

Processus de coagulation et fragmentation

Les phénomènes de coagulation et de fragmentation interviennent de façon très naturelle dans la modélisation

1. de la polymérisation [13] : des polymères de taille $n \in \mathbb{N}^*$ composés de n monomères identiques sont présents dans une solution homogène ; un polymère de taille n peut se lier avec un polymère de taille k pour former un polymère de taille $n + k$ ou bien se fragmenter pour donner naissance à deux polymères de tailles respectives j et $n - j$ où $1 \leq j \leq n - 1$,
2. des aérosols [10, 19, 9] : des particules solides ou liquides (fumée, brouillard, polluants, flocons de neige,...) présentes en suspension dans un gaz peuvent s'agréger ou bien se fragmenter,
3. de la formation des structures à grande échelle de l'univers [21], de la formation des amas protostellaires dans les galaxies [20, 11], de la formation des planètes dans les systèmes solaires [24] en astronomie,
4. en phylogénie [23] : nous verrons que le modèle présenté dans le paragraphe 7.2 pour décrire les ancêtres communs d'une population de n individus est un processus de coagulation.

Dans ce chapitre, pour des raisons de simplicité, nous nous intéressons uniquement au cas discret où la taille des objets modélisés prend ses valeurs dans \mathbb{N}^* et nous garderons à l'esprit l'interprétation des équations de coagulation et fragmentation en termes de polymérisation. Mais ces équations possèdent une version continue plus générale où la taille des objets modélisés est un réel positif. Cette version intervient par exemple dans la modélisation des aérosols en pollution atmosphérique [9].

Nous commencerons par étudier dans le premier paragraphe le système infini d'équations différentielles ordinaires introduit par Smoluchowski au début du vingtième siècle [22] pour décrire des phénomènes de coagulation discrets. Puis, dans le second paragraphe, nous verrons comment modifier ces équations pour prendre en compte le phénomène de fragmentation.

Dans le troisième paragraphe, nous présenterons le processus de Marcus-Lushnikov qui a été introduit vers 1970 dans [17] et [16]. Ce processus est

une chaîne de Markov à temps continu dont les transitions sont la traduction des phénomènes physiques de coagulation et de fragmentation. Nous verrons comment obtenir les équations de coagulation et de fragmentation discrètes à partir de ce processus lorsque le nombre N de polymères initialement présents tend vers $+\infty$. Puis nous introduirons un algorithme probabiliste développé au début des années 2000 et qui permet d'approcher la solution des équations de coagulation et de fragmentation discrètes plus efficacement que la simulation du processus de Marcus-Lushnikov. Cet algorithme qui porte le nom d'algorithme de transfert de masse consiste à simuler une autre chaîne de Markov à temps continu dont les transitions préservent les nombres de polymères présents alors qu'un polymère disparaît lors d'une coagulation physique et un polymère apparaît lors d'une fragmentation physique. Le lecteur intéressé par une synthèse sur les modèles déterministes de coagulation et leurs pendants probabilistes pourra se référer à [1].

12.1 Équations de coagulation discrètes

Les équations de coagulation de Smoluchowski décrivent l'évolution au cours du temps des concentrations $c_n(t)$ de polymères de taille $n \in \mathbb{N}^*$ dans une solution homogène lorsque pour $j, k \in \mathbb{N}^*$, la constante de la réaction de coagulation qui à partir de deux polymères de taille j et k donne naissance à un polymère de taille $j + k$ est notée $K_{j,k}$:

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \dot{c}_n(t) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k,k} c_{n-k}(t) c_k(t) - c_n(t) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_k(t), \quad (12.1)$$

où pour toute fonction f dépendant du temps t , on note \dot{f} la dérivée de f par rapport à t . Le premier terme du second membre correspond à la formation de polymères de taille n par coagulation de deux polymères de tailles $n - k$ et k où $1 \leq k \leq n - 1$. Le second terme traduit la disparition des polymères de taille n qui coagulent. Le noyau de coagulation K est supposé symétrique : $\forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} = K_{k,j}$.

Après avoir présenté quelques propriétés générales des solutions de (12.1), nous obtiendrons des solutions explicites de ces équations pour des noyaux de coagulation spécifiques.

12.1.1 Définition et propriétés des solutions

Définition 12.1.1. On appelle solution de l'équation (12.1) sur $[0, T[$ où $0 < T \leq +\infty$ une famille $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ telle que pour tout $n \in \mathbb{N}^*$,

1. $s \rightarrow c_n(s)$ est une fonction continue de $[0, T[$ dans \mathbb{R}_+ et pour tout $t \in [0, T[, \int_0^t \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_k(s) ds < +\infty$,

2. l'équation (12.1) est vérifiée sous forme intégrée en temps : pour tout t dans $[0, T[$,

$$c_n(t) = c_n(0) + \int_0^t \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k,k} c_{n-k}(s) c_k(s) - c_n(s) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_k(s) \right) ds. \quad (12.2)$$

Notons que la condition 1 assure que d'une part, pour $t \in [0, T[$, la fonction $s \rightarrow \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k,k} c_{n-k}(s) c_k(s)$ est continue donc bornée sur $[0, t]$ et d'autre part que $c_n(s) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_k(s)$ est intégrable sur $[0, t]$ comme produit de la fonction continue donc bornée $c_n(s)$ et de la fonction intégrable $\sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_k(s)$. Donc l'intégrale dans (12.2) est bien définie.

Remarque 12.1.2. Soit $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ une solution de l'équation de coagulation (12.1) et α, β deux constantes positives. Pour $t < T/(\alpha\beta)$ et $n \in \mathbb{N}^*$,

$$\begin{aligned} \alpha c_n(\alpha\beta t) &= \alpha c_n(0) + \alpha \int_0^{\alpha\beta t} \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k,k} c_{n-k}(s) c_k(s) \right. \\ &\quad \left. - c_n(s) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_k(s) \right) ds \\ &= \alpha c_n(0) + \int_0^t \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \beta K_{n-k,k} \alpha c_{n-k}(\alpha\beta r) \alpha c_k(\alpha\beta r) \right. \\ &\quad \left. - \alpha c_n(\alpha\beta r) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \beta K_{n,k} \alpha c_k(\alpha\beta r) \right) ds. \end{aligned}$$

Par ailleurs $\int_0^t \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \beta K_{n,k} \alpha c_k(\alpha\beta r) dr = \int_0^{\alpha\beta t} \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_k(s) ds < +\infty$. Donc $(\alpha c_n(\alpha\beta t), t \in [0, T/(\alpha\beta)[, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.1) pour le noyau de coagulation $\beta K_{j,k}$. \diamond

Si $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.1), pour $l \in \mathbb{N}$ et $t \geq 0$, on note

$$m_l(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^l c_n(t) \in [0, +\infty]$$

le moment d'ordre l associé à cette solution à l'instant t . On pose également

$$\mu_l = m_l(0) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^l c_n(0).$$

Comme le nombre de monomères qui constituent les polymères qui réagissent et donc la masse sont conservés lors de chaque coagulation, on s'attend à ce que la concentration massique totale $m_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(t)$ soit une fonction

constante de t . Si on somme sur $n \in \mathbb{N}^*$ l'équation (12.1) multipliée par n et on échange formellement somme et dérivée au premier membre et sommes entre elles au second membre, on obtient que $\dot{m}_1(t)$ est égal à

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \sum_{n \geq k+1} (k + (n - k)) K_{n-k, k} c_{n-k}(t) c_k(t) - \sum_{n, k \in \mathbb{N}^*} n c_n(t) K_{n, k} c_k(t) \\
&= \frac{1}{2} \left(\sum_{k \in \mathbb{N}^*} k c_k(t) \sum_{n \geq k+1} K_{n-k, k} c_{n-k}(t) \right. \\
&\quad \left. + \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_k(t) \sum_{n \geq k+1} K_{n-k, k} (n - k) c_{n-k}(t) \right) - \sum_{n, k \in \mathbb{N}^*} n c_n(t) K_{n, k} c_k(t) \\
&= \frac{1}{2} \left(\sum_{k \in \mathbb{N}^*} k c_k(t) \sum_{j \in \mathbb{N}^*} K_{j, k} c_j(t) \right. \\
&\quad \left. + \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_k(t) \sum_{j \in \mathbb{N}^*} K_{j, k} j c_j(t) \right) - \sum_{n, k \in \mathbb{N}^*} n c_n(t) K_{n, k} c_k(t) \\
&= 0
\end{aligned}$$

car par symétrie, $\forall k, j \in \mathbb{N}^*$, $K_{j, k} = K_{k, j}$. Pour des questions d'intégrabilité, les échanges effectués formellement pour obtenir la nullité de $\dot{m}_1(t)$ ne sont pas toujours licites. On peut tout de même montrer la décroissance de la concentration massique totale $m_1(t)$ de toute solution de (12.1) ainsi que celle de la concentration totale de polymères $m_0(t)$. Cette dernière se justifie intuitivement de la façon suivante : lors de chaque coagulation deux polymères disparaissent pour former un seul polymère.

Lemme 12.1.3. *Si $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.1), alors $m_0(t)$ et $m_1(t)$ sont des fonctions décroissantes de t .*

Démonstration. Soit $0 \leq \tau \leq t < T$. D'après (12.2), on a

$$c_n(t) = c_n(\tau) + \int_{\tau}^t \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k, k} c_{n-k}(s) c_k(s) - c_n(s) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n, k} c_k(s) \right) ds.$$

On multiplie cette égalité par n et on somme le résultat pour $n \in \{1, \dots, N\}$ pour obtenir

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1}^N n c_n(t) &= \sum_{n=1}^N n c_n(\tau) + \int_{\tau}^t \left(\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N n \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k, k} c_{n-k}(s) c_k(s) \right. \\
&\quad \left. - \sum_{n=1}^N n c_n(s) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n, k} c_k(s) \right) ds. \quad (12.3)
\end{aligned}$$

En échangeant les sommes puis en posant $j = n - k$ et en utilisant la symétrie du noyau de coagulation, on obtient que

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1}^N n \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k,k} c_{n-k}(s) c_k(s) &= \sum_{n=1}^N ((n-k) + k) \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k,k} c_{n-k}(s) c_k(s) \\
&= \sum_{k=1}^{N-1} c_k(s) \sum_{j=1}^{N-k} j K_{j,k} c_j(s) + \sum_{k=1}^{N-1} k c_k(s) \sum_{j=1}^{N-k} K_{j,k} c_j(s) \\
&= \sum_{j=1}^{N-1} j c_j(s) \sum_{k=1}^{N-j} K_{j,k} c_k(s) + \sum_{k=1}^{N-1} k c_k(s) \sum_{j=1}^{N-k} K_{k,j} c_j(s) \\
&= 2 \sum_{n=1}^{N-1} n c_n(s) \sum_{k=1}^{N-n} K_{n,k} c_k(s).
\end{aligned}$$

En reportant cette égalité dans (12.3), on conclut que

$$\sum_{n=1}^N n c_n(t) = \sum_{n=1}^N n c_n(\tau) - \int_{\tau}^t \sum_{n=1}^N n c_n(s) \sum_{k \geq N-n+1} K_{n,k} c_k(s) ds. \quad (12.4)$$

En particulier, $\sum_{n=1}^N n c_n(t) \leq \sum_{n=1}^N n c_n(\tau)$. En prenant la limite $N \rightarrow +\infty$, on conclut que $m_1(t) \leq m_1(\tau)$.

Pour montrer la décroissance de la concentration totale de polymères, on passe à la limite $N \rightarrow +\infty$ dans l'inégalité $\sum_{n=1}^N c_n(t) \leq \sum_{n=1}^N c_n(\tau)$ qui s'obtient en remarquant que la différence $\sum_{n=1}^N c_n(t) - \sum_{n=1}^N c_n(\tau)$ est égale à

$$- \int_{\tau}^t \sum_{n=1}^N c_n(s) \sum_{k \in \mathbb{N}} \left(\frac{1}{2} \mathbf{1}_{\{k \leq N-n\}} + \mathbf{1}_{\{k \geq N-n+1\}} \right) K_{n,k} c_k(s) ds.$$

□

La concentration massique totale $m_1(t)$ peut décroître strictement : par exemple la solution explicite (12.25) que l'on obtiendra dans le cas du noyau de coagulation multiplicatif $K_{j,k} = jk$ pour la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$ est telle que $m_1(t) = \min(1, 1/t)$. Intuitivement, cela correspond à la formation d'un polymère de taille infinie appelé gel auquel une partie de la masse initialement présente est transférée. Ce phénomène de transition de phase est appelé gélification.

La possibilité que la concentration massique totale ne soit pas préservée conduit à s'intéresser aux solutions de concentration massique totale constante.

Définition 12.1.4. On dit que $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ est une solution de (12.1) de masse constante sur $[0, T[$ si

1. $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution au sens de la définition 12.1.1,
2. $\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(0) < +\infty$ et $\forall t \in [0, T[, m_1(t) = \mu_1$.

Avant d'expliciter des solutions particulières de (12.1), nous énonçons un résultat d'existence et d'unicité que nous ne démontrerons pas (voir [3, 18]) :

Théorème 12.1.5. *S'il existe une constante $\kappa > 0$ telle que*

$$\forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} \leq \kappa(j+k) \quad (12.5)$$

et si la condition initiale $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^)$ vérifie $\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(0) < +\infty$, alors l'équation (12.1) admet une solution de masse constante sur $[0, \infty[$.*

Si on suppose en outre soit $K_{j,k} \leq \kappa\sqrt{jk}$ pour tous j, k dans \mathbb{N}^ soit $\mu_2 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^2 c_n(0) < +\infty$ alors il y a unicité des solutions (non nécessairement de masse constante) pour l'équation (12.1).*

Remarque 12.1.6. Notons qu'avec l'hypothèse (12.5), $\sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_k(0) \leq \kappa(n\mu_0 + \mu_1)$. Il est donc naturel de supposer $\mu_1 < +\infty$ en vue d'assurer la condition d'intégrabilité du point 1 de la définition 12.1.1. \diamond

12.1.2 Solutions explicites pour les noyaux constant, additif et multiplicatif

Dans ce paragraphe inspiré de [8], nous allons donner la solution de (12.1) dans le cas $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$ pour les noyaux de coagulation constant $K_{j,k} = 1$, additif $K_{j,k} = j+k$ et multiplicatif $K_{j,k} = jk$. La remarque 12.1.2 permet d'en déduire la solution lorsque $c_n(0) = c\mathbf{1}_{\{n=1\}}$ et $K_{j,k} = \kappa$, $K_{j,k} = \kappa(j+k)$ ou $K_{j,k} = \kappa jk$ pour toutes constantes $c, \kappa > 0$.

Noyau constant : $K_{j,k} = 1$

Dans ce cas, (12.1) se récrit

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, c_n(t) = c_n(0) + \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} c_{n-k}(s) c_k(s) ds - \int_0^t m_0(s) c_n(s) ds. \quad (12.6)$$

Ainsi, pour $n \in \mathbb{N}^*$, l'équation donnant l'évolution de $c_n(t)$ ne fait intervenir les concentrations de polymères de taille supérieure à n qu'au travers de $m_0(\cdot)$. En commençant par déterminer la fonction $m_0(\cdot)$, nous allons démontrer l'existence d'une unique solution pour l'équation (12.1) avec noyau de coagulation constant sous l'hypothèse que la concentration totale initiale μ_0 est finie. Cette hypothèse est moins restrictive que celle faite dans le théorème 12.1.5.

Proposition 12.1.7. *Soit $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ une condition initiale telle que $\mu_0 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n(0)$ est fini. Alors l'équation (12.1) admet une unique solution $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ pour le noyau constant $K_{j,k} = 1$. La concentration massique totale de cette solution est $m_0(t) = 2\mu_0/(2 + \mu_0 t)$. Enfin, $\forall n \in \mathbb{N}^*$,*

$$\forall t \geq 0, c_n(t) = c_n(0) + \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} c_{n-k}(s) c_k(s) ds - \int_0^t \frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 s} c_n(s) ds. \quad (12.7)$$

Démonstration. Soit $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ une solution de (12.1) pour le noyau de coagulation constant $K_{j,k} = 1$. Nous allons commencer par vérifier que $m_0(t)$ est égal à $2\mu_0/(2 + \mu_0 t)$ pour en déduire que $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.7). Puis nous observerons que le système d'équations (12.7) se résout par récurrence sur n . Il admet une unique solution $(\tilde{c}_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$, ce qui assure l'unicité pour (12.1). Enfin, dans une dernière étape, nous démontrerons que la concentration totale $\tilde{m}_0(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{c}_n(t)$ associée à cette solution est égale à $2\mu_0/(2 + \mu_0 t)$ ce qui assure que $(\tilde{c}_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.6) et donc de (12.1).

