Chapitre 5

La vrille des chaînes nouées

JUSQU'À PRÉSENT dans les simulations comme dans la théorie, les chaînes sont *fantômes*, c'est–à–dire que notre description autorise les déformations pour lesquelles la molécule passe au travers d'elle-même, tout en gardant un supertour $\chi = 0$. Les calculs que nous avons effectués dans le chapitre 4 sont des statistiques sur toutes les configurations. Mais lorsque l'on manipule une molécule unique, celle–ci est dans la même configuration topologique pendant toute la durée des expériences. Il faut donc se demander quelle est l'importance de l'erreur que nous avons commise en ne tenant pas compte de cette contrainte.

Afin de préciser ce que nous entendons par nœud, nous commençons par présenter quelques éléments de théorie algébrique des nœuds et la notion d'*invariant* qui permet de distinguer deux nœuds. Nous présentons ensuite les invariants les plus utilisés en physique : le polynôme de Conway et le polynôme de Jones. Nous choisissons le second qui permet une étude plus précise.

Nous classons, au cours de la simulation, les chaînes construites en fonction de leur nœud. Nous comparons ces résultats, obtenus lorsque la configuration est imposée, aux résultats du chapitre 4. Nous étudions l'influence de la classe de nœud sur les fluctuations de la vrille et nous interprétons nos résultats en décomposant la vrille en deux termes : un terme *topologique* et un terme *stochastique*.

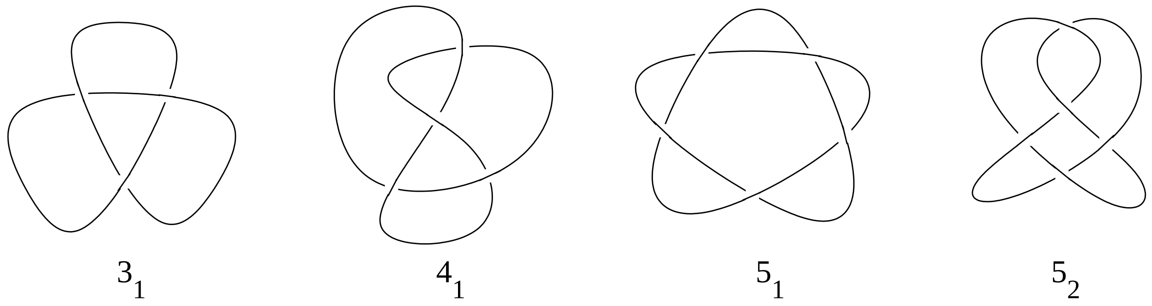


fig. 5.1: *Début de la classification des nœuds premiers jusqu'à cinq croisements. Une classification plus détaillée et jusqu'à neuf croisements se trouve dans The knot book (Adams, 1994).*

5.1 Introduction à la théorie des nœuds

5.1.a Les nœuds

Le premier scientifique à s'être intéressé aux nœuds est le mathématicien Vandermonde, mais c'est Gauss qui a fait passer l'étude des nœuds du statut de travail artisanal à celui de discipline mathématique à part entière. Il a introduit l'indice de liage que nous avons vu au chapitre 2. L'étude systématique des nœuds a été initiée par le physicien Tait vers 1860. Il était motivé par l'hypothèse due à Thomson (le futur Lord Kelvin) que les atomes étaient en réalité des nœuds d'éther (Thomson, 1867).

La classification systématique des nœuds de Tait est effectuée de la façon suivante : pour un nombre entier c donné on répertorie les diagrammes pour lesquels ce nombre est le nombre de croisements. On ne garde alors que les diagrammes qui ne peuvent pas être déformés par isotopie en un diagramme possédant moins de croisements. Cela donne un ensemble de diagrammes que l'on regroupe en classes d'isotopie. La classification répertorie en réalité ces *classes d'isotopie* que l'on appelera désormais un **nœud**. Chaque classe est distinguée par un indice i et est notée c_i. La plupart des nœuds ne sont pas équivalents à leur image dans un miroir, mais dans la nomenclature, seul l'un des deux nœuds est représenté, son image dans le miroir est notée simplement $\overline{c_i}$. Sur la figure 5.1, on présente les nœuds les plus simples pour des valeurs de $c \leqslant 5$.

5.1.b Les opérations sur les nœuds

La théorie moderne des nœuds se base sur des manipulations de diagrammes comme ceux que l'on a présentés dans la section 2.1.a. Ces manipulations permettent de construire des objets généraux. Contrairement aux transformations de Reidermeis-

