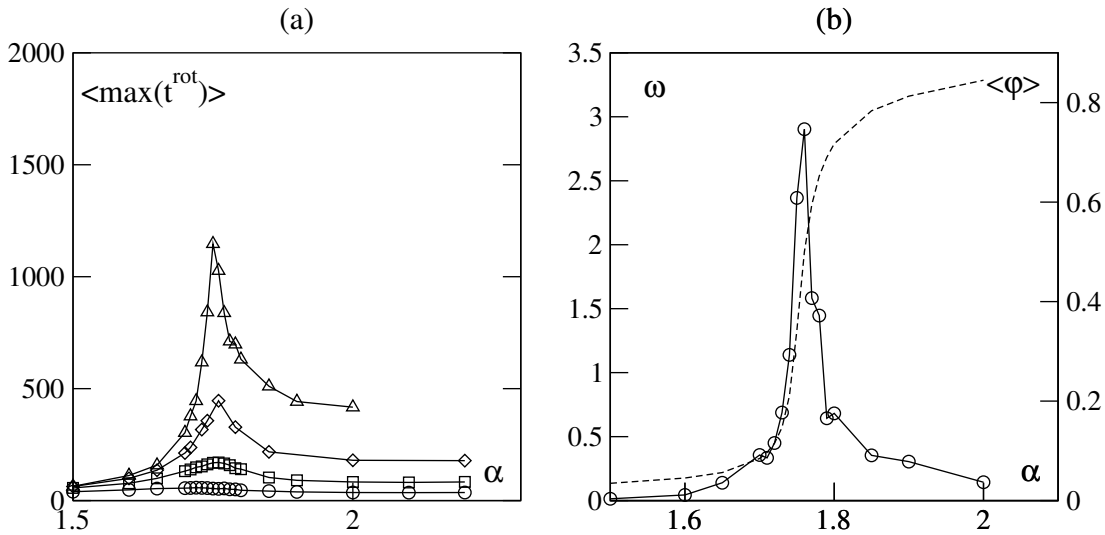


FIG. 8.13 – Recherche des états de vortex. (a) : moyenne des maxima sur 100 échantillons contenant 1000 événements pour les tailles $N = 32, 128, 512, 2048$. (b) : angle de rotation durant l'extrémum des temps de rotation pour un troupeau de $N = 2048$ individus. Nous nous sommes placés dans la phase liquide ($\beta = 30,0$) du modèle Br2-Fh, à bruit $\eta = 1,0$ et densité $\rho = 1/32$. Le trait discontinu correspond à la moyenne de la vitesse global pour le même système.

mouvements de translation. Dans notre modèle, la rotation solide pure d'un troupeau dont le centre de masse est immobile est impossible. En effet, vitesse de rotation Ω et vitesse de translation v sont reliées : $v = r\Omega$. La vitesse v étant de module fixé, pour qu'un mouvement de rotation d'ensemble soit possible, il faut qu'il y ait ou un profil des vitesses de rotation, ou un mouvement de translation global, ou les deux.

Nous recherchons les vortex les plus stables possibles, c'est-à-dire une configuration dans laquelle le troupeau reste en rotation le plus longtemps possible. Il s'agit donc de trouver le maximum du temps de rotation d'un troupeau. Pour le définir, nous utilisons le moment cinétique :

$$\vec{s} = \sum_i \overline{GM}_i \times \vec{v}_i, \quad (8.1)$$

où G désigne le centre de masse du troupeau. Dans les systèmes bidimensionnels, le moment cinétique est un nombre \bar{s} , positif si la rotation s'effectue dans le sens trigonométrique, négatif sinon. Nous définissons le temps de rotation t^{rot} comme le temps durant lequel \bar{s} ne change pas de signe. La recherche d'un temps maximal absolu est numériquement impossible. Il faudrait effectuer des simulations de temps infini. Pour en avoir une mesure fiable, nous nous plaçons dans le cadre des statistiques des événements extrêmes (voir Annexe F). Nous considérons chaque

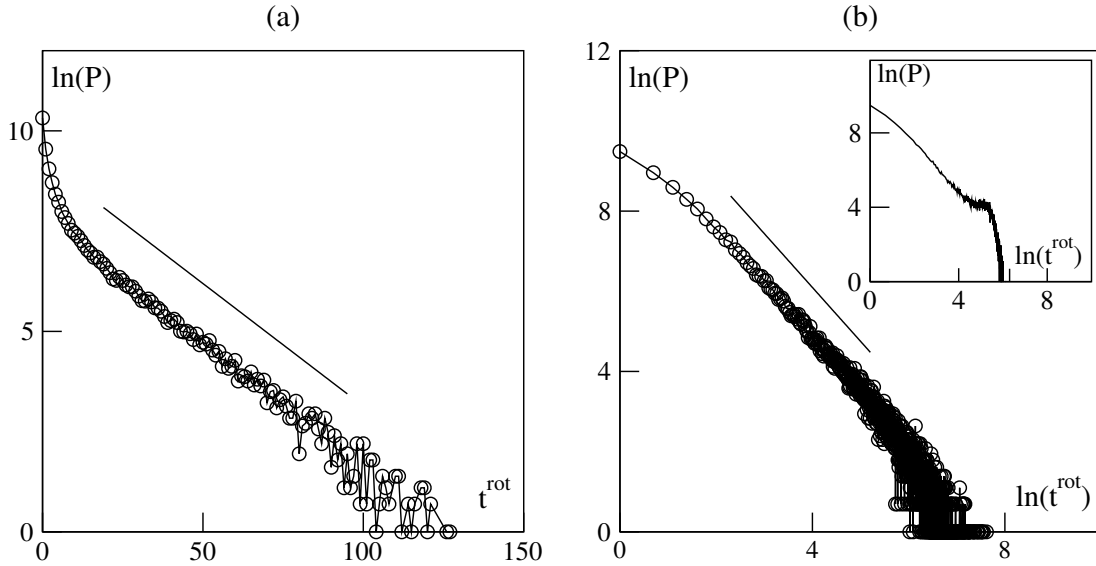


FIG. 8.14 – Fonction de distribution des temps de vie des vortex. La fonction P est tracée pour un troupeau de taille $N = 2048$. Nous nous sommes placés dans la phase liquide ($\beta = 30,0$) du modèle Br2-Fh, à bruit $\eta = 1,0$ et densité $\rho = 1/32$, à un alignement : (a) faible $\alpha = 1,60$, (b) proche de la transition de mouvement $\alpha = 1,77$. En encart : dans la phase en mouvement $\alpha = 3,0$. Les droites servent de comparaison pour reconnaître le comportement exponentiel en (a) et algébrique d'exposant $1 + \theta \sim 1,34$ en (b).

configuration telle que \bar{s} ne change pas de signe comme un évènement de variable aléatoire t^{rot} . Un estimateur du maximum absolu de t^{rot} est la moyenne du maximum déterminé sur un échantillon de taille finie. Nous avons choisi de déterminer le maximum $\max(t^{\text{rot}})$ sur un échantillon de mille évènements, et de calculer la moyenne sur cent échantillons $\langle \max(t^{\text{rot}}) \rangle$. À aucun moment, nous n'introduisons de coupure sur les temps considérés. Enfin nous introduisons l'angle de rotation ω parcouru en moyenne par les animoïdes pendant t^{rot} :

$$\tan(\omega) = \frac{\sum_i \overrightarrow{\text{GM}}_i(t) \times \overrightarrow{\text{GM}}_i(t + t^{\text{rot}})}{\sum_i \overrightarrow{\text{GM}}_i(t) \cdot \overrightarrow{\text{GM}}_i(t + t^{\text{rot}})}. \quad (8.2)$$

Nous constatons que le temps de rotation et l'angle de rotation divergent à l'approche de la transition de mouvement, pour toute valeur de la cohésion (fig. 8.13). Les temps de rotation restent élevés pour des troupeaux en mouvement. Mais ce ne sont pas pour autant des vortex puisque les angles de rotation correspondants sont négligeables. Puis nous avons observés les effets de taille finie : les vortex sont d'autant mieux définis que le troupeau considéré est grand. La durée de vie d'une rotation et l'angle de rotation divergent avec la taille. Cela assure l'existence des vortex.

Dans la phase des gouttelettes fixes, les temps de rotations sont distribués exponentiellement (figure 8.14(a)). S'ils existent des vortex dans ces phases, ce ne sont alors que des états de durée de vie finie, des états temporaires. De plus, les états extrémaux suivent la distribution de Gumbel (voir Annexe F) : $H(t) = \exp(-\exp(-x))$. La probabilité de trouver un vortex de durée vie longue est donc négligeable. Au point de divergence du temps de rotation, la distribution suit une loi d'échelle, ce qui signifie qu'il est toujours possible de trouver un vortex durant plus longtemps (figure 8.14(b)). Plus précisément, la probabilité de tourner longtemps pour un troupeau doit suivre la distribution de Fréchet : $H(t) = \exp(-x^{-\theta})$ si θ est l'exposant de la distribution des temps de vie. Ici, $\theta \sim 0,34$. Parmi les longs vortex, ceux qui durent le plus longtemps sont donc d'autant plus probables. Comme $\theta < 1$, il est impossible de définir un temps de vie moyen des vortex. Cette remarque fournit une justification *a posteriori* de notre choix de considérer les maxima des temps de rotation plutôt que leurs moyennes. Enfin, dans la phase mobile, la distribution des temps de rotation semble suivre une loi d'échelle similaire (encart de la figure 8.14(b)). Cependant, loin de la zone d'existence des vortex, les fonctions de distributions semblent posséder un temps de coupure nettement défini.

Des troupeaux en rotation existent donc bel et bien. Notons qu'il s'agit de troupeaux entièrement cohésifs (nous sommes loin du seuil de décohésion vu dans le paragraphe précédent), dans un grand espace (la densité globale est faible). Les vortex apparaissent au point de la transition de mouvement. Ceci implique aussi que la limite thermodynamique d'un tel état ne peut pas être définie à paramètre de cohésion fixé puisque la décohésion intervient pour la même gamme de paramètre.

9

Approches de champ moyen

Sommaire

9.1	Théorie cinétique	135
9.2	Gaz de van der Waals	138

Ce chapitre est dédié à la présentation de deux modèles de champ moyen. Une théorie en champ moyen a déjà été publiée [22]. Il s'agissait d'un modèle de gaz sur réseau pour des particules dont la vitesse était de module constant et de direction choisies parmi les six multiples de $\frac{\pi}{6}$. Cette théorie était un analogue du modèle de Potts à six états. Il y avait donc une transition de phase du premier ordre.

Les modèles que nous décrivons ici sont continus en positions des particules et directions des vitesses. Mais ils ont les défauts habituels des théories de champ moyen puisque toutes les corrélations y sont négligées. L'accord quantitatif avec les simulations est donc impossible. Ainsi, pour une dimension inférieure à la dimension critique supérieure, les valeurs des points de transition et des exposants critiques sont erronés. L'intérêt de ces théories réside dans la preuve analytique de l'existence des transitions et elles permettent une comparaison aisée de l'impact des différents paramètres, ici : le bruit, l'alignement, la cohésion et la densité.

Dans ce chapitre, nous suivons le plan général de notre travail. Nous considérons d'abord un modèle sans cohésion, puis nous étudions les rôles croisés de l'alignement et de la cohésion.

9.1 Théorie cinétique

Les calculs présentés dans ce paragraphe ont été réalisés par E. Bertin à la suite d'une de nos nombreuses discussions. Ils sont issus des idées de la théorie cinétique classique. Nous modélisons les interactions entre animoïdes comme des collisions à deux corps.

L'hypothèse première est que les positions des particules sont décorréliées des interactions. Ainsi la probabilité de trouver n individus à l'intérieur du disque de voisinage de rayon R_0 est poissonnienne. La seconde hypothèse est que, au maximum, trois particules peuvent interagir. Nous ne considérons donc que les cas à aucun voisin, un seul, ou deux voisins ; et les probabilités d'être dans un de ces cas valent :

$$\begin{aligned} q_0 &= e^{-\lambda}, \\ q_1 &= \lambda e^{-\lambda}, \\ q_2 &= 1 - (1 + \lambda)e^{-\lambda}, \end{aligned}$$

où $\lambda = \rho\pi R_0^2$ est le paramètre de la loi de Poisson et ρ la densité de particules. Notons que la probabilité q_2 est en fait la probabilité d'avoir au moins deux voisins, mais dans les interactions deux voisins au plus sont considérés. Cette définition permet de normaliser proprement les probabilités de présence. Enfin, les vitesses avant le choc sont supposées décorréliées.