Par le théorème de Fubini, puis en posant $j = n - k$, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} c_{n-k}(s) c_k(s) ds &= \int_0^t \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_k(s) \sum_{n \geq k+1} c_{n-k}(s) ds \\ &= \int_0^t \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_k(s) \sum_{j \in \mathbb{N}^*} c_j(s) ds \\ &= \int_0^t m_0^2(s) ds. \end{aligned}$$

Cette quantité est finie puisque d'après le lemme 12.1.3, $s \rightarrow m_0(s)$ est décroissante et que par hypothèse $\mu_0 < +\infty$. De même,

$$\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_0^t m_0(s) c_n(s) ds = \int_0^t m_0(s) \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n(s) ds = \int_0^t m_0^2(s) ds < +\infty.$$

Ainsi en sommant (12.6) sur $n \in \mathbb{N}^*$, on obtient

$$m_0(t) = \mu_0 - \frac{1}{2} \int_0^t m_0^2(s) ds.$$

Donc $\dot{m}_0(t) = -\frac{1}{2}m_0^2(t)$ et en résolvant cette équation différentielle avec la condition initiale μ_0 , on conclut que $m_0(t) = 2\mu_0/(2 + \mu_0 t)$. En reportant cette valeur dans (12.6), on obtient (12.7). D'après la proposition E.1, $(\tilde{c}_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.7) si et seulement si pour tout $n \in \mathbb{N}^*$ et tout $t \geq 0$,

$$\begin{aligned} \tilde{c}_n(t) &= c_n(0) \exp \left(- \int_0^t \frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 r} dr \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{c}_{n-k}(s) \tilde{c}_k(s) \exp \left(- \int_s^t \frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 r} dr \right) ds \\ &= \frac{1}{(2 + \mu_0 t)^2} \left(4c_n(0) + \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{c}_{n-k}(s) \tilde{c}_k(s) (2 + \mu_0 s)^2 ds \right). \end{aligned} \quad (12.8)$$

Comme le second membre ne dépend que des concentrations de polymères de taille inférieure ou égale à $n - 1$, en raisonnant par récurrence sur $n \in \mathbb{N}^*$, on

vérifie que le système (12.7) admet une unique solution $(\tilde{c}_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ et que pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, la fonction $t \rightarrow \tilde{c}_n(t)$ est continûment dérivable sur \mathbb{R}_+ et à valeurs dans \mathbb{R}_+ .

Il reste à vérifier que la concentration totale associée $\tilde{m}_0(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{c}_n(t)$ est donnée par $2\mu_0/(2 + \mu_0 t)$ pour conclure que $(\tilde{c}_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.6).

Commençons par vérifier par récurrence sur N , que pour tout $N \in \mathbb{N}^*$,

$$\forall t \geq 0, \sum_{n=1}^N \tilde{c}_n(t) \leq \frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 t}. \quad (12.9)$$

D'après (12.8), pour tout $t \geq 0$, $\tilde{c}_1(t) = 4c_1(0)/(2 + \mu_0 t)^2$. Comme $4/(2 + \mu_0 t)^2 \leq 2/(2 + \mu_0 t)$ et que $c_1(0) \leq \mu_0$, l'hypothèse de récurrence (12.9) est satisfaite pour $N = 1$. Supposons maintenant que l'hypothèse de récurrence (12.9) est satisfaite jusqu'au rang $N \geq 1$.

En sommant (12.8) sur $n \in \{1, \dots, N+1\}$ et en multipliant le résultat par $(2 + \mu_0 t)^2$, il vient

$$(2 + \mu_0 t)^2 \sum_{n=1}^{N+1} \tilde{c}_n(t) = 4 \sum_{n=1}^{N+1} c_n(0) + \frac{1}{2} \int_0^t (2 + \mu_0 s)^2 \sum_{n=1}^{N+1} \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{c}_{n-k}(s) \tilde{c}_k(s) ds.$$

Comme

$$\sum_{n=1}^{N+1} \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{c}_{n-k}(s) \tilde{c}_k(s) = \sum_{k=1}^N \tilde{c}_k(s) \sum_{j=1}^{N+1-k} \tilde{c}_j(s) \leq \left(\sum_{k=1}^N \tilde{c}_k(s) \right)^2,$$

l'hypothèse de récurrence (12.9) assure que

$$(2 + \mu_0 t)^2 \sum_{n=1}^{N+1} \tilde{c}_n(t) \leq 4\mu_0 + \frac{1}{2} \int_0^t 4\mu_0^2 ds = 2\mu_0(2 + \mu_0 t).$$

En divisant les deux membres par $(2 + \mu_0 t)^2$, on obtient l'hypothèse de récurrence au rang $N + 1$. Ainsi (12.9) est vérifié pour tout $N \in \mathbb{N}^*$. En passant à la limite $N \rightarrow +\infty$ dans l'inégalité, on en déduit que pour $t \geq 0$, $\tilde{m}_0(t) \leq 2\mu_0/(2 + \mu_0 t)$.

Il reste à démontrer l'inégalité inverse pour achever la démonstration. En sommant (12.7) sur $n \in \mathbb{N}^*$ et en utilisant la majoration précédente pour justifier les échanges entre sommes et intégrales, on obtient

$$\begin{aligned} \tilde{m}_0(t) &= \mu_0 + \int_0^t \tilde{m}_0(s) \left(\frac{\tilde{m}_0(s)}{2} - \frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 s} \right) ds \\ &= \mu_0 + \int_0^t \left(\frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 s} \right)^2 \frac{(2 + \mu_0 s)\tilde{m}_0(s)}{2\mu_0} \left(\frac{(2 + \mu_0 s)\tilde{m}_0(s)}{4\mu_0} - 1 \right) ds. \end{aligned}$$

Comme pour tout $s \geq 0$, $(2 + \mu_0 s)\tilde{m}_0(s)/2\mu_0$ est dans l'intervalle $[0, 1]$ et que le minimum de la fonction $x \rightarrow x(x/2 - 1)$ sur cet intervalle, atteint pour $x = 1$, vaut $-1/2$, on en déduit que

$$\tilde{m}_0(t) \geq \mu_0 - \frac{1}{2} \int_0^t \left(\frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 s} \right)^2 ds = \mu_0 + \left[\frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 s} \right]_0^t = \frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 t}.$$

□

On suppose que $\mu_0 \in]0, +\infty[$. Pour $t \geq 0$ et $n \in \mathbb{N}^*$, on pose $p_n(t) = c_n(t)/m_0(t) = (2 + \mu_0 t)c_n(t)/2\mu_0$ de telle sorte que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} p_n(t) = 1$ i.e. $(p_n(t), n \in \mathbb{N}^*)$ est une probabilité sur \mathbb{N}^* . On note $F(t, s) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} s^n p_n(t)$ où $s \in [0, 1]$ la fonction génératrice associée. En déduisant de (12.7) l'évolution de $F(t, s)$ nous allons identifier $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$.

Proposition 12.1.8. *On suppose que $\mu_0 \in]0, +\infty[$. Alors la solution de (12.1) pour le noyau constant $K_{j,k} = 1$ est donnée par $(2\mu_0 p_n(t))/(2 + \mu_0 t)$, $t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*$, où $(p_n(t), n \in \mathbb{N}^*)$ est la loi de $\sum_{i=1}^{N_t} X_i$ avec les variables aléatoires $(X_i, i \in \mathbb{N}^*)$ indépendantes et identiquement distribuées suivant la probabilité $(c_n(0)/\mu_0, n \in \mathbb{N}^*)$ et N_t une variable aléatoire indépendante de loi géométrique de paramètre $2/(2 + \mu_0 t)$.*

L'objectif de l'exercice suivant est de vérifier que si $\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(0)$ est fini, alors la solution que nous venons d'exhiber est de masse constante.

Exercice 12.1.9. Dans le cas où $\mu_1 < +\infty$, vérifier que les variables X_i sont intégrables puis que $\mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^{N_t} X_i \right] = \mathbb{E}[N_t] \mathbb{E}[X_1]$ (on pourra décomposer sur les valeurs prises par N_t). En déduire que la solution de (12.1) pour le noyau $K_{j,k} = 1$ est de masse constante. ♦

Démonstration. D'après (12.7),

$$\begin{aligned} \dot{p}_n(t) &= \frac{c_n(t)}{2} + \frac{2 + \mu_0 t}{2\mu_0} \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} c_{n-k}(t) c_k(t) - \frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 t} c_n(t) \right) \\ &= \frac{\mu_0}{2 + \mu_0 t} \left(\sum_{k=1}^{n-1} p_{n-k}(t) p_k(t) - p_n(t) \right). \end{aligned}$$

Soit $s \in [0, 1]$. En intégrant cette équation en temps et en multipliant le résultat par s^n , on obtient

$$s^n p_n(t) = s^n p_n(0) + \int_0^t \frac{\mu_0}{2 + \mu_0 r} \left(\sum_{k=1}^{n-1} s^{n-k} p_{n-k}(r) s^k p_k(r) - s^n p_n(r) \right) dr. \quad (12.10)$$

D'après le théorème de Fubini,

$$\begin{aligned}
& \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_0^t \frac{\mu_0}{2 + \mu_0 r} \left(\sum_{k=1}^{n-1} s^{n-k} p_{n-k}(r) s^k p_k(r) + s^n p_n(r) \right) dr \\
&= \int_0^t \frac{\mu_0}{2 + \mu_0 r} \left(\sum_{k \in \mathbb{N}^*} s^k p_k(r) \sum_{n \geq k+1} s^{n-k} p_{n-k}(r) + \sum_{n \in \mathbb{N}^*} s^n p_n(r) \right) dr \\
&= \int_0^t \frac{\mu_0}{2 + \mu_0 r} (F^2(r, s) + F(r, s)) dr \leq \int_0^t \frac{2\mu_0}{2 + \mu_0 r} dr < +\infty.
\end{aligned}$$

Donc en sommant (12.10) sur $n \in \mathbb{N}^*$, et en échangeant somme et intégrale au second membre, il vient

$$F(t, s) = F(0, s) + \int_0^t \frac{\mu_0}{2 + \mu_0 r} F(r, s) (F(r, s) - 1) dr. \quad (12.11)$$

Comme pour $n \in \mathbb{N}^*$, $t \rightarrow p_n(t)$ est continue, la majoration $s^n p_n(t) \leq s^n$ et le théorème de convergence dominée assurent que pour s dans $[0, 1[$, $t \rightarrow F(t, s)$ est continue. Avec (12.11) on en déduit que pour s dans $[0, 1[$, $t \rightarrow F(t, s)$ est continûment dérivable et vérifie

$$\frac{\partial}{\partial t} F(t, s) = \frac{\mu_0}{2 + \mu_0 t} F(t, s) (F(t, s) - 1).$$

Pour s dans $]0, 1[$, comme $F(t, s) \in]0, 1[$, cette équation se récrit

$$\frac{d}{dt} \log \left(\frac{1}{F(t, s)} - 1 \right) = \frac{d}{dt} \log(2 + \mu_0 t).$$

En intégrant en temps, on obtient

$$\frac{1}{F(t, s)} - 1 = \left(\frac{1}{F(0, s)} - 1 \right) \times \left(\frac{2 + \mu_0 t}{2} \right).$$

On en déduit que pour $t \geq 0$ et $s \in]0, 1[$,

$$F(t, s) = \frac{2F(0, s)}{2 + \mu_0 t - \mu_0 t F(0, s)}, \quad (12.12)$$

équation qui reste vraie pour $s = 0$ et $s = 1$ puisque pour tout $t \geq 0$, $F(t, 0) = 0$ et $F(t, 1) = 1$.

En raisonnant comme dans la démonstration du lemme 4.1.1, on obtient que la fonction génératrice de $\sum_{i=1}^{N_t} X_i$ est la composée de la fonction génératrice $r \rightarrow \frac{2r}{2 + \mu_0 t - \mu_0 t r}$ de N_t avec la fonction génératrice $s \rightarrow F(0, s)$ commune aux variables aléatoires X_i , c'est-à-dire que

$$\forall s \in [0, 1], \mathbb{E} \left[s^{\sum_{i=1}^{N_t} X_i} \right] = F(t, s).$$

Le théorème A.2.4 assure alors que la loi de $\sum_{i=1}^{N_t} X_i$ est $(p_n(t), n \in \mathbb{N}^*)$. \square

Dans le cas particulier où $(p_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ est la loi géométrique de paramètre $p \in]0, 1]$, on a $F(0, s) = ps/(1 - (1 - p)s)$ et d'après (12.12)

$$F(t, s) = \frac{2ps}{(2 + \mu_0 t)(1 - (1 - p)s) - \mu_0 tps} = \frac{2ps/(2 + \mu_0 t)}{1 - s(1 - 2p/(2 + \mu_0 t))}.$$

On reconnaît la fonction génératrice de la loi géométrique de paramètre $2p/(2 + \mu_0 t)$. Donc pour $n \in \mathbb{N}^*$ et $t \geq 0$,

$$p_n(t) = \frac{2p}{2 + \mu_0 t} \times \left(\frac{2 + \mu_0 t - 2p}{2 + \mu_0 t} \right)^{n-1}.$$

On en déduit le corollaire suivant :

Corollaire 12.1.10. *Pour la condition initiale $(c_n(0) = \mu_0 p(1 - p)^{n-1}, n \in \mathbb{N}^*)$ avec $\mu_0 \in]0, +\infty[$ et $p \in]0, 1]$, la solution de (12.1) pour le noyau de coagulation constant $K_{j,k} = 1$ est donnée par*

$$c_n(t) = \frac{4\mu_0 p}{(2 + \mu_0 t)^2} \times \left(\frac{2 + \mu_0 t - 2p}{2 + \mu_0 t} \right)^{n-1}.$$

En particulier, pour la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$ obtenue lorsque $\mu_0 = p = 1$,

$$\boxed{\forall n \in \mathbb{N}^*, \forall t \geq 0, c_n(t) = \left(\frac{2}{2+t} \right)^2 \left(\frac{t}{2+t} \right)^{n-1}.} \quad (12.13)$$

Sur la figure 12.1, nous avons représenté la solution (12.13) sur l'intervalle de temps $[0, 10]$.

Exercice 12.1.11. Vérifier directement que $c_n(t)$ donné par (12.13) est solution de (12.1) pour $K_{j,k} = 1$ et $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$. ♦

Noyau additif : $K_{j,k} = j + k$

Soit $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ une condition initiale t.q. $\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(0) < +\infty$ et $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ une solution de (12.1) de masse constante, dont l'existence est assurée par le théorème 12.1.5. Nous allons à nouveau commencer par déterminer l'évolution de $m_0(t)$ pour en déduire un nouveau système d'équations satisfait par $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$.

Lemme 12.1.12. *Pour tout t positif, $m_0(t) = \mu_0 e^{-\mu_1 t}$. En outre $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est l'unique solution de*

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \dot{c}_n(t) = \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(t) c_k(t) - (\mu_1 + n \mu_0 e^{-\mu_1 t}) c_n(t) \quad (12.14)$$

et pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, la fonction $t \rightarrow c_n(t)$ est continûment dérivable sur \mathbb{R}_+ .