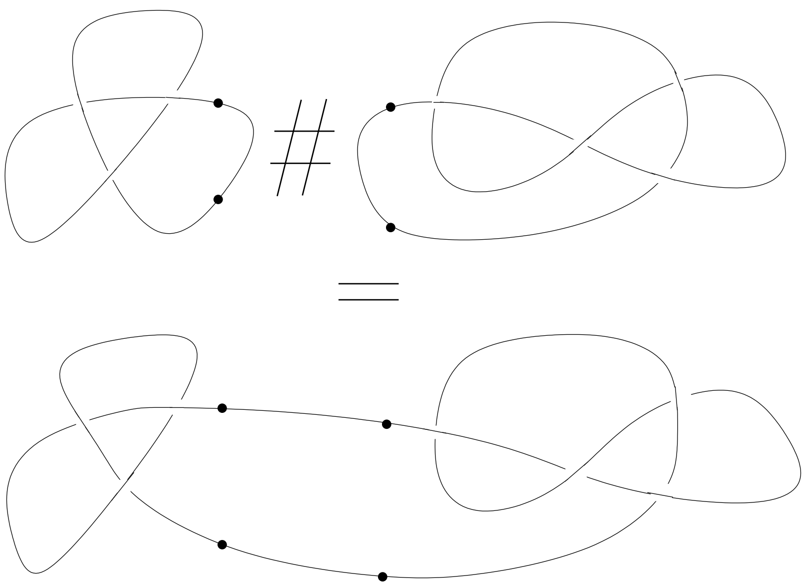


fig. 5.2: *Addition de deux nœuds. On coupe chaque nœud à un endroit et on recolle les extrémités de façon à ne former plus qu'un seul nœud. Sur le dessin on a coupé les nœuds entre les points noirs. Le résultat ne dépend pas de l'endroit où l'on coupe. Cette addition est commutative.*

ter elles modifient la nature du nœud, mais permettent d'établir des relations entre différentes classes.

Addition de nœuds

L'opération la plus simple que l'on peut effectuer sur les nœuds est appelée addition de nœuds. Si K_1 et K_2 sont deux nœuds, leur somme est notée $K_1 \# K_2$. Pour additionner deux nœuds, on les ouvre et on attache les extrémités libres de façon à ce qu'il n'y ait plus qu'une seule courbe (voir la figure 5.2). Le résultat est indépendant de l'endroit où l'on ouvre les nœuds. Ceux qui ne peuvent pas être construits comme somme de deux noeuds sont appelés **nœuds premiers**.

Les opérations chirurgicales

La notion d'opération chirurgicale* a été inventée par Conway (Conway, 1970). Il s'agit de modifier la courbe autour d'un croisement en la coupant et en recollant les quatre bouts de façon différente (à la manière d'une topoisomérase). Il existe quatre façons de coller quatre extrémités, dont trois permettent de conserver l'orientation

* « skein relation » en anglais.

des courbes. Les notations sont introduites sur la figure 5.3. Ces relations seront

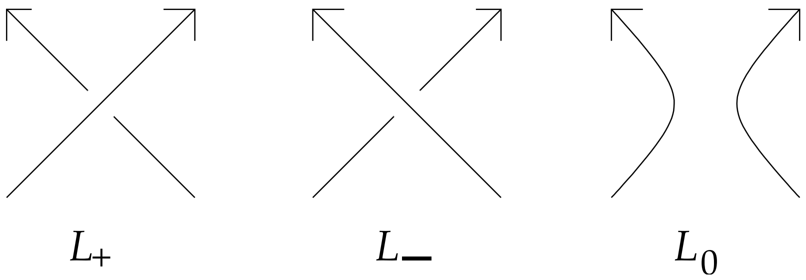


fig. 5.3: *Les relations chirurgicales qui permettent de conserver l'orientation des courbes sont celles qui ne font intervenir que des changements entre L_+, L_- et L_0.*

utiles lors de la construction d'invariants de nœuds. On verra par exemple comment construire le polynôme de Conway grâce à elles.

5.1.c Les nœuds ouverts

Les nœuds dont nous avons parlé sont fermés. Notre étude porte sur les nœuds ouverts. Tous les résultats que nous allons énoncer sont valables pour les nœuds fermés et ouverts. En effet un nœud ouvert est une courbe de $\mathcal{S}^3$ * dont un des points est l'infini.

5.2 Invariants

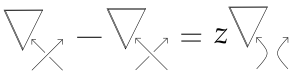
L'étude des nœuds directement à partir de leurs diagrammes est très compliquée, généralement à cause du fait qu'un nœud même simple possède une infinité de diagrammes isotopes le représentant et que certains peuvent être très complexes. C'est pourquoi les mathématiciens ont cherché des objets calculables à partir d'un diagramme de nœud et *invariants* par les transformations de Reidermeister (figure 2.4 page 18). On appelle de tels objets des **invariants** de nœud. Deux conformations isotopes (liées par une succession de transformations de Reidermeister) conduisent à la même valeur de l'invariant. On voit que le nombre de croisements n'*est pas* un invariant car il est modifié par les mouvements de Reidermeister de type I et II. Un autre type d'objets d'étude des nœuds est construit par une définition du type « nombre minimum sur tous les diagrammes isotopes », c'est le cas du nombre minimal de croisements $c(K)$ servant à établir la classification. Les invariants de nœuds sont en général des objets difficiles à calculer et de ce fait d'un usage peu aisé dans les simulations numériques. On présente dans la suite deux invariants polynômiaux de nœud

* S^3 est le compactifié de $\mathbf{R}^3$.

qui sont utilisés en physique : le polynôme d'Alexander, sous la forme de Conway qui est en réalité la seule utilisable, et le polynôme de Jones.