Nous considérons, comme dans les simulations, une évolution à temps discret. Lorsqu'une particule n'a pas de voisin, la direction de la vitesse θ est choisie de façon aléatoire. En présence de voisins, la nouvelle direction est celle de la moyenne des vitesses des voisins à un bruit η près. Le bruit est gaussien de fonction de distribution $w(\eta)$ et de variance σ^2 . L'équation d'évolution est calculée sur la probabilité $P_n(\theta)$ telle que la particule considérée ait une vitesse de direction θ après n pas de temps :

$$\begin{aligned} P_{n+1}(\theta) &= \frac{q_0}{2\pi} + q_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta w(\eta) P_n(\theta_1) \sum_m \delta(\theta_1 + \eta - \theta + 2m\pi) \\ &\quad + q_2 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\eta w(\eta) P_n(\theta_1) P_n(\theta_2) \sum_m \delta(\psi(\theta_1, \theta_2) + \eta - \theta + 2m\pi), \end{aligned}$$

où les sommes sur l'indice m tiennent compte de la définition des angles à 2π près. Pour résoudre cette équation, nous nous plaçons dans l'espace de Fourier :

$$P_n(\theta) = \sum_k a_k^n e^{ik\theta}; \quad a_k^n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta P_n(\theta) e^{-ik\theta} \quad (9.1)$$

Après calcul, E. Bertin montre que les coefficients de Fourier suivent une relation de récurrence entre les instants n et $n + 1$:

$$a_k^{n+1} = \frac{q_0}{2\pi} \delta_{k,0} + q_1 e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 k^2} a_k^n + q_2 \sum_p e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 k^2} D_{k,p} a_p^n a_{k-p}^n, \quad (9.2)$$

où les coefficients $D_{k,p}$ sont donnés par :

$$\begin{aligned} D_{2m,p} &= 2\pi \delta_{m,p}, \\ D_{2m+1,p} &= \frac{4}{2(p-m)-1} (-1)^{p-m+1}. \end{aligned}$$

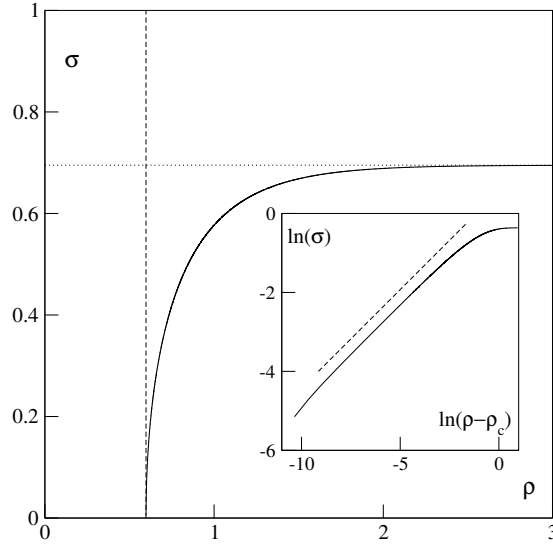


FIG. 9.1 – Diagramme des phases issu du modèle cinétique. Les mouvements collectifs ont lieu sous la courbe. Les droites en traits discontinus et pointillés représentent respectivement les valeurs asymptotiques de la densité et du bruit limites. En encart : même figure en échelle logarithmique, nous avons utilisé $\rho_t = 0,597$; la droite en traits discontinus représente la loi d'exposant $1/2$.

Pour rechercher les solutions stationnaires de l'équation 9.1, il est utile d'introduire les incréments des coefficients de Fourier : $\Delta a_k^n = a_k^{n+1} - a_k^n$:

$$\Delta a_k^n = \frac{q_0}{2\pi} \delta_{k,0} + \left(q_1 e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 k^2} - 1 \right) a_k^n + q_2 e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 k^2} \sum_p D_{k,p} a_p^n a_{k-p}^n, \quad (9.3)$$

les solutions stationnaires vérifiant $\Delta a_k^n = 0$.

Il est clair que la solution de probabilité uniforme, *i.e.* $a_k = \frac{1}{2\pi} \delta_{k,0}$, fait partie des solutions de ce modèle pour toutes valeurs de bruit σ et de densité λ . La question suivante est de connaître la stabilité de cet état. Pour cela, on y ajoute une petite perturbation $\varepsilon \ll 1$. En considérant la normalisation des probabilités $P(\theta)$ et le fait qu'elles doivent être réelles, on montre que, si a_1 est d'ordre ε , alors a_k est d'ordre $\varepsilon^{|k|}$. Cela nous permet de nous restreindre aux coefficients d'ordre $|k| \leq 2$ pour étudier la stabilité linéaire de la solution :

$$\Delta a_1^n = \left[\left(q_1 + \frac{4}{\pi} q_2 \right) e^{-\frac{1}{2}\sigma^2} - 1 \right] a_1^n - \frac{16\pi}{3} q_2 e^{-\frac{5}{2}\sigma^2} |a_1^n|^2 a_1^n \quad (9.4)$$

On obtient alors la condition suivante pour que la solution $a_1 = 0$ soit linéairement instable :

$$\left(q_1 + \frac{4}{\pi} q_2 \right) e^{-\frac{1}{2}\sigma^2} - 1 > 0. \quad (9.5)$$

Cette relation permet de tracer le diagramme des phases (figure 9.1). Conformément à ce que nous avons déjà vu, les mouvements collectifs apparaissent pour

des densités élevées et des bruits faibles. Les mouvements collectifs n'existent pas sous une densité limite $\rho_t \sim 0,597$, pour $\sigma \rightarrow 0$, et un bruit limite $\sigma_t = \sqrt{2 \ln(4/\pi)} \sim 0,695$, quand $\rho \rightarrow \infty$. De plus, à faible densité, la ligne de transition se comporte selon une loi de puissance d'exposant 1/2, comme montré dans l'encart de la figure 9.1. C'est la valeur mesurée par T. Vicsek *et al.* Ces résultats appuient la lecture critique des travaux précédents que nous avons effectuée au Chapitre 1 et les résultats obtenus sur les phases gazeuses du paragraphe 8.1.2.

9.2 Gaz de van der Waals

Nous désirons ici étudier l'interaction entre l'alignement et la cohésion. Pour cela, nous allons utiliser le point de vue de la mécanique statistique classique développée pour l'étude de la transition d'un gaz de van der Waals vers l'état liquide. La description hamiltonienne est normalement impossible ici puisque, à tous paramètres constants, l'énergie totale n'est pas conservée. Le problème que nous nous posons ici a quelque chose d'artificielle. Cependant il fournit quelques indications sur le diagramme gaz-liquide.

Nous écrivons le hamiltonien \mathcal{H} comportant des termes d'énergie cinétique, d'énergie d'interaction due à la force de cohésion, de celle due à l'alignement selon les voisins et selon un champ extérieur \vec{h}_0 :

$$\mathcal{H} = \frac{Nm}{2} v_0^2 + U(r_1, r_2, \dots, r_N) - \alpha \sum_{i,j \sim i}^N \vec{v}_i \cdot \vec{v}_j - \vec{h}_0 \cdot \sum_i^N \vec{v}_i, \quad (9.6)$$

où nous avons tenu du fait que les vitesses sont de module constant v_0 et nous avons attribué à chaque particule une masse m . Simplifions chaque terme en fonction de l'hypothèse de champ moyen : nous supposons que la densité en particules est homogène et négligeons les fluctuations de densité et de la vitesse moyenne $\langle \vec{v} \rangle = \vec{\varphi}$. L'interaction de cohésion est donc supposée quasiment constante :

$$U(r_1, r_2, \dots, r_N) \sim \frac{1}{2} \sum_{i \sim j} u(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \sim \frac{N}{2} U_0, \quad (9.7)$$

$$U_0 = \int_{R_c}^{+\infty} \rho u(r) d^d r, \quad (9.8)$$

où R_c est le rayon du volume exclu. En utilisant un potentiel de Lennard-Jones d'amplitude β dans un espace bidimensionnel, nous obtenons :

$$U_0 = -2a\rho\beta, \text{ avec } a = -\frac{3}{5}\pi R_c^2. \quad (9.9)$$

L'interaction d'alignement se simplifie aisément en fonction de $\vec{\varphi}$ et du nombre moyen de voisins $\rho\pi R_0^2 = \rho s$ que nous déterminons ici en fonction de la surface

du disque définissant le voisinage :

$$\alpha \sum_{i,j \sim i}^N \vec{v}_i \cdot \vec{v}_j + \vec{h}_0 \cdot \sum_i^N \vec{v}_i \sim \left(\vec{h}_0 + \alpha \rho s \vec{\varphi} \right) \cdot \sum_i^N \vec{v}_i, \quad (9.10)$$

on pose pour la suite $\vec{h}_0 + \alpha \rho s \vec{\varphi} = \vec{h}$.

La fonction de partition est définie comme :

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{N! (2\pi\hbar)^{2N}} \int \prod_i^N d^d r_i d^d p_i \exp \left(-\frac{\mathcal{H}}{kT} \right). \quad (9.11)$$

Les approximations réalisées fournissent le hamiltonien à une constant près, déterminés par comparaison des valeurs moyennes de l'approximation et du hamiltonien : $\alpha N \rho s \varphi^2 / 2$.

Pour effectuer l'intégration, nous supposons que les positions et les vitesses sont décorréelées. En réalité, nous n'avons pas à faire d'hypothèse supplémentaire, car l'interaction d'alignement ne dépend pas de la position des particules tant que la densité est homogène. Chaque terme du hamiltonien donne lieu donc à facteur de la fonction de partition :

- la cohésion :

$$(S - bN)^N \exp \left(aN \rho \frac{\beta}{kT} \right), \quad (9.12)$$

avec $b = \frac{\pi}{2} R_c^2$ le volume exclu et S la surface totale,

- l'alignement :

$$\left[2\pi m v_0 I_0 \left(-\frac{h v_0}{kT} \right) \right]^N, \quad (9.13)$$

où I_0 est la fonction de Bessel de première espèce.

On en déduit l'énergie libre :

$$\begin{aligned} -\frac{F}{NkT} &= \ln \left(\frac{m v_0}{\hbar} \right) - \frac{m v_0^2}{2kT} + 1 + \ln (\rho^{-1} - b) + a \rho \frac{\beta}{kT} \\ &\quad + \ln I_0 \left(-\frac{h v_0}{kT} \right) - \rho s \varphi^2 \frac{\alpha}{2kT} \end{aligned} \quad (9.14)$$

L'énergie libre du système doit être minimum et concave. La vitesse moyenne correspond au minimum d'énergie libre. La solution en est une équation auto-cohérente :

$$\frac{\varphi}{v_0} = \frac{I_1}{I_0} \left(\frac{v_0 h}{kT} \right). \quad (9.15)$$

Nous sommes alors en mesure de déterminer le point critique en fonction de la température, de la densité et de l'alignement :

$$s v_0^2 \rho \alpha = 2kT, \quad (9.16)$$

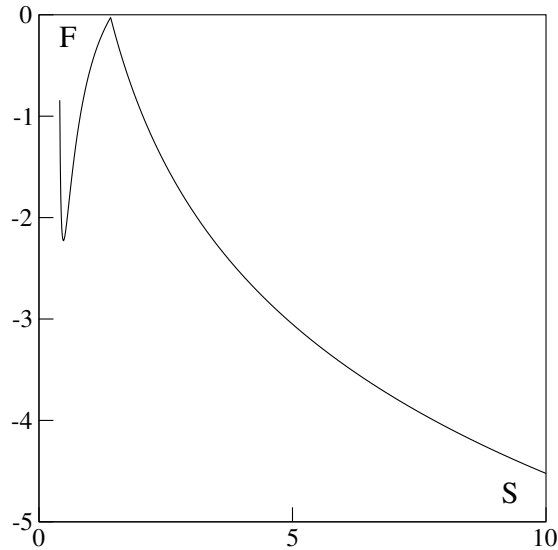


FIG. 9.2 – Énergie libre au cours de la transition. Nous étudions les propriétés de compression du troupeau en mouvement. La zone de transition est comprise entre le premier et le dernier point d'inflexion de la courbe.

et, après un développement autour du point de transition, les exposants $\beta = 0,5$ et $\gamma = 1$, la transition obtenue étant continue. L'expression du point de transition est indépendante de la valeur de la cohésion.

La seconde contrainte est la concavité de l'énergie libre. Cette condition, appliquée à l'équation 9.14, n'est pas vérifiée sauf à introduire une zone de coexistence de phases (figure 9.2) correspondant aux premier et dernier points d'inflexion : la transition gaz-liquide est du premier ordre. Puisque nous avons séparé les échelles, les transitions de phase de cohésion et celle vers le mouvement sont décorréées. Nous les étudions donc séparément. En l'absence de mouvement, nous pouvons calculer exactement la ligne de transition. Le gaz devient instable pour l'amplitude de cohésion :

$$\beta = \frac{kT}{2a\rho(1 - b\rho)^2}. \quad (9.17)$$

Plusieurs conclusions sont à tirer de cette expression. D'abord, à densité nulle, un liquide ne peut exister. Ensuite le terme cohésion β à la transition est proportionnelle à l'agitation thermique. Enfin, la ligne de transition est indépendante de l'alignement.

Lorsque les mouvements collectifs sont en place, nous n'avons pu déterminer une expression analytique de la ligne de transition. Mais nous pouvons facilement la calculer numériquement. Nous obtenons alors la figure 9.3. Nous observons une chute de la cohésion nécessaire à l'agrégation des particules quand le mouvement entre en jeu, c'est-à-dire que ce dernier stabilise la phase liquide.

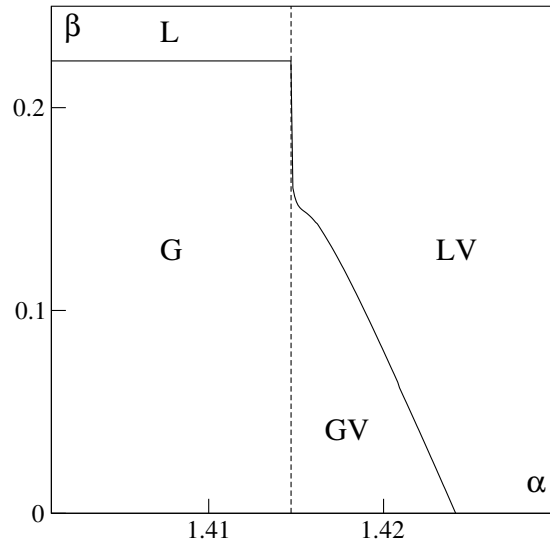


FIG. 9.3 – Diagramme des phases dans le modèle de gaz de van der Waals. La ligne en trait interrompu correspond à la transition de mouvement, la courbe en trait plein est la ligne de stabilité du gaz.