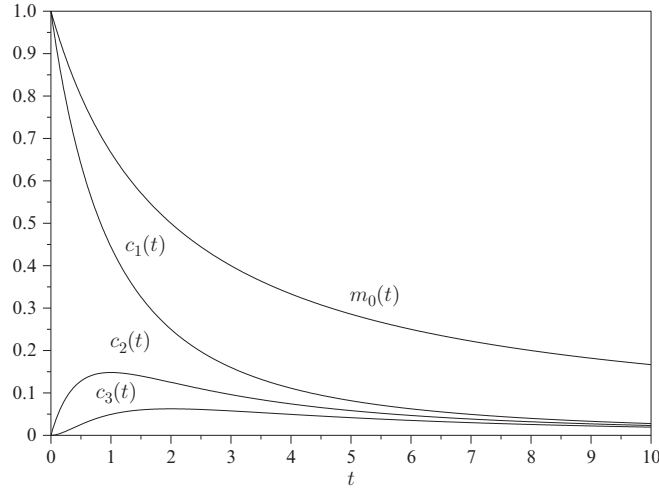


Fig. 12.1. Solution pour le noyau constant et $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$

Remarque 12.1.13. Ainsi, lorsque la condition initiale est telle que $\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(0) < +\infty$, l'équation de coagulation (12.1) pour le noyau de coagulation additif $K_{j,k} = j + k$ admet une unique solution de masse constante. D'après le théorème 12.1.5, sous l'hypothèse plus forte $\mu_2 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^2 c_n(0) < +\infty$ sur la condition initiale, l'unicité a lieu dans la classe plus large des solutions de masse non nécessairement constante. \diamond

Démonstration. En utilisant la conservation de la concentration massique totale $m_1(t) = \sum_{k \in \mathbb{N}^*} k c_k(t) = \mu_1$, on obtient que pour $n \in \mathbb{N}^*$ et $t \geq 0$,

$$\dot{c}_n(t) = \frac{n}{2} \sum_{k=1}^{n-1} c_{n-k}(t) c_k(t) - (\mu_1 + m_0(t)n) c_n(t). \quad (12.15)$$

En remarquant que

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(s) c_k(s) = \sum_{k=1}^{n-1} k c_k(s) c_{n-k}(s) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} ((n-k) + k) c_{n-k}(s) c_k(s),$$

on en déduit que

$$c_n(t) = c_n(0) + \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(s) c_k(s) ds - \int_0^t (\mu_1 + m_0(s)n) c_n(s) ds. \quad (12.16)$$

En utilisant le théorème de Fubini, la constance de $m_1(s)$ et la majoration $m_0(s) = \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_k(s) \leq \sum_{k \in \mathbb{N}^*} k c_k(s) = \mu_1$, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(s) c_k(s) ds &= \int_0^t \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_k(s) \sum_{n \geq k+1} (n-k) c_{n-k}(s) ds \\ &= \int_0^t m_0(s) m_1(s) ds \leq \mu_1^2 t < +\infty. \end{aligned}$$

Par ailleurs

$$\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_0^t (\mu_1 + m_0(s)n) c_n(s) ds = 2\mu_1 \int_0^t m_0(s) ds < +\infty.$$

Donc en sommant (12.16) sur $n \in \mathbb{N}^*$, on a $m_0(t) = \mu_0 - \mu_1 \int_0^t m_0(s) ds$. On conclut que $m_0(t) = \mu_0 e^{-\mu_1 t}$. En reportant cette égalité dans (12.16), on obtient (12.14). Comme d'après la proposition E.1, $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de ce système si et seulement si pour tout $n \in \mathbb{N}^*$ et tout $t \geq 0$

$$\begin{aligned} c_n(t) &= \exp \left(- \int_0^t (\mu_1 + n\mu_0 e^{-\mu_1 r}) dr \right) \\ &\times \left(c_n(0) + \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(s) c_k(s) \exp \left(\int_0^s (\mu_1 + n\mu_0 e^{-\mu_1 r}) dr \right) ds \right), \end{aligned}$$

l'unicité s'obtient par récurrence sur n . En outre, comme l'intégrande qui figure au membre de droite est une fonction continue de s , $t \rightarrow c_n(t)$ est continûment dérivable. \square

Pour $t \geq 0$ et $n \in \mathbb{N}^*$, on pose $p_n(t) = e^{\mu_1 t} c_n(t) / \mu_0$ de telle sorte que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} p_n(t) = e^{\mu_1 t} m_0(t) / \mu_0 = 1$ i.e. $(p_n(t), n \in \mathbb{N}^*)$ est une probabilité. On note $F(t, s) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} s^n p_n(t)$, $s \in [0, 1]$ la fonction génératrice associée.

Lemme 12.1.14. *La fonction F est continûment différentiable sur $\mathbb{R}_+ \times [0, 1]$ et vérifie*

$$\frac{\partial F}{\partial t}(t, s) = \mu_0 e^{-\mu_1 t} s (F(t, s) - 1) \frac{\partial F}{\partial s}(t, s).$$

Démonstration. Commençons par établir la continuité de $\frac{\partial F}{\partial s}$ sur $\mathbb{R}_+ \times [0, 1]$. Comme

$$\sum_{n \in \mathbb{N}^*} n p_n(t) = \frac{e^{\mu_1 t}}{\mu_0} m_1(t) = \frac{\mu_1 e^{\mu_1 t}}{\mu_0} < +\infty,$$

pour tout $t \geq 0$, la fonction $s \rightarrow F(t, s)$ est continûment dérivable sur $[0, 1]$ de dérivée $\frac{\partial F}{\partial s}(t, s) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n s^{n-1} p_n(t)$.

Pour $r \in [0, 1[$, la continuité de $t \rightarrow p_n(t)$ et l'inégalité

$$\forall (t, s) \in \mathbb{R}_+ \times [0, r], \quad 0 \leq n s^{n-1} p_n(t) \leq n r^{n-1}$$

entraînent par convergence dominée la continuité de $(t, s) \rightarrow \frac{\partial F}{\partial s}(t, s)$ sur $\mathbb{R}_+ \times [0, r]$. Comme r est arbitraire, cette fonction est continue sur $\mathbb{R}_+ \times [0, 1[$. Pour montrer qu'elle est continue sur $\mathbb{R}_+ \times [0, 1]$, on se donne maintenant $((t_l, s_l), l \geq 0)$ une suite de $\mathbb{R}_+ \times [0, 1]$ qui converge vers $(t, 1)$ lorsque $l \rightarrow +\infty$. Le lemme de Fatou assure que

$$\liminf_{l \rightarrow +\infty} \frac{\partial F}{\partial s}(t_l, s_l) = \liminf_{l \rightarrow +\infty} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n s_l^{n-1} p_n(t_l) \geq \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n p_n(t) = \frac{\partial F}{\partial s}(t, 1).$$

Par ailleurs, la croissance de $s \in [0, 1] \rightarrow \frac{\partial F}{\partial s}(t, s)$ et la continuité de $t \rightarrow \frac{\partial F}{\partial s}(t, 1) = \mu_1 e^{\mu_1 t} / \mu_0$ assurent que

$$\limsup_{l \rightarrow +\infty} \frac{\partial F}{\partial s}(t_l, s_l) \leq \lim_{l \rightarrow +\infty} \frac{\partial F}{\partial s}(t_l, 1) = \frac{\partial F}{\partial s}(t, 1).$$

Donc $\frac{\partial F}{\partial s}(t_l, s_l)$ converge vers $F(t, 1)$ lorsque $l \rightarrow +\infty$. On conclut que $\frac{\partial F}{\partial s}(t, s)$ est continue sur $\mathbb{R}_+ \times [0, 1]$ de même que $F(t, s) = \int_0^s \frac{\partial F}{\partial s}(t, u) du$.

Nous allons maintenant vérifier que F satisfait l'équation aux dérivées partielles énoncée dans le lemme. Comme $t \rightarrow c_n(t)$ est continûment dérivable, en dérivant $p_n(t)$ par rapport à t et en utilisant (12.14), on obtient

$$\begin{aligned} \dot{p}_n(t) &= \mu_1 p_n(t) + \frac{e^{\mu_1 t}}{\mu_0} \left(\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(t) c_k(t) - (\mu_1 + \mu_0 e^{-\mu_1 t} n) c_n(t) \right) \\ &= \mu_0 e^{-\mu_1 t} \left(\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) p_{n-k}(t) p_k(t) - n p_n(t) \right). \end{aligned}$$

Donc pour $s \in [0, 1]$ et $n \in \mathbb{N}^*$,

$$\begin{aligned} s^n p_n(t) &= s^n p_n(0) + \int_0^t \mu_0 e^{-\mu_1 r} s \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) s^{n-k-1} p_{n-k}(r) s^k p_k(r) dr \\ &\quad - \int_0^t \mu_0 e^{-\mu_1 r} s n s^{n-1} p_n(r) dr. \end{aligned} \quad (12.17)$$

D'après le théorème de Fubini,

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_0^t \mu_0 e^{-\mu_1 r} s \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) s^{n-k-1} p_{n-k}(r) s^k p_k(r) dr \\ = \int_0^t \mu_0 e^{-\mu_1 r} s \sum_{k \in \mathbb{N}^*} s^k p_k(r) \sum_{n \geq k+1} (n-k) s^{n-k-1} p_{n-k}(r) dr \\ = \int_0^t \mu_0 e^{-\mu_1 r} s F(r, s) \frac{\partial F}{\partial s}(r, s) dr < +\infty, \end{aligned}$$

et

$$\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_0^t \mu_0 e^{-\mu_1 r} s n s^{n-1} p_n(r) dr = \int_0^t \mu_0 e^{-\mu_1 r} s \frac{\partial F}{\partial s}(r, s) dr < +\infty.$$

Donc en sommant (12.17) sur $n \in \mathbb{N}^*$, on obtient que pour $s \in [0, 1]$ et $t \geq 0$,

$$F(t, s) = F(0, s) + \int_0^t \mu_0 e^{-\mu_1 r} s (F(r, s) - 1) \frac{\partial F}{\partial s}(r, s) dr.$$

Comme l'intégrande est continu en r , on en déduit que $F(t, s)$ est dérivable par rapport à t de dérivée partielle

$$\frac{\partial F}{\partial t}(t, s) = \mu_0 e^{-\mu_1 t} s (F(t, s) - 1) \frac{\partial F}{\partial s}(t, s).$$

La continuité du second membre sur $\mathbb{R}_+ \times [0, 1]$ entraîne celle de $\frac{\partial F}{\partial t}$ et on conclut que F est continûment différentiable sur $\mathbb{R}_+ \times [0, 1]$. \square

Nous nous plaçons désormais dans le cas particulier de la condition $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$ pour laquelle $\mu_0 = \mu_1 = 1$. Alors $F(t, s)$ est solution continûment différentiable de l'équation aux dérivées partielles non linéaire suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} F(t, s) = e^{-t} s (F(t, s) - 1) \frac{\partial}{\partial s} F(t, s) & \text{pour } (t, s) \in \mathbb{R}_+ \times [0, 1] \\ F(0, s) = s & \text{pour } s \in [0, 1] \text{ et } F(t, 1) = 1 \text{ pour } t \geq 0. \end{cases} \quad (12.18)$$

Nous allons en déduire $c_n(t)$ en utilisant des résultats sur les processus de Galton-Watson.

Proposition 12.1.15. *Pour tout $t \geq 0$, $(p_n(t), n \in \mathbb{N}^*)$ est la loi de Borel de paramètre $1 - e^{-t}$:*

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, p_n(t) = \frac{(n(1 - e^{-t}))^{n-1}}{n!} e^{-n(1 - e^{-t})}.$$

Comme $p_n(t) = e^t c_n(t)$, on en déduit la solution de (12.1). Notons que comme $\mu_2 = 1 < +\infty$, d'après le théorème 12.1.5, l'unicité a lieu dans la classe des solutions de masse non nécessairement constante.

Corollaire 12.1.16. *Pour la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$ et le noyau de coagulation additif $K_{j,k} = j + k$, l'unique solution de l'équation de coagulation (12.1) est donnée par*

$$\boxed{\forall n \in \mathbb{N}^*, \forall t \geq 0, c_n(t) = \frac{(n(1 - e^{-t}))^{n-1}}{n!} e^{-t} e^{-n(1 - e^{-t})}.} \quad (12.19)$$

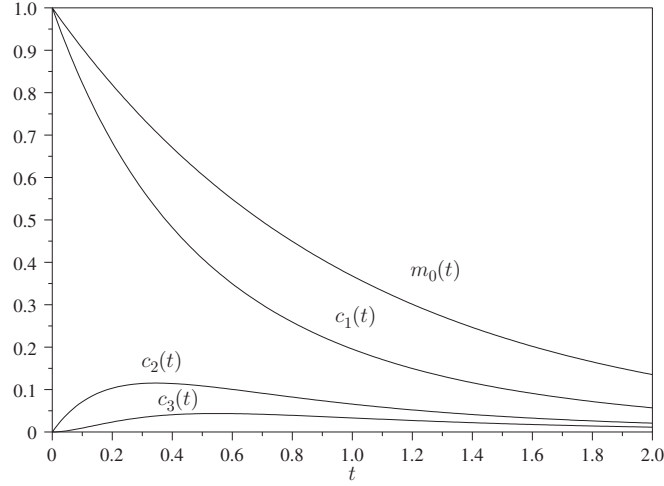


Fig. 12.2. Solution pour le noyau additif et $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$

Sur la figure 12.2, nous avons représenté la solution (12.19) sur l'intervalle de temps $[0, 2]$.

Démonstration de la proposition 12.1.15. Nous allons construire les courbes caractéristiques $t \rightarrow \varphi(t)$ telles que la fonction $t \rightarrow F(t, \varphi(t))$ est constante, ce qui, compte tenu de (12.18), implique formellement

$$\dot{\varphi}(t) = -e^{-t}\varphi(t)(F(t, \varphi(t)) - 1).$$

Nous en déduisons l'unicité pour (12.18). Puis nous caractériserons la solution de cette équation en utilisant les résultats sur la population totale d'un processus de Galton-Watson donnés dans le paragraphe 4.4.

La fonction $F(t, s)$ est continûment différentiable sur $\mathbb{R}_+ \times [0, 1]$ et satisfait (12.18). Avec la condition au bord $F(t, 1) = 1$, on vérifie facilement que pour tout $T > 0$, la fonction $x \in \mathbb{R} \rightarrow -e^{-t}\mathbf{1}_{\{x \in [0, 1]\}}x(F(t, x) - 1)$ est lipschitzienne et bornée avec une constante de Lipschitz et une borne uniformes pour $t \in [0, T]$. Par le théorème de Cauchy-Lipschitz, on en déduit que pour $y \in \mathbb{R}$, l'équation différentielle ordinaire

$$\dot{\varphi}_y(t) = -e^{-t}\mathbf{1}_{\{\varphi_y(t) \in [0, 1]\}}\varphi_y(t)(F(t, \varphi_y(t)) - 1), \quad \varphi_y(0) = y,$$

admet une unique solution. Comme pour $x \notin [0, 1]$, $-e^{-t}\mathbf{1}_{\{x \in [0, 1]\}}x(F(t, x) - 1) = 0$, on vérifie facilement que pour $s \in [0, 1]$, $\forall t \geq 0$, $\varphi_s(t) \in [0, 1]$ ce qui implique en particulier que $\dot{\varphi}_s(t) = -e^{-t}\varphi_s(t)(F(t, \varphi_s(t)) - 1)$. En utilisant (12.18), on obtient que

$$\frac{d}{dt}F(t, \varphi_s(t)) = \frac{\partial}{\partial t}F(t, \varphi_s(t)) + \dot{\varphi}_s(t)\frac{\partial}{\partial s}F(t, \varphi_s(t)) = 0.$$

Donc

$$\forall t \geq 0, \forall s \in [0, 1], F(t, \varphi_s(t)) = F(0, \varphi_s(0)) = s. \quad (12.20)$$

En particulier l'équation différentielle ordinaire donnant la caractéristique issue de s se réécrit $\dot{\varphi}_s(t) = -e^{-t}\varphi_s(t)(s-1)$, $\varphi_s(0) = s$. Son unique solution est donnée par

$$\varphi_s(t) = se^{(1-s)(1-e^{-t})}.$$

Soit $t > 0$. D'après le corollaire 4.4.5, la fonction $s \in [0, 1] \rightarrow \varphi_s(t) \in [0, 1]$ est inversible et son inverse $s \in [0, 1] \rightarrow \psi(t, s)$ est la fonction génératrice de la loi de Borel de paramètre $1 - e^{-t}$. Comme l'égalité (12.20) se réécrit $F(t, s) = \psi(t, s)$, on conclut que $(p_n(t), n \in \mathbb{N}^*)$ est la loi de Borel de paramètre $1 - e^{-t}$ i.e. que

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, p_n(t) = \frac{(n(1 - e^{-t}))^{n-1}}{n!} e^{-n(1-e^{-t})}.$$

□

Dans le développement qui précède, nous avons effectivement montré que toute solution de masse constante de (12.1) pour le noyau de coagulation additif $K_{j,k} = j + k$ et la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$ est nécessairement donnée par (12.19). Et c'est le résultat d'existence énoncé dans le théorème 12.1.5 mais admis qui assure que (12.19) fournit bien une solution de (12.1). L'objet de l'exercice suivant est de vérifier directement ce point.

Exercice 12.1.17. Soit $c_n(t) = \frac{(n(1-e^{-t}))^{n-1}}{n!} e^{-t} e^{-n(1-e^{-t})}$.

1. À l'aide du corollaire 4.4.5, vérifier que pour tout $t \geq 0$, $m_0(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n(t) = e^{-t}$ et $m_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(t) = 1$.
2. En utilisant l'identité combinatoire (4.17), vérifier que $c_n(t)$ est solution de (12.16) puis de (12.1).

◆

Noyau multiplicatif : $K_{j,k} = jk$

Le résultat suivant tiré de [8], garantit l'existence d'une solution à (12.1) pour le noyau de coagulation multiplicatif lorsque $\mu_2 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^2 c_n(0) < +\infty$ en établissant un lien avec l'équation de coagulation pour le noyau additif.

