

Annick Lesne

Laboratoire de Physique Théorique des Liquides,

Université Pierre et Marie Curie,

Case courrier 121, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

lesne@lptl.jussieu.fr

---

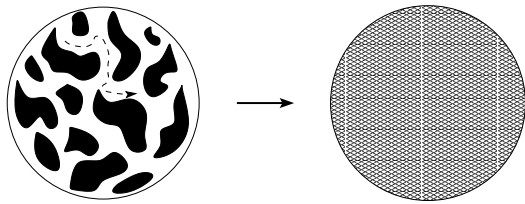
Cet énoncé « du discret au continu » et l'énoncé symétrique « du continu au discret » qui le complète soulèvent deux types d'interrogations, suivant qu'elles concernent les modèles (§ 1, § 2) ou les phénomènes eux-mêmes (§ 3, § 4). Les exemples considérés pourraient alimenter un débat parallèle entre déterminisme et stochasticité (§ 5).

## 1 - D'un modèle discret à un modèle continu

Le passage du discret au continu intervient dans la **modélisation** d'un système lorsque le trop grand nombre d'éléments qui le constitue rend inopérante leur description en tant qu'entités distinctes (trop grand nombre de degrés de liberté), et/ou quand l'échelle de l'observation est très supérieure à l'échelle typique des phénomènes élémentaires. Fournir des méthodes pour réaliser de façon systématique et contrôlée ce passage est l'un des enjeux de la **physique statistique**, et l'un de ses succès pour les systèmes à l'équilibre. Les outils sont encore à développer dans le cas des systèmes complexes, loin de l'équilibre, que sont les systèmes vivants. Donnons quelques exemples classiques pour illustrer ce propos.

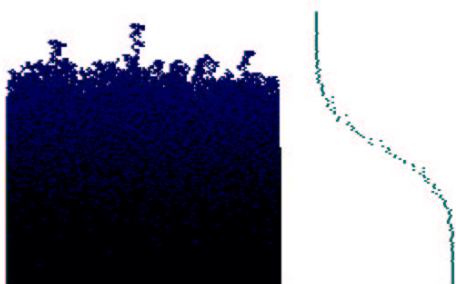
Une première voie permettant de replacer le comportement d'un ensemble d'éléments (atomes, molécules, bactéries, fourmis) dans un modèle continu est de décrire le comportement de **moyennes locales instantanées**, par exemple la concentration moyenne (nombre d'éléments par unité de volume) ou la vitesse moyenne. C'est ainsi qu'on peut définir la **température** d'un gaz à partir de la vitesse quadratique moyenne des molécules de masse  $m$  qui le constituent, suivant la relation  $m\langle v^2 \rangle = 3kT$  où  $k$  est la constante de Boltzmann ; on montre que cette définition coïncide avec la notion familière de température lorsque le gaz est à l'équilibre. Cette démarche n'est cependant valable que dans une certaine limite (dite bien sûr « limite continue ») dans laquelle le volume  $d^3\vec{r}$  considéré comme élémentaire contient assez d'éléments pour que les inhomogénéités se moyennent, *i.e.* pour que le caractère discret soit relativement négligeable, et que le champ  $a(\vec{r})$  décrivant l'observable d'intérêt puisse être considérée comme une fonction régulière. C'est l'approximation dite des **milieux continus**, usuelle en mécanique des fluides et en théorie de l'élasticité [Landau et Lifshitz]. Ce type d'approximation est également utilisé à des échelles nanométriques en physique des polymères, par exemple pour décrire l'**ADN** comme une fibre élastique homogène (« modèle du ver ») [Allemand *et al.* 1996]. De même, l'intervalle de temps infinitésimal  $dt$  doit être assez grand devant les temps caractéristiques microscopiques pour que la dépendance temporelle du champ  $a(\vec{r}, t)$  soit régulière. Cet argument est implicite en **cinétique chimique**, où l'on décrit des réactions se produisant chacune entre quelques molécules par des équations différentielles pour les concentrations des différentes espèces en présence. Cette description peut cependant échouer s'il y a trop peu de molécules en jeu au total (typiquement moins d'un millier), par exemple pour une réaction chimique enzymatique prenant place à l'intérieur d'un compartiment cellulaire [Gonze *et al.* 2002].