5.2.a *Le polynôme de Conway*

Le polynôme de Conway ∇_K d'un nœud K est un invariant polynômial de nœud construit à partir d'une opération chirurgicale. O désigne le nœud trivial, c'est à dire une courbe fermée isotope au cercle.



(I–5.1a)

$$\nabla_{\bigcirc} = 1 \qquad \text{(I–5.1b)}$$

Cette définition est complète : pour se ramener au nœud trivial il existe toujours un croisement tel que le changement de son signe diminue le nombre minimal de croisements du nœud suivant. On a ainsi une descente « récursive » vers plusieurs termes ∇_O reliés entre eux par des équations polynômiales en z.

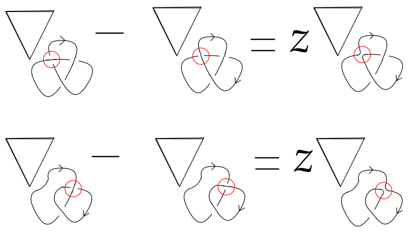
Propriétés

On désigne par $\sqcup$ la réunion de deux liens que l'on peut séparer, c'est–à–dire qui ne sont pas liés.

$$\begin{aligned} (i) \quad & \nabla_{K_1 \sqcup K_2} = 0 \\ (ii) \quad & \nabla_{K_1 \# K_2} = \nabla_{K_1} \, \nabla_{K_2} \\ (iii) \quad & \nabla_{\overline{K}} = \nabla_K \end{aligned}$$

Exemple

On calcule en exemple le polynôme de Conway du nœud de trèfle 3_1 où $H_\pm$ désigne les anneaux de Hopf : deux anneaux liés une fois ($Lk = \pm 1$). Le signe est celui de Lk.



$$\nabla_{\overline{3_1}} - \underbrace{\nabla_{0_1}}_{1} = z \nabla_{H_+}$$

$$\nabla_{H_+} - \underbrace{\nabla_{0_1 \sqcup 0_1}}_{\substack{0 \\ cf.\ \text{prop. } (i)}} = z \nabla_{0_1} = z$$

On en déduit que $\nabla_{\overline{3_1}} = \nabla_{3_1} = 1 + z^2$.

Le polynôme d'Alexander

Le polynôme d'Alexander $\triangle_K(t)$ est défini à partir du polynôme de Conway. L'égalité de deux polynômes d'Alexander est notée avec le signe $\doteq$ qui signifie que les deux diffèrent par une multiplication par une puissance de t.

$$\triangle_K(t) \doteq \nabla_K \left(t^{-1/2} - t^{1/2}\right). \qquad \text{(I–5.2)}$$

Il existe de nombreuses méthodes de calcul de ce polynôme, qui fut en réalité le premier invariant polynômial découvert (Alexander, 1928). On a pour le nœud de trèfle $\triangle_{3_1}(t) \doteq \nabla_{3_1}(t^{-1/2} - t^{1/2}) \doteq t^{-1} - 1 + t \doteq 1 - t + t^2$. C'est en 1973 que Conway a reconstruit le polynôme d'Alexander à partir d'opérations chirurgicales. Les polynômes de Conway et d'Alexander contiennent la même information sur le nœud. Cet invariant est également le premier qui a été utilisé au cours de simulations numériques (Vologodskii et coll., 1974). L'algorithme utilisé était très différent de la construction chirurgicale puisqu'il était basé sur la construction d'une matrice à partir du diagramme du nœud. En pratique dans la plupart des articles qui ont suivi l'introduction du polynôme d'Alexander (Vologodskii et coll., 1974) $\triangle_K(t)$ est calculé pour quelques valeurs de t permettant de distinguer tous les nœuds apparaissant dans les simulations. Cet invariant distingue la plupart des nœuds simples, mais ne fait pas la distinction entre K et $\overline{K}$. Malheureusement il existe des nœuds non triviaux pour lesquels $\triangle_K \doteq 1$ comme pour le nœud trivial.

5.2.b *Le polynôme de Jones*

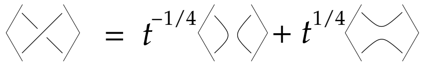
Le polynôme d'Alexander souffre de quelques limitations qui sont assez gênantes pour distinguer les nœuds dans notre classification. Il ne distingue pas le nœud trivial des autres avec certitude et il ne distingue pas un nœud de son image dans le miroir lorsque celle–ci est différente. Le polynôme de Jones va permettre de corriger ces défauts. Il a été découvert en 1985 (Jones, 1985) mais la construction présentée était alors très technique. C'est Kauffman qui a proposé une construction plus simple, basée sur une analogie avec le modèle d'Ising (Kauffman, 1987).

Sa découverte a provoqué un regain d'intérêt pour les nœuds, dont l'étude avait été délaissée par les mathématiciens. Les liens du polynôme de Jones avec la physique sont assez forts (Kauffman, 1991). En particulier des similarités de structure avec la mécanique quantique permettent le calcul d'invariants quantiques (Lickorish, 1991). E. Witten a établi un lien avec les théories de cordes (Witten, 1989). Enfin, dans le domaine mathématique, il a été généralisé en un polynôme de Laurent à deux variables, nommé HOMFLY des initiales de ses découvreurs (Freyd et coll., 1985).