Proposition 12.1.18. Soit $(c_n^*(0), n \in \mathbb{N}^*)$ une condition initiale telle que $\mu_2^* = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^2 c_n^*(0) < +\infty$ et $(c_n^+(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ la solution de masse constante de (12.1) pour le noyau additif $K_{j,k} = j + k$ et la condition initiale $(c_n^+(0) = n c_n^*(0), n \in \mathbb{N}^*)$, dont l'existence est assurée par le théorème 12.1.5 et l'unicité par le lemme 12.1.12. Alors si on pose pour $t \in [0, 1/\mu_2^*[$ et $n \in \mathbb{N}^*$

$$c_n^*(t) = \frac{1}{1 - \mu_2^* t} \frac{1}{n} c_n^+ \left(-\frac{1}{\mu_2^*} \log(1 - \mu_2^* t) \right), \quad (12.21)$$

$(c_n^*(t), t \in [0, 1/\mu_2^*[, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de masse constante de l'équation de coagulation (12.1) pour le noyau multiplicatif $K_{j,k} = jk$.

Démonstration. Comme la concentration massique totale constante $\mu_1^+ = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} nc_n^+(t)$ de la solution $(c_n^+(t), t \in [0, +\infty[, n \in \mathbb{N}^*)$ est égale à μ_2^* , dans toute la démonstration, nous remplacerons μ_2^* par μ_1^+ .

Vérifions d'abord la constance de la concentration massique totale pour c^* . Pour $s \in [0, 1/\mu_1^+]$, en utilisant le lemme 12.1.12, on a

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} nc_n^*(s) &= \frac{1}{1 - \mu_1^+ s} m_0^+ \left(-\frac{1}{\mu_1^+} \log(1 - \mu_1^+ s) \right) = \frac{\mu_0^+ \exp(\log(1 - \mu_1^+ s))}{1 - \mu_1^+ s} \\ &= \mu_0^+ = \mu_1^+. \end{aligned}$$

Donc la concentration massique totale $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} nc_n^*(s)$ est constante sur l'intervalle $[0, 1/\mu_1^+]$ et la condition d'intégrabilité de la définition 12.1.1 est satisfaite pour tout $t \in [0, 1/\mu_1^+]$.

Toujours d'après le lemme 12.1.12, $t \rightarrow c_n^+(t)$ est continûment dérivable. En dérivant (12.21) et en utilisant (12.15), on obtient que pour $t \in [0, 1/\mu_1^+]$, si on pose $\tau = -\frac{1}{\mu_1^+} \log(1 - \mu_1^+ t)$,

$$\begin{aligned} \dot{c}_n^*(t) &= \frac{\mu_1^+}{n(1 - \mu_1^+ t)^2} c_n^+(\tau) + \frac{1}{n(1 - \mu_1^+ t)^2} \dot{c}_n^+(\tau) \\ &= \frac{1}{n(1 - \mu_1^+ t)^2} \left[\mu_1^+ c_n^+(\tau) + \frac{n}{2} \sum_{k=1}^{n-1} c_{n-k}^+ c_k^+(\tau) - (\mu_1^+ + nm_0^+(\tau)) c_n^+(\tau) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}^*(t) k c_k^*(t) - \frac{nc_n^*(t)}{1 - \mu_1^+ t} m_0^+(\tau) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) k c_{n-k}^*(t) c_k^*(t) - \frac{nc_n^*(t)}{1 - \mu_1^+ t} \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_k^+(\tau) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) k c_{n-k}^*(t) c_k^*(t) - nc_n^*(t) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} k c_k^*(t), \end{aligned}$$

en utilisant (12.21) pour les trois dernières égalités. \square

Pour le noyau de coagulation multiplicatif, l'équation de coagulation se récrit

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \quad \dot{c}_n(t) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(t) k c_k(t) - m_1(t) n c_n(t). \quad (12.22)$$

L'évolution de $c_n(t)$ ne fait donc intervenir les concentrations de polymères de taille supérieure à n qu'au travers de la concentration massique totale $m_1(\cdot)$. Nous allons tirer parti de cette propriété pour démontrer le résultat d'unicité suivant :

Proposition 12.1.19. Soit $(c_n(t), n \in \mathbb{N}^*, t \in [0, T])$ et $(\tilde{c}_n(t), n \in \mathbb{N}^*, t \in [0, \tilde{T}])$ deux solutions de l'équation (12.1) pour le noyau de coagulation multiplicatif $K_{j,k} = jk$ issues la même condition initiale ($\forall n \in \mathbb{N}^*, c_n(0) = \tilde{c}_n(0)$) de concentration massique totale $\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(0)$ finie. Alors pour tout $t \in [0, \min(T, \tilde{T})]$, pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $c_n(t) = \tilde{c}_n(t)$.

Démonstration. D'après la proposition E.1, l'équation (12.22) implique que pour $t < T$, et $n \in \mathbb{N}^*$,

$$c_n(t) = e^{-n \int_0^t m_1(r) dr} c_n(0) + \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(s) k c_k(s) e^{-n \int_s^t m_1(r) dr} ds.$$

Après multiplication de cette équation par $e^{n \int_0^t m_1(r) dr}$, on en déduit que $(e^{n \int_0^t m_1(r) dr} c_n(t), n \in \mathbb{N}^*, t \in [0, T])$ est solution de

$$\gamma_n(t) = c_n(0) + \frac{1}{2} \int_0^t \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \gamma_{n-k}(s) k \gamma_k(s) ds.$$

Pour $n = 1$, on obtient $\gamma_1(t) = c_1(0)$. Puis pour $n = 2$, on en déduit que $\gamma_2(t) = c_2(0) + c_1^2(0)t/2$. Plus généralement, en raisonnant par récurrence sur n , on vérifie que ce système d'équations admet une unique solution $(\gamma_n(t), n \in \mathbb{N}^*, t \in [0, +\infty[)$. Ainsi

$$\forall t \in [0, T], \forall n \in \mathbb{N}^*, c_n(t) = e^{-n \int_0^t m_1(r) dr} \gamma_n(t).$$

En particulier, la concentration massique totale $m_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(t)$ de la première solution de (12.1) vérifie

$$m_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} e^{-n \int_0^t m_1(r) dr} n \gamma_n(t). \quad (12.23)$$

De même pour $t \in [0, \tilde{T}]$, $\forall n \in \mathbb{N}^*$, $\tilde{c}_n(t) = e^{-n \int_0^t \tilde{m}_1(r) dr} \gamma_n(t)$ et $\tilde{m}_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n e^{-n \int_0^t \tilde{m}_1(r) dr} \gamma_n(t)$. Il suffit donc de vérifier que pour tout t dans $[0, \min(T, \tilde{T})]$, $\int_0^t m_1(r) dr = \int_0^t \tilde{m}_1(r) dr$ pour conclure que les deux solutions c et \tilde{c} coïncident sur $[0, \min(T, \tilde{T})]$.

Pour tout n dans \mathbb{N}^* , par décroissance de la fonction $x \rightarrow e^{-nx}$,

$$\left(e^{-n \int_0^t m_1(r) dr} - e^{-n \int_0^t \tilde{m}_1(r) dr} \right) \left(\int_0^t m_1(r) dr - \int_0^t \tilde{m}_1(r) dr \right) \leq 0.$$

En multipliant cette inégalité par $n \gamma_n(t)$, en sommant le résultat sur n dans \mathbb{N}^* et en utilisant (12.23) ainsi que l'équation analogue pour \tilde{m}_1 on obtient,

$$\forall t \in [0, \min(T, \tilde{T})], (m_1(t) - \tilde{m}_1(t)) \int_0^t (m_1(r) - \tilde{m}_1(r)) dr \leq 0. \quad (12.24)$$

Pour $s \in [0, \min(T, \tilde{T})[$, en intégrant cette inégalité sur $[0, s]$, il vient que

$$\frac{1}{2} \left(\int_0^s (m_1(r) - \tilde{m}_1(r)) dr \right)^2 = \int_0^s (m_1(t) - \tilde{m}_1(t)) \int_0^t (m_1(r) - \tilde{m}_1(r)) dr dt$$

est négatif, ce qui achève la démonstration. \square

Le résultat d'existence et le résultat d'unicité qui précèdent vont maintenant nous permettre d'exhiber l'unique solution de (12.1) pour le noyau de coagulation multiplicatif et la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$.

Corollaire 12.1.20. *La famille $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ définie par*

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, c_n(t) = \begin{cases} \frac{1}{n} \frac{(nt)^{n-1}}{n!} e^{-nt} & \text{si } t \in [0, 1] \\ \frac{1}{t} \frac{n^{n-2}}{n!} e^{-n} & \text{si } t \geq 1. \end{cases} \quad (12.25)$$

est l'unique solution de l'équation de coagulation (12.1) pour le noyau de coagulation multiplicatif $K_{j,k} = jk$ et la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$.

Démonstration. En reprenant les notations de la proposition 12.1.18, lorsque $c_n^*(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$, alors $\mu_2^* = 1$ et $c_n^+(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$. D'après le corollaire 12.1.16 qui donne la solution de (12.1) pour le noyau de coagulation additif et la condition initiale $(c_n^+(0), n \in \mathbb{N}^*)$ et la proposition 12.1.18, $c_n(t)$ donné par (12.25) est solution de masse constante sur l'intervalle de temps $[0, 1[$ de l'équation de coagulation avec noyau multiplicatif $K_{j,k} = jk$ pour la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$.

Nous allons maintenant en déduire que $c_n(t)$ satisfait également (12.1) pour $t > 1$. Comme le second membre de (12.22) est continu sur $[0, 1[$, $t \rightarrow c_n(t)$ est continûment dérivable sur cet intervalle et en passant à la limite $t \rightarrow 1^-$, on obtient

$$\dot{c}_n(1^-) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(1) k c_k(1) - n c_n(1).$$

Par ailleurs en dérivant (12.25), on obtient que pour t dans $[0, 1[$, $\dot{c}_n(t) = [n^{n-1}(n-1)t^{n-2} - n(nt)^{n-1}]e^{-nt}/(n \times n!)$. En prenant la limite $t \rightarrow 1^-$, il vient $\dot{c}_n(1^-) = -n^{n-2}e^{-n}/n! = -c_n(1)$. L'égalité des deux expressions précédentes de $\dot{c}_n(1^-)$ s'écrit

$$-c_n(1) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) c_{n-k}(1) k c_k(1) - n c_n(1).$$

Comme le corollaire 4.4.5 assure que la loi de Borel de paramètre 1 qui donne le poids $n^{n-1}e^{-n}/n!$ à tout entier n non nul est une probabilité, on a $\sum_{k \in \mathbb{N}^*} k c_k(1) = 1$ et on en déduit

$$-c_n(1) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)c_{n-k}(1)kc_k(1) - nc_n(1) \sum_{k \in \mathbb{N}^*} kc_k(1). \quad (12.26)$$

Pour $t > 1$, d'après (12.25), $c_n(t) = c_n(1)/t$, ce qui assure que $\dot{c}_n(t) = -c_n(1)/t^2$. En divisant (12.26) par t^2 on en déduit que (12.1) est vérifiée pour $t > 1$.

Notons que comme $\dot{c}_n(1^-) = \dot{c}_n(1^+) = -c_n(1)$, $t \rightarrow c_n(t)$ est continûment dérivable sur $[0, +\infty[$ et l'équation (12.1) est satisfaite sur $[0, +\infty[$.

L'unicité est assurée par la proposition 12.1.19. \square

Remarque 12.1.21.

- La concentration massique totale $m_1(t) = \min(1, 1/t)$ de la solution (12.25) est strictement décroissante à partir du temps $t = 1$, appelé temps de gélification. L'interprétation physique de ce phénomène est qu'il se forme au temps de gélification un polymère de taille infinie appelé gel, auquel de la masse est ensuite transférée.
- Pour calculer $m_0(t)$ et $m_2(t)$, on peut remarquer que pour t plus grand que 1, $m_0(t)$ et $m_2(t)$ sont respectivement égaux à $m_0(1)/t$ et $m_2(1)/t$. D'autre part, pour t dans $[0, 1]$, $m_0(t) = \mathbb{E}[1/Y_t]$ et $m_2(t) = \mathbb{E}[Y_t]$ où Y_t suit la loi de Borel de paramètre t . D'après le corollaire 4.4.5, pour t dans $[0, 1]$, $\mathbb{E}[Y_t] = 1/(1-t)$ (avec la convention $1/0 = +\infty$), ce qui assure que $m_2(t)$ est égal à $1/(1-t)$ pour t dans $[0, 1[$ et à $+\infty$ ensuite. Par ailleurs la fonction génératrice $s \in [0, 1] \rightarrow F(s)$ de Y_t est l'inverse de la fonction $u \in [0, 1] \rightarrow \varphi(u) = ue^{t(1-u)}$. Comme $\mathbb{P}(Y_t = 0) = 0$ et comme pour $n \in \mathbb{N}^*$, $\frac{1}{n} = \int_0^1 s^{n-1} ds$, on a $\frac{1}{Y_t} = \int_0^1 s^{Y_t-1} ds$. En prenant l'espérance, on en déduit

$$\mathbb{E} \left[\frac{1}{Y_t} \right] = \int_0^1 \frac{F(s)}{s} ds = \int_0^1 \frac{F(\varphi(u))}{\varphi(u)} \varphi'(u) du = \int_0^1 (1-tu) du = 1 - \frac{t}{2}.$$

On conclut alors que $m_0(t)$ est égal à $1 - t/2$ pour t dans $[0, 1]$ et à $1/(2t)$ ensuite. \diamond

Sur la figure 12.3, nous avons représenté la solution (12.25) sur l'intervalle de temps $[0, 2]$.

Le noyau multiplicatif $K_{j,k} = jk$ ne satisfait pas les hypothèses faites dans le théorème 12.1.5 en vue d'obtenir un résultat d'existence et d'unicité pour (12.1). Le résultat suivant tiré de [18] englobe le cas de ce noyau :

Théorème 12.1.22. *S'il existe une constante $\kappa > 0$ telle que $\forall j, k \in \mathbb{N}^*$, $K_{j,k} \leq \kappa jk$ et si la condition initiale non nulle $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ vérifie $\mu_2 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^2 c_n(0) < +\infty$, alors il existe un unique $T \geq 1/(\kappa \mu_2)$ tel que (12.1) admet une solution $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ de masse constante sur $[0, T[$ et que la fonction $t \rightarrow \int_0^t m_2(s) ds$ associée est finie sur $[0, T[$ avec une limite à gauche en T égale à $+\infty$.*

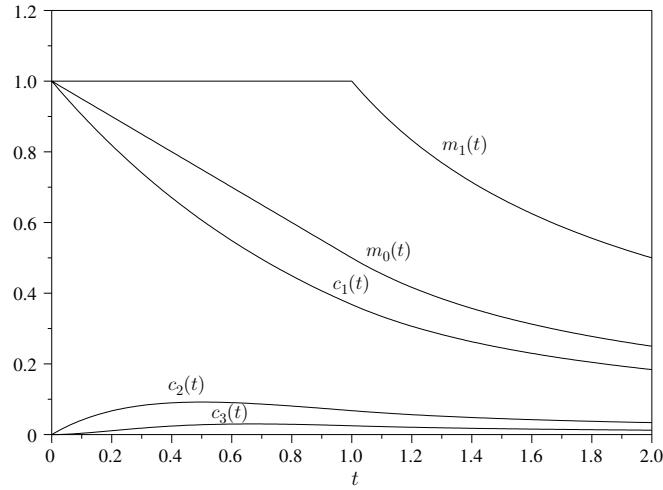


Fig. 12.3. Solution pour le noyau multiplicatif et $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$

En outre, on a le résultat d'unicité suivant : toute solution de (12.1) sur l'intervalle de temps $[0, \tau[$ coïncide avec $c_n(t)$ sur $[0, \min(T, \tau)[$.

Remarque 12.1.23. Comme $\forall j, k \in \mathbb{N}^*$, $j + k \leq 2jk$ l'hypothèse de croissance sur le noyau de coagulation faite dans le théorème précédent est plus faible que celle faite dans le théorème 12.1.5.

