Particules en interaction selon un graphe dynamique : une double limite lent-rapide et champ moyen.

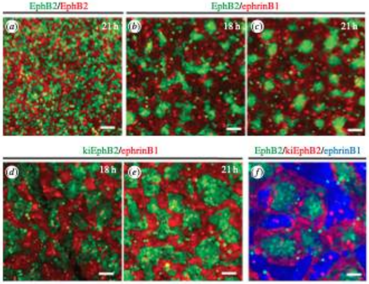
avec J.A. Carrillo, P. Degond, *P. Dobson*, *M. Ottobre*, *E. Zatorska*, D. Peurichard

Institut Denis Poisson, Orléans, France

Rencontre ANR PERISTOCH, Mai 2022

Motivations : un exemple.

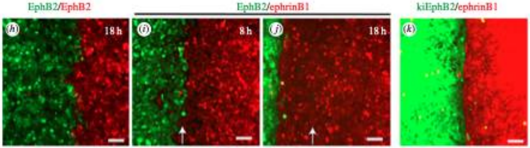
- Ségrégation cellulaire, expériences HB Taylor, A. Khuong et al., Interface, 2017 (exp. Francis Crick Institute, Londres).



2 types de cellules (sauf en bas à droite (f)); condition initiale mélangée. En haut à gauche (a) : cellules identiques (contrôle : pas de ségrégation). (b)-(f) : ségrégation, clusters plus ou moins grands.

Motivations : un exemple.

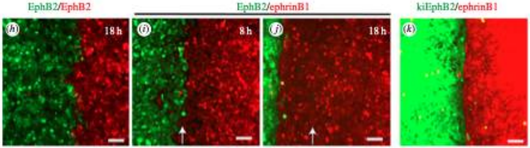
• Ségrégation cellulaire, expériences HB Taylor, A. Khuong et al., Interface, 2017 (exp. Francis Crick Institute, Londres).



Condition initiale avec une frontière floue. A gauche (h) (contrôle), la frontière reste floue. A droite (i)-(k), la frontière devient nette, et parfois se déplace.

Motivations : un exemple.

• Ségrégation cellulaire, expériences HB Taylor, A. Khuong et al., Interface, 2017 (exp. Francis Crick Institute, Londres).



Condition initiale avec une frontière floue. A gauche (h) (contrôle), la frontière reste floue. A droite (i)-(k), la frontière devient nette, et parfois se déplace.

• A plus petite échelle : Vidéo

Modèle microscopique : graphe d'interactions dynamique

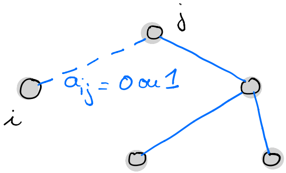
- Les interactions entre particules sont décrites par un graphe.
- Ce graphe évolue en même temps que les particules se déplacent.
- Type de modèle introduit et utilisé en modélisation biologique par P. Degond, F. Delebecque et D. Peurichard.
- Couplage entre l'évolution du graphe d'interaction et les degrés de liberté internes des particules / agents : a priori une situation courante en épidémiologie, sciences sociales...

Objectif = obtenir une description macroscopique.

Modèle microscopique

Graphe des interactions :

- $a_{ij} = 1$ si les particules i et j sont connectées
- $a_{ij} = 0$ sinon.



Force exercée sur la particule i :

$$F_i = \sum_{j=1}^{N} a_{ij}(t) \underbrace{K(X_j - X_i)}_{\text{interaction}} - \underbrace{V'(X_i)}_{\text{pot. ext.}} .$$

Diffusion de la particule i :

$$dX_i(t) = F_i dt + D\, dW_i(t)$$

Espace des états : $\mathbb{R}^{dN} \times \mathcal{A}$.