Construction de Kauffman

La construction de Kauffman du polynôme de Jones se fait en deux étapes. On commence par calculer un objet appelé **crochet de Kauffman** d'un diagramme du nœud puis on le régularise à l'aide de l'indice de vrille du diagramme (voir page 22) noté ici Vr. Le calcul du crochet de Kauffman d'un diagramme s'effectue par une méthode ressemblant à une opération chirurgicale, à la différence qu'ici les liens ne sont pas orientés.*

$$\langle O \rangle = 1 \tag{I–5.3a}$$
$$\langle K \sqcup O \rangle = -\left(t^{-1/2} + t^{1/2}\right) \langle K \rangle \tag{I–5.3b}$$



(I–5.3c)

Le polynôme de Jones V_K s'obtient alors en régularisant le crochet de Kauffman de la façon suivante

$$\mathrm{V}_K(t) \overset{\text{déf.}}{=} (-1)^{Vr}\, t^{3Vr/4} \langle K \rangle\,. \tag{I–5.4}$$

Il a été démontré que les puissances de t du résultat final sont toujours toutes entières ou toutes demi–entières selon que le nombre de courbes est impair ou pair.

Exemple Le polynôme de Jones de 3_1 est $V_{3_1}(t) = -t^{-4} + t^{-3} + t^{-1}$.

Propriétés

(i) $\mathrm{V}_{K_1 \sqcup K_2} = -(t^{1/2} + t^{-1/2})\mathrm{V}_{K_1}\mathrm{V}_{K_2}$

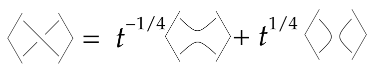
(ii) $\mathrm{V}_{K_1 \# K_2} = \mathrm{V}_{K_1}\mathrm{V}_{K_2}$

(iii) Conjecture $\mathrm{V}_K = 1 \Leftrightarrow K = O$

(iv) $\mathrm{V}_{\overline{K}}(t) = \mathrm{V}_K(t^{-1})$

La conjecture (iii), vérifiée pour tous les nœuds connus, résoud le problème de savoir si un nœud est trivial ou non. La première étape de notre classification consiste à séparer les courbes nouées des courbes non nouées grâce à cette conjecture. La propriété (iv) est intéressante car elle permet de savoir si un nœud n'est pas sa propre image dans un miroir. Les nœuds 3_1 et $\overline{3_1}$ sont différenciés, ce qui sera utile pour calculer la *vrille topologique*.

* On remarque que comme les liens ne sont pas orientés, la troisième équation s'écrit aussi



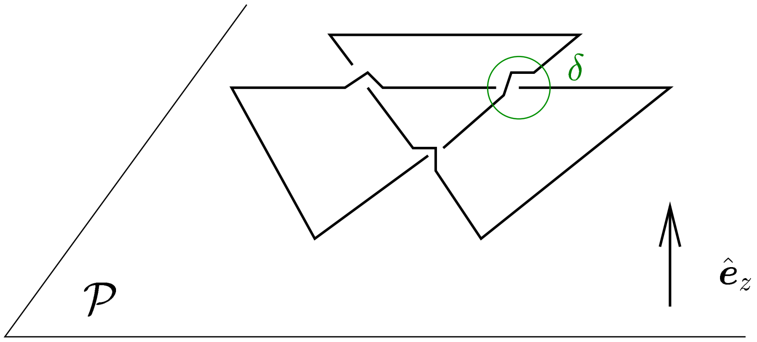


fig. 5.4: *Nœud presque plat. Toute partie hors du plan $\mathcal{P}$ est contenue dans une boule de rayon δ. Lorsque $\delta \to 0$, le nœud devient plat mais sa vrille tend vers une valeur non nécessairement nulle. Dans ce travail, cette valeur limite est appelée* vrille topologique. *Elle est définie pour une configuration d'un nœud avec le nombre minimal de croisements et est unique.*

5.3 Topologie d'une chaîne

5.3.a Identification des nœuds

Pour identifier les chaînes nouées et calculer le type de nœud qu'elles forment, nous avons écrit un programme qui calcule à partir des vecteur $\{\boldsymbol{r}_i\}_{1\leqslant i\leqslant N}$ le diagramme de la courbe refermée comme sur la figure 2.12. Ce diagramme est codé de façon à être compréhensible par un autre programme que nous avons appelé `noeud`. Ce programme interprète le codage du diagramme et effectue le calcul du polynôme de Jones avec l'algorithme de Kauffman. Lorsqu'il connaît le polynôme de Jones, `noeud` cherche dans sa base de données à quel type de nœud il correspond, et donne comme résultat ce type sous le format usuel 3_1, 4_1, etc.*

5.3.b La vrille topologique

Définition

Lorsque la chaîne est contenue dans un plan $\mathcal{P} \perp \hat{\boldsymbol{e}}_z$ partout sauf au voisinage des points de croisement, l'indice de vrille $Vr(\hat{\boldsymbol{u}})$ est le même dans presque toutes les