Si le noyau de coagulation ne satisfait pas $K_{j,k} \leq \kappa jk$, on peut perdre l'existence de solutions de masse constante sur un intervalle $[0, T[$ où $T > 0$. Par exemple, s'il existe des constantes α, β t.q. $\beta > \alpha > 1$ et $\forall j, k \in \mathbb{N}^*$, $j^\alpha + k^\alpha \leq K_{j,k} \leq (jk)^\beta$ alors Carr et da Costa [5] ont montré que le temps de gélification de toute solution non nulle de (12.1) est nécessairement nul. \diamond

L'objet de l'exercice suivant est de donner une réciproque à la proposition 12.1.18 :

Exercice 12.1.24. Soit $(c_n^+(0), n \in \mathbb{N}^*)$ une condition initiale non nulle telle que $\mu_1^+ = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n^+(0) < +\infty$ et $(c_n^*(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ avec $T \geq 1/\mu_1^+$ la solution de masse constante de l'équation de coagulation avec noyau multiplicatif $K_{j,k} = jk$ pour la condition initiale $(c_n^*(0) = c_n^+(0)/n, n \in \mathbb{N}^*)$ dont l'existence est assurée par le théorème 12.1.22. Pour $t > 0$ et $n \in \mathbb{N}^*$, on pose

$$c_n^+(t) = e^{-\mu_1^+ t} n c_n^*(t) \left(\frac{1}{\mu_1^+} (1 - e^{-\mu_1^+ t}) \right).$$

1. Montrer que pour tout $n \in \mathbb{N}^*$

$$\forall t \geq 0, \dot{c}_n^+(t) = \frac{n}{2} \sum_{k=1}^{n-1} c_{n-k}^+(t) c_k^+(t) - \left(n \mu_1^* e^{-\mu_1^+ t} + \mu_1^+ \right) c_n^+(t).$$

2. Calculer μ_0^+ et conclure à l'aide du lemme 12.1.12 que $(c_n^+(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est la solution de masse constante de (12.1) pour le noyau additif $K_{j,k} = j + k$ et la condition initiale $(c_n^+(0), n \in \mathbb{N}^*)$ dont l'existence est assurée par le théorème 12.1.5.

◆

12.2 Équations de coagulation et de fragmentation discrètes

Nous enrichissons maintenant les équations pour prendre en compte, en plus de la coagulation, le phénomène inverse : la fragmentation. Un polymère de taille $n \geq 2$ peut se fragmenter pour donner naissance à deux polymères de tailles respectives $n - k$ et k où $k \in \{1, \dots, [n/2]\}$ (pour x réel, $[x]$ désigne la partie entière de x). La constante de cette réaction est $F_{n-k,k} = F_{k,n-k}$ si $k \neq n/2$ et $\frac{1}{2}F_{\frac{n}{2},\frac{n}{2}}$ si $k = n/2$. La constante globale de fragmentation d'un polymère de taille n est alors $\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} F_{n-k,k}$ et les équations de coagulation fragmentation discrètes s'écrivent :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{N}^*, \dot{c}_n(t) = & \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (K_{n-k,k} c_{n-k}(t) c_k(t) - F_{n-k,k} c_n(t)) \\ & - \sum_{k \in \mathbb{N}^*} (K_{n,k} c_n(t) c_k(t) - F_{n,k} c_{n+k}(t)). \end{aligned} \quad (12.27)$$

Notons que la fragmentation n'introduit que des termes linéaires dans le système précédent. Comme la masse est conservée lors de chaque fragmentation, on s'attend à ce que la concentration massique totale $m_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(t)$ soit conservée. Ce n'est pas toujours vrai. Comme nous l'avons vu dans le cas du noyau de coagulation multiplicatif, en l'absence de fragmentation, il se peut que la concentration massique totale décroisse : cela correspond physiquement à la formation d'un polymère de taille infinie appelé gel. En l'absence de coagulation, comme le montre l'exemple suivant tiré de [3], on peut construire des solutions de (12.27) telles que $m_1(t)$ est strictement croissante.

Exemple 12.2.1. Pour $n \in \mathbb{N}^*$ et $t \geq 0$, on pose

$$c_n(t) = \frac{e^t}{(n+1)(n+2)(n+3)}.$$

On a alors

$$\dot{c}_n(t) = c_n(t) = -\frac{n-1}{2} c_n(t) + \frac{n+1}{2} c_n(t).$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned} \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_{n+k}(t) &= e^t \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{(n+k+1)(n+k+2)} - \frac{1}{(n+k+2)(n+k+3)} \right) \\ &= \frac{e^t}{2} \left(\sum_{k \in \mathbb{N}^*} \frac{1}{(n+k+1)(n+k+2)} - \sum_{j \geq 2} \frac{1}{(n+j+1)(n+j+2)} \right) \\ &= \frac{e^t}{2} \times \frac{1}{(n+2)(n+3)} = \frac{n+1}{2} c_n(t). \end{aligned}$$

On a donc

$$\dot{c}_n(t) = c_n(t) = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} c_n(t) + \sum_{k \in \mathbb{N}^*} c_{n+k}(t).$$

Donc $c_n(t)$ est solution de (12.27) pour le noyau de fragmentation constant égal à 1 et le noyau de coagulation nul. Comme

$$\frac{n}{(n+1)(n+2)(n+3)} = \frac{1}{n+2} - \frac{1}{2(n+1)(n+2)} - \frac{1}{n+3} + \frac{1}{2(n+2)(n+3)},$$

on vérifie facilement que la concentration massique totale de cette solution est $m_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(t) = \frac{e^t}{4}$, fonction strictement croissante. Notons que la constante globale de fragmentation d'un polymère de taille n n'est pas bornée : elle est égale à $(n-1)/2$ et tend vers $+\infty$ avec la taille n . \diamond

Comme les équations ne font intervenir que les polymères de taille finie, ce phénomène d'augmentation de masse doit être rejeté pour des arguments physiques. C'est pourquoi nous imposons la décroissance de la concentration massique totale dans la définition suivante des solutions :

Définition 12.2.2. On appelle solution de l'équation (12.27) sur $[0, T[$ où $0 < T \leq +\infty$ une famille $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ telle que

1. pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $s \rightarrow c_n(s)$ est une fonction continue de $[0, T[$ dans \mathbb{R}_+ et pour tout $t \in [0, T[$, $\int_0^t \sum_{k \in \mathbb{N}^*} (K_{n,k} c_k(s) + F_{n,k} c_{n+k}(s)) ds < +\infty$,
2. pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, l'équation (12.27) est vérifiée sous forme intégrée en temps : pour tout $t \in [0, T[$,

$$\begin{aligned} c_n(t) &= c_n(0) + \int_0^t \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (K_{n-k,k} c_{n-k}(s) c_k(s) - F_{n-k,k} c_n(s)) ds \\ &\quad - \int_0^t \sum_{k \in \mathbb{N}^*} (K_{n,k} c_n(s) c_k(s) - F_{n,k} c_{n+k}(s)) ds, \end{aligned}$$

3. $\forall t \in [0, T[, m_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(t) < +\infty$ et la fonction $m_1(t)$ est décroissante sur $[0, T[$.

Remarque 12.2.3. En raisonnant comme dans la remarque 12.1.2, on obtient que si $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.27) pour les noyaux K et F , alors pour toutes constantes positives α et β , $(\alpha c_n(\alpha\beta t), t \in [0, T/(\alpha\beta)[, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.27) pour les noyaux βK et $\alpha\beta F$. \diamond

Nous regroupons dans le théorème suivant tiré de [15] et que nous ne démontrerons pas des résultats d'existence et d'unicité pour (12.27) sous les hypothèses du théorème 12.1.5 et des résultats sous les hypothèses du théorème 12.1.22.

Théorème 12.2.4. *On suppose que la condition initiale $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ est non nulle et vérifie $\mu_2 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^2 c_n(0) < +\infty$.*

- *S'il existe une constante $\kappa > 0$ t.q. $\forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} \leq \kappa(j+k)$ alors l'équation (12.27) admet une unique solution sur $[0, +\infty[$. En outre, cette solution est de masse constante.*
- *S'il existe une constante $\kappa > 0$ telle que $\forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} \leq \kappa jk$, alors il existe un unique $T \geq 1/(\kappa\mu_2)$ tel que (12.27) admet une solution $(c_n(t), t \in [0, T[, n \in \mathbb{N}^*)$ de masse constante sur $[0, T[$ et que la fonction $t \rightarrow \int_0^t m_2(s)ds$ associée est finie sur $[0, T[$ avec une limite à gauche en T égale à $+\infty$. En outre, toute solution de (12.27) sur l'intervalle de temps $[0, \tau[$ coïncide avec $c_n(t)$ sur $[0, \min(T, \tau)[$.*

Remarque 12.2.5. Dans l'énoncé précédent nous n'avons pas fait d'hypothèse sur le noyau de fragmentation et nous généralisons les résultats obtenus en absence de fragmentation c'est-à-dire pour un noyau F nul.

Dans [6], da Costa adopte un point de vue radicalement différent : il se place sous une hypothèse dite de fragmentation forte qui assure que le phénomène de fragmentation domine celui de coagulation pour obtenir des résultats d'existence et d'unicité pour (12.27). \diamond

12.3 Chaînes de Markov à temps continu associées

Nous allons d'abord introduire le processus de Marcus-Lushnikov qui est une chaîne de Markov à temps continu dont les transitions sont la traduction des phénomènes physiques de coagulation et de fragmentation. Puis nous présenterons le processus de transfert de masse qui permet d'approcher la solution des équations de coagulation et de fragmentation discrètes plus efficacement que la simulation du processus de Marcus-Lushnikov.

12.3.1 Le processus de Marcus-Lushnikov

Existence du processus

Le processus de Marcus-Lushnikov est une chaîne de Markov à temps continu qui décrit l'évolution d'une population de molécules de polymères présentes initialement. Plus précisément l'espace d'états

$$E = \left\{ x = (x(n), n \in \mathbb{N}^*) \in \mathbb{N}^{\mathbb{N}^*} : \exists n_0 \in \mathbb{N}^*, \forall n \geq n_0, x(n) = 0 \right\},$$

est dénombrable puisque si on note pour $x \in E$, $M(x) = \max\{n \in \mathbb{N}^* : x(n) > 0\}$ alors $x \in E \rightarrow (x(1), x(2), \dots, x(M(x)))$ est une injection dans l'espace dénombrable $\bigcup_{k \geq 1} \mathbb{N}^k$.

Lorsque le processus est dans l'état $x \in E$, cela signifie que pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $x(n)$ molécules de polymères de taille n sont présentes. Les transitions transcrivent directement la physique des phénomènes de coagulation et de fragmentation. Si pour $k \in \mathbb{N}^*$, $e_k = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, \dots)$ désigne l'élément de E avec un 1 en k -ième position et des 0 ailleurs (ce qui s'écrit aussi $e_k(n) = \mathbf{1}_{\{n=k\}}$), le générateur infinitésimal est donné pour $y \neq x$ par

$$A_N(x, y) = \begin{cases} F_{j,k}x(j+k) & \text{si } y = x + e_j + e_k - e_{j+k} \text{ où } 1 \leq k < j < \infty \\ \frac{F_{j,j}}{2}x(2j) & \text{si } y = x + 2e_j - e_{2j} \text{ où } j \in \mathbb{N}^* \\ \frac{K_{j,k}}{N}x(j)x(k) & \text{si } y = x - e_j - e_k + e_{j+k} \text{ où } 1 \leq k < j < \infty \\ \frac{K_{j,j}}{2N}(x^2(j) - x(j)) & \text{si } y = x - 2e_j + e_{2j} \text{ où } j \in \mathbb{N}^* \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

$$\text{et par } A_N(x, x) = - \sum_{j \in \mathbb{N}^*} \left(\sum_{k=1}^{j-1} \left(F_{j,k}x(j+k) + \frac{K_{j,k}}{N}x(j)x(k) \right) + \frac{F_{j,j}}{2}x(2j) + \frac{K_{j,j}}{2N}x(j)(x(j) - 1) \right), \quad (12.28)$$

où $N \in \mathbb{N}^*$ est un paramètre dont le rôle apparaîtra lors de l'étude de la convergence vers les équations de coagulation fragmentation.

Le taux auquel un polymère de taille j et un polymère de taille k sont formés par fragmentation d'un polymère de taille $j+k$ (transition $x \rightarrow x + e_j + e_k - e_{j+k}$) est égal à $\mathbf{1}_{\{k \neq j\}}F_{j,k} + \mathbf{1}_{\{k=j\}}F_{j,j}/2$ fois le nombre $x(j+k)$ de polymères de taille $j+k$ présents. En particulier ce taux est nul si $x(j+k) = 0$ c'est-à-dire s'il n'y a pas de polymère de taille $j+k$.

Si $j \neq k$, le taux avec lequel un polymère de taille $j+k$ est formé par coagulation d'un polymère de taille j et d'un polymère de taille k (transition $x \rightarrow x - e_j - e_k + e_{j+k}$) est, au facteur multiplicatif de normalisation $1/N$ près, égal au produit de $K_{j,k}$ et du nombre $x(j)x(k)$ de couples de polymères de tailles respectives j et k présents. Le taux avec lequel un polymère de taille

$2j$ est formé par coagulation de deux polymères de taille j est, au facteur multiplicatif de normalisation $1/N$ près, égal au produit de $K_{j,j}$ et du nombre $x(j)(x(j) - 1)/2$ de couples de polymères de taille j présents.

Lemme 12.3.1. *Pour tout noyau de coagulation K , tout noyau de fragmentation F et tout $N \in \mathbb{N}^*$, A_N défini par (12.28) est le générateur d'une chaîne de Markov à temps continu $(X_t^N, t \geq 0)$ sur E appelée processus de Marcus-Lushnikov.*

Démonstration. On remarque que pour la chaîne trace en temps discret $(Z_l, l \in \mathbb{N})$ de matrice de transition $\mathbf{1}_{\{y \neq x\}} A_N(x, y)/|A_N(x, x)|$, seules les transitions $x \in E \rightarrow y \in E$ préservant la masse i.e. telles que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} ny(n) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} nx(n)$ sont possibles. Pour $x_0 \in E$, le sous-ensemble $E_{x_0} = \{y \in E : \sum_{n \in \mathbb{N}^*} ny(n) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} nx_0(n)\}$ de l'espace d'état que peut visiter la chaîne trace conditionnellement à $Z_0 = x_0$ est fini. Avec la remarque 8.1.2, on en déduit que la condition (8.3) est satisfaite. Le théorème 8.1.6 permet alors de conclure que A_N est bien le générateur d'une chaîne de Markov à temps continu sur E . \square

Remarque 12.3.2. En l'absence de fragmentation, pour le noyau de coagulation constant $K_{j,k} = 1$ et pour la condition initiale $X_0^1 = \nu e_1$ où $\nu \in \mathbb{N}^*$, le processus de Marcus-Lushnikov X_t^1 porte également le nom de processus de coalescence de Kingman. Ce processus modélise l'apparition des ancêtres communs dans le modèle de Wright-Fisher renormalisé (voir paragraphe 7.2). En effet, en reportant les valeurs de F et K dans (12.28) on obtient que pour tout $x \in E$,

$$\begin{aligned} |A_1(x, x)| &= \sum_{j \in \mathbb{N}^*} \sum_{k=1}^{j-1} x(j)x(k) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{N}^*} x(j)(x(j) - 1) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{N}^*} x(j) \left(\sum_{k \in \mathbb{N}^*} x(k) - 1 \right). \end{aligned}$$

Comme les seules transitions possibles sont les coagulations qui diminuent le nombre total de polymères présents d'une unité, la chaîne trace en temps discret $(Z_l, l \in \mathbb{N})$ est telle que pour $l \in \{0, \dots, \nu - 1\}$, $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} Z_l(n) = \nu - l$. Donc $|A_N(Z_l, Z_l)| = \frac{1}{2}(\nu - l)(\nu - l - 1)$ et les durées entre les sauts successifs de X_t^1 sont des variables exponentielles indépendantes de paramètres successifs $\frac{1}{2}(\nu - l)(\nu - l - 1)$, $l \in \{0, \dots, \nu - 2\}$.

Pour $n \in \{1, \dots, \nu\}$, $X_t^1(n)$ représente le nombre d'ancêtres à l'instant $-t$ ayant exactement n descendants parmi les ν individus de la population à l'instant 0. Le nombre d'ancêtres à l'instant $-t$ qui ont généré les ν individus de l'instant 0 est donné par $\sum_{n=1}^{\nu} X_t^1(n)$. La première coagulation, nécessairement entre 2 monomères, correspond, au retournement du temps près, à l'apparition d'un ancêtre commun pour deux des individus présents à l'instant 0. Plus généralement une coagulation entre un polymère de taille j et

un polymère de taille k correspond à l'apparition d'un ancêtre commun pour deux populations de tailles j et k d'individus de l'instant 0 qui avaient déjà chacune un ancêtre commun. \diamond

Convergence vers les équations de coagulation fragmentation (12.27)

On suppose que la condition initiale $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ de (12.27) est une probabilité sur \mathbb{N}^* . Quitte à changer le noyau de coagulation, on peut toujours s'y ramener lorsque $\mu_0 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n(0)$ est dans l'intervalle $]0, +\infty[$. En effet, d'après la remarque 12.2.3 pour le choix $\beta = 1/\alpha = \mu_0$, si $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.27) alors $(c_n(t)/\mu_0, t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de l'équation de coagulation fragmentation pour le noyau de coagulation modifié $\mu_0 K$ et le noyau de fragmentation F .