Modèle microscopique, suite

Le graphe évolue selon un processus de saut :

$$\begin{aligned} &\text{transition } a_{ij} = 0 \to a_{ij} = 1, \quad \text{taux } \tilde{\nu}_f = \frac{1}{N}\frac{\nu_f}{\varepsilon}\varphi_R\left(X_j - X_i\right). \\ &\text{transition } a_{ij} = 1 \to a_{ij} = 0, \quad \text{taux } \tilde{\nu}_d = \frac{\nu_f}{\varepsilon}. \end{aligned}$$

Générateur de la dynamique :

$$\mathcal{L}^{N,\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon}\mathcal{L}_{\text{fast}} + \mathcal{L}_{\text{slow}}; \ \mathcal{L}_{\text{fast}} = \text{le graphe}, \ \mathcal{L}_{\text{slow}} = \text{les positions}.$$

- Fonction φ_R : une arête ne peut se créer que si deux particules sont assez proches, à distance d'ordre au plus R. $\to$ une particule a d'ordre $N(R/L)^d$ voisins potentiels.
- Scaling en N^{-1} du taux de création d'arête ν_f : à un instant donné, le nombre de voisin est d'ordre $(R/L)^d$ (fixé).
- Scaling en ε^{-1} des taux de destruction et de création des arêtes : la dynamique du réseau sera "rapide".

Description macroscopique

- Graphe "peu dense" (nombre de voisins à un instant fixé d'ordre 1)
  $\rightarrow$ pas de loi des grands nombres pour la force exercée sur une particule :
  $$F_i = \sum_{j=1}^{N} a_{ij}(t) K(X_j - X_i);$$
  c'est a priori un cas plus difficile.

Description macroscopique

- Graphe "peu dense" (nombre de voisins à un instant fixé d'ordre 1)
- Mais : graphe "rapide" $\rightarrow$ "Moyennisation" de l'arête $i - j$ (variables lentes fixées) :

$$\mathbb{E}[a_{ij}|X_i, X_j] = \frac{1}{N}\frac{\nu_f \varphi_R(X_i - X_j)}{\nu_d + \frac{\nu_f}{N}\varphi_R(X_i - X_j)} \simeq \frac{1}{N}\frac{\nu_f}{\nu_d}\varphi_R(X_i - X_j)$$

Description macroscopique

- Graphe "peu dense" (nombre de voisins à un instant fixé d'ordre 1)
- Mais : graphe "rapide" $\rightarrow$ "Moyennisation" de l'arête $i - j$ (variables lentes fixées) :

$$\mathbb{E}[a_{ij}|X_i, X_j] = \frac{1}{N}\frac{\nu_f \varphi_R(X_i - X_j)}{\nu_d + \frac{\nu_f}{N}\varphi_R(X_i - X_j)} \simeq \frac{1}{N}\frac{\nu_f}{\nu_d}\varphi_R(X_i - X_j)$$

On définit donc une dynamique "moyennée" :

$$d\bar{X}_i(t) = \bar{F}_i dt + D\, dW_i(t),$$

$$\text{avec } \bar{F}_i = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \underbrace{\frac{\nu_f}{\nu_d}\varphi_R(X_i - X_j)K(X_j - X_i)}_{\bar{K}(X_i - X_j)} - V'(X_i)$$

Générateur de la dynamique moyennée à N particules : $\bar{\mathcal{L}}^N$.

Description macroscopique, suite

- A partir de la dynamique moyennée, la limite $N \to \infty$ est une limite champ moyen classique : la mesure empirique des $\bar{X}_i$ converge vers la solution de

$$\partial_t \rho = \nabla_x \cdot \left((\bar{K} * \rho)\rho + D\nabla_x \rho \right) . \tag{1}$$

- Littérature (Degond et al.) : dérivation heuristique de (1) en passant par une équation cinétique décrivant les positions + le graphe, puis étude des propriétés qualitatives de (1), comparaison éventuelle aux expériences.
- **But ici** : prouver la convergence de la dynamique microscopique décrite par $\mathcal{L}^{N,\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon}\mathcal{L}_{\text{fast}} + \mathcal{L}_{\text{slow}}$ vers (1).
- Pour les applications, le comportement en temps long est important $\to$ on s'intéresse si possible à des résultats uniformes en temps.