* Le calcul du polynôme de Jones requiert en théorie 2^c opérations, où c est le nombre de croisements du diagramme. Cependant, on améliore très facilement cette très mauvaise efficacité en simplifiant les diagrammes avec les modifications de Reidermeister de type I et II car elles permettent de diminuer c. On cherche à chaque étape à simplifier les diagrammes intermédiaires par ces deux type de modification, en prenant garde à conserver en mémoire la régularisation (I–5.4) qui est dépendante de c. Grâce à cette astuce, la plupart des calculs de polynômes de Jones se font dans des temps raisonnables même lorsque c est grand.

directions. La vrille topologique est définie à partir d'une représentation avec un nombre minimal de croisements. Il est démontré que cette définition est sans ambiguïté (Cerf, 1997; Călugăreanu, 1959)*. Le « rapprochement » autour de ces croisements se mesure avec le rayon δ de la boule dans laquelle la chaîne quitte le plan $\mathcal{P}$. Si l'on fait tendre ce rayon vers 0 la mesure de surface sur la sphère des directions $\hat{\boldsymbol{u}}$ pour lesquelles $Vr(\hat{\boldsymbol{u}}) \neq Vr(\hat{\boldsymbol{e}}_z)$ tend vers 0 et ainsi on a, grâce à l'équation (I–2.19)

$$Wr = \frac{1}{4\pi}\int_{\mathcal{S}^2} Vr(\hat{\boldsymbol{u}})\,\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{u}} \underset{\delta\to 0}{\longrightarrow} \frac{1}{4\pi}\int_{\mathcal{S}^2} Vr(\hat{\boldsymbol{e}}_z)\,\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{u}} = Vr(\hat{\boldsymbol{e}}_z) \qquad \text{(I–5.5)}$$

Comme notre objet final est plat, sa vrille devrait être nulle. Or elle ne l'est pas. Cette vrille qui ne disparaît pas est en quelque sorte la vrille de la topologie de l'objet c'est pourquoi on l'appelle la **vrille topologique** que l'on note Wr^{t}.

Exemples On voit facilement que $Wr^{\mathrm{t}}(3_1) = -3$ et $Wr^{\mathrm{t}}(4_1) = 0$.

Propriétés

(*i*) $|Wr^{\mathrm{t}}(K)| \leqslant c(K)$;
(*ii*) $Wr^{\mathrm{t}}(K)$ et $c(K)$ ont la même parité ;
(*iii*) $Wr^{\mathrm{t}}\left(\overline{K}\right) = -Wr^{\mathrm{t}}(K)$;
(*iv*) $Wr^{\mathrm{t}}(K_1 \# K_2) = Wr^{\mathrm{t}}(K_1) + Wr^{\mathrm{t}}(K_2)$.

5.3.c Pertinence du concept de vrille topologique

Nous revenons à un objet tridimensionnel. Supposons que l'on a une chaîne fermée nouée dont la vrille topologique est non nulle, par exemple pour un nœud de trèfle, $Wr^{\mathrm{t}}(3_1) = -3$. Quelle est la distribution de probabilité de la vrille d'un nœud de trèfle? Et cette distribution dépend-elle de la vrille topologique? Nous montrons que la vrille moyenne lorsque le nœud est fixé dépend de la nature du nœud et semble être proche de la vrille topologique.

Méthode

Nous réutilisons notre algorithme de croissance de polymères. Pour chaque chaîne on calcule la vrille et le type de nœud formé en la refermant de la même façon. Le type de nœud est calculé à partir du polynôme de Jones que l'on obtient en projetant la chaîne selon un plan vertical.

---

* La démonstration de cette invariance due à Călugăreanu fait appel à la relation

$$Wr + \frac{1}{2\pi}\oint \tau = Wr^{\mathrm{t}}.$$

Le polynôme de Jones permet de calculer la vrille topologique car il distingue un nœud de son image dans le miroir. Dans les cas usuels, cela est suffisant pour connaître le vrille topologique. Dans une étude où apparaîtraient des nœuds avec un nombre minimal de croisements élevé $c \geqslant 12$ on serait obligé d'utiliser un invariant plus compliqué, par exemple le polynôme à deux variables HOMFLY, parce que le polynôme de Jones risquerait d'être le même pour deux nœuds différents que nous ne pourrions pas distinguer. Dans toutes les simulations où nous nous sommes intéressés aux nœuds, cela n'a pas été nécessaire car le polynômes de Jones distingue tous les nœuds jusqu'à onze croisements†.

Nous avons trié les résultats d'une simulation numérique de 10.000 chaînes sans tension ($L/\ell_{\mathrm{p}} = 80$, $\ell_{\mathrm{p}}/b = 30$) et trié les configurations en fonction de leur nœud. Nous avons ensuite, afin d'augmenter le nombre de points, regroupé les valeurs des vrilles pour les nœuds tels que $\overline{K} \neq K$ pour ne constituer qu'un seul ensemble grâce à la relation $Wr^{\mathrm{t}}(\overline{K}) = -Wr^{\mathrm{t}}(K)$. Pour chaque ensemble on a calculé ρ_4 (voir le paragraphe 4.2.c).