Notons que ce modèle possède deux paramètres indépendants parmi les trois utilisés : alignement, cohésion et température, tout comme le modèle Br2-Fh. Nous avons réalisé l'étude à température constante. Il est donc satisfaisant d'observer quelques traits similaires au diagramme des phases du modèle Br2-Fh effectué à bruit constant. Le comportement hors mouvement global est très proche dans les deux cas. Et c'est tout-à-fait compréhensible. Tant que nous sommes loin du point de transition, les corrélations des vitesses sont négligeables. Seule l'interaction de cohésion intervient donc.

Par ailleurs, la transition gaz-liquide de Br2-Fh est effectivement stabilisée par le mouvement, mais uniquement loin de l'ébranlement des troupeaux (voir le diagramme 6.7). Nous avons vu au Chapitre 8 qu'au point de transition les fluctuations déstabilisent les phases cohésives, alors que les fluctuations sont négligées en champ moyen. La différence la plus cruciale concerne la différence de nature des transitions de mouvement : continue dans notre modèle de champ moyen, elle est du premier ordre dans Br2-Fh.

Conclusion et résumé

État de l'art

Nous avons revisité le modèle de Vicsek et avons fait la distinction entre deux familles de modèles suivant la nature du bruit. En densité quasi-homogène, ces modèles possèdent une transition de phase entre un état désordonné et un état dans lequel tous les animoïdes se déplacent dans la même direction. En fonction de la force d'interaction appliquée entre animoïdes, les transitions ont les mêmes propriétés. Nous constatons ainsi le principe d'universalité avec deux couplages différents. Cependant la nature du bruit change la nature de la transition. Elle est continue avec un bruit angulaire Br1, elle est du premier ordre dans le cas d'un bruit vectoriel Br2. En utilisant les comportements des transitions des systèmes à l'équilibre, nous avons caractérisé la mise en mouvement dans nos modèles hors d'équilibre. Nous avons porté un soin particulier à l'étude des effets de taille et à la mesure du temps d'autocorrélation. Cela nous a permis de montrer que les mesures des exposants régissant les comportements au point critique de Br1 sont soumises à des corrections importantes. Ces corrections, négligées dans les travaux précédents, ont été difficilement mesurées. Nous en avons déduit un jeu d'exposants compatible avec les mesures et les relations d'échelles (table 3.2). En ce qui concerne le bruit Br2, nous avons observé que la transition suit parfaitement les prédictions théoriques faites pour les systèmes multiphasiques.

Puis nous avons simulé un ensemble de traceurs passifs dans un bain de particules actives : situation similaire à l'expérience réalisée par X.-L. Wu et A. Libchaber. Nous avons interprété la diffusion anormale des différentes particules comme l'apparition des comportements collectifs. Nous prédisons ainsi que les variations des grandeurs caractéristiques de la diffusion devraient diverger au point de transition et que l'expérience se situe trop loin du point de transition pour que ces divergences aient pu être observées.

Dans la seconde Partie, nous avons introduit une force d'interaction à deux corps comportant une partie attractive et une partie répulsive, simulant le corps de l'animal. Cette force nous permet d'étudier les troupeaux d'animaux. Il en existe de quatre types. D'une part, les animaux peuvent être libres de se déplacer à l'intérieur du groupe, ou bien leurs positions peuvent être contraintes à rester fixes par rapport à celles de leurs voisins. Nous appelons respectivement ces

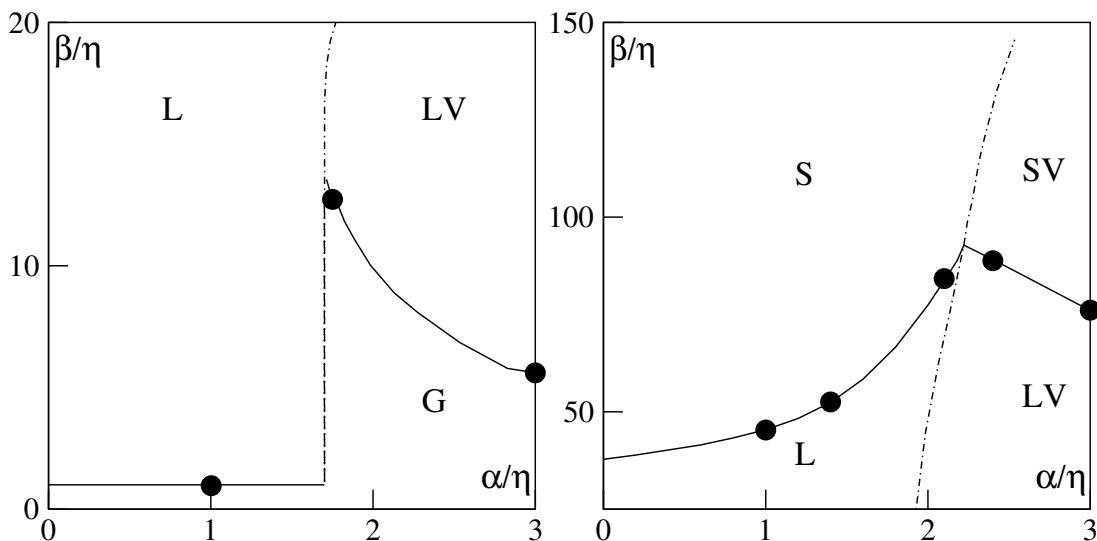


FIG. 1 – Diagramme des phases asymptotique en densité nulle pour le modèle Br2-Fh en fonction des amplitudes d’alignement et de cohésion. Les points sont les mesures effectuées lors des chapitres précédents.

phases des gouttelettes liquides et des cristaux. D’autre part, liquide et solide peuvent être immobiles dans l’espace, ou peuvent se déplacer. Nous montrons que ces regroupements existent sans effets de confinement quelle que soit leur taille. Ils peuvent donc atteindre des tailles gigantesques. Une zone d’ombre reste à lever : la nature des phases gazeuses. À très faible densité le gaz ne possède pas de comportement collectif. Les travaux précédents montrent des mouvements globaux pour des densités $\rho \ll 1$. Mais ce sont cependant des densités supérieures à celles que nous avons testées. De plus le modèle de champ moyen issu d’une théorie cinétique que nous avons étudié laisse penser qu’il existe une densité limite en-dessous de laquelle les comportements collectifs n’existent plus. Pour compléter nos résultats, il faudrait déterminer la valeur d’une telle densité par les simulations numériques.

Nous avons observé que le comportement des individus dépend du mouvement global du troupeau. S’il est fixe, le groupe est isotrope ; s’il est en mouvement, la diffusion d’une particule à l’avant du groupe est plus rapide que celle d’une particule au centre du groupe. Cela est dû à la frustration induite par la présence du bord du troupeau et par le fait que le mouvement global induit des modes acoustiques principalement dirigés dans la direction du mouvement. Nous expliquons ainsi les phénomènes de coexistence liquide-solide au point de transition et l’apparition d’un phénomène spectaculaire de décohésion et de filamentation au point de la mise en mouvement. Nous avons commencé une étude des formes des troupeaux et il serait intéressant de relier notre travail à des études expérimentales.

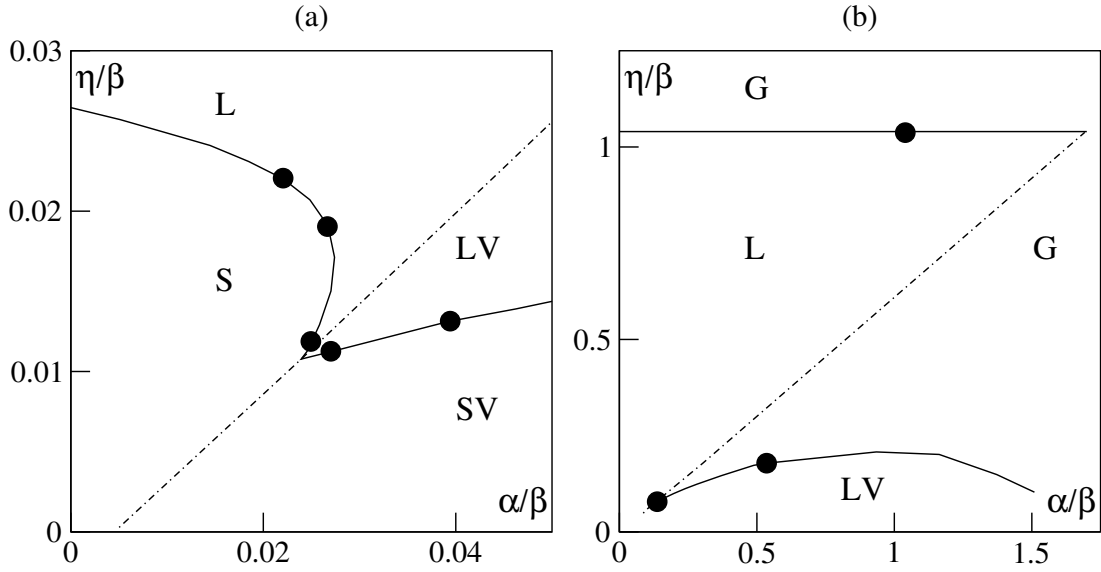


FIG. 2 – Diagramme des phases asymptotique en densité nulle pour le modèle Br2-Fh en fonction des amplitudes de bruit et d’alignement. Les points sont les mesures effectuées lors des chapitres précédents. La figure (a) est un agrandissement de la figure (b).

tales. Par exemple, les observations des êtres multicellulaires de *Dictyostelium discoideum* montrent une anisotropie de forme due au mouvement [13].

La dernière observation intéressante concerne des états de rotation. Ceux-ci existent dans nos modèles le long de la ligne de transition de mise en mouvement (fig. 1 et 3), et nous pouvons en mesurer la durée de vie. Cependant, il reste des questions liées aux états de vortex. D’abord, ils apparaissent le long de la ligne de décohésion. Pour obtenir un vortex de taille arbitraire, il faudrait donc appliquer une force de cohésion d’autant plus grande. Ensuite, nous n’observons pas tous les états rotatifs existant dans la nature, notamment ceux qui ont une zone de déplétion au centre. Nous avons deux explications. La première est que nous ne les avons pas vus mais qu’ils existent. La seconde est qu’ils n’existent pas dans notre modèle car, le module de vitesse individuelle étant fixé, il faut qu’il y ait des déformations macroscopiques importantes pour autoriser les vortex. Pour appuyer cette dernière explication, notons que nous n’observons pas non plus de vortex parfaitement circulaire.

Enfin, nous avons déterminé quelques points du diagramme asymptotique en densité nulle pour le modèle Br2 à bruit constant et nous en avons dessiné une esquisse sur la figure 1. Sur celle-ci, nous retrouvons les différentes phases présentées précédemment. Les lignes de transition sont dessinées de manière à ressembler aux observations en taille finie. Nous avons supposé que la ligne de transition gaz-

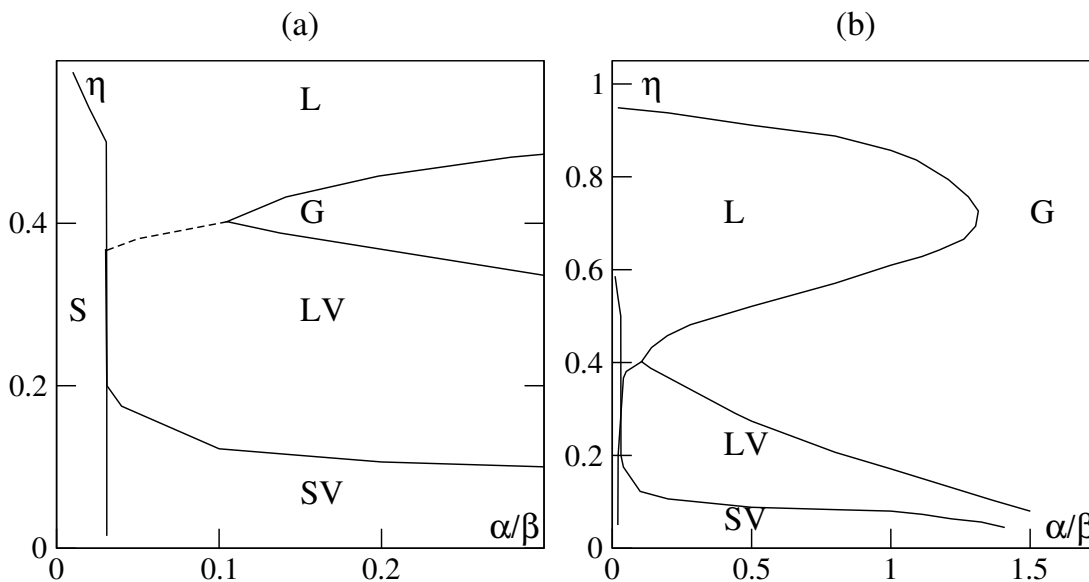


FIG. 3 – Esquisse du diagramme des phases pour le modèle Br1-Fh. La figure (a) est un agrandissement de la figure (b), la ligne discontinue correspond à la ligne de transition vers le mouvement et la transition est continue sur cette ligne.

liquide est indépendante de α en l'absence de mouvement d'ensemble. Ceci est en accord avec l'étude des effets de taille finie, qui sont marginaux dans cette zone, et avec le modèle de champ moyen du gaz de van der Waals.