Résultat principal

Théorème : $\hat{\mu}^N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \delta(X_i - x)$: mesure empirique.
Soit $u \in C_b^2(\mathbb{R}^d)$.

$$\sup_{t\in[0,T]} \mathbb{E}\left(\int_{\mathbb{R}^d} u(y)d\hat{\mu}^N(y) - \int_{\mathbb{R}^d} u(y)\rho_t(y)dy\right)^2 \leq \underbrace{\frac{C}{N}e^{CT}}_{\text{chp m.}} + \underbrace{C(1+T)N\varepsilon}_{\text{moy.}}$$

Et sous de bonnes hypothèses de convexité sur le potentiel extérieur V, **uniformité en temps** :

$$\sup_{t\in[0,T]} \mathbb{E}\left(\int_{\mathbb{R}^d} u(y)d\hat{\mu}^N(y) - \int_{\mathbb{R}^d} u(y)\rho_t(y)dy\right)^2 \leq \underbrace{\frac{C}{N}}_{\text{chp. m.}} + \underbrace{CN\varepsilon}_{\text{moy.}}$$

Remarque : significatif si $N\varepsilon$ petit.

Principe de la preuve

Les deux limites $\varepsilon \to 0$ et $N \to \infty$ prises séparément = classique. Difficulté ici : contrôler en N les estimations de moyennisation.

$$\mathbb{E}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} u(X_i) - \int u(y)\rho(y)dy\right)^2 \quad = \quad E_{\mathrm{moy}} + E_{\mathrm{CM}}$$

E_{CM}, erreur de l'approximation champ moyen = méthode standard.

Principe de la preuve

Les deux limites $\varepsilon \to 0$ et $N \to \infty$ prises séparément = classique.
Difficulté ici : contrôler en N les estimations de moyennisation.

$$\mathbb{E}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} u(X_i) - \int u(y)\rho(y)dy\right)^2 \quad = \quad E_{\mathrm{moy}} + E_{\mathrm{CM}}$$

$$E_{\mathrm{moy}} \simeq \left|\mathbb{E}[u(X_1)u(X_2)] - \mathbb{E}[u(\bar{X}_1)u(\bar{X}_2)]\right| \simeq \left|\mathcal{P}_t^{N,\varepsilon} u \otimes u - \bar{\mathcal{P}}_t^N u \otimes u\right|$$

avec $(u \otimes u)(\mathbf{x}, \mathbf{a}) = u(x_1)u(x_2)$, fonction sur $\mathbb{R}^{dN} \times \mathcal{A}$ ou sur $\mathbb{R}^{dN}$;
$\mathcal{P}_t^{N,\varepsilon}$= semi-groupe de la dynamique microscopique (agit sur des fonctions sur $\mathbb{R}^{dN} \times \mathcal{A}$);
$\bar{\mathcal{P}}_t^N$= semi-groupe de la dynamique moyennée à N particules (agit sur des fonctions sur $\mathbb{R}^{dN}$).

La moyennisation

But = contrôle de $\left(\mathcal{P}_t^{N,\varepsilon} f\right)(\mathbf{x},\mathbf{a}) - \left(\bar{\mathcal{P}}_t^N f\right)(\mathbf{x},\mathbf{a})$.

$$\partial_t \mathcal{P}_t^{N,\varepsilon} f = \mathcal{L}^{N,\varepsilon} \mathcal{P}_t^{N,\varepsilon} f \ , \ \mathcal{L}^{N,\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_{\mathrm{fast}} + \mathcal{L}_{\mathrm{slow}} .$$

On pose $\left(\mathcal{P}_t^{N,\varepsilon} f\right)(\mathbf{x},\mathbf{a}) = f_t^0(\mathbf{x},\mathbf{a}) + \varepsilon f_t^1(\mathbf{x},\mathbf{a}) + \ldots$ et on résout ordre par ordre :

$$\begin{aligned} O\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) &\quad : \quad \mathcal{L}_{\mathrm{fast}} f_t^0 = 0 \Rightarrow f_t^0(\mathbf{x},\mathbf{a}) = f_t^0(\mathbf{x}) \\ O(1) &\quad : \quad \partial_t f_t^0 - \mathcal{L}_{\mathrm{slow}} f_t^0 = \mathcal{L}_{\mathrm{fast}} f_t^1 . \end{aligned}$$