Résultats

Les résultats sont présentés sur la table 5.1. On constate que la probabilité de formation d'un nœud donné décroît avec sa complexité. Seuls les résultats pour les nœuds 3_1 et 4_1 sont significatifs du fait de la rareté des autres nœuds. La valeur moyenne de la vrille semble être proche de la vrille topologique du type de nœud et la distribution des valeurs de Wr autour de cette moyenne est approximativement gaussienne comme on le voit grâce à la valeur de ρ_4. Une dizaine de nœuds plus complexes ont été observés (6_1, 6_3, $3_1\#3_1$, $3_1\#\overline{3_1}$, 7_7,...)

La vrille stochastique

On définit la **vrille stochastique** comme la différence de la vrille avec la vrille topologique de sorte que

$$Wr = Wr^{\mathrm{t}} + Wr^{\mathrm{s}}. \tag{I–5.6}$$

On cherche à exprimer les fluctuations de Wr dans nos présentations du chapitre 4 sous la forme d'une somme

$$\left\langle Wr^2 \right\rangle = \left(\left\langle (Wr^{\mathrm{t}})^2 \right\rangle + \left\langle (Wr^{\mathrm{s}})^2 \right\rangle\right) \left(1 + \mathcal{O}\left(C^{\mathrm{ts}}\right)\right). \tag{I–5.7}$$

† En pratique, dans toutes nos simulations, seuls quelques nœuds (sur plusieurs millions) n'ont pas pu être identifiés à cause d'une imperfection de l'algorithme de projection (que l'on repère car le polynôme de Jones calculé est invalide). Ces configurations sont alors retirées des statistiques.

TAB. 5.1: *Résultats statistiques sur la vrille des nœuds pour des chaînes de longueur $L/\ell_p = 80$ avec $\ell_p = 30b$. La probabilité de formation d'un nœud donné décroît avec sa complexité. On constate que la moyenne de la vrille n'est plus nulle en général, mais qu'elle est proche de la valeur de la vrille topologique. La difficulté de l'étude tient au fait que les nœuds sont rares (moins de 5% des chaînes construites sont nouées), les statistiques sont effectuées sur un petit nombre de données, en particulier les nœuds à cinq croisements.*

Type de nœud	Nombre de nœuds	Wr^{t}	$\langle Wr\rangle$	$\sqrt{\langle Wr^2\rangle - \langle Wr\rangle^2}$	ρ_4
3_1	215	-3	$-3{,}36$	2,08	3,03
4_1	24	0	0,048	1,43	2,26
5_1	8	-5	$-6{,}63$	1,28	2,64
5_2	8	-5	$-3{,}89$	2,77	2,55

où C^{ts} est la corrélation statistique des quantités Wr^{t} et Wr^{s}.

$$C^{\mathrm{ts}} \overset{\text{déf.}}{=} \frac{\langle Wr^{\mathrm{s}}\, Wr^{\mathrm{t}}\rangle - \langle Wr^{\mathrm{s}}\rangle \langle Wr^{\mathrm{t}}\rangle}{\sqrt{\left(\langle Wr^{\mathrm{s}2}\rangle - \langle Wr^{\mathrm{s}}\rangle^2\right)\left(\langle Wr^{\mathrm{t}2}\rangle - \langle Wr^{\mathrm{t}}\rangle^2\right)}}. \tag{I–5.8}$$

La corrélation calculée pour la totalité de l'échantillon de 4. 000 chaînes de 80 longueurs de persistance $\ell_{\mathrm{p}} = 30$ est $C^{\mathrm{ts}} = 0{,}04$ (270 nœuds). Pour un autre échantillon de 10. 000 chaînes de 40 longueurs de persistance $\ell_{\mathrm{p}} = 50$ on a une corrélations de $C^{\mathrm{ts}} = 0{,}02$ (240 nœuds). Ce résultat est surprenant car il indique que la vrille stochastique et la vrille topologique sont faiblement corrélées, alors qu'on aurait pu imaginer au contraire l'existence d'une forte corrélation entre ces deux quantités issues d'un même calcul*. Les résultats qui suivent supposeront que cette approximation est toujours valable, avec une précision suffisante pour que la corrélation n'influe pas sur les résultats†.

Lorsque la configuration est fixée, comme par exemple au cours des expériences de micromanipulation, Wr^{t} est fixée et on mesure Wr^{s}. Les résultats de la table 5.1 semblent indiquer que la distribution de la vrille stochastique est gaussienne. Pour que les résultats du chapitre 4 soient applicables aux expériences, il faut en toute rigueur retirer $\langle (Wr^{\mathrm{t}})^2\rangle$ à $\langle Wr^2\rangle$. $\langle (Wr^{\mathrm{t}})^2\rangle$ est la correction topologique aux fluctuations de la vrille évoquée dans (Bouchiat et Mézard, 2002). Nous calculons maintenant plus précisément cette correction et évaluons son importance relative dans les résultats numériques.

* La statistique du type de nœud, reflétée par la vrille topologique, est à température nulle et la vrille stochastique correspond à des fluctuations thermiques.

† Notons que lorsque l'on calcule cette corrélation uniquement sur les configurations nouées, on observe une décroissance $C^{\mathrm{ts}} \simeq 10(L/\ell_{\mathrm{p}})^{-1}$ pour $L/\ell_{\mathrm{p}} \leqslant 80$.