Une démarche assez analogue est la procédure d'**homogénéisation**, dans laquelle la description détaillée d'un milieu inhomogène, aux petites échelles, est remplacée par une description effective, à plus grande échelle, dans laquelle le milieu apparaît comme un milieu homogène. Un exemple classique, celui de la diffusion d'une particule dans un milieu poreux rempli de fluide, est présenté sur la figure 1 ; il s'applique entre autres à la diffusion d'ions et de petites molécules dans le tissu cérébral [Nicholson 2001].



**Figure 1 :** À gauche, le milieu poreux réel : les interstices (en blanc) sont remplis de fluide dans lequel prend place la diffusion, avec un coefficient de diffusion  $D$  et de nombreuses conditions aux bords, rendant compte du fait que les particules ne pénètrent pas dans les régions solides (en noir). À droite, le milieu effectif homogène ; on décrit l'état local par une concentration effective obtenue par une moyenne spatiale sur un volume représentatif. Le coefficient de diffusion effectif  $D_{eff}$ , proportionnel à  $D$ , rend compte de façon moyenne du ralentissement de la diffusion dû au moindre espace réellement accessible ; la diffusion reste ici normale.

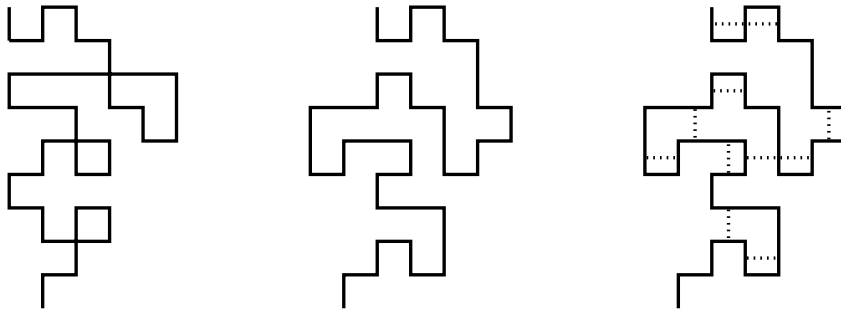
Une autre voie menant d'un comportement individuel à une description continue est de décrire la **distribution de probabilité** d'une observable individuelle. Par exemple, la distribution de probabilité de présence d'une particule animée d'un mouvement brownien est une fonction  $P(\vec{r}, t)$  régulière, vérifiant l'équation de diffusion  $\partial_t P = D\Delta P$ . Un autre exemple, celui d'un front de diffusion, est illustré sur la figure 2. Une idée similaire sous-tend la **dualité onde-corpuscule** en mécanique quantique : une particule peut être décrite par une fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  telle que  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  soit sa densité de probabilité de présence en  $\vec{r}$  à l'instant  $t$ . C'est aussi une idée présente dans la théorie des systèmes dynamiques, où l'on remplace la description de la trajectoire  $[x(t)]_{t \geq 0}$  du système dans l'espace de phase  $\mathcal{X}$  (espace des configurations du système) par celle de sa **mesure invariante**, *i.e.* par celle de sa distribution de probabilité de présence instantanée dans  $\mathcal{X}$ , en régime stationnaire ; on peut également décrire ainsi le régime transitoire, en étudiant l'évolution de la distribution initiale.



**Figure 2 :** Front de diffusion observé à l'échelle microscopique, à partir d'un profil en marche (simulation numérique en dimension 2). Le front apparaît comme une interface rugueuse, présentant des fluctuations spatiales d'échelles très différentes : c'est une structure fractale aux petites échelles. Néanmoins, le profil moyen présenté à droite est presque régulier, d'autant plus que le nombre de particules impliquées est grand, et son évolution est décrite par une équation de diffusion [Laguës et Lesne 2003].