On se donne alors une suite $(\xi_i, i \in \mathbb{N}^*)$ de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées suivant $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$. Pour $N \in \mathbb{N}^*$, la condition initiale du processus de Marcus-Lushnikov X_t^N est choisie de la manière suivante

$$X_0^N = \sum_{i=1}^N e_{\xi_i} \text{ i.e. } \forall n \in \mathbb{N}^*, X_0^N(n) = \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{\{\xi_i=n\}}.$$

Pour $t \geq 0$ et $n \in \mathbb{N}^*$, on pose $c_n^N(t) = X_t^N(n)/N$. La loi forte des grands nombres entraîne que presque sûrement, pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $c_n^N(0)$ converge vers $\mathbb{P}(\xi_1 = n) = c_n(0)$ lorsque N tend vers $+\infty$.

Expliquons pourquoi on peut penser que $c_n^N(t)$ va converger lorsque N tend vers $+\infty$ vers une solution de (12.27) pour la condition initiale $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$. Pour $n \in \mathbb{N}^*$, entre t et $t + \Delta t$, conditionnellement à $X_t^N = x \in E$, en dehors de l'événement « plusieurs transitions ont lieu pour X^N entre t et $t + \Delta t$ » qui se produit avec probabilité $o(\Delta t)$,

$$c_n^N(t + \Delta t) - c_n^N(t) = (X_{t+\Delta t}^N(n) - X_t^N(n))/N$$

1. est égal à $2/N$ si un polymère de taille $2n$ se fragmente en 2 polymères de taille n , événement de probabilité

$$\Delta t \frac{F_{n,n}}{2} x(2n) + o(\Delta t),$$

2. est égal à $1/N$ si
 - une coagulation donne naissance à un polymère de taille n : à un $o(\Delta t)$ près, un tel événement se produit avec probabilité

$$\begin{aligned} \Delta t \sum_{k=1}^{n-1} \left(\mathbf{1}_{\{k < n-k\}} \frac{K_{n-k,k}}{N} x(n-k)x(k) + \mathbf{1}_{\{k=n-k\}} \frac{K_{k,k}}{2N} x(k)(x(k)-1) \right) \\ = \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \frac{K_{n-k,k}}{N} x(n-k)(x(k) - \mathbf{1}_{\{k=n/2\}}), \end{aligned}$$

par symétrie du noyau K

- une fragmentation donne naissance à un polymère de taille n et un polymère de taille $k \neq n$: à un $o(\Delta t)$ près, cet événement se produit avec probabilité

$$\Delta t \left(\sum_{k < n} F_{n,k} x(n+k) + \sum_{k > n} F_{k,n} x(k+n) \right) = \Delta t \sum_{k \neq n} F_{n,k} x(n+k),$$

par symétrie de F ,

- est égal à $-1/N$ si
 - un polymère de taille n se fragmente, événement qui se produit à $o(\Delta t)$ près avec probabilité

$$\Delta t \sum_{k=1}^{n-1} \left(\mathbf{1}_{\{k < n-k\}} F_{n-k,k} + \mathbf{1}_{\{k=n-k\}} \frac{F_{k,k}}{2} \right) x(n) = \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{n-1} F_{n-k,k} x(n),$$

par symétrie du noyau F ,

- un polymère de taille n coagule avec un polymère de taille $k \neq n$: à un $o(\Delta t)$ près, cet événement se produit avec probabilité

$$\Delta t \left(\sum_{k < n} \frac{K_{n,k}}{N} x(n)x(k) + \sum_{k > n} \frac{K_{k,n}}{N} x(k)x(n) \right) = \Delta t \sum_{k \neq n} \frac{K_{n,k}}{N} x(n)x(k),$$

par symétrie de K ,

- est égal à $-2/N$ si deux polymères de taille n coagulent ensemble pour former un polymère de taille $2n$, événement de probabilité

$$\Delta t \frac{K_{n,n}}{2N} x(n)(x(n) - 1) + o(\Delta t),$$

- est égal à 0 avec probabilité complémentaire des précédentes.

De manière abusive, on traduit cela en écrivant

$$\begin{aligned} & c_n^N(t + \Delta t) - c_n^N(t) \\ &= \frac{\Delta t}{N} \left(2 \frac{F_{n,n}}{2} X_t^N(2n) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \frac{K_{n-k,k}}{N} X_t^N(n-k)(X_t^N(k) - \mathbf{1}_{\{k=n/2\}}) \right. \\ & \quad + \sum_{k \neq n} F_{n,k} X_t^N(n+k) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} F_{n-k,k} X_t^N(n) \\ & \quad \left. - \sum_{k \neq n} \frac{K_{n,k}}{N} X_t^N(n) X_t^N(k) - 2 \frac{K_{n,n}}{2N} X_t^N(n)(X_t^N(n) - 1) \right) + o(\Delta t). \end{aligned}$$

Sous de bonnes hypothèses de croissance sur les noyaux K et F et sur la condition initiale $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ on peut effectivement montrer que la différence

entre le membre de gauche et le premier terme du membre de droite est en $o(\Delta t)$ dans le passage à la limite $N \rightarrow +\infty$. En divisant les deux membres par Δt puis en utilisant $c_k^N(t) = X_t^N(k)/N$, on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} (c_n^N(t + \Delta t) - c_n^N(t)) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} K_{n-k,k} c_{n-k}^N(t) \left(c_k^N(t) - \frac{\mathbf{1}_{\{k=n/2\}}}{N} \right) + \sum_{k \in \mathbb{N}^*} F_{n,k} c_{n+k}^N(t) \\ & \quad - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} F_{n-k,k} c_n^N(t) - \sum_{k \in \mathbb{N}^*} K_{n,k} c_n^N(t) \left(c_k^N(t) - \frac{\mathbf{1}_{\{k=n\}}}{N} \right) + o(1) \end{aligned}$$

et on retrouve les équations de coagulation fragmentation discrètes (12.27) en faisant tendre N vers l'infini et Δt vers 0. Nous n'énoncerons pas de résultat de convergence précis pour $c_n^N(t)$ car la topologie dans laquelle cette convergence a lieu dépasse le cadre de cet ouvrage. Nous renvoyons pour cela par exemple à [14].

Simulation du processus

Une fois que l'on a généré la variable initiale X_0^N , pour simuler le processus de Marcus-Lushnikov X_t^N , il suffit, d'après le paragraphe 8.1, de simuler la chaîne trace et la suite des instants de transition. Pour des noyaux de fragmentation et de coagulation spécifiques, on peut adapter astucieusement cette méthode générale afin de réduire le temps de calcul nécessaire pour générer la chaîne trace, comme le montre l'exercice suivant.

Exercice 12.3.3. Méthode des coagulations fictives

On se place en absence de fragmentation ($F = 0$). Soit $x \in E$ et pour $l \in \{0, 1, 2\}$, $\nu_l = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^l x(n)$.

1. On suppose dans un premier temps que le noyau de coagulation est constant : $\forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} = 1$.

Vérifier que $|A_N(x, x)| = \nu_0(\nu_0 - 1)/2N$. On suppose désormais que x est tel que $\nu_0 \geq 2$ de façon à ce que $|A_N(x, x)| > 0$ et on pose $\lambda = \nu_0^2/2N$. On se donne $(\tau_m, \beta_m, \gamma_m, U_m, m \geq 1)$ une suite de variables indépendantes et identiquement distribuées avec τ_1 exponentielle de paramètre λ , β_1 et γ_1 de loi $(x(j)/\nu_0, j \in \mathbb{N}^*)$ et U_1 uniforme sur $[0, 1]$ indépendantes. On pose

$$\sigma = \inf\{m \geq 1 : \beta_m \neq \gamma_m \text{ ou } U_m \geq 1/x(\beta_m)\}$$

avec les conventions $1/0 = +\infty$ et $\inf \emptyset = +\infty$.

- a) Montrer que $\mathbb{P}(\beta_1 = \gamma_1, U_1 < 1/x(\beta_1)) = 1/\nu_0$ et en déduire que la variable σ est finie presque sûrement.

On pose $T = \sum_{m=1}^{\sigma} \tau_m$ et $Y = x + e_{\beta_{\sigma} + \gamma_{\sigma}} - e_{\beta_{\sigma}} - e_{\gamma_{\sigma}}$.

b) Montrer que pour $u \in \mathbb{R}$ et $j, k \in \mathbb{N}^*$

$$\mathbb{E} [e^{iuT} \mathbf{1}_{\{\beta_\sigma=j, \gamma_\sigma=k\}}] = \frac{\nu_0(\nu_0-1)/2N}{\nu_0(\nu_0-1)/2N - iu} \times \frac{x(j)(x(k) - \mathbf{1}_{\{k=j\}})}{\nu_0(\nu_0-1)}.$$

Conclure que T est une variable exponentielle de paramètre $|A_N(x, x)|$ indépendante de Y qui suit la loi $(\mathbf{1}_{\{y \neq x\}} A_N(x, y) / |A_N(x, x)|)_{y \in E}$.

2. On suppose maintenant que le noyau de coagulation est multiplicatif : $\forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} = jk$.

Vérifier que $A_N(x, x)$ est non nul si et seulement si $\nu_0 \geq 2$. On se place désormais sous cette condition. Montrer que $|A_N(x, x)| = (\nu_1^2 - \nu_2)/2N$. On pose $\lambda = \nu_1^2/2N$ et on se donne $(\tau_m, \beta_m, \gamma_m, U_m, m \geq 1)$ et σ définis comme dans le cas du noyau de coagulation constant à ceci près que β_m et γ_m sont distribuées suivant la probabilité $(jx(j)/\nu_1, j \in \mathbb{N}^*)$.

a) Montrer que $\mathbb{P}(\beta_1 = \gamma_1, U_1 < 1/x(\beta_1)) = \nu_2/\nu_1^2$ et en déduire que la variable σ est finie presque sûrement. On définit alors T et Y comme dans le cas du noyau de coagulation constant.

b) Montrer que pour $u \in \mathbb{R}$ et $j, k \in \mathbb{N}^*$

$$\mathbb{E} [e^{iuT} \mathbf{1}_{\{\beta_\sigma=j, \gamma_\sigma=k\}}] = \frac{(\nu_1^2 - \nu_2)/2N}{(\nu_1^2 - \nu_2)/2N - iu} \times \frac{jx(j)k(x(k) - \mathbf{1}_{\{k=j\}})}{\nu_1^2 - \nu_2}.$$

Conclure que T est une variable exponentielle de paramètre $|A_N(x, x)|$ indépendante de Y qui suit la loi $(\mathbf{1}_{\{y \neq x\}} A_N(x, y) / |A_N(x, x)|)_{y \in E}$.

3. On suppose enfin que le noyau de coagulation est additif : $\forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} = j + k$.

Vérifier que $|A_N(x, x)| = \nu_1(\nu_0 - 1)/N$. On suppose $\nu_0 \geq 2$, on pose $\lambda = \nu_1\nu_0/N$ et on se donne $(\tau_m, \beta_m, \gamma_m, U_m, m \geq 1)$ et σ définis comme dans le cas du noyau de coagulation constant à ceci près que β_m (mais pas γ_m) est distribuée suivant la probabilité $(jx(j)/\nu_1, j \in \mathbb{N}^*)$.

a) Montrer que $\mathbb{P}(\beta_1 = \gamma_1, U_1 < 1/x(\beta_1)) = 1/\nu_0$ et en déduire que la variable σ est finie presque sûrement. On définit alors T et Y comme dans le cas du noyau de coagulation constant.

b) Montrer que pour $u \in \mathbb{R}$ et $j, k \in \mathbb{N}^*$

$$\mathbb{E} [e^{iuT} \mathbf{1}_{\{\beta_\sigma=j, \gamma_\sigma=k\}}] = \frac{\nu_1(\nu_0-1)/N}{\nu_1(\nu_0-1)/N - iu} \times \frac{jx(j)(x(k) - \mathbf{1}_{\{k=j\}})}{\nu_1(\nu_0-1)}.$$

Conclure que T est une variable exponentielle de paramètre $|A_N(x, x)|$ indépendante de Y qui suit la loi $(\mathbf{1}_{\{y \neq x\}} A_N(x, y) / |A_N(x, x)|)_{y \in E}$.



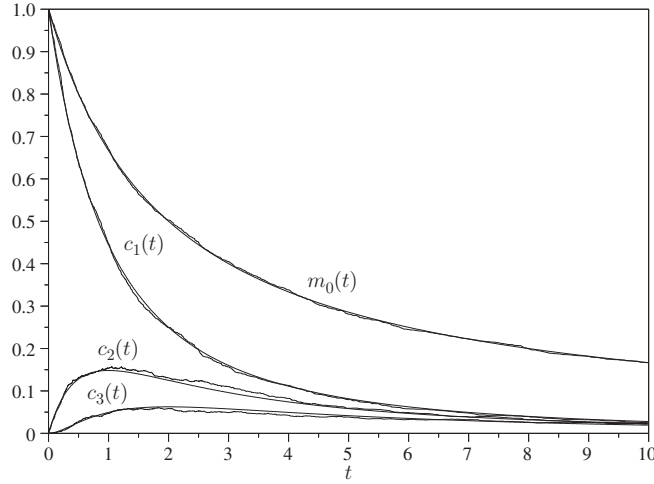


Fig. 12.4. Comparaison de la solution exacte (12.13) ($K_{j,k} = 1$, $F_{j,k} = 0$, $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$) et de la solution approchée par le processus de Marcus-Lushnikov pour $N = 2000$

Résultats numériques

La figure 12.4 illustre la convergence de la solution approchée construite grâce au processus de Marcus-Lushnikov vers la solution (12.13) de l'équation sans fragmentation pour le noyau de coagulation constant $K_{j,k} = 1$ et la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$. La concentration totale $m_0(t)$ est bien sûr approchée par $m_0^N(t) = \frac{1}{N} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} X_t^N(n)$. Dans le cas du noyau de coagulation additif, on obtient des résultats tout à fait similaires.

Dans le cas du noyau de coagulation multiplicatif $K_{j,k} = jk$, en absence de fragmentation et pour la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$, la solution approchée construite grâce au processus de Marcus-Lushnikov ne converge vers la solution exacte (12.25) que jusqu'au temps de gélification $t = 1$. On peut démontrer (voir [4]) que pour tout $t \geq 0$, $c_n^N(t)$ converge vers $\frac{1}{n} \frac{(nt)^{n-1}}{n!} e^{-nt}$. Pour tout $t \geq 0$, la concentration totale $\tilde{m}_0(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \frac{1}{n} \frac{(nt)^{n-1}}{n!} e^{-nt}$ et la concentration massique totale $\tilde{m}_1(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \frac{(nt)^{n-1}}{n!} e^{-nt}$ associées à cette limite sont, d'après le paragraphe 4.4, respectivement égales à $\mathbb{E}[1/Y_t]$ et $\mathbb{P}(Y_t < +\infty)$, où la variable aléatoire Y_t suit la loi de la population totale du processus de Galton-Watson avec la loi de Poisson de paramètre t comme loi de reproduction. Pour $t > 1$, $\tilde{m}_1(t) = \mathbb{P}(Y_t < +\infty)$ est égal à la probabilité d'extinction η_t pour ce processus de Galton-Watson : η_t est l'unique solution dans $]0, 1[$ de l'équation $e^{t(\eta_t - 1)} = \eta_t$. Par ailleurs, d'après le lemme 4.4.1, la fonction génératrice $s \in [0, 1[\mapsto F(s)$ de Y_t est l'inverse de la fonction $u \in [0, \eta_t[\mapsto \varphi(u) = ue^{t(1-u)}$, et en raisonnant comme dans la remarque 12.1.21, on obtient que $\tilde{m}_0(t) = \mathbb{E}[1/Y_t] = \eta_t(1 - t\eta_t/2)$. La figure 12.5 illustre

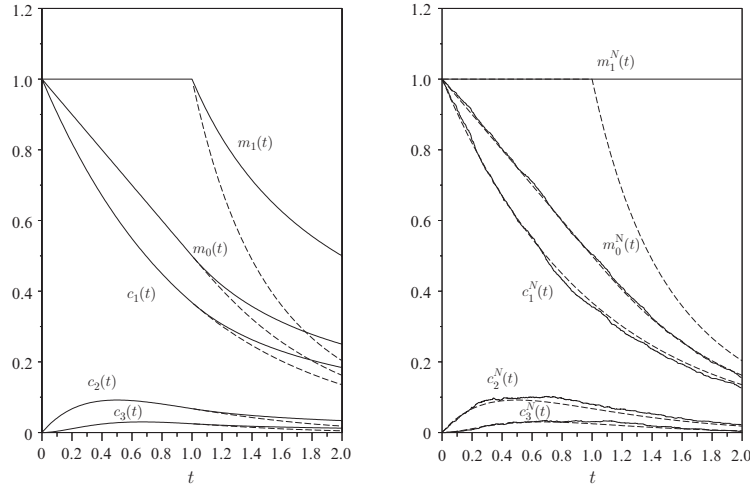


Fig. 12.5. À gauche, comparaison de la solution exacte (12.25) (trait plein) et de la limite (pointillés) de la solution approchée grâce au processus de Marcus-Lushnikov. À droite comparaison de la solution approchée pour $N = 2000$ et de sa limite

la convergence de $c_n^N(t)$ vers sa limite (seule $m_1^N(t) = \frac{1}{N} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n X_t^N(n) = 1$ ne converge pas vers $\tilde{m}_1(t)$). Le processus de Marcus-Lushnikov n'est donc pas capable de reproduire le phénomène de transition de phase à $t = 1$.