5.4 Calcul de la correction topologique

Le calcul de la correction topologique consiste à calculer $\langle (Wr^{\mathrm{t}})^2 \rangle$. La vrille topologique est définie en sommant sur les types de nœud K.

$$\left\langle (Wr^{\mathrm{t}})^2 \right\rangle = \sum_K p(K) Wr^{\mathrm{t}}(K)^2. \qquad \text{(I–5.9)}$$

L'expression de cette correction fait appel au calcul de $p(K)$, probabilité que la molécule forme le nœud K lorsque sa conformation vérifie l'équation de transfert (I–3.21). Nous commençons par étudier la probabilité $p(K)$ qui dépend *a priori* de la longueur de la molécule L/ℓ_{p} et de la force réduite $f\ell_{\mathrm{p}}$.

5.4.a Probabilité de formation d'un nœud

Le nouage aléatoire

La question du nouage aléatoire est un sujet récent de recherche. Les premiers travaux dans ce domaine ont été motivés par le nouage de l'ADN et effectués numériquement à l'aide du polynôme de Conway–Alexander (Vologodskii et coll., 1974). Puis Sumners et Whittington on effectué une étude analytique de la formation des nœuds sur réseau. Ils ont conclu que la probabilité qu'aucun nœud ne soit formé tendait exponentiellement vers 0 lorsque la longueur tend vers l'infini (Sumners et Whittington, 1988). Cependant le coefficient de l'exponentielle est faible ce qui fait qu'en pratique, pour des longueurs $L/\ell_{\mathrm{p}} \leqslant 1000$, la probabilité de former un nœud est faible (Grosberg, 2000).

Ces résultats ont été affinés par des simulations numériques suggérant que la probabilité de formation d'un nœud K donné ne dépend pas du modèle (Deguchi et Tsurusaki, 1997) en se basant sur une probabilité de la forme

$$p(K) = C(K) \left(\frac{L}{\mathcal{N}_0(K)\ell_{\mathrm{p}}} \right)^{m(K)} \exp\left(-\frac{L}{\mathcal{N}_0(K)\ell_{\mathrm{p}}} \right). \qquad \text{(I–5.10)}$$

Les coefficients à ajuster pour chaque nœud sont nombreux : $C(K)$, $\mathcal{N}_0(K)$ et $m(K)$. Ces coefficients sont également difficiles à obtenir car la probabilité de nouage est toujours très faible. Les résultats sont souvent publiés avec des intervalles de confiance assez larges.

Résultats numériques

Nous donnons ici les résultats numériques issus de nos propres simulations numériques ainsi que la dépendance avec la force de cette probabilité. On commence par tracer la probabilité de formation d'un nœud en fonction de la longueur sur la

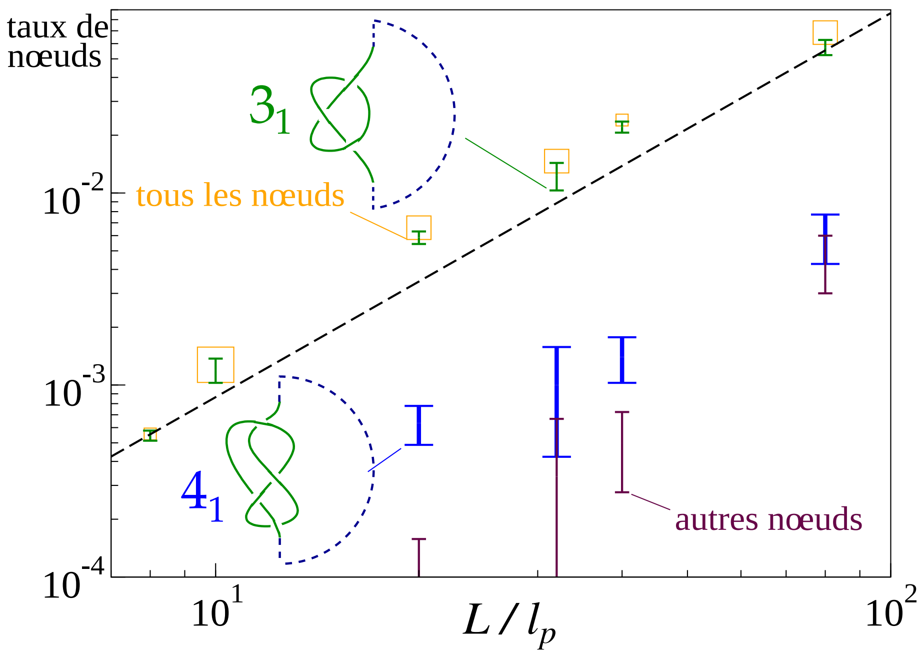


fig. 5.5: *Probabilité de nœuds pour des chaînes semi–flexibles ouvertes en fonction de la longueur. Le nœud de trèfle* 3_1 *est le plus probable, le nœud de huit* 4_1 *est assez fréquent pour les longues chaînes. Tant que* $L/\ell_p \leqslant 100$ *les autres types de nœud sont rares. Les carrés représentent la probabilité qu'un nœud se forme, l'incertitude est la taille du carré. On voit que les incertitudes sont grandes, cependant une loi semble se dégager, représentée par la droite en tirets d'équation* $p \sim (L/\ell_p)^2$. *La longueur typique de* 16 μm *pour l'ADN correspond à* $L/\ell_p = 320$.