Nous pouvons transformer ce diagramme de manière à se placer à amplitude de cohésion constante. Les lignes du diagramme peuvent s'écrire comme l'annulation d'une fonction de trois paramètres $f(\alpha, \beta, \eta)$ dont deux seulement sont indépendants. La forme des couplages du modèle Br2 permet d'en déduire que :

$$f(\alpha, \beta, \eta) = g\left(\frac{\alpha}{\eta}, \frac{\beta}{\eta}\right) = h\left(\frac{\alpha}{\beta}, \frac{\eta}{\beta}\right).$$

Nous obtenons alors la figure 2. Cette représentation est intéressante car, en la comparant avec le diagramme du modèle Br1 (fig. 3), nous y observons que les deux modèles sont parfaitement similaires. Non seulement ils possèdent tous deux les mêmes phases, mais aussi les mêmes transitions entre phases. Un seul point est différent : la nature de la transition de mouvement.

Pour conclure, nous avons écrit deux modèles très simples avec trois ingrédients principaux :

- ce sont des modèles stochastiques hors d'équilibre,
- nous prenons en compte les couplages hydrodynamiques,
- et les phénomènes d'interaction du type attraction-répulsion.

Notons bien qu'il n'y a aucun lien social entre les individus et que nous avons obtenus des comportements collectifs, complexes et robustes.

Perspectives

Le premier travail nécessaire serait de fournir à nos études des comparaisons expérimentales. La forme des troupes, la présence de modes acoustiques dans les groupes se déplaçant et la diffusion des individus en fonction de leur localisation dans le groupe sont autant de points qui peuvent être testés qualitativement et quantitativement. Nous pouvons nous demander aussi si les états de filaments correspondent à une situation expérimentale.

Les groupes d'animaux et de cellules comportent souvent plusieurs types d'individus et il y a des expériences très surprenantes concernant le tri cellulaire[80]. En introduisant deux types d'individus dans nos modèles, par exemple en définissant deux tailles d'animoïdes, ou deux amplitudes de cohésion, ou deux amplitudes d'alignement différentes, nous pourrions voir si ces phénomènes apparaissent.

Certains points entièrement nouveaux restent à étudier avec les modèles de troupeau présentés. Notamment, nous avons étudié les propriétés de tension de surface des groupes, nous avons aussi observé qualitativement que les filaments ont une certaine élasticité. Nous pouvons alors nous demander quelles sont les propriétés rhéologiques des troupes. Une expérience possible est de contraindre un troupeau à rencontrer un obstacle et de mesurer sa réponse. Plusieurs scénarii sont imaginables comme la scission du groupe, l'évitement de l'obstacle, l'embrassement de l'obstacle par le troupeau. Une autre étude peut consister à *attraper* deux animoïdes du groupe, à leur appliquer une force constante et à mesurer l'élasticité du troupeau. Enfin, lorsque les troupes prennent la forme de filaments, il serait intéressant de savoir ce qui se passe à l'intérieur de ceux-ci, en terme de flux d'individus notamment.

Nous pouvons aussi apporter quelques changements aux modèles étudiés. La vitesse des individus peut être laissée libre. Il faudrait revenir alors à une description du type des équations de Langevin. On pourrait y introduire un terme non-linéaire de saturation des vitesses, $(v_0^2 - |\vec{v}|^2)\vec{v}$ par exemple, un terme d'alignement $\alpha \langle \vec{v} \rangle$, une force de cohésion et une force aléatoire. Cette description permettrait une étude plus large des états de rotation. Dans la nature, ceux-ci prennent plusieurs formes que nous n'avons pas observées dans nos modèles Br1

et Br2. Notamment ils peuvent prendre un aspect circulaire compact, ou avoir une zone de déplétion au centre. Enfin, nous ne pouvons pas avoir de rotation solide à vitesse constante. Nous pensons que toutes ces catégories sont observables dans un modèle à vitesse variable.

Enfin, les modèles Br1 et Br2 peuvent être étudiés dans un espace tridimensionnel. Il existe une étude de ce cas, mais elle est restée essentiellement qualitative [27]. Les différentes phases cohésives, liquides et cristallines, qu'elles soient mobiles ou immobiles doivent exister. En revanche, il est peu probable qu'un gaz puisse exister sous forme volante. En espace bidimensionnel, un gaz volant existe probablement (ce n'est pas prouvé) pour une densité supérieure à une densité seuil. Le processus en cause dans cette mise en mouvement est le grand nombre de collisions des différents agrégats entre eux. En dimension $d = 3$, les collisions sont beaucoup moins probables, ce qui explique qu'un gaz en mouvement est difficilement imaginable.

Les transitions de cohésion et de mouvement existent sans doute et leurs natures doivent être inchangées. Seules doivent varier les valeurs des grandeurs critiques, exposants et valeur du cumulatif de Binder. La propagation des modes acoustiques au sein des troupeaux tridimensionnels n'a jamais été étudiée. C'est un problème qui peut fournir de nombreuses informations en ce qui concerne les formes des groupes. Ainsi, nous attendons à retrouver des structures complexes proches de celles des filaments.

L'étude du cas tridimensionnel nécessite l'introduction d'un ingrédient supplémentaire. En effet, les groupes d'animaux, même s'ils ont trois degrés de liberté pour leur déplacement, restent surtout dans des plans et utilisent relativement peu l'axe vertical. Si nous étendons directement les modèles bidimensionnels au cas $d = 3$, le choix de la direction sera entièrement aléatoire. Il faut donc faire intervenir l'équivalent d'un champ de pesanteur pour contraindre légèrement le système à se déplacer sur le plan horizontal.

Enfin le problème tridimensionnel est excitant puisque l'essentiel de la biologie se déroule dans les trois dimensions de l'espace. La morphogénèse de l'embryon, la régénération de l'hydre, par exemple, même s'il est possible de définir des axes particuliers, sont tridimensionnelles. Et nous pensons que les modèles présentés sont aisément utilisables. Leur relative simplicité en fait un outil de simulation numérique très puissant vis-à-vis de modèles plus globaux. De plus la physique statistique permet une interprétation riche d'enseignements.

A

Les transitions continues

Dans ce paragraphe nous allons donner une définition succincte des transitions continues pour les systèmes à l'équilibre. Nous reviendrons sur ce sujet au Chapitre B. Pour de plus amples détails on peut se reporter aux publications [55] et [76].

Une transition de phase est une brisure spontanée de symétrie pour un système à la limite thermodynamique (*i.e.* $L \rightarrow \infty$), entre la phase dite *désordonnée* ayant une symétrie plus élevée et la phase *ordonnée*. Il faut donc définir un paramètre d'ordre dont la valeur traduit le changement de symétrie en fonction du paramètre de contrôle. Il s'agit, par exemple, de l'aimantation : nulle lorsque tous les dipôles magnétiques d'un matériau sont décorrélés, non nulle lorsque le matériau est ferromagnétique. Quant au paramètre de contrôle, ce peut être la température T , comme dans l'exemple précédent. Dans le cadre du modèle XY , l'interaction des spins à deux composantes \vec{s}_i sous champ magnétique \vec{h} est décrite par le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j \sim i} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \vec{h} \sum_i \vec{s}_i, \quad (\text{A.1})$$

J étant la constante de couplage inter-spins. L'aimantation peut alors être définie comme la moyenne d'ensemble du spin moyen :

$$M = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \vec{s}_i \right\rangle_{\mathcal{G}}, \quad (\text{A.2})$$

où la moyenne $\langle \cdot \rangle_{\mathcal{G}}$ est définie par :

$$\langle S \rangle_{\mathcal{G}} = \frac{1}{Z} \sum_{[\vec{s}_i]} S \exp \left(-\frac{\mathcal{H}[\vec{s}_i]}{k_B T} \right), \quad (\text{A.3})$$

la somme est effectuée sur toutes les configurations possibles $[\vec{s}_i]$, k_B est la constante de Boltzmann et Z la fonction de partition :

$$Z = \sum_{[\vec{s}_i]} \exp \left(-\frac{\mathcal{H}[\vec{s}_i]}{k_B T} \right). \quad (\text{A.4})$$

Au point de transition, les fonctions thermodynamiques sont singulières. La transition est dite continue si la dérivée première de l'énergie libre est continue, du second ordre si la dérivée seconde ⁵ est discontinue. Le point de transition T_c est alors appelé point critique et, à son voisinage, les quantités thermodynamiques suivent des lois d'échelle. Successivement, l'aimantation M , la susceptibilité χ , la chaleur spécifique C et la longueur de corrélation dépendent de la température réduite $\varepsilon = 1 - \frac{T}{T_c}$:

$$M \propto \varepsilon^\beta, \text{ si } \varepsilon > 0 \quad (\text{A.5})$$

$$\chi \propto |\varepsilon|^{-\gamma}, \quad (\text{A.6})$$

$$C \propto |\varepsilon|^{-\alpha}, \quad (\text{A.7})$$

$$\xi \propto |\varepsilon|^{-\nu}, \quad (\text{A.8})$$

$$(\text{A.9})$$

en l'absence de champ magnétique. L'aimantation au point critique dépend aussi du champ de façon algébrique :

$$M \propto h^{\frac{\beta}{\Delta}}, \quad (\text{A.10})$$

Il est possible de distinguer les exposants à gauche et à droite de la singularité, mais ils sont en général égaux. Dans le cas contraire, nous les noterons, par exemple, γ^- et γ^+ . D'autres lois d'échelle avec d'autres exposants peuvent être définies. Leurs valeurs dépendent de la dimension d de l'espace dans lequel le système est plongé. Lorsque d est inférieure à une dimension d_c^{inf} , appelée dimension critique inférieure, alors aucune brisure spontanée de symétrie n'est possible. Si $d \geq d_c^{\text{sup}}$, le modèle est correctement décrit par une théorie de champ moyen. En dimension intermédiaire, les fluctuations du paramètre d'ordre au voisinage de la transition sont prédominantes et les exposants prennent des valeurs différentes de ceux du champs moyen. Ils sont dits non-triviaux. Pour les spins XY, $d_c^{\text{inf}} = 3$ et $d_c^{\text{sup}} = 4$.

Le point crucial de cette théorie est que ces exposants ne dépendent pas des détails des systèmes. Ainsi tous les matériaux ferromagnétiques à dipôles en rotation libre dans un plan ont les exposants des systèmes à spin de Heisenberg XY, peu importe la composition chimique du matériau. Cette remarque empirique a été confirmée par le développement des techniques liées au groupe de renormalisation (RG) [52, 55]. Ainsi, il est possible de montrer que les exposants, valeurs propres de la transformée linéarisée du groupe de renormalisation, sont indépendants des détails microscopiques du hamiltonien. Le problème ultérieur est donc de classer les systèmes et de déterminer les ingrédients minimaux nécessaires à l'appartenance à ces ensembles appelés *classes d'universalité*. Ces techniques analytiques

⁵Il est possible de définir des transitions d'ordre supérieur par analogie avec cet exemple.

permettent aussi de relier les exposants entre eux par des relations d'échelles :

$$\Delta = \beta + \gamma, \quad (\text{A.11})$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (\text{A.12})$$

$$2 - \alpha = d\nu, \quad (\text{A.13})$$

Seuls deux exposants sont donc nécessaires pour décrire les propriétés statiques d'un phénomène critique. L'étude du paramètre d'ordre permet de fixer β . Il est ensuite courant de déterminer γ . En effet, dans le cadre des systèmes magnétiques à l'équilibre, il est facile de montrer que :

$$\chi = \frac{N}{k_B T} \left(\langle \mathcal{S}^2 \rangle - \langle \mathcal{S} \rangle^2 \right), \quad (\text{A.14})$$

où $\mathcal{S} = \frac{1}{N} \sum_i \vec{s}_i$. Cette relation est appelée théorème fluctuation–dissipation. L'étude de la variance du paramètre d'ordre suffit donc à déterminer le comportement de la susceptibilité et l'exposant γ .

Le théorème de fluctuation–dissipation possède une généralisation en dehors de l'état stationnaire [24]. À l'instant t_0 , nous soumettons le système à un champ magnétique \vec{h} . Nous introduisons la réponse du système au champ \vec{h} :

$$R_{ij}(t, t_0) = \frac{\delta \mathcal{S}_i(t)}{\delta h_j(t_0)}, \quad (\text{A.15})$$

où les indices i et j désignent les composantes des vecteurs. Alors, la susceptibilité s'écrit en fonction de la réponse :

$$\chi_{ij}(t, t_0) = \int_{t_0}^t R_{ij}(t, t') dt'. \quad (\text{A.16})$$

De plus, nous définissons la corrélation du champ :

$$C_{ij}(t, t_0) = \langle \mathcal{S}_i(t) \mathcal{S}_j(t_0) \rangle - \langle \mathcal{S}_i(t) \rangle \langle \mathcal{S}_j(t_0) \rangle. \quad (\text{A.17})$$

Le théorème de fluctuation–généralisé s'écrit alors :

$$R_{ij}(t - t_0) = \frac{1}{T} \frac{\partial C_{ij}(t - t_0)}{\partial t}, \quad (\text{A.18})$$

$$\chi_{ij}(t - t_0) = \frac{1}{T} (C_{ij}(0) - C_{ij}(t - t_0)). \quad (\text{A.19})$$

La courbe de la susceptibilité en fonction de la corrélation du champ est donc linéaire et le coefficient directeur de cette droite est l'invers de la température du milieu. En fait l'énoncé du théorème que nous donnons ici est restrictif, puisque nous supposons qu'il n'y a pas de phénomène de vieillissement pour des temps $t \leq t_0$. Cette hypothèse convient à notre étude.