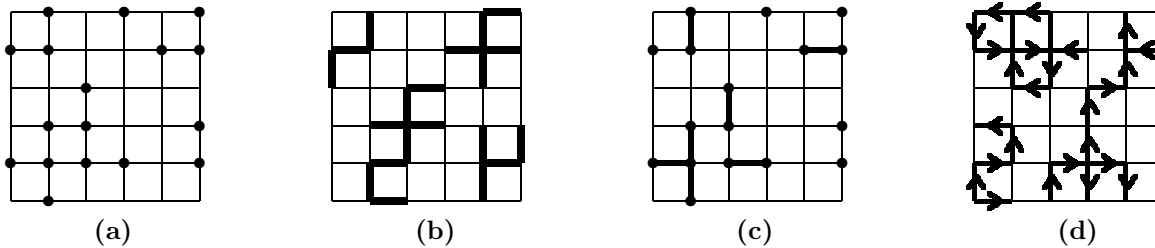
## 2 • D'un modèle continu à un modèle discret

Inversement, un élagage adéquat des degrés de liberté explicitement décrits peut permettre de réduire un modèle continu à un modèle discret. Un premier exemple est celui des **modèles sur réseaux** introduits entre autres pour étudier la conformation spatiale d'un ou plusieurs polymères (voir figure 3), ou le mouvement de diffusion d'une particule (marches aléatoire). De tels modèles se prêtent particulièrement bien aux études numériques, ainsi qu'à certaines approches analytiques (énumération exacte, renormalisation). Dans le cas de polymères linéaires, la longueur des pas (*i.e.* la taille des mailles du réseau) est pris égal ou supérieur à la longueur de persistance de la chaîne, de façon à pouvoir négliger toute contrainte angulaire sur l'orientation relative de deux pas successifs. La distorsion la plus importante est la perte, dans le modèle sur réseau, de l'**isotropie** qui est présente dans le système réel. Elle est d'autant plus faible (relativement) que le polymère ou la trajectoire sont longs, et que la connectivité du réseau est élevée (un réseau triangulaire est « meilleur » qu'un réseau carré). L'erreur provenant de la discrétisation doit être prise en compte, voire étudiée de façon systématique, dans le cas de chaînes courtes.



**Figure 3 :** Trois modèles de polymère sur réseau (ici carré) : à gauche, la marche idéale à pas successifs indépendants ; au milieu la marche auto-évitante dont le tracé ne peut se recouper ; à droite, la marche auto-évitante avec interactions, où une énergie attractive  $-J$  est attribuée à chacun des contacts représentés en pointillés.

Les modèles de **percolation** forment un autre type de modèles discrets : le système est discrétisé en cellules (percolation de sites) ou sous la forme d'un réseau (percolation de liens) ; suivant la valeur d'une observable locale, un site (ou un lien) sera occupé ou vide, et codé respectivement 1 ou 0 (voir figure 4). On peut alors décrire quantitativement les propriétés statistiques d'occupation du réseau et comment elles varient quand on fait varier les paramètres contrôlant la probabilité d'occupation d'un site. Précisément parce qu'on ignore les détails spécifiques et concrets, *i.e.* les propriétés physiques, chimiques ou biologiques correspondant à l'occupation d'un site, pour ne retenir qu'une information qualitative sur l'état local, codée de façon la plus minimale possible, ces modèles se rencontrent dans les domaines les plus divers : milieux poreux, alliages, gels de polymères, épidémies. Bien plus, ils sont par construction même destinés à faire émerger des **propriétés universelles**, liées à la géométrie de l'organisation spatiale du système et non aux phénomènes physiques, chimiques ou biologiques qui y prennent place.