On intègre cette équation contre $\mu_{\mathbf{x}}(\mathbf{a})$ la mesure invariante de la dynamique rapide. On obtient la dynamique moyennée et on peut calculer f_1 :

$$\partial_t f_t^0 - \bar{\mathcal{L}}^N f_t^0 = 0 \ , \ f_t^1(\mathbf{x},\mathbf{a}) \simeq \sum_{j \neq i} \frac{K(x_j - x_i)}{\nu_d} a_{ij} \partial_i \bar{\mathcal{P}}_t^N f(\mathbf{x}).$$

La moyennisation, suite

On doit donc contrôler

$$f_t^1(\mathbf{x}, \mathbf{a}) \simeq \sum_{j \neq i} \frac{K(x_j - x_i)}{\nu_d} a_{ij} \partial_i \bar{\mathcal{P}}_t^N f(\mathbf{x}).$$

- Un contrôle sur le graphe d'interaction : nombre moyen d'arêtes $O(N)$ + pas de sommet de trop haut degré.
- Un contrôle sur les dérivées spatiales de $\bar{\mathcal{P}}_t^N f(\mathbf{x})$, le semi-groupe moyenné à N particules : **partie plus délicate**.

Conclusion (C dépend de f) :

$$\begin{aligned} \left|\left(\mathcal{P}_t^{N,\varepsilon} f\right)(\mathbf{x}, \mathbf{a}) - \left(\bar{\mathcal{P}}_t^N f\right)(\mathbf{x}, \mathbf{a})\right| &\leq \varepsilon N C(1+t) \\ &\leq \varepsilon N C \text{ (cas uniforme en temps).} \end{aligned}$$

Retour au problème initial

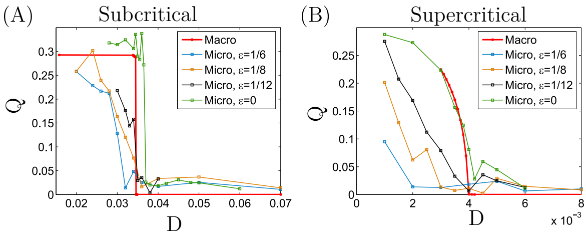
- Le modèle microscopique est très coûteux à simuler; le modèle macroscopique est rapide.
- En principe, on sait relier les paramètres microscopiques (possiblement mesurables) aux paramètres du modèle macroscopique.
- Le modèle macroscopique est une équation de Fokker-Planck non linéaire, dont les propriétés qualitatives sont bien connues. En particulier :
  - Possible instabilité d'une densité homogène;
  - Bifurcation et formation de structures;
  - Flot gradient pour une certaine énergie libre.

  $\rightarrow$ La comparaison qualitative du modèle macroscopique avec les expériences est beaucoup plus facile.

Simulations numériques, exemples

• Force attractive entre particules $\rightarrow$ instabilité d'une densité homogène lorsque la diffusion est assez petite. Cette instabilité peut-être selon les paramètres "discontinue" (sous-critique) ou "continue" (supercritique).

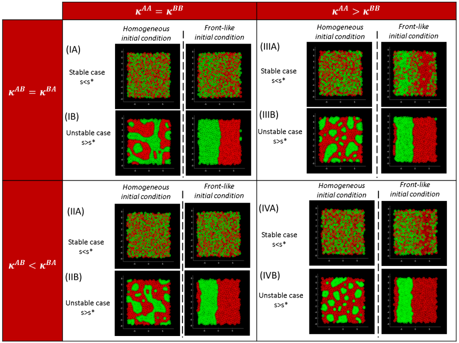
• Simulations : D = coeff. de diffusion; Q = paramètre d'ordre qui mesure l'inhomogénéité.



Ref : Barré, Carrillo, Degond, Peurichard, Zatorska 2017

Simulations numériques, exemple avec deux populations

• Cellules A (rouge) et B (vert). Toutes les cellules diffusent et se repoussent, κ^{AB}= intensité de la répulsion entre cellules A et B. Si la répulsion entre A et B est suffisamment forte, une instabilité est possible.

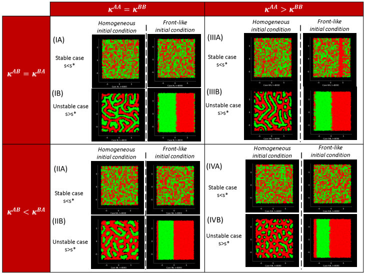


Simulation du modèle microscopique pour différents paramètres et deux conditions initiales.