B

Études des effets de taille finie

Quelle que soit la nature de la transition étudiée dans l'ensemble canonique, la taille finie du système a pour effet de faire disparaître les singularités. C'est tout-à-fait compréhensible en considérant la définition de la fonction de partition. En taille finie, le nombre de configurations $[\vec{s}_i]$ étant fini, le nombre de termes dans l'équation A.4 l'est aussi. La fonction de partition est donc toujours régulière.

Soulignons que la plupart des systèmes étudiés, tant numériques qu'expérimentaux, sont finis. En principe, aucune transition n'est étudiée à la limite thermodynamique. C'est dire l'importance que revêt l'étude des effets de taille. En fonction de la nature de la transition, le traitement de ces effets sera très différent. Nous commencerons par les transitions continues et verront celles qui sont discontinues dans l'Annexe C.

Les résultats présentés ci-dessous sont détaillés dans le livre édité par V. Privman [76], et plus particulièrement, dans l'article intitulé *Finite size scaling theory* écrit par le même auteur. Rappelons cependant que c'est M. Fisher [37] qui, le premier a émis l'hypothèse fondatrice de cette théorie. Elle a ensuite été justifiée analytiquement via une théorie des champs renormalisée [16, 17]. Dans la suite, nous utiliserons les notations définies de l'Annexe A.

Au risque d'écrire une tautologie, la grandeur clef de l'étude des effets de taille est la taille du système L , et consiste en sa comparaison avec la longueur d'autocorrélation ξ définie par :

$$\langle \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle_{\mathcal{G}} (|\vec{r}_j - \vec{r}_i| = r) \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right). \quad (\text{B.1})$$

À la limite thermodynamique, nous avons vu précédemment que ξ diverge au voisinage du point critique $\varepsilon \sim 0^-$:

$$\xi \propto |\varepsilon|^{-\nu}. \quad (\text{B.2})$$

En taille finie, il existe donc toujours une valeur de la température réduite telle que $L \sim \xi$, et pour des valeurs plus proches du point critique, ξ est bornée

par L . En tenant compte de ces considérations et de la relation d'échelle B.2, la *bonne* variable pour étudier les phénomènes critiques est $\frac{L}{\varepsilon} = L\varepsilon^\nu$, ou de façon équivalente $\varepsilon L^{\frac{1}{\nu}}$. De plus, la partie singulière de l'énergie libre au point critique est une fonction homogène : $f(\varepsilon, h) = \varepsilon^{d\nu} \tilde{f}(h\varepsilon^{-\Delta})$. En utilisant la variable naturelle que nous avons définie ci-dessus, nous obtenons l'expression de l'énergie libre d'un système fini au voisinage du point critique :

$$f(L, \varepsilon, h) = L^{-d} \tilde{f}(\varepsilon L^{\frac{1}{\nu}}, hL^{\frac{\Delta}{\nu}}). \quad (\text{B.3})$$

Le groupe de renormalisation nous en dit un peu plus. Les variables sont les vecteurs propres et les exposants associés au facteur d'échelle sont les valeurs propres de la transformée du groupe de renormalisation linéarisée. Il y en a une infinité. Les champs à valeur propre positive sont dits pertinents, ceux à valeur propre nulle sont dits marginaux et ceux à valeur propre négative sont dits non-pertinents. Les champs pertinents peuvent être associés aux observables habituellement enregistrées : température, champ magnétique, etc. L'énergie libre s'écrit alors :

$$f(L, \varepsilon, h) = L^{-d} \cdot \tilde{f}(a \cdot \varepsilon L^{\frac{1}{\nu}}, b \cdot h L^{\frac{\Delta}{\nu}}, c \cdot u L^{-\frac{\omega}{\nu}}), \quad (\text{B.4})$$

où seul un champ non-pertinent u a été inséré. Les exposants sont universels bien sûr, la fonction \tilde{f} l'est aussi ; les détails microscopiques apparaissent via les coefficients métriques a , b et c .

Les fonctions thermodynamiques telles l'aimantation et la susceptibilité sont les dérivées successives de l'énergie libre en fonction du champ magnétique. En utilisant les relations d'échelle A.11, A.12, A.13, nous obtenons alors les formes suivantes :

$$M = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \cdot \tilde{M}(a \cdot \varepsilon L^{\frac{1}{\nu}}, b \cdot h L^{\frac{\Delta}{\nu}}, c \cdot u L^{-\frac{\omega}{\nu}}), \quad (\text{B.5})$$

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \cdot \tilde{\chi}(a \cdot \varepsilon L^{\frac{1}{\nu}}, b \cdot h L^{\frac{\Delta}{\nu}}, c \cdot u L^{-\frac{\omega}{\nu}}). \quad (\text{B.6})$$

En se plaçant au point critique ($\varepsilon = 0$), à des tailles suffisamment grandes pour pouvoir négliger les champs non-pertinents, nous pouvons écrire quatre lois de puissance permettant les mesures des rapports d'exposants $\frac{\beta}{\nu}$, $\frac{\gamma}{\nu}$ et $\frac{1}{\nu}$:

$$M \propto L^{-\frac{\beta}{\nu}}, \quad (\text{B.7})$$

$$\chi \propto L^{\frac{\gamma}{\nu}}, \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{\partial \ln(M)}{\partial \varepsilon} \propto L^{\frac{1}{\nu}}, \quad (\text{B.9})$$

$$\frac{\partial \ln(\chi)}{\partial \varepsilon} \propto L^{\frac{1}{\nu}}. \quad (\text{B.10})$$

À ce point de la théorie, il reste une difficulté à lever : la détermination du point critique. Elle a été levée par K. Binder [8] par la définition du cumulant

qui porte maintenant son nom. Il s'agit de définir une grandeur libre de tout préfacteur dépendant de la taille. Soit la susceptibilité non-linéaire $\chi^{\text{nl}} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial h^2}$, on définit le cumulante de Binder comme :

$$G(\varepsilon, L) = - \left[\frac{\chi^{\text{nl}}}{L^d \cdot \chi^2} \right]_{h=0}. \quad (\text{B.11})$$

Les relations d'échelle et les définitions des susceptibilités linéaire et non-linéaire permettent de montrer que :

$$G(\varepsilon, L) = \mathcal{G} \left(\varepsilon L^{\frac{1}{\nu}}, u L^{-\frac{\omega}{\nu}} \right), \quad (\text{B.12})$$

où \mathcal{G} est une fonction universelle. Au point critique, hormis les corrections dues aux champs non-pertinents, cette fonction prend une valeur unique et universelle U^* lorsque la taille varie. Il suffit donc de trouver le point de croisement des cumulants calculés pour chaque taille. En pratique, les termes non-pertinents jouent un rôle non négligeable. En tenant compte des premières corrections, le développement de Taylor du cumulante de Binder au point critique vaut :

$$\mathcal{G} \left(0, u L^{-\frac{\omega}{\nu}} \right) \sim U^* + c \cdot u L^{-\frac{\omega}{\nu}}. \quad (\text{B.13})$$

Ne connaissant ni le point critique T_c , ni la valeur universelle U^* , le problème peut être vu comme la recherche du couple (T_c, U^*) pour que la courbe de $\ln(G(T_c, L) - U^*)$ en fonction de $\ln(L)$ soit une droite. Mais c'est une méthode difficile à mettre en oeuvre d'une part à cause de la qualité des courbes des cumulants, d'autre part parce que la résolution numérique de cette minimisation peut révéler l'existence de minima locaux. Dans la littérature (voir par exemple [18]), l'utilisation du cumulante de Binder passe par une hypothèse, en générale fondée sur des études précédentes, concernant la valeur d'un des paramètres T_c , U^* ou ω . La suite de l'étude est alors restreinte à la recherche d'un seul paramètre.

Outre la détermination du point critique, le cumulante permet aussi la mesure des exposants non-pertinent $\frac{\omega}{\nu}$ par l'étude des corrections et pertinent $\frac{1}{\nu}$ grâce à la relation :

$$\frac{\partial G}{\partial \varepsilon}(\varepsilon, L) \propto L^{\frac{1}{\nu}}. \quad (\text{B.14})$$

Nous avons maintenant une méthode de détermination du point critique par l'étude des effets de taille sur le cumulante de Binder (équation B.13), une mesure des rapports d'exposants $\frac{\beta}{\nu}$ et $\frac{\gamma}{\nu}$ par les relations B.7 et B.8, trois mesures possibles de $\frac{1}{\nu}$ grâce à B.9, B.10 et B.14. Une mesure directe des lois de puissance en fonction de la température réduite A.5, A.6 et B.2 est aussi possible. Enfin, nous pouvons confronter ces valeurs entre-elles, et vérifier la validité de lois d'échelle A.11, A.12 et A.13, qui sont réductibles à une seule loi ici, puisque nous n'étudions que trois de ces exposants :

$$2\beta + \gamma = d\nu \quad (\text{B.15})$$

Enfin, en ce qui concerne la détermination numérique des grandeurs thermodynamiques, nous avons vu précédemment que l'aimantation et la susceptibilité, par l'intermédiaire du théorème fluctuation-dissipation, sont données par la moyenne d'ensemble des moments de la moyenne spatiale des spins (équations A.2 et A.14). De même, nous pouvons calculer le cumulants de Binder :

$$G(\varepsilon, L) = 1 - \frac{\langle \mathcal{S}^4 \rangle - 4 \langle \mathcal{S}^3 \rangle \langle \mathcal{S} \rangle + 6 \langle \mathcal{S}^2 \rangle \langle \mathcal{S} \rangle^2 - 3 \langle \mathcal{S} \rangle^4}{3 (\langle \mathcal{S}^2 \rangle^2 - 2 \langle \mathcal{S} \rangle \langle \mathcal{S}^2 \rangle + \langle \mathcal{S} \rangle^4)} \quad (\text{B.16})$$

Dans le cas symétrique, les moments impairs de l'aimantation s'annulent :

$$G(\varepsilon, L) = 1 - \frac{\langle \mathcal{S}^4 \rangle}{3 \langle \mathcal{S}^2 \rangle^2}. \quad (\text{B.17})$$

Le cumulants de Binder prend alors la forme de la kurtosis, grandeur mesurant l'écart entre la fonction de distribution de la variable aléatoire \mathcal{S} et la loi de Gauss. Dans la phase ordonnée idéale, le paramètre est constamment égal à sa valeur maximale. Par ce raisonnement simpliste, nous en déduisons la valeur du cumulants de Binder : $G(\varepsilon \gg 0, L) \sim \frac{2}{3}$.

C

Transition du premier ordre

Nous conserverons, dans cette annexe, le cadre des phénomènes ferromagnétiques à l'équilibre. Soit un matériau à une température inférieure à la température de Curie T_c et sous champ magnétique \vec{h} . Le matériau possède alors une aimantation \vec{M} de même orientation que le champ externe. Si nous diminuons l'intensité de \vec{h} , l'aimantation diminue pour atteindre sa valeur spontanée \vec{M}_R sous champ nul, appelée aussi aimantation rémanente. La seule différence par rapport à un système paramagnétique dont la température a été abaissée sous la température critique est l'orientation de l'aimantation : imposée selon \vec{h} dans le premier cas, spontanée, c'est-à-dire influencée par les seuls défauts du matériau, dans le second. Lorsque nous imposons un champ faible et d'orientation opposée au champ précédent, nous nous attendons à ce que l'aimantation s'inverse. En effet, le terme important du hamiltonien A.1 pour le problème présent est : $-\vec{h} \sum_i \vec{s}_i$. Par la minimisation de ce terme, la courbe théorique du paramètre d'ordre est donc un saut de \vec{M}_R à $-\vec{M}_R$.

Cependant, l'expérience montre une aimantation décroissante qui s'annule en un champ, dit coercitif, $(-\vec{h}_{co})$. Si nous continuons à augmenter l'intensité du champ, tous les dipôles magnétiques finissent pas s'aligner avec le champ extérieur. Quand nous suivons le processus inverse, l'aimantation ne prend pas les mêmes valeurs. En $(-\vec{h}) = \vec{0}$, elle vaut $(-\vec{M}_R)$, et elle s'annule en \vec{h}_{co} . Le cycle ainsi réalisé est nommé cycle d'hystérésis. Le chemin suivi le long du cycle dépend de l'orientation initiale de l'aimantation. La raison principale de cette hystérèse est que, si nous inversons tous les spins d'une configuration donnée, nous obtenons un nouvel équilibre. Sous champ, parmi les deux équilibres, l'un est stable et l'autre instable. Loin de la transition, seule la solution stable est atteinte par le système. Au voisinage de la transition, chacune des configurations devient marginalement stable. Des domaines du matériau restent alors bloqués dans la phase métastable. En conclusion, et c'est une des caractéristiques des transitions du premier ordre, il y a coexistence des phases au point de transition.