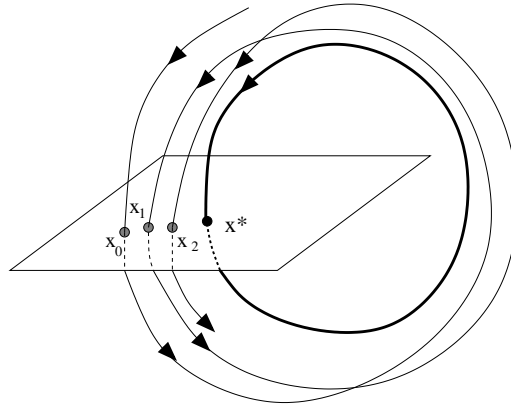


**Figure 4 :** Percolation de sites (a), de liens (b), de sites-liens (c) et dirigée (d).

- (a) la probabilité  $p$  qu'un site soit occupé coïncide avec la concentration totale si le réseau est suffisamment grand ;
- (b) la probabilité  $p_B$  qu'un lien soit présent coïncide avec la concentration totale de liens si le réseau est assez grand ;
- (c) on retrouve (a) si tous les liens admissibles sont présents ( $p_B=1$ ) et (b) si tous les sites sont occupés ( $p=1$ ) ;
- (d) les liens du modèle (b) sont de plus orientés.

Une méthode classique permet de ramener une évolution en temps continu, approximativement périodique, à une évolution en temps discret. Connue sous le nom de **section de Poincaré**, elle consiste à n'enregistrer l'état du système que lorsqu'une de ses observables passe par une valeur particulière (annulation d'une phase, par exemple), ce qui se produit de façon récurrente du fait de la « presque périodicité » de la dynamique (figure 5). À la différence de la méthode consistant à stroboscooper l'évolution continue, la discrétisation est ici intrinsèque, adaptée à la dynamique.

Une réduction plus drastique est d'envisager une **partition** finie  $\mathcal{X} = \cup_{i=1}^n A_i$  de l'espace de phase  $\mathcal{X}$  du système, et de représenter l'état instantané non plus par le point  $x_t$  de l'espace de phase décrivant l'état du système à l'instant  $t$  mais par le symbole  $s_t$  indexant la région  $A_{s_t}$  où se trouve ce point  $x_t$ . Une trajectoire est alors simplement représentée par une **suite de symboles**. Pour certains systèmes dynamiques chaotiques, cette représentation grossière suffit à déterminer univoquement la trajectoire et permet de calculer les propriétés statistiques que possède la dynamique (en régime stationnaire). Un exemple typique est celui de l'évolution en temps discret  $x_{t+1} = 10 x_t$  (modulo 1) sur l'intervalle  $[0, 1]$ . Le symbole associé à un point  $x_0$  est sa première décimale, le symbole associé à son image  $x_1$  est sa deuxième décimale, et ainsi de suite : la suite de symboles associée à ce point  $x_0$  est donc son écriture décimale complète et elle le définit entièrement.



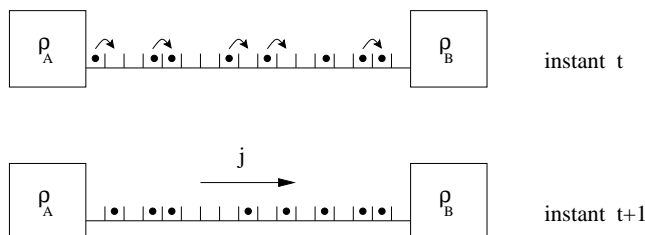
**Figure 5 :** Discrétisation par « section de Poincaré », au voisinage d'une orbite périodique (en gras). On remplace l'étude d'une trajectoire  $x(t)$  par celle de la suite de ses points d'intersection  $(x_n)_{n \geq 0}$  avec une section transverse de l'orbite périodique. La correspondance univoque donnant  $x_{n+1}$  en fonction de  $x_n$  s'appelle l'application de premier retour. L'intersection d'une orbite périodique avec la section de Poincaré est un point fixe  $x^*$  de cette application. Il faut noter que cette discrétisation est intrinsèque à la dynamique (le « temps de premier retour » mis pour passer de  $x_n$  à  $x_{n+1}$  dépend de  $n$  et de la trajectoire considérée).

Le pendant dynamique des modèles de percolation est fourni par ce qu'on appelle des **automates cellulaires** ; dans ces modèles, l'espace, le temps et les variables d'états sont discrétisés. Les automates cellulaires fournissent des modèles discrets d'équations déterministes continues, plus faciles à simuler et permettant des études systématiques (exploration de l'espace des paramètres de contrôle, par exemple). Inversement, on sait associer des équations continues déterministes à un automate cellulaire, décrivant l'évolution de diverses moyennes statistiques (cf. § 1) ; elles permettent d'interpréter les paramètres microscopiques de l'automate cellulaire en termes de paramètres macroscopiques observables [Chopard et Droz 1998].