12.3.2 Le processus de transfert de masse

Pour le processus de Marcus-Lushnikov, en absence de fragmentation ($F = 0$), le nombre de molécules de polymères $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} X_t^N(n)$ décroît au fur et à mesure des coagulations. L'évolution s'arrête même lorsqu'il ne reste plus qu'une molécule. Cela entraîne que la qualité de l'approximation de la solution $c_n(t)$ de (12.27) par $c_n^N(t) = X_t^N(n)/N$ se dégrade avec t . C'est pour éviter ce phénomène qu'a été introduit le processus de transfert de masse [2, 12, 7] : ce dernier consiste à simuler une autre chaîne de Markov à temps continu dont les transitions préservent le nombre de polymères présents et ne respectent donc pas la physique des phénomènes de coagulation et de fragmentation.

Existence du processus

On suppose que la condition initiale de (12.27) vérifie $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(0) = 1$, c'est-à-dire que $(p_n(0) = n c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ est une probabilité. On peut s'y ramener dès que $\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n c_n(0) \in]0, +\infty[$, quitte à modifier le noyau de coagulation. En effet, d'après la remarque 12.2.3 pour le choix $\beta = 1/\alpha = \mu_1$, si $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de (12.27) alors $(c_n(t)/\mu_1, t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est solution de l'équation de coagulation fragmentation pour le noyau de coagulation modifié $\mu_1 K$ et le noyau de fragmentation F .

Effectuer le changement de variable $p_n(t) = nc_n(t)$ dans (12.27) est assez naturel du fait que la masse est conservée lors des coagulations et des fragmentations. En outre si la concentration massique totale de $(c_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ est constante alors pour tout $t \geq 0$, $(p_n(t), n \in \mathbb{N}^*)$ sera une probabilité. Pour $n \in \mathbb{N}^*$ et $t \geq 0$, $p_n(t)$ représente alors la proportion de masse qui correspond aux polymères de taille n .

En multipliant (12.27) par n et en utilisant la symétrie des noyaux K et F , on obtient que

$$\begin{aligned} \dot{p}_n(t) &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k+k) \left(K_{n-k,k} c_{n-k}(t) c_k(t) - \frac{F_{n-k,k}}{n} p_n(t) \right) \\ &\quad - \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \left(\frac{K_{n,k}}{k} p_n(t) p_k(t) - \frac{n F_{n,k}}{n+k} p_{n+k}(t) \right) \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \left(K_{n-k,k} c_{n-k}(t) c_k(t) - \frac{F_{n-k,k}}{n} p_n(t) \right) \\ &\quad - \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \left(\frac{K_{n,k}}{k} p_n(t) p_k(t) - \frac{n F_{n,k}}{n+k} p_{n+k}(t) \right) \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{K_{n-k,k}}{k} p_{n-k}(t) p_k(t) - \frac{(n-k) F_{n-k,k}}{n} p_n(t) \right) \\ &\quad - \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \left(\frac{K_{n,k}}{k} p_n(t) p_k(t) - \frac{n F_{n,k}}{n+k} p_{n+k}(t) \right). \end{aligned}$$

Si on pose $\tilde{K}_{j,k} = K_{j,k}/k$ et $\tilde{F}_{j,k} = j F_{j,k}/(j+k)$, le système satisfait par $(p_n(t), t \geq 0, n \in \mathbb{N}^*)$ et qui porte le nom d'équations de transfert de masse s'écrit : pour tout $n \in \mathbb{N}^*$,

$$\begin{aligned} \dot{p}_n(t) &= \sum_{k=1}^{n-1} \left(\tilde{K}_{n-k,k} p_{n-k}(t) p_k(t) - \tilde{F}_{n-k,k} p_n(t) \right) \\ &\quad - \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \left(\tilde{K}_{n,k} p_n(t) p_k(t) - \tilde{F}_{n,k} p_{n+k}(t) \right). \end{aligned} \quad (12.29)$$

Pour $N \in \mathbb{N}^*$, on lui associe le générateur infinitésimal suivant sur E :

$$\forall y \neq x, \tilde{A}_N(x, y) = \begin{cases} \tilde{F}_{j,k} x(j+k) & \text{si } y = x + e_j - e_{j+k} \text{ où } j, k \in \mathbb{N}^* \\ \frac{1}{N} \tilde{K}_{j,k} x(j) x(k) & \text{si } y = x - e_j + e_{j+k} \text{ où } j, k \in \mathbb{N}^* \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\text{et } \tilde{A}_N(x, x) = - \sum_{j,k \in \mathbb{N}^*} \tilde{F}_{j,k} x(j+k) - \frac{1}{N} \sum_{j,k \in \mathbb{N}^*} \tilde{K}_{j,k} x(j) x(k).$$

Notons que les transitions $x \in E \rightarrow y \in E$ correspondant à ce générateur sont telles que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} x(n) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} y(n)$ à la différence du processus de Marcus-Lushnikov pour lequel $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} nx(n) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} ny(n)$. Par exemple, partant de l'état $e_1 + e_3 = (1, 0, 1, 0, \dots, 0, \dots)$ qui représente un monomère et 1/3 de polymère de taille 3, on peut passer en une transition

- à l'état $2e_1$ qui représente deux monomères si $F_{1,2} > 0$,
- à l'état $e_1 + e_2$ qui représente un monomère et 1/2 polymère de taille 2 si $F_{1,2} > 0$,
- à l'état $e_2 + e_3$ qui représente 1/2 polymère de taille 2 et 1/3 de polymère de taille 3 si $K_{1,1} > 0$,
- à l'état $e_3 + e_4$ qui représente 1/3 de polymère de taille 3 et 1/4 de polymère de taille 4 si $K_{1,3} > 0$,
- à l'état $e_1 + e_4$ qui représente 1 monomère et 1/4 de polymère de taille 4 si $K_{1,3} > 0$,
- à l'état $e_1 + e_6$ qui représente 1 monomère et 1/6 de polymère de taille 6 si $K_{3,3} > 0$.

Pour $x_0 \in E$ tel que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} x_0(n) \geq 1$, à la différence de l'ensemble E_{x_0} introduit pour le processus de Marcus-Lushnikov dans la démonstration du lemme 12.3.1, l'ensemble $\tilde{E}_{x_0} = \{y \in E : \sum_{n \in \mathbb{N}^*} y(n) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} x_0(n)\}$ des points que peut visiter la chaîne trace en temps discret $(\tilde{Z}_l, l \in \mathbb{N})$ de matrice de transition $\mathbf{1}_{\{y \neq x\}} A_N(x, y) / |A_N(x, x)|$ conditionnellement à $\tilde{Z}_0 = x_0$ n'est pas fini. Et si on ne fait pas d'hypothèse sur le noyau de coagulation K , le processus \tilde{X}_t^N associé à \tilde{A}_N par la construction du paragraphe 8.1 n'est pas nécessairement une chaîne de Markov à temps continu sur E , comme le montre l'exemple suivant.

Exemple : Supposons que $K_{j,k} = (jk)^\alpha$ où $\alpha > 1/2$, $F_{j,k} = 0$, $N = 1$ et $\tilde{X}_0^1 = \tilde{Z}_0 = e_1$ (c'est-à-dire que $\tilde{X}_0^1(n) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$). La chaîne trace en temps discret $(\tilde{Z}_l, l \in \mathbb{N})$ prend ses valeurs dans $\tilde{E}_{e_1} = \{e_j, j \in \mathbb{N}^*\}$. On vérifie facilement que pour $j \in \mathbb{N}^*$ et $y \in E$, $\mathbf{1}_{\{y \neq e_j\}} \tilde{A}_1(e_j, y) / |\tilde{A}_1(e_j, e_j)| = \mathbf{1}_{\{y=e_{2j}\}}$. Ainsi la chaîne trace est déterministe : $\forall l \in \mathbb{N}$, $\tilde{Z}_l = e_{2^l}$. On a $\tilde{K}_{j,k} = j^\alpha k^{\alpha-1}$ d'où $1/|\tilde{A}_1(\tilde{Z}_l, \tilde{Z}_l)| = 2^{(1-2\alpha)l}$. Comme cette série est sommable, on déduit du lemme 8.1.1 que les temps de sauts de $(\tilde{X}_t^N, t \geq 0)$ s'accumulent : ainsi il y a explosion en temps fini.

De façon générale, on peut analyser le comportement de la chaîne trace en temps discret lorsque les temps de saut s'accumulent.

Lemme 12.3.4. *Soit $x_0 \in E$ tel que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} x_0(n) \in \mathbb{N}^*$. Conditionnellement à $\tilde{X}_0^N = \tilde{Z}_0 = x_0$, lorsque les temps de sauts successifs $(\tilde{S}_l, l \in \mathbb{N})$ de $(\tilde{X}_t^N, t \geq 0)$ s'accumulent i.e. $\lim_{l \rightarrow +\infty} \tilde{S}_l = \tau_1 < +\infty$, alors la suite $(\tilde{M}_l = \max\{i \in \mathbb{N}^* : \tilde{Z}_l(i) > 0\}, l \in \mathbb{N})$ tend vers l'infini avec l . En outre, si le noyau de coagulation est sous-multiplicatif au sens où*

$$\exists \kappa > 0, \forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} \leq \kappa jk \quad (12.30)$$

alors pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, la suite $(\tilde{Z}_l(n), l \in \mathbb{N})$ admet une limite $\tilde{Z}_\infty(n)$; \tilde{Z}_∞ est un élément de E tel que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{Z}_\infty(n) \leq \sum_{n \in \mathbb{N}^*} x_0(n) - 1$.

Démonstration. Commençons par démontrer que si la suite $(\tilde{M}_l, l \in \mathbb{N})$ ne tend pas vers l'infini, alors $\lim_{l \rightarrow +\infty} \tilde{S}_l = +\infty$, ce qui, par contraposée, est équivalent à la première assertion du lemme. Si $(\tilde{M}_l, l \in \mathbb{N})$ ne tend pas vers l'infini, il existe $I \in \mathbb{N}^*$, et $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ strictement croissante tels que $\forall j \in \mathbb{N}$, $\tilde{M}_{f(j)} \leq I$.

Comme l'ensemble $\tilde{E}_{x_0}^I = \{y \in \tilde{E}_{x_0} : \forall n \geq I+1, y(n) = 0\}$ est fini, conditionnellement à $\tilde{Z}_0 = x_0$, la suite $(|\tilde{A}_N(\tilde{Z}_{f(j)}, \tilde{Z}_{f(j)})|, j \in \mathbb{N})$ est bornée par $\max_{y \in \tilde{E}_{x_0}^I} |\tilde{A}_N(y, y)|$ qui est fini. Donc

$$+\infty = \sum_{j \in \mathbb{N}} 1/|\tilde{A}_N(\tilde{Z}_{f(j)}, \tilde{Z}_{f(j)})| \leq \sum_{l \in \mathbb{N}} 1/|\tilde{A}_N(\tilde{Z}_l, \tilde{Z}_l)|.$$

Avec le lemme 8.1.1, on en déduit que $\lim_{l \rightarrow +\infty} \tilde{S}_l = +\infty$.

On suppose désormais que (12.30) est vérifiée. On se place sur l'événement $\{\tilde{Z}_0 = x_0\} \cap \{\lim_{l \rightarrow +\infty} \tilde{S}_l < +\infty\}$ et on se donne $n \in \mathbb{N}^*$. La suite $(\tilde{Z}_l, l \in \mathbb{N})$ est à valeurs dans \tilde{E}_{x_0} . Pour tout $x \in \tilde{E}_{x_0}$,

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{y \in E \\ y(n) < x(n)}} \tilde{A}_N(x, y) &= x(n) \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{F}_{n-k, k} + \frac{x(n)}{N} \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \tilde{K}_{n, k} x(k) \\ &\leq x(n) \left(\sum_{k=1}^{n-1} \tilde{F}_{n-k, k} + \frac{\kappa n}{N} \sum_{k \in \mathbb{N}^*} x(k) \right) \\ &\leq \sum_{j \in \mathbb{N}^*} x_0(j) \left(\sum_{k=1}^{n-1} \tilde{F}_{n-k, k} + \frac{\kappa n}{N} \sum_{k \in \mathbb{N}^*} x_0(k) \right) \end{aligned}$$

où le dernier majorant ne dépend pas de x . Comme, d'après le lemme 8.1.1, $\sum_{l \in \mathbb{N}} 1/|\tilde{A}_N(\tilde{Z}_l, \tilde{Z}_l)| < +\infty$, on en déduit que si

$$\tilde{Q}_N(x, y) = \mathbf{1}_{\{y \neq x\}} \tilde{A}_N(x, y) / |\tilde{A}_N(x, x)|$$

désigne la matrice de transition de la chaîne trace, alors

$$\sum_{l \in \mathbb{N}} \sum_{\substack{y \in E \\ y(n) < \tilde{Z}_l(n)}} \tilde{Q}_N(\tilde{Z}_l, y) < +\infty.$$

Cela signifie intuitivement que les probabilités des transitions conduisant à diminuer $\tilde{Z}_l(n)$ sont faibles. On peut en déduire, mais la démonstration dépasse le cadre de ce livre que $\sum_{l \in \mathbb{N}} \mathbf{1}_{\{\tilde{Z}_{l+1}(n) < \tilde{Z}_l(n)\}} < +\infty$. Ainsi la suite $(\tilde{Z}_l(n), l \in \mathbb{N})$ ne diminue qu'un nombre fini de fois. Comme elle est à valeurs

dans $\{0, 1, \dots, \sum_{i \in \mathbb{N}^*} x_0(i)\}$ avec $\sum_{i \in \mathbb{N}^*} x_0(i) < +\infty$, on en déduit qu'elle est constante à partir d'un certain rang. Ainsi elle converge vers une limite $\tilde{Z}_\infty(n) \geq 0$.

D'après le lemme de Fatou, $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{Z}_\infty(n) \leq \sum_{n \in \mathbb{N}^*} x_0(n)$. Donc $\tilde{M}_\infty = \max\{i \in \mathbb{N}^* : \tilde{Z}_\infty(i) > 0\} < +\infty$. On a

$$\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{Z}_\infty(n) = \sum_{n=1}^{\tilde{M}_\infty} \tilde{Z}_\infty(n) = \lim_{l \rightarrow +\infty} \sum_{n=1}^{\tilde{M}_\infty} \tilde{Z}_l(n).$$

Puisque la suite $(\tilde{M}_l, l \in \mathbb{N})$ tend vers l'infini, nécessairement pour l grand, $\sum_{n=1}^{\tilde{M}_\infty} \tilde{Z}_l(n) \leq \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{Z}_l(n) - 1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} x_0(n) - 1$, ce qui conclut la démonstration. \square

D'après le lemme précédent, lorsque les sauts s'accumulent en temps fini, c'est-à-dire lorsque $\lim_{l \rightarrow +\infty} \tilde{S}_l = \tau_1 < +\infty$, nécessairement, $\max\{n \in \mathbb{N}^* : \tilde{Z}_l(n) > 0\}$ tend vers l'infini avec l . Cela signifie intuitivement qu'il se forme avant τ_1 des polymères de taille arbitrairement grande. On peut voir ce phénomène comme une traduction au niveau stochastique de la gélification.