L'hystérèse n'est pas la seule déviation possible du comportement asymptotique. Tout comme les transitions continues, les grandeurs thermodynamiques d'un système de petite taille ne possèdent pas de discontinuités. Prenons comme exemple le modèle d'Ising, *i.e.*, un ensemble de spins à seulement deux valeurs possibles $\{-1; 1\}$, à une température T et ayant un volume L^d . La fonction de partition correspondant au hamiltonien A.1 peut être réduite à :

$$Z(h, L) \sim e^{h.M_R.L^d/kT} + e^{-h.M_R.L^d/kT}, \quad (\text{C.1})$$

où M_R est l'aimantation rémanente du modèle d'Ising. On en déduit la forme du paramètre d'ordre, sachant que $M(h, L) = \frac{1}{L^d} \frac{\partial \ln(Z(h, L))}{\partial h}$:

$$M(h, L) \sim M_R \tanh \left(\frac{h.M_R.L^d}{kT} \right). \quad (\text{C.2})$$

Cette relation n'est vraie que si l'on considère des systèmes où peuvent coexister deux phases, soumises à un champ symétrique. L'étude des systèmes soumis à un champ asymétrique, ou pilotés par la température, et pouvant posséder plusieurs phases a été réalisée par C. Borgs, R. Kotecký et S. Miracle-Solé, d'abord dans le cas général [14], puis en une application sur le modèle de Potts [15]. Le modèle de Potts [77] est une généralisation du modèle d'Ising à q états (le modèle d'Ising est un modèle de Potts à $q = 2$), mais possède une transition du premier ordre dès que $q > 4$. Tous leurs résultats ont été obtenus pour un réseau de taille L , de dimension d aux conditions aux bords périodiques et en considérant que l'énergie fondamentale et l'activité de chaque phase sont suffisamment régulières. Et par un modèle de *contours*, les auteurs obtiennent la forme de l'aimantation près du point de transition h_t , dans le cas d'un système bi-phasique dont chaque phase est désignée par les indices + et - :

$$M(h, L) = M_0 + \frac{\chi_+ + \chi_-}{2}(h - h_t) + \left[M + \frac{\chi_+ - \chi_-}{2}(h - h_t) \right] \tanh \left[L^d \left[M(h - h_t) + \frac{\chi_+ - \chi_-}{4}(h - h_t)^2 \right] \right], \quad (\text{C.3})$$

où $M_0 = (M_+(h_t) + M_-(h_t))/2$, $M = (M_+(h_t) - M_-(h_t))/2$ et h est un paramètre de contrôle, champ magnétique, température ou autre. Les termes correctifs à cette relation sont exponentiellement petits avec la taille. Notons que nous y retrouvons un terme semblable à celui trouvé sur le modèle d'Ising, ainsi que le terme de réponse linéaire du système à un faible champ. D'autre part, loin de la transition, l'encart entre l'aimantation à taille finie et sa valeur asymptotique décroît de même :

$$|M(h, L) - M(h, L \rightarrow \infty)| \leq e^{(-aL)} + be^{(-c|h-h_t|L^d)}. \quad (\text{C.4})$$

Mais le premier problème reste la détermination du point de transition. Les auteurs ont défini cinq mesures possibles. La chaleur spécifique est maximale au point de transition, le cumulatif de Binder, quant à lui, y est minimal. En taille finie, ces deux extrema sont atteints en des valeurs $h_t(L)$ déplacées par rapport au point asymptotique h_t , et leurs écarts $|h_t - h_t(L)|$ décroissent comme le volume du système. De même, la susceptibilité $\chi(L)$ est maximale en h_χ et $h_\chi(L)$ tend vers h_t :

$$h_\chi(L) = h_t + \frac{3(\chi_+ - \chi_-)}{4M^3L^{2d}} + O(L^{-3d}). \quad (\text{C.5})$$

Au point de transition, appelé aussi point de coexistence, le nombre de phases est maximal. Ce point, en taille finie, tend exponentiellement vite avec la taille vers la valeur asymptotique du point de transition.

Enfin, nous avons défini précédemment l'aimantation M_0 au point de transition. Soit $h_m(L)$, la valeur du champ telle que l'aimantation en taille finie $M(L, h_m(L))$ vaille M_0 , alors

$$|h_t - h_m(L)| \leq O(e^{-aL}), \quad (\text{C.6})$$

où a est une constante positive. Bien sûr, la dernière méthode est numériquement la plus facile à mettre en oeuvre.

Nous avons étudié la détermination du point de transition et les propriétés des grandeurs thermodynamiques de ces systèmes. Ajoutons un mot au sujet de leurs propriétés dynamiques. Tout comme les phénomènes critiques, le temps d'autocorrélation dépend de la longueur de corrélation. Mais il n'y a pas de loi d'échelle. J. C. Niel et J. Zinn-Justin [67] ont montré en théorie des champs que cette dépendance est de la forme :

$$\tau \propto \xi^{\frac{d}{2}}. \quad (\text{C.7})$$

En fait, ces processus sont dirigés aussi par la tension de surface des différentes phases en présence. Ainsi, dans [71], les auteurs utilisent l'expression suivante pour modéliser les processus dynamiques dans les système de Potts à 6 et 7 états en taille finie :

$$\tau = L^{\frac{d}{2}} \exp\left(\sigma L^{d-1}\right) \quad (\text{C.8})$$

D

Erreurs statistiques

Les définitions des grandeurs thermodynamiques en terme de moyennes telles que nous les avons posées précédemment ne sont valides qu'une fois définie une mesure au sens de Gibbs. Cela n'est pas toujours facile ni même possible. Pour la plupart des systèmes pour lesquels les transitions de phase ont été étudiées, tant de façon numérique qu'analytique, la difficulté réside dans la détermination de toutes les configurations. Cantonnons-nous au problème numérique. La méthode généralement utilisée est de trouver un analogue dynamique au système à l'équilibre, puis de considérer que tous les instants constituent des configurations possibles. La moyenne temporelle est alors une approximation de la moyenne d'ensemble :

$$\langle \mathcal{S} \rangle (T) = \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{S}(t) dt \rightarrow \langle \mathcal{S} \rangle_G. \quad (\text{D.1})$$

L'égalité n'est atteinte qu'à temps infini. Que se passe-t-il à temps fini ? Le système peut très rapidement explorer tout l'espace des phases, mais il peut tout aussi bien rester longtemps confiné dans un bassin d'attraction, voire bloqué sur un point fixe ou un cycle limite l'empêchant ainsi de visiter des configurations au poids de Boltzmann pourtant non nul.

Il nous faut donc mesurer la qualité de l'approximation réalisée lorsque nous avons changé de définition. Intuitivement, l'écart à la moyenne de la grandeur \mathcal{S} est égal à ses fluctuations mesurées en nombre de mesures indépendantes :

$$(\delta \langle \mathcal{S} \rangle)^2 = \frac{\langle \mathcal{S}^2 \rangle - \langle \mathcal{S} \rangle^2}{T_{ind}}. \quad (\text{D.2})$$

H. Müller-Krumbhaar et K. Binder [65] ont démontré cette égalité et défini le nombre de mesures indépendantes T_{ind} pour les systèmes magnétiques à l'équilibre :

$$T_{ind} = \frac{T}{1 + 2\tilde{\tau}}, \quad (\text{D.3})$$

où T est le temps total durant lequel a été effectuée la moyenne. $\tilde{\tau}$ est le temps décorrélation, c'est-à-dire le temps à la fin duquel la fonction d'autocorrélation

s'annule :

$$\tilde{\rho}(t) = \frac{\langle \mathcal{S}(0) \cdot \mathcal{S}(t) \rangle - \langle \mathcal{S} \rangle^2}{\langle \mathcal{S}^2 \rangle - \langle \mathcal{S} \rangle^2} \quad (\text{D.4})$$

On observe, dans les systèmes magnétiques que cette fonction décroît exponentiellement suivant un temps caractéristique τ : $\tilde{\rho}(t) \propto \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$. D'autre part, τ , appelé temps d'autocorrélation, diverge en s'approchant du point critique, ce qui définit l'exposant dynamique z : $\tau \sim \xi^z$. En taille finie, la longueur de corrélation étant bornée par la taille du système, cette équation devient au point critique :

$$\tau \sim L^z. \quad (\text{D.5})$$

Dans le cas d'une transition du premier ordre, $z = d/2$.

Idéalement, à chaque valeur du paramètre de contrôle pour lequel les grandeurs thermodynamiques sont mesurées, il faudrait mesurer τ . Nous avons choisi de nous restreindre au point critique. D'une part, cela permet de mesurer l'exposant dynamique. D'autre part, nous obtenons ainsi une borne supérieure du temps d'autocorrélation dans le régime désordonné et donc une sur-estimation des erreurs. Enfin, τ est le temps typique de décroissance de la fonction d'autocorrélation, et non le temps de décorrélation $\tilde{\tau}$. Nous définissons $\tilde{\tau}$ tel que $\tilde{\rho}(\tilde{\tau}) = \exp(-\tilde{\tau}/\tau) = 0,1\%$.

Cependant, la mesure des erreurs définie par l'équation D.2 n'est pas entièrement satisfaisante. En effet, à chaque grandeur mesurée, il faudrait associer un temps d'autocorrélation. Nous avons préféré calculer un seul temps τ , mesuré pour l'aimantation dans la suite de ce travail. Pour dériver les erreurs sur les moments d'ordre supérieure, nous nous sommes inspirés du livre de B. Efron [33] et de son application à un modèle de spins XY , travail mené par D. Loison et P. Simon [59].

La méthode est la suivante. Considérons avoir obtenu numériquement la série temporelle de longueur T de la variable \mathcal{S} , pour des instants séparés de $\Delta t = 1$. Soit $\langle \mathcal{S} \rangle$ la moyenne réalisée sur cet ensemble et \mathcal{S}_t la valeur de la variable à un instant t . Nous définissons les moyennes et les fluctuations tronquées comme :

$$\bar{\mathcal{S}}_t = \frac{T \langle \mathcal{S} \rangle - \mathcal{S}_t}{T - 1}, \quad (\text{D.6})$$

$$\bar{\mathcal{S}}_t^2 = \frac{T \langle \mathcal{S}^2 \rangle - \mathcal{S}_t^2}{T - 1}, \quad (\text{D.7})$$

$$\bar{\sigma}_t = N \left(\bar{\mathcal{S}}_t^2 - \bar{\mathcal{S}}_t^2 \right). \quad (\text{D.8})$$

Une approximation des moyennes d'ensemble s'écrit comme la moyenne des fluctuations tronquées, ainsi que les erreurs :

$$\sigma \sim \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \bar{\sigma}_t \quad (\text{D.9})$$

$$(\delta\sigma)^2 \sim (1 + 2\tilde{\tau}) \frac{T-1}{T} \sum_{t=1}^T (\bar{\sigma}_t - \sigma)^2 \quad (\text{D.10})$$

En développant ces relations, et en considérant la limite des longues séries temporelles, nous vérifions d'une part que nous retrouvons effectivement la définition des fluctuations du paramètre d'ordre au sens des moyennes d'ensemble ; d'autre part, nous obtenons l'expression des erreurs statistiques de la fluctuation :

$$(\delta\sigma)^2 \sim \frac{1 + 2\tilde{\tau}}{T} \left[\langle \mathcal{S}^4 \rangle - \langle \mathcal{S}^2 \rangle^2 + 4 \langle \mathcal{S} \rangle^2 (\langle \mathcal{S}^2 \rangle - \langle \mathcal{S} \rangle^2) - 4 \langle \mathcal{S} \rangle (\langle \mathcal{S}^3 \rangle - \langle \mathcal{S}^2 \rangle \langle \mathcal{S} \rangle) \right]$$

et, en généralisant, les erreurs sur le cumulants de Binder :

$$(\delta G)^2 \sim \frac{1 + 2\tilde{\tau}}{T} \left[4 \langle \mathcal{S}^4 \rangle^3 - 4 \langle \mathcal{S}^2 \rangle \langle \mathcal{S}^4 \rangle \langle \mathcal{S}^6 \rangle + 8 \langle \mathcal{S}^2 \rangle^2 \langle \mathcal{S}^8 \rangle - 2 \langle \mathcal{S}^2 \rangle^2 \langle \mathcal{S}^4 \rangle^2 \right].$$

Les erreurs varient donc comme la racine carrée du temps d'autocorrélation τ . Or, nous avons vu que τ diverge algébriquement en fonction de la taille au voisinage du point critique, nous pouvons donc nous attendre à devoir augmenter le temps de calcul selon la même loi. Pour obtenir des résultats à erreurs statistiques égales, le temps de calcul devrait croître comme $L^{d+z/2}$. Cependant, il faut prendre en compte également le second facteur qui est composé des moments de la moyenne spatiale des spins, ou des vitesses dans nos modèles. Les fluctuations de ces moments peuvent donc varier avec la taille du système. A. Ferrenberg *et al* [36] ont à ce propos défini la propriété d'*auto-moyennage*. À temps de calcul identique, modélisons la dépendance des fluctuations selon la taille comme une loi de puissance L^{-x} . Si $x = d$, le moyennage est dit fort ; si $x = 0$, il est dit absent. Bien sûr, tous les cas intermédiaires sont possibles. Nous voyons immédiatement que si nous étudions une grandeur à moyennage fort, il est plus rentable de calculer un grand système. Alors que, dans le cas, d'un faible moyennage, il faudra augmenter le temps de calcul pour atteindre des erreurs plus faibles. Comme exemples des différents types de comportement des moyennes spatiales, citons l'aimantation dont les fluctuations, dans la phase désordonnée, varient comme L^{-d} , l'énergie moyenne qui fluctue comme $L^{-(d-\alpha/\nu)}$ et la susceptibilité pour laquelle il n'y a pas d'auto-moyennage.