### 3 - Émergence d'un comportement continu

Le passage du discret au continu peut concerner les **phénomènes eux-mêmes**. Il existe de nombreux exemples de l'émergence d'un comportement continu, « fluide », dans un système composé d'éléments distincts :

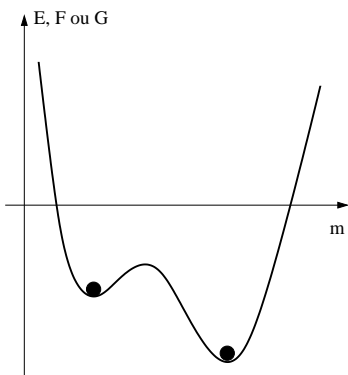
- un **fluide** est formé de molécules en agitation thermique, libres de se déplacer ; ce sont uniquement leurs interactions, à courte portée, qui assurent la cohésion du fluide aux densités intermédiaires (à basse densité, on obtient un gaz alors qu'à haute densité, on obtient un solide) ;
- par certains aspects, le **sable** se comporte comme un liquide ; l'exemple familier est celui d'un sablier, où le sable et l'air sont d'ailleurs parfois remplacés par deux liquides visqueux non miscibles ;
- le **trafic** des voitures sur une autoroute se rapproche de l'écoulement d'un milieu granulaire et présente certains comportements fluides (voire solides). On peut aussi voir émerger des comportements collectifs continus dans les troupes d'animaux, les bancs de poissons voire dans une foule [Vicsek 2001].



**Figure 6 :** Modèle du « processus totalement asymétrique avec exclusion », permettant d'étudier l'émergence d'un comportement fluide, continu, dans le trafic d'éléments discrets. Les particules se déplacent ici par sauts élémentaires, uniquement vers la droite, et à la condition que le site d'arrivée soit inoccupé. Les densités  $\rho_A$  et  $\rho_B$  imposées aux extrémités, incompatibles ( $\rho_A \neq \rho_B$ ) maintiennent le système hors d'équilibre, parcouru par un courant  $j$  de particules.

### 4 - Émergence d'un comportement discret

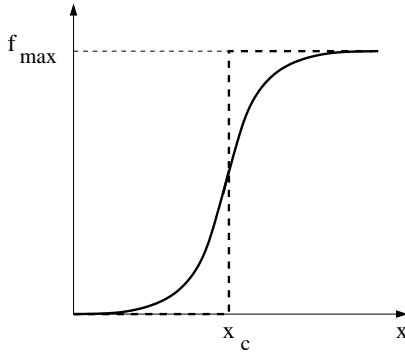
Un comportement discret émerge spontanément dès que la dynamique possède **plusieurs états d'équilibre**. Suivant les conditions initiales et les éventuelles perturbations subies au cours de l'évolution, le système pourra être dans l'un ou l'autre de ces états discrets, bien différenciés les uns des autres. Typiquement, une dynamique présentant un **schéma de rétroaction positive** est susceptible de présenter un comportement bistable [Thomas 1998] ; cette idée intuitive doit néanmoins être complétée par une analyse d'un modèle dynamique explicite. En mécanique statistique, une telle situation correspond à un paysage énergétique présentant plusieurs vallées. Le cas de figure le plus simple est celui de la courbe en W unidimensionnelle associée à la **bistabilité** (figure 7). Une perturbation, déterministe ou stochastique, peut induire une transition entre deux de ces états. Citons par exemple les **transitions conformationnelles** de macromolécules (ARN, ADN, protéines) impliquées dans tous les mécanismes de régulation allostérique. Le même formalisme, centré autour de la théorie de Kramers, est utilisé pour décrire ces transitions et les réactions chimiques les plus générales [Hänggi *et al.* 1990].



**Figure 7 :** Paysage énergétique bistable. La variable  $m$  en abscisse est le paramètre d'ordre en mécanique statistique ou la coordonnée réactionnelle (avancement de la réaction, par exemple) dans le contexte des réactions chimiques. En réalité, les paysages sont multi-dimensionnels.