On suppose désormais que le noyau de coagulation est sous-multiplicatif au sens (12.30). D'après le lemme qui précède, $\lim_{t \rightarrow \tau_1^-} \tilde{X}_t^N = \tilde{Z}_\infty$ avec \tilde{Z}_∞ élément de l'espace d'états E tel que $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{Z}_\infty(n) \leq \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{X}_0^N(n) - 1$. On peut poser $\tilde{X}_{\tau_1}^N = \tilde{Z}_\infty$ et définir, en reprenant la construction du paragraphe 8.1, l'évolution de \tilde{X}_t^N au delà du temps τ_1 , plus précisément jusqu'au second temps d'accumulation de sauts si ce temps est fini. Et ainsi de suite. Notons qu'il y a au plus $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{X}_0^N(n)$ temps d'accumulation de sauts puisqu'à chacun de ces temps $t \rightarrow \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{X}_t^N(n)$ diminue au moins d'une unité. Ainsi \tilde{X}_t^N est construit sur l'intervalle de temps $[0, +\infty[$ par cette procédure. Le résultat suivant tiré de [15] et que nous ne démontrerons pas assure que si le noyau de coagulation est sous-additif au sens (12.31) ci-dessous, il n'y a pas accumulation de sauts et \tilde{A}_N est bien le générateur d'une chaîne de Markov à temps continu :

Lemme 12.3.5. *Si*

$$\exists \kappa > 0, \forall j, k \in \mathbb{N}^*, K_{j,k} \leq \kappa(j+k), \quad (12.31)$$

alors pour tout $N \in \mathbb{N}^$, \tilde{A}_N est le générateur d'une chaîne de Markov à temps continu $(\tilde{X}_t^N, t \geq 0)$ sur l'espace d'états E appelée processus de transfert de masse.*

Convergence

On suppose que le noyau de coagulation est sous-additif au sens (12.31) et on se donne une suite $(\xi_i, i \in \mathbb{N}^*)$ de variables aléatoires indépendantes et

identiquement distribuées suivant $(p_n(0) = nc_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$. Pour $N \in \mathbb{N}^*$, on choisit $\tilde{X}_0^N(n) = \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{\{\tilde{\xi}_i=n\}}$ comme condition initiale pour la chaîne \tilde{X}_t^N de générateur \tilde{A}_N . Pour $N, n \in \mathbb{N}^*$ et $t \geq 0$, on pose $p_n^N(t) = \tilde{X}_t^N(n)/N$. La loi forte des grands nombres assure que p.s., pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $p_n^N(0)$ tend vers $p_n(0) = nc_n(0)$ lorsque $N \rightarrow +\infty$. Comme p.s. $(p_n^N(0), n \in \mathbb{N}^*)$ est une probabilité, avec le lemme D.2 et le théorème de convergence dominée, on en déduit que $\mathbb{E} [\sum_{n \in \mathbb{N}^*} |p_n^N(0) - p_n(0)|]$ converge vers 0 lorsque $N \rightarrow +\infty$.

En raisonnant comme nous l'avons fait dans le cas du processus de Marcus-Lushnikov, on peut se convaincre que $p_n^N(t)$ va converger vers une solution $p_n(t)$ de (12.29) lorsque $N \rightarrow +\infty$. Au vu du changement de variables effectué pour obtenir (12.29), $p_n(t)$ est alors de la forme $nc_n(t)$ où $c_n(t)$ est solution de (12.27). Le résultat suivant tiré de [15] et que nous ne démontrerons pas, assure la convergence attendue sous une hypothèse d'intégrabilité renforcée pour $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$.

Théorème 12.3.6. *Supposons que la condition initiale $(c_n(0), n \in \mathbb{N}^*)$ est telle que $\mu_2 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^2 c_n(0) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n p_n(0) < +\infty$ et que le noyau de coagulation est sous-additif au sens (12.31).*

Alors si $(c_n(t), t \geq 1, n \in \mathbb{N}^)$ désigne l'unique solution de (12.27) donnée par le théorème 12.2.4,*

$$\forall T > 0, \lim_{N \rightarrow +\infty} \mathbb{E} \left[\sup_{t \in [0, T]} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} |p_n^N(t) - nc_n(t)| \right] = 0.$$

Simulation

Comme dans le cas du processus de Marcus-Lushnikov, pour des noyaux spécifiques, on peut générer astucieusement la chaîne trace en temps discret comme le montre l'exercice suivant :

Exercice 12.3.7. Soit $x \in E$. Pour $l \in \{-1, 0, 1\}$, on pose $\nu_l = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^l x(n)$. Soit β_0 et γ_0 de loi $(x(n)/\nu_0, n \in \mathbb{N}^*)$, β_1 de loi $(x(n)/n\nu_{-1}, n \in \mathbb{N}^*)$ et γ_1 de loi $(nx(n)/\nu_1, n \in \mathbb{N}^*)$. Toutes ces variables aléatoires sont supposées indépendantes.

Le noyau de fragmentation F est supposé nul.

1. Dans le cas du noyau de coagulation constant $K_{j,k} = 1$, vérifier que $|\tilde{A}_N(x, x)| = \nu_0 \nu_{-1}/N$ et que $Y = x + e_{\gamma_0 + \beta_1} - e_{\gamma_0}$ suit la loi

$$(\mathbf{1}_{\{y \neq x\}} \tilde{A}_N(x, y) / |\tilde{A}_N(x, x)|)_{y \in E}.$$

2. Dans le cas du noyau de coagulation multiplicatif $K_{j,k} = jk$, vérifier que $|\tilde{A}_N(x, x)| = \nu_0 \nu_1/N$ et que $Y = x + e_{\gamma_1 + \beta_0} - e_{\gamma_1}$ suit la loi $(\mathbf{1}_{\{y \neq x\}} \tilde{A}_N(x, y) / |\tilde{A}_N(x, x)|)_{y \in E}$.

3. Dans le cas du noyau de coagulation additif $K_{j,k} = j + k$, on se donne indépendamment de $\beta_0, \beta_1, \gamma_0$ et γ_1 une variable aléatoire α de loi de Bernoulli de paramètre $\nu_1\nu_{-1}/(\nu_0^2 + \nu_1\nu_{-1})$. Vérifier que $|\tilde{A}_N(x, x)| = (\nu_0^2 + \nu_1\nu_{-1})/N$ et que $Y = x + e_{\beta_\alpha + \gamma_\alpha} - e_{\gamma_\alpha}$ suit la loi

$$(\mathbf{1}_{\{y \neq x\}} \tilde{A}_N(x, y) / |\tilde{A}_N(x, x)|)_{y \in E}.$$

◆

Résultats numériques

La figure 12.6 illustre la convergence de la solution approchée construite grâce au processus de transfert de masse vers la solution (12.13) de l'équation sans fragmentation pour le noyau de coagulation constant $K_{j,k} = 1$ et la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$. La concentration $c_n(t)$ de polymères de taille n est approchée par $p_n^N(t)/n = \tilde{X}_t^N(n)/(Nn)$. La concentration totale $m_0(t)$ est approchée par $\frac{1}{N} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \frac{\tilde{X}_t^N(n)}{n}$.

Dans le cas du noyau de coagulation multiplicatif $K_{j,k} = jk$, en absence de fragmentation et pour la condition initiale $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$, il y a accumulation des sauts pour le processus de transfert de masse au voisinage du temps de gélification $t = 1$. Il n'est pas possible de simuler le processus au delà de ce temps d'accumulation. Pour remédier à cette difficulté, on peut choisir de supprimer tous les polymères de taille supérieure

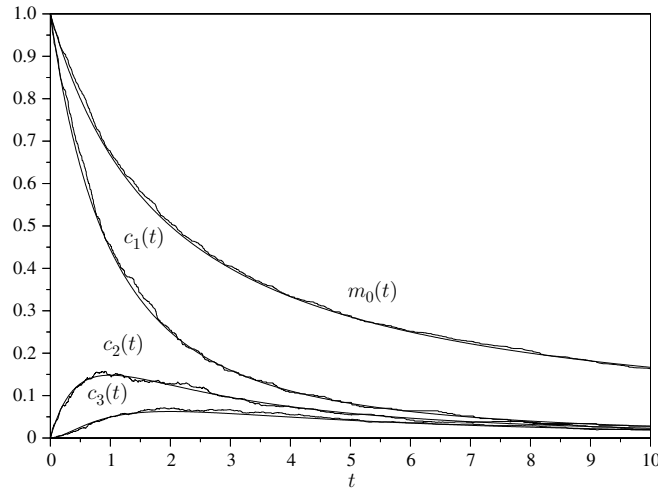


Fig. 12.6. Comparaison de la solution exacte (12.13) et de la solution approchée par le processus de transfert de masse pour $N = 500$

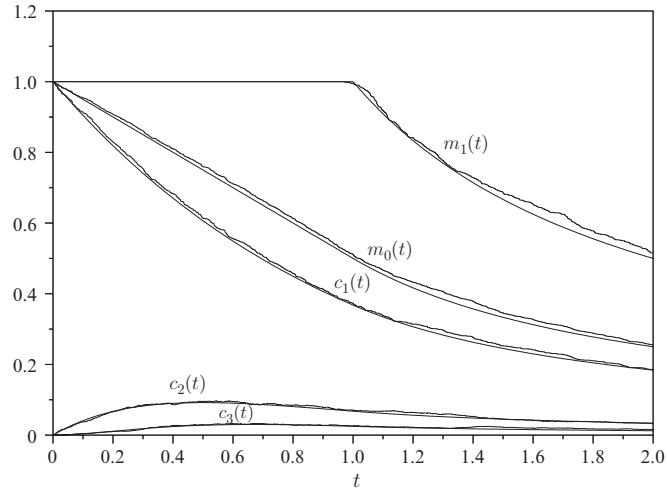


Fig. 12.7. Comparaison de la solution exacte (12.25) et de la solution approchée par le processus de transfert de masse modifié pour $N = 1000$

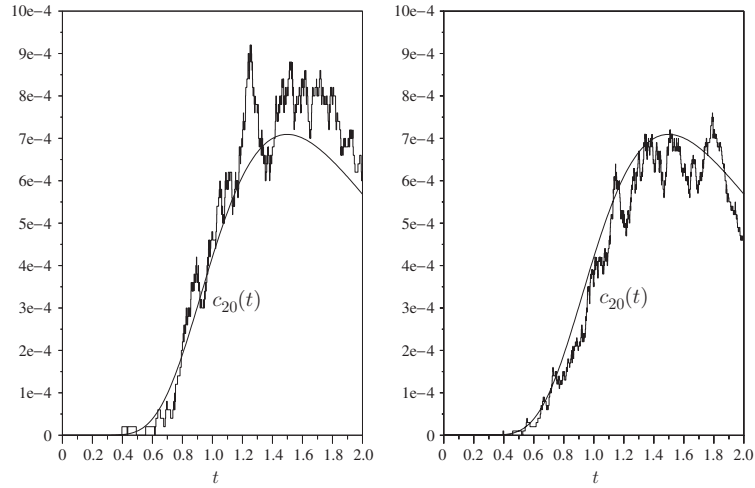


Fig. 12.8. Comparaison de $c_{20}(t)$ donné par (12.19) et de son approximation par le processus de Marcus-Lushnikov (resp. transfert de masse) avec $N = 50\,000$ à gauche (resp. avec $N = 5\,000$ à droite)

à N qui se forment : $\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{X}_t^N(n)$ décroît alors avec le temps et on peut approcher $m_1(t)$ (resp. $m_0(t)$) par $\frac{1}{N} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \tilde{X}_t^N(n)$ (resp. $\frac{1}{N} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \frac{\tilde{X}_t^N(n)}{n}$). La figure 12.7 illustre la convergence de la solution approchée construite à partir de ce processus de transfert de masse modifié. À la différence du processus de Marcus-Lushnikov, le processus de transfert de masse, convenablement

modifié pour éviter l'accumulation des sauts, est capable de rendre de compte du phénomène de transition de phase à $t = 1$.

La figure 12.8, illustre sur l'exemple de la solution 12.19 ($K_{j,k} = j + k$, $F_{j,k} = 0$, $c_n(0) = \mathbf{1}_{\{n=1\}}$) la constatation suivante : pour avoir une précision analogue pour la concentration de polymères de taille 20, il faut choisir N environ 10 fois plus grand pour le processus de Marcus-Lushnikov que pour le processus de transfert de masse. Cela s'explique par le fait que lorsque $X_t^N(n)$ a un saut d'amplitude 1, alors $c_n^N(t)$ a un saut d'amplitude $1/N$ tandis que lorsque $\tilde{X}_t^N(n)$ a un saut d'amplitude 1, $p_n^N(t)/n$ a un saut d'amplitude $1/Nn$.

En conclusion, pour une même valeur de N , la simulation du processus de transfert de masse permet d'approcher plus précisément les concentrations de polymères de taille grande que la simulation du processus de Marcus-Lushnikov. En revanche, elle est plus coûteuse en temps de calcul, notamment parce que le nombre de molécules de polymères décroît au cours du temps dans le processus de Marcus-Lushnikov et pas dans le processus de transfert de masse.

Références

1. D. Aldous. Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation and coagulation) : a review of the mean-field theory for probabilists. *Bernoulli*, 5(1) : 3–48, 1999.
2. H. Babovsky. On a Monte Carlo scheme for Smoluchowski's coagulation equation. *Monte Carlo Methods Appl.*, 5(1) : 1–18, 1999.
3. J.M. Ball et J. Carr. The discrete coagulation-fragmentation equations : existence, uniqueness, and density conservation. *J. Statist. Phys.*, 61(1-2) : 203–234, 1990.
4. E. Buffet et J.V. Pulé. Polymers and random graphs. *J. Statist. Phys.*, 64(1-2) : 87–110, 1991.
5. J. Carr et F.P. da Costa. Instantaneous gelation in coagulation dynamics. *Z. Angew. Math. Phys.*, 43(6) : 974–983, 1992.
6. F.P. da Costa. Existence and uniqueness of density conserving solutions to the coagulation-fragmentation equations with strong fragmentation. *J. Math. Anal. Appl.*, 192(3) : 892–914, 1995.
7. M. Deaconu, N. Fournier et E. Tanré. A pure jump Markov process associated with Smoluchowski's coagulation equation. *Ann. Probab.*, 30(4) : 1763–1796, 2002.
8. M. Deaconu et E. Tanré. Smoluchowski's coagulation equation : probabilistic interpretation of solutions for constant, additive and multiplicative kernels. *Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci. (4)*, 29(3) : 549–579, 2000.
9. E. Debry, B. Sportisse et B. Jourdain. A stochastic approach for the simulation of the general dynamics equation for aerosols. *J. Comput. Phys.*, 184 : 649–669, 2003.

10. R. Drake. A general mathematical survey of the coagulation equation. *Int. Rev. Aerosol Phys. Chem.*, 3 : 201–376, 1972.
11. E. Allen et P. Bastien. On coagulation and the stellar mass function. *Astrophys. J.*, 452 : 652–670, 1995.
12. A. Eibeck et W. Wagner. Stochastic particle approximations for Smoluchowski's coagulation equation. *Ann. Appl. Probab.*, 11(4) : 1137–1165, 2001.
13. M.H. Ernst. Exact solutions of the nonlinear Boltzmann equation and related kinetic equations. In *Nonequilibrium phenomena, I*, volume 10 de *Stud. Statist. Mech.*, pages 51–119. North-Holland, Amsterdam, 1983.
14. I. Jeon. Existence of gelling solutions for coagulation-fragmentation equations. *Comm. Math. Phys.*, 194(3) : 541–567, 1998.
15. B. Jourdain. Nonlinear processes associated with the discrete Smoluchowski coagulation-fragmentation equation. *Markov Process. Related Fields*, 9(1) : 103–130, 2003.
16. A. Lushnikov. Evolution of coagulating systems. *J. Colloid Interface Sci.*, 45 : 549–556, 1973.
17. A.H. Marcus. Stochastic coalescence. *Technometrics*, 10 : 133–143, 1968.
18. J.R. Norris. Smoluchowski's coagulation equation : uniqueness, nonuniqueness and a hydrodynamic limit for the stochastic coalescent. *Ann. Appl. Probab.*, 9(1) : 78–109, 1999.
19. J. Seinfeld. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. Wiley, 1986.
20. J. Silk et T. Takahashi. A statistical model for the initial stellar mass function. *Astrophys. J.*, 229 : 242–256, 1979.
21. J. Silk et S. White. The development of structure in the expanding universe. *Astrophys. J.*, 228 : L59–L62, 1978.
22. M. Smoluchowski. Drei vorträge über diffusion, brownsche bewegung und koagulation von kolloidteilchen. *Phys. Z.*, 17 : 557–585, 1916.
23. S. Tavaré. Line-of-descent and genealogical processes, and their applications in population genetics models. *Theoret. Population Biol.*, 26(2) : 119–164, 1984.
24. G. Wetherill. Comparison of analytical and physical modeling of planetesimal accumulation. *Icarus*, 88 : 336–354, 1990.