E

Pavage de Voronoï

E.1 Définition

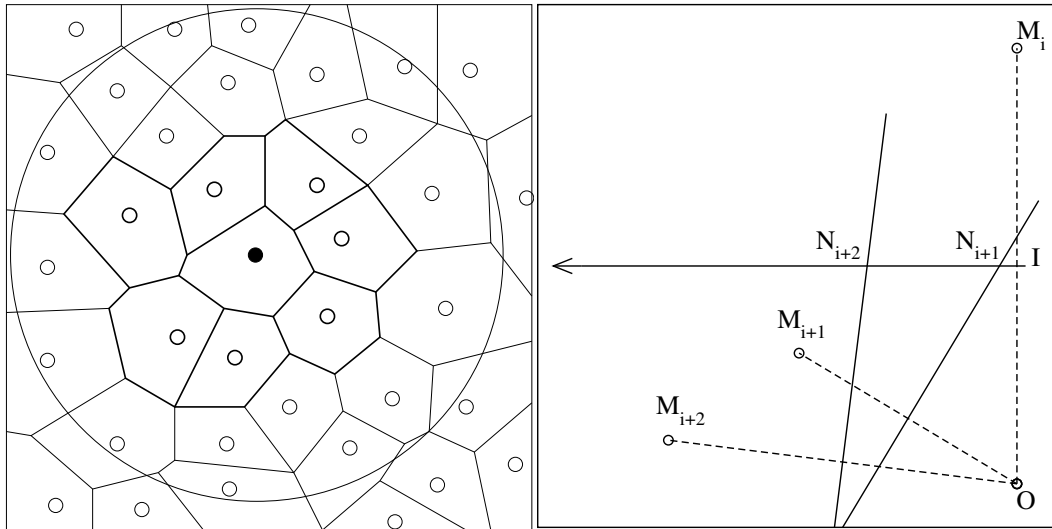


FIG. E.1 – Définition des voisins selon le pavage de Voronoï. À gauche : pavage complet autour du point noir ; ses plus proches voisins sont en trait gras. Nous avons représenté le cercle figurant la distance de coupure des interactions appliquées aux animoïdes. À droite : schéma illustrant l'algorithme récursif utilisé pour tracer le pavage de Voronoï.

Le pavage de Voronoï est utilisé dans notre étude pour la détermination des plus proches voisins parmi des points aléatoirement répartis sur le plan. Considérons un point O . Traçons toutes médiatrices de tous les segments formés par ce point et tous ses voisins, sans préjuger de leurs distances. Toutes les médiatrices se coupent et les points d'intersection forment un réseau. Considérons les polygones constitués par ces points, le polygone intérieur à tous les autres a été créé par les

premiers voisins de O . Chacun des ces polygones minimaux constitue le pavage de Voronoï. Outre la détermination des voisins, cette technique peut permettre la définition du volume de chaque cellule. Ainsi la figure E.1 montre-t-elle un pavage de Voronoï construit à partir du point noir central. Ses premiers voisins sont les cercles en trait gras.

Le pavage de Voronoï est connu de longue date, puisque R. Descartes [28] l'employait déjà sans en donner d'explications approfondies, ce qui sous-entend que cette méthode était connue au XVII^e siècle. Ils sont ensuite tombés dans l'oubli. Les réseaux aléatoires ont été à nouveau étudiés par G. Lejeune–Dirichlet et G. Voronoï. Le sujet a depuis été longuement étudié. Le lecteur pourra en trouver une revue de ses travaux dans le livre d'A. Okabe *et al* [68]. Notamment il y a des algorithmes pour déterminer ce pavage. Nous en avons écrit une version adaptée à notre problème.

E.2 Algorithme

La première partie de l'algorithme est la détermination des voisins au sens large. La seconde partie est un algorithme récursif de détermination du pavage de Voronoï.

Les particules étudiées sont libres de se déplacer librement dans un espace bidimensionnel. Mais, pour les repérer, nous traçons sur ce plan un réseau régulier de pas R_0 . À chaque case ainsi définie, on associe toutes les particules qui s'y trouvent. La première définition du voisinage est l'appartenance à l'une des neuf boîtes entourant la particule considérée (fig 1.1). Parmi ces voisins, nous déterminons les animoïdes qui sont à l'intérieur du disque R_0 . Il s'agit de la distance de coupure de toutes les interactions.

La recherche des plus proches voisins n'est mise en place que s'il y a plus de deux particules dans le disque d'interaction. L'algorithme récursif a pour point de départ le plus proche animoïde. Ensuite, nous considérons chaque particule les unes après les autres en balayant l'espace dans le sens trigonométrique. Soit O , la particule dont nous recherchons les voisins. Supposons que N particules notées M soient dans le disque d'interaction, et que nous ayons déterminé les n premiers voisins, le dernier de ceux-ci étant d'indice i . Nous traçons la médiatrice du segment $[OM_i]$. Le milieu de $[OM_i]$ est noté I . Nous orientons cette médiatrice et nous fixons l'origine de l'axe ainsi défini en I . Ensuite nous traçons les médiatrices de $[OM_j]$ pour $j > i$. Toutes ces droites coupent la médiatrice de $[OM_i]$ en des points N_j .

La cellule de Voronoï est définie comme le polygone le plus intérieur. Nous observons alors que le voisin suivant est celui pour lequel la distance algébrique

\bar{N} est la plus petite Sur la figure E.1, nous montrons un exemple pour lequel le point M_{i+1} est reconnu comme un des voisins au sens de Voronoï. Ensuite, il suffit d'itérer le processus.

F

Statistique des évènements extrêmes

Cette annexe n'est que le résumé des résultats sur le sujet. Le lecteur intéressé pour consulter la thèse d'A. Baldassari [4] pour avoir plus de détails.

Le problème consiste à déterminer les grandeurs statistiques des évènements rares ou extrêmes, c'est-à-dire la fonction de distribution de probabilité, la moyenne, la variance etc. Soit des évènements aléatoires caractérisés par une variable X_i , nous étudions W_n le maximum des X_i sur un échantillon de n évènements. Le problème peut s'écrire comme la détermination des deux suites (a_n) et (b_n) telles que :

$$\text{Prob} \left(\frac{W_n - a_n}{b_n} \right) \rightarrow H(x) \quad (\text{F.1})$$

Dans le cas de variables indépendantes et identiquement distribuées, on définit la fonction de répartition $F(x) = \text{Prob}(X_i \leq x)$. Alors la distribution limite $H(x)$ se déduit de $F(x)$ par le raisonnement suivant :

$$\text{Prob}(W_n \leq x) = F^n(x) \equiv H_n(x). \quad (\text{F.2})$$

Or $H_n((a_n + b_n x) \rightarrow H(x)$. De plus si $F(x) \sim 1$ alors $H_n(x) \sim \exp(-n(1 - F(x)))$. Alors il suffit de trouver les suite (a_n) et (b_n) pour déterminer entièrement $H(x)$. Les résultats suivants nous sont nécessaires dans notre étude des troupeaux :

Si la variable aléatoire suit une loi de distribution exponentielle :

$$F(x) = 1 - \exp(-\lambda x), \quad (\text{F.3})$$

alors $H_n \sim \exp(-n \exp(-\lambda x))$. Si nous prenons $a_n = \ln(n)/\lambda$ et $b_n = 1/\lambda$, alors nous obtenons la distribution limite de Gumbel :

$$H(x) = \exp(-\exp(-x)). \quad (\text{F.4})$$

Si la variable aléatoire suit une loi distribuée selon une loi d'échelle :

$$F(x) = 1 - x^{-\theta}, \quad (\text{F.5})$$

avec $\theta > 0$ alors $H_n(x) \sim \exp(-nx^{-\theta})$. Avec les suites $a_n = 0$ et $b_n = n^{1/\theta}$, alors nous obtenons la distribution limite de Fréchet :

$$H(x) = \exp(-x^\theta). \quad (\text{F.6})$$

Publications

Prigent A., Grégoire G., Chaté H., Dauchot O. and van Saarloos W., *Long wavelength modulation of turbulent shear flows*, Physica D, à paraître.

Prigent A., Grégoire G., Chaté H., Dauchot O. and van Saarloos W., *Large-scale Finite-Wavelength modulation of turbulent shear flows*, Phys. Rev. Lett. **89**, 014501 (2002).

Grégoire G., Chaté H. and Tu Y., *Active and passive particle : Modeling beads in a bacterial bath*, Phys. Rev. E **64**, 011902 (2001).

Grégoire G., Chaté H. and Tu Y., *Comment on "Particle Diffusion in a Quasi-Two-Dimensional Bacterial Bath"*, Phys. Rev. Lett. **86**, 556 (2001).

Fournier P. *et al*, *Status of CO₂ laser ion source at CERN*, Rev. Sci. Instr **71**, 924 (2000).

Grégoire G. *et al*, *Aberrations due to solenoid focusing of a multiple charged high-current ion beam*, Rev. Sci. Instr **71**, 1097 (2000).

Chaix P., Piovela N. and Grégoire G., *Superradiant, single-mode and nonlinear regimes of short pulse free electron laser oscillators*, Phys. Rev. E **59**, 1136 (1999).

Bibliographie

- [1] Adler J., *Chemoreceptors in bacteria*, Science **166**, 1588 (1969).
- [2] Albano E. V., *Self-organized Collective Displacements of Self-Driven Individuals*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2119 (1996).
- [3] Allen S. M. and Cahn J. W., *A microscopic theory for antiphase boundary motion and its applications to antiphase domain coarsening*, Acta Metall. **27**, 1085.
- [4] Baldassari A., *Statistics of Persistent Events*, thèse de doctorat de l'Université Paris Sud-XI (1999).
- [5] Belmonte A. *et al* , *Velocity fluctuations in a turbulent soap film : The third moment in two dimensions*, Phys. of Fluids **11**, 1196 (1999).
- [6] Berg H. C., *Random walk in biology*, Princeton : Princeton Univ. Press (1983).
- [7] Ben-Jacob E., Cohen I. and Levine H., *Cooperative self-organization in microorganisms*, Adv. in Phys. **49**, 395 (2000).
- [8] Binder K., Monte Carlo investigations of phase transitions and critical phenomena. In Domb C. and Green M. S. (Eds.), *Phase transitions and critical phenomena*, vol 5b. New York : Academic Press (1976).
- [9] Bonabeau E., Theraulaz G., Fourcassié V and Deneubourg J.-L., *Phase-ordering kinetics of cemetery organization in ants*, Phys. Rev. E **57**, 4568 (1998).
- [10] Bonner J. T., *The migration stage of Dictyostelium : Behavior without muscles or nerves*, FEMS Microbiology Lett. **120**, 1 (1994).
- [11] Bonner J. T. *et al*, *Development in one dimension : The rapid differentiation of Dictyostelium discoideum in glass capillaries*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **92**, 8249 (1995).
- [12] Bonner J. T., Segel L. and Cox E. C., *Oxygen and differentiation in Dictyostelium discoideum*, J. Biosci. **23**, 177 (1998).

- [13] Bonner J. T., *A way of following individual cells in the migrating slugs of Dictyostelium discoideum*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **95**, 9355 (1998).
- [14] Borgs C. and Kotecký R., *A Rigorous Theory of Finite Size Scaling at First-Order Phase Transitions*, J. Stat. Phys. **61**, 79 (1990).
- [15] Borgs C., Kotecký R. and Miracle-Solé S., *Finite-Size Scaling for Potts Models*, J. Stat. Phys. **62**, 529 (1991).
- [16] Brézin E., J. Physique **43**, 15 (1982).
- [17] Brézin E. and Zinn-Justin J., *Finite Size Effects in Phase Transitions*, Nucl. Phys. B **257**, 867 (1985).
- [18] Campostrini M., Haschenbush M., Pelissetto A., Rossi P. and Vicari E., *Critical behavior of the three-dimensional XY universality class*, Phys. Rev. B **63**, 214503 (2001).
- [19] Cardy J. L., *Conformal invariance and surface critical behaviour*, Nucl. Phys. B **240**, 514 (1984).
- [20] Chandrasekhar S., *Liquid Crystal*, Cambridge : Cambridge University Press (1992).
- [21] Cheung C., Hwang Y. H., Wu X.-L. and Choi H. J., *Diffusion of Particles in Free-Standing Liquid Films*, Phys. Rev. Lett. **76**, 2531(1996).
- [22] Csahók Z. and Vicsek T., *Lattice – gas model for collective motion*, Phys. Rev. E **52**, 5297 (1995).
- [23] Csahók Z. and Czirók A., *Hydrodynamics of bacterial motion*, Physica A **243**, 304 (1997).
- [24] Cugliandolo L., Kurchan J. and Peliti L., *Energy flow, partial equilibration, and effective temperatures in systems with slow dynamics*, Phys. Rev. E **55**, 3898 (1997).
- [25] Czirók A., Stanley H. E., Vicsek T., *Spontaneously ordered motion of self – propelled particles*, J. Phys. A **30**, 1375 (1997).
- [26] Czirók A., Barabási A.-L. and Vicsek T., *Collective Motion of Self – Propelled Particles : Kinetic Phase Transition in One Dimension*, Phys. Rev. Lett. **82**, 209 (1999).
- [27] Czirók A., Vicsek M. and Vicsek T., *Collective motion of organisms in three dimensions*, Physica A **264**, 299 (1999).
- [28] Descartes R., *Le monde de M. Descartes ou Le trait de la lumière*, III (1644).