Une autre situation est celle des **milieux excitables**. Ces milieux, monostables, présentent des mécanismes de réponse fortement non linéaires (**fonction de réponse sigmoïdale**, voir la figure 8). Ils peuvent de ce fait jouer un rôle d'interrupteur et transformer un signal d'entrée continu en signal de sortie discret 0/1. L'un des « intérêts » de cette conversion est la robustesse qu'elle donne au signal de sortie, alors moins sensible aux bruits surimposés au signal entrant que ne le serait un signal relié de façon graduée au signal d'entrée. En théorie de l'information, on parlerait de conversion d'un **codage analogique** en **codage digital**, ici binaire, en « tout ou rien ». Une telle conversion se produit dans la membrane d'un neurone : un potentiel d'action n'est émis au niveau de l'axone que si le stimulus (le signal d'entrée) est supérieur à un seuil ; l'amplitude des potentiels d'action émis est alors indépendante de celle du signal d'entrée (seule la fréquence d'émission en dépend) [Keener et Sneyd 1998].

Signalons enfin que dans les milieux spatialement étendus, la conjonction d'une dynamique excitable ou bistable et d'un couplage diffusif peut engendrer des phénomènes de propagation, appelés des **fronts de réaction-diffusion**, où l'on voit se propager le « basculement » d'un état discret à un autre [Murray 2002].



**Figure 8 :**  
Fonction de réponse non linéaire typique (« sigmoïde ») avec un seuil  $x_c$  et une saturation à la valeur  $f_{max}$ . Dans la limite où cette pente tend vers l'infini, on obtient une fonction en marche (réponse en « tout ou rien »).

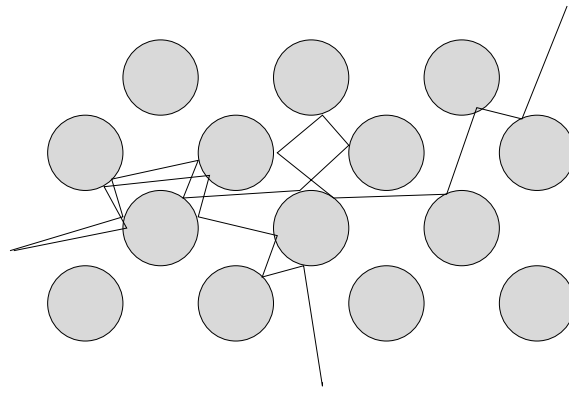
## 5 - Discret vs continu, déterministe vs stochastique

Pour conclure, nous noterons que ce débat entre le discret et le continu rejoint très souvent celui existant entre déterministe et stochasticité. Typiquement, le système est décrit au niveau microscopique par un très grand nombre de degrés de liberté déterministes, dont l'évolution, chaotique, est très rapidement imprédictible (voir figure 9). À une échelle un peu supérieure, mésoscopique, il sera donc plus pertinent et plus efficace d'utiliser une modélisation stochastique [Bricmont 2002] ; l'état du système est alors décrit par des observables  $a(\vec{r}, t)$  aléatoires. Mais les moyennes spatiales (voire temporelles) locales et instantanées  $\bar{a}(\vec{r}, t)$  sont des champs non seulement réguliers, comme nous l'avons vu au § 1, mais aussi déterministes : on moyenne non seulement les inhomogénéités mais aussi des fluctuations. La justification mathématique de cette affirmation s'appuie sur la loi des grands nombres et le théorème-limite central ; comme telle, elle n'est valable qu'asymptotiquement, et elle échoue dans diverses situations critiques où ces deux théorèmes ne s'appliquent pas : corrélations de portée infinie entre les individus, distributions individuelles larges, non stationnarité ou inhomogénéités.