Ref : Barré, Degond, Peurichard, Zatorska 2019

Simulations numériques, exemple avec deux populations

- Mêmes paramètres, mais modèle macroscopique.

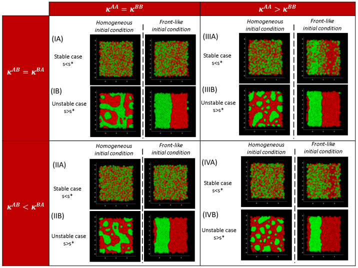


Remarques :

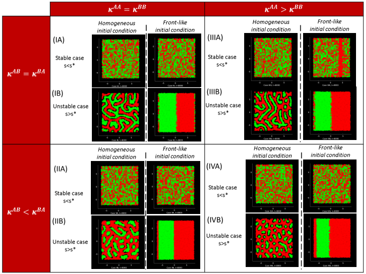
-Un raisonnable accord qualitatif (les hypothèses du théorème ne sont pas vérifiées !).

-C'est une comparaison "aux temps longs" : d'où l'intérêt de résultats uniformes en temps.

-Il faudrait plus travailler pour faire une sérieuse comparaison avec les expériences.



$\kappa^{AA} = \kappa^{BB}$
$\kappa^{AA} > \kappa^{BB}$
$\kappa^{AB} = \kappa^{BA}$
$\kappa^{AB} < \kappa^{BA}$
Homogeneous initial condition
Front-like initial condition
(IA)
Stable case s<s*
(IB)
Unstable case s>s*
(IIIA)
Stable case s<s*
(IIIB)
Unstable case s>s*
(IIA)
Stable case s<s*
(IIB)
Unstable case s>s*
(IVA)
Stable case s<s*
(IVB)
Unstable case s>s*



$\kappa^{AA} = \kappa^{BB}$
$\kappa^{AA} > \kappa^{BB}$
$\kappa^{AB} = \kappa^{BA}$
$\kappa^{AB} < \kappa^{BA}$
Homogeneous initial condition
Front-like initial condition
(IA)
Stable case s<s*
(IB)
Unstable case s>s*
(IIIA)
Stable case s<s*
(IIIB)
Unstable case s>s*
(IIA)
Stable case s<s*
(IIB)
Unstable case s>s*
(IVA)
Stable case s<s*
(IVB)
Unstable case s>s*

Principe de la preuve

Lemme 1 : $d_i = \sum_j a_{ij}$ (degré du sommet i dans le graphe).

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_i d_i\right] \leq C,$$

le degré moyen du réseau de contact reste borné (en espérance).
Lemme 2 : le moment d'ordre 2 du degré est aussi borné :

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_i d_i^2\right] \leq C,$$

Contrôle du semi-groupe moyenné, N fini

$f \in C_b^2(\mathbb{R}^{dN})$, on définit

$$[[f]]^2_{C_b^2(\mathbb{R}^{Nd})} = \sup_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^{Nd}} \left(\sum_{i=1}^{N} |\nabla_i f|^2(\mathbf{x}) + \sum_{i,j=1}^{N} |\nabla_{ij} f|^2|(\mathbf{x}) \right)$$

$$||f||^2_{C_b^2(\mathbb{R}^{Nd})} = ||f||^2_\infty + \sum_{i=1}^{N} ||\nabla_i f||^2_\infty + \sum_{i,j=1}^{N} ||\nabla_{ij} f||^2_\infty$$

Il existe C tel que pour tout $f \in C_b^2(\mathbb{R}^{dN})$

$$[[\bar{\mathcal{P}}_t^N f]] \leq C||f||_{C_b^2(\mathbb{R}^{Nn})}$$

Ou : il existe $C, \delta > 0$ tel que pour tout $f \in C_b^2(\mathbb{R}^{dN})$

$$[[\bar{\mathcal{P}}_t^N f]] \leq Ce^{-\delta t}||f||_{C_b^2(\mathbb{R}^{Nn})}$$