-
- [29] Detrain C., Natan C. and Deneubourg J.-L., *The influence of the physical environment on the self-organised foraging patterns of ants*, *Naturwissenschaften* **88**, 171 (2001).
- [30] Domb C. and Lebowitz J. L. (ed.), *Phase transitions and critical phenomena*, vol. 11, London : Acad. Press inc. (1987).
- [31] Dormann D., Vasiev B and Weijer C. J., *The control of chemotactic movement during Dictyostelium discoideum morphogenesis*, *Philos. Trans. R. Soc. Lnd. B Biol. Sci.* **355**, 983 (2000).
- [32] Duparcmeur Y. L., Herrman H. and Troadec J. P., *Spontaneous Formation of Vortex in a System of Self Motorised*, *J. Phys. I France* **5**, 1119 (1995).
- [33] Efron B., *The Jackknife, The Bootstrap and other Resampling Plans*, Philadelphia : SIAM (1982).
- [34] Einstein A., *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*, *Ann. Phys.* **17**, 549 (1905).
- [35] Eisenbach M., *Functions of the flagellar modes of rotation in bacterial motility and chemotaxis*, *Molec. Microbiol.* **4**, 161 (1990).
- [36] Ferrenberg A. M., Landau D. P. and Binder K., *Statistical and Systematic errors in Monte Carlo Sampling*, *J. Stat. Phys.* **63**, 867 (1991).
- [37] Fisher M. E., in *Critical Phenomena, Internatinal School of Physics "Enrico Fermi", Course 51*, edited by M. S. Green, New York : Academic Press (1971).
- [38] Flierl G. *et al*, *From individuals to aggregations : The interplay behavior and physics*, *J. of Theor. Biol.* **196**, 397 (1999).
- [39] Francis D. F., Phd thesis, Univ. of Wisconsin (1962).
- [40] Fujikawa H. and Matsushita M., *Fractal Growth of bacillus subtilis on agar plates*, *J. phys. Soc. Jpn* **58**, 3875 (1989).
- [41] Goldstein R. E., *Travelling-Wave Chemotaxis*, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 775 (1996).
- [42] Glazier J. A. and Graner F. , *Simulation of the differential adhesion driven rearrangement of biological cells*, *Phys. Rev. E* **47**, 2128 (1993).
- [43] Graner F. and Glazier J. A., *Simulation of Biological Cell Sorting Using a Two-Dimensional Extended Potts Model*, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2013 (1992).

- [44] Grégoire G., Chaté H. and Tu Y., *Comment on “Particle Diffusion in a Quasi-Two-Dimensional Bacterial Bath”*, Phys. Rev. Lett. **86**, 556 (2001).
- [45] Grégoire G., Chaté H. and Tu Y., *Active and passive particle : Modeling beads in a bacterial bath*, Phys. Rev. E **64**, 011902 (2001).
- [46] Hamilton W. D., *Geometry of selfish herd*, J. theor. Biol. **31**, 295 (1971).
- [47] Helbing D., Farkas I. J. and Vicsek T., *Simulating Dynamical Features of Escape Panic*, Phys. Rev. Lett. **84**, 1240 (2000).
- [48] Hemmingson J., *Modellization of self-propelling particles with a coupled map lattice model*, J. Phys. A **28**, 4245 (1995).
- [49] Hoshen J. and Kopelman R., *Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm*, Phys. Rev. B **14**, 3438 (1976)
- [50] Hugues B. D., *Random Walks and Random environments, Vol. 1 : Random Walks*, Oxford : Clarenton Press (1996).
- [51] Kerner B. S. and Konhäuser P., *Cluster effect in initially homogeneous traffic flow*, Phys. Rev. E **48**, 2335 (1993).
- [52] Kogut J. and Wilson K.G., *The Renormalization Group and the ϵ Expansion*, Physics Reports **12C**, 75 (1975).
- [53] Kozlovsky Y *et al*, *Lubricating bacteria model for branching growth of bacterial colonies*, Phys. Rev. E **59**, 7025 (1999).
- [54] Laub M. T. and Loomis W. F., *A Molecular Network That Produces Spontaneous Oscillations in Excitable Cells of Dictyostelium*, Mol. Bio. of the Cell **9**, 3521 (1998).
- [55] Le Bellac M., *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, Paris : éditions du CNRS (1988).
- [56] Lee K. J., Cox E. C. and Goldstein R. E., *Competing Patterns of Signaling Activity in Dictyostelium discoideum*, Phys Rev. Lett. **76**, 1174 (1996).
- [57] Levine H., Rappel W.-J. and I. Cohen, *Self-organization in systems of self-propelled particles*, Phys. Rev. Lett. **63**, 017101 (2000).
- [58] Libchaber A., communication privée.
- [59] Loison D. and Simon P., *A Monte Carlo analysis of the phase transitions in the 2D, $J_1 - J_2$ XY Model*, Phys. Rev. B **61**, 6114 (2000).

-
- [60] Marcq P., *Systèmes Dynamiques Étendus : Structures Localisées et Transition de Phase*, thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie (1996).
- [61] Marcq P., Chaté H. and Manneville P., *Universal Critical Behavior in Two-Dimensional Coupled Map Lattices*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4003 (1996).
- [62] Matsushita M. *et al*, *Formation of colony patterns by a bacterial cell population*, Physica A **274**, 190 (1999).
- [63] Mermin N. D. and Wagner H., *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One - or - Two - Dimensional Isotropic Heisenberg Models*, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [64] Mikhailov A. S. and Zanette D. H., *Noise-induced breakdown of coherent collective motion in swarms*, Phys. Rev. E **60**, 4571 (1999).
- [65] Müller-Krumbhaar H. and Binder K., *Dynamic Properties of Monte Carlo Method in Statistical Mechanics*, J. Stat. Phys. **8**, 1 (1973).
- [66] Nagano S., *Modeling the organism Dictyostelium discoideum*, Dev. Growth Differ. **42**, 541 (2000).
- [67] Niel J. C. and Zinn-Justin J., *Finite size effects in critical dynamics*, Nucl. Phys. B **280**, 355 (1987).
- [68] Okabe A. *et al*, *Spatial Tessellations*, Chichester : ed. Wiley J. and sons, ltd (1992).
- [69] Okubo A, *Dynamical aspects of animal grouping : swarms, schools, flocks, and herds*, Adv. Bioph. **22**, 1 (1986).
- [70] O'Loan O. J. and Evans M. R., *Alternating steady state in one - dimensional flocking*, J. Phys. A **32**, 99 (1999).
- [71] Özoğuz B. E., Gündüç Y. and Aydın M., *Dynamic Scaling for First-order Phase Transitions*, Int. J. of Mod. Phys C **11**, 553 (2000)
- [72] Palsson E. and Othmer H. G., *A model for individual and collective cell movement in Dictyostelium discoideum*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **97**, 10448 (2000).
- [73] Parrish J. K. and Hamner W. M. (Eds.), *Animals Groups in Three dimensional* , Cambridge : Cambridge University Press (1997).
- [74] Parrish J. K. and Edelstein-Keshet L., *Complexity, Pattern, and Evolutionary Trade-Offs in Animal Aggregation*, Science **284**, 99 (1999).

- [75] Pline l'Ancien, *L'histoire naturelle*, traduction de *Naturalis historia* réalisée par André J., Paris : les Belles lettres (1950).
- [76] Privman V. (Ed.), *Finite size scaling and numerical simulations of statistical systems*, Singapor : ed. World scientific (1990).
- [77] Potts R. B., *Some generalized order-disorder transformations*, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952).
- [78] Rappel W.-J. *et al*, *Self-organized Vortex State in Two-Dimensional Dictyostelium Dynamics*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1247 (1999).
- [79] Reynolds C. W., *Flocks, herds and schools : a distributed behavioural model*, Comput. Graph. **21**, 25 (1987).
- [80] Rieu J. P., Kataoka N. and Sawada Y., *Quantitative analysis of cell motion during sorting in two-dimensional aggregates of dissociated hydra cells*, Phys. Rev. E **57**, 924 (1998).
- [81] Shimoyama N. *et al*, *Collective Motion in a System of motile Elements*, Phys. Rev. Lett. **76**, 3870 (1996).
- [82] Shibata T. and Kaneko K., *Coupled map gas : structure formation and dynamics of interacting motile elements with internal dynamics*, parution électronique : <http://lanl.arXiv.org/nlin.AO/0204024>, (2002).
- [83] Shraiman B. I. and Siggia E. D., *Scalar turbulence*, Nature **405**, 639 (2000).
- [84] Simha R. A. and S. Ramaswamy, *Statistical hydrodynamics of ordered suspensions of self-particles : waves, giant number fluctuations and instabilities*, Physica A **306**, 262 (2002).
- [85] Simha R. A. and S. Ramaswamy, *Hydrodynamics Fluctuations and Instabilities in Ordered Suspensions of Self-Propelled Particles*, Phys. Rev. Lett. **89**, 058101 (2002).
- [86] Tatischeff I., *Upon the Use of Dictyostelium discoideum for Cancel Research*, Cell BIOforum Int. **1**, 43 (2002).
- [87] Tel T. *et al*, *Chaotic advection, diffusion, and reactions in open flows*, Chaos **10**, 89 (2000).
- [88] Toner J. and Tu Y., *Long-Range Order in a Two-Dimensional Dynamical XY Model : How Birds Fly Together*, Phys. Rev. Lett. **75**, 4326 (1995).
- [89] Toner J., Tu Y. and Ulm M., *Sound Wave and the Absence of Galilean Invariance in Flocks*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4819 (1998).

-
- [90] Toner J. and Tu Y., *Flocks, herds, and schools : A quantitative theory of flocking*, Phys. Rev. E **58**, 4828 (1998).
- [91] Tu Y., communication privée, 2000.
- [92] Vicsek T., Czirók A., Ben-Jacob E., Cohen I. and Shochet O., *Novel Type of Phase Transition in a System of Self – Driven Particles*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995).
- [93] Vicsek T., Czirók A., Farkas I. J. and Helbing D., *Application of statistical mechanics to collective motion in biology*, Physica A **274**, 182 (1999).
- [94] Vicsek T., *A question of scale*, Nature **411**, 421 (2001).
- [95] Vicsek T., *The bigger picture*, Nature **418**, 131 (2002).
- [96] Wang B. and Kuspa A., *Dictyostelium Development in the Absence of cAMP*, Science **277**, 251 (1997).
- [97] Weijer C. J., *Morphogenetic cell movement in Dictyostelium*, Semin. Cell Dev. Biol. **10**, 609 (2000).
- [98] Williams G. C., *Measurement of consociation among fishes and comments on the evolution of schooling*, Michigan St. Univ. Bio. Series **2**, 349 (1964).
- [99] Wu X.-L. and Libchaber A., *Particle Diffusion in a Quasi-Two-Dimensional Bacterial Bath*, Phys. Rev. Lett. **84**, 3017 (2000).
- [100] Wu X.-L. and Libchaber A., réponse au commentaire [44], Phys. Rev. Lett. **86**, 557 (2001).

Résumé

Mots-clés: mouvement collectif d'animaux, auto-organisation, transition de phase hors d'équilibre, cohésion, diffusion anormale

Cette thèse présente des modèles bi-dimensionnels stochastiques de physique hors d'équilibre décrivant les mouvements collectifs d'animaux. Le but n'est pas la simulation réaliste mais la compréhension d'un petit nombre d'ingrédients.

Dans la première partie, nous étudions la mise en mouvement d'une population uniformément répartie dans l'espace. Deux transitions, ou du second ordre, ou discontinue, sont observées et entièrement caractérisées. Au point de transition, la diffusion est anormale, ce qui nous permet de modéliser une expérience de traceurs passifs dans un bain de bactéries.

La seconde partie est dédiée à l'étude des troupes, fixes ou mobiles, avec un ordre interne ou sans. Nous définissons chacune des phases par leurs propriétés microscopiques et macroscopiques de cohésion et de diffusion. Ainsi nous montrons que ces modèles autorisent l'existence de troupes cohésifs arbitrairement grands sur un espace ouvert et nous dessinons le diagramme des phases associé. Enfin, nous montrons que l'ébranlement des troupes déstabilise leur structure interne et produit des formes surprenantes et complexes de petits troupes reliés par des filaments.

Abstract

Keywords: collective motion of animals, self-organization, out-of-equilibrium phase transitions, cohesive properties, anomalous diffusion

This dissertation presents two-dimensional out-of-equilibrium stochastic models of animal collective motion. The aim of the study is not a realistic description but, rather, the understanding of a few minimal components.

In the first part, we study how a uniformly space-distributed population achieves macroscopic motion. Two transitions are observed and entirely characterized. One is second order, the second is first order. At the threshold, the diffusion is anomalous, and this allows the description of an experiment of passive beads in a bacterial bath.

The second part is devoted to the study of cohesive animal groups of arbitrary structure : fixed or in motion, with or without internal order. We define each phase by its diffusive, cohesive, microscopic, and macroscopic properties. We show the existence of infinite cohesive herds in a open space and we draw the related phase diagram. Lastly, we show that, at the onset of collective motion, the internal order of the herd is destabilized, leading to some astonishing and complex structures.