Les automates cellulaires mentionnés au § 2 peuvent être utilisés pour modéliser l'évolution aléatoire d'un système à l'échelle mésoscopique ; l'automate est alors régi par des règles probabilistes. Le comportement spatio-temporel de l'automate est relié à la description macroscopique déterministe par approximation de « champ moyen » : typiquement, si  $X$  est une observable (aléatoire) de l'automate, l'observable macroscopique déterministe correspondante sera  $\langle X \rangle$  et on obtient l'équation d'évolution macroscopique en identifiant  $\langle X^2 \rangle$  avec  $\langle X \rangle^2$ , autrement dit en négligeant les fluctuations  $\delta X = X - \langle X \rangle$ . Évaluer l'influence de ces fluctuations dans le comportement global, *i.e.* évaluer l'écart à la théorie de champ moyen, et en fin de compte, évaluer la validité de la description macroscopique déterministe, est l'un des intérêts des automates cellulaires [Chopard et Droz 1998].

Inversement, la discrétisation (par projection ou par coarse-graining, *i.e.* par moyenne locale dans l'espace de phase) d'un système dynamique déterministe conduit généralement à une description stochastique ; en effet, un terme de bruit doit généralement être ajouté à la dynamique pour rendre compte des degrés de liberté qui ne sont alors plus décrits explicitement, et obtenir des équations fermées.

En conclusion, un même phénomène peut typiquement être décrit par une succession de modèles emboîtés, d'échelles croissantes, et de natures (discret/continu ou déterministe/stochastique) différentes, en alternance.



**Figure 9 :** Modèle moléculaire imagé ( gaz de Lorentz) expliquant l'origine du caractère aléatoire de la diffusion. Ici, une particule se déplace dans un réseau de centres diffuseurs fixes, avec lesquels elle subit des collisions élastiques : sa vitesse, bien définie entre les collisions, reste égale à sa vitesse thermique. Malgré le caractère parfaitement déterministe de ce modèle, la trajectoire est imprédictible à long terme, car chaque collision double l'incertitude angulaire sur la condition initiale, due au bruit inévitablement présent dans le système. En pratique, le phénomène observé aux temps longs et aux grandes échelles spatiales a toutes les caractéristiques d'un mouvement stochastique. On montre qu'il suit une loi de diffusion normale, sous certaines conditions sur la densité des obstacles, qui ne doivent être ni trop nombreux (piégeage) ni trop clairsemés (mouvement rectiligne). Ces propriétés sont encore observées lorsque la particule se déplace dans un nuage d'autres particules elles-mêmes mobiles.

## Références

- Allemand J.F. , A. Bensimon, D. Bensimon, F. Caron, D. Chatenay, P. Cluzel, V. Croquette, C. Heller, R. Lavery, A. Lebrun, T. Strick et J.L.Viovy, L'ADN, ressort moléculaire, *Pour la Science* **224** 76-82 (1996) .
- Bricmont J., Determinism, chaos and quantum mechanics, *Dogma*, [http : //dogma.free.fr/txt/JB-Determinism.pdf](http://dogma.free.fr/txt/JB-Determinism.pdf)
- Chopard B. et M. Droz, *Cellular automata modeling of physical systems*, Collection « Aléa Saclay » , Cambridge University Press (1998).
- Dorfman J.R., *An introduction to chaos in nonequilibrium statistical mechanics*, Cambridge University Press (1999).
- Gonze D., J. Halloy et A. Goldbeter. Robustness of circadian rhythms with respect to molecular noise, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **99**, 673-678 (2002).
- Hänggi P. , P. Talkner et M. Borkovec, Reaction rate theory : fifty years after Kramers *Rev. Mod. Phys.* **62**, 251-342 (1990).
- Keener J. et J. Sneyd, *Mathematical physiology*, Springer, Berlin (1998).
- Laguës M. et A. Lesne, *Invariances d'échelle*, Belin, sous presse (2003).
- Landau L.D. et E.F. Lifshitz, *Mécanique des fluides*, Mir, Moscou. *Théorie de l'élasticité*, Mir, Moscou
- Murray, J.D. *Mathematical biology*, troisième édition, Springer, Berlin (2002).
- Nicholson C., Diffusion and related transport mechanisms in brain tissue, *Rep. Prog. Physics* **64**, 815-884 (2001).
- Thomas R. , Laws for the dynamics of regulatory networks, *Int. J. Dev. Biol.* **42**, 479-485 (1998).
- Vicsek T., *Fluctuations and scaling in biology*, Oxford University Press (2001).