figure 5.5. La probabilité augmente avec la longueur, comme on s'y attend. La très grande majorité des nœuds sont des nœuds de trèfle. Une loi d'échelle semble assez bien vérifiée tant que $L/\ell_{\mathrm{p}} \leqslant 100$ qui est

$$p(\text{nœud}) \sim \left(\frac{L}{\ell_{\mathrm{p}}}\right)^2 . \qquad \text{(I–5.11)}$$

Le coefficient de proportionnalité est de l'ordre de 280^{-2}. En posant $\mathcal{N}_0 = 280$, cela donne une dépendance en fonction de $L/(\mathcal{N}_0\ell_{\mathrm{p}})$, comme attendu dans l'équation (I–5.10) et où le coefficient $\mathcal{N}_0$ est proche de la valeur calculée par d'autres équipes (Deguchi et Tsurusaki, 1997; Grosberg, 2000). La longueur typique d'ADN utilisée dans les expériences est d'environ $L/\ell_{\mathrm{p}} \simeq 300 \gtrsim \mathcal{N}_0$.

5.4.b Calcul de la correction topologique

Comme presque tous ces nœuds sont des nœuds de trêfle, on estime $\langle (Wr^{\mathrm{t}})^2 \rangle$ lorsque $L/\ell_{\mathrm{p}} \leqslant 100$ d'après l'équation (I–5.9)

$$\left\langle (Wr^{\mathrm{t}})^2 \right\rangle \simeq \left(\frac{3L}{\mathcal{N}_0 \ell_{\mathrm{p}}} \right)^2 . \qquad \text{(I–5.12)}$$

Cette estimation a été vérifiée numériquement pour $L/\ell_{\mathrm{p}} \leqslant 100$. Son domaine de validité est difficile à mesurer. Les courbes trouvables dans la littérature semblent indiquer que la formule (I–5.11) est valable jusqu'à des longueurs L/ℓ_{p} de l'ordre de 1000 (Deguchi et Tsurusaki, 1997). La formule corrigée des fluctuations de la vrille s'écrit approximativement.

$$\left\langle Wr^2 \right\rangle \simeq \gamma \frac{L}{\ell_{\mathrm{p}}} - \frac{9}{\mathcal{N}_0^2} \left(\frac{L}{\ell_{\mathrm{p}}} \right)^2 \qquad \text{(I–5.13)}$$

On se rend compte que la correction relative $\langle (Wr^{\mathrm{t}})^2 \rangle / \left\langle Wr^2 \right\rangle$ reste assez faible pour $L/\ell_{\mathrm{p}} \leqslant 100$. Ce sera la zone de validité de l'équation (I–5.13). Pour une longueur $L = 100\ell_{\mathrm{p}}$ cette dernière formule estime la correction à 15% environ, ce qui est important.

5.4.c Correction topologique en fonction de la force

Nœuds d'une chaîne de blobs

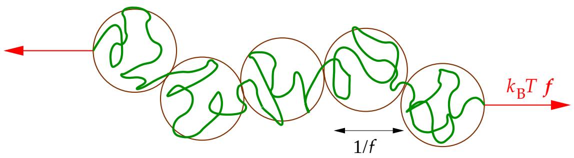


fig. 5.6: *Découpage en blobs élastiques de taille* $1/f$ *d'une chaîne sous la tension* $k_B T \boldsymbol{f}$.

Une fois encore nous devons étendre les résultats aux chaînes sous tension. Lorsque l'on applique une force f sur la molécule d'ADN, une nouvelle longueur caractéristique $1/f$ intervient. Elle correspond à la taille d'un « blob », c'est–à–dire l'extension moyenne (définie par l'équation (I–3.1)) d'une portion de la chaîne que l'on peut considérer comme une chaîne indépendante. Considérons une telle chaîne de longueur L. La longueur ℓ_{blob} de chaîne contenue dans un blob est, d'après l'équation (I–3.17)

$$\ell_{\mathrm{blob}} \overset{\text{déf.}}{\simeq} \frac{1}{2 f^2 \ell_{\mathrm{p}}} . \qquad \text{(I–5.14)}$$

Il y a environ $N_{\text{blob}} \overset{\text{déf.}}{=} 2f^2\ell_{\text{p}}\,L$ blobs. Afin de satisfaire les conditions des résultats numériques de la figure 5.5, on suppose que la condition $\ell_{\text{blob}}/\ell_{\text{p}} \in [0,100]$ est vérifiée, ce qui donne $f\ell_{\text{p}} \geqslant 0{,}07$. La probabilité qu'un nœud se forme dans un blob est d'après l'équation (I–5.11)

$$p_{\text{blob}} \simeq \left(\frac{\ell_{\text{blob}}}{\mathcal{N}_0\,\ell_{\text{p}}}\right)^2 \simeq \left(\frac{1}{2\mathcal{N}_0\,(f\ell_{\text{p}})^2}\right)^2 = \frac{1}{4\mathcal{N}_0^2}\,(f\ell_{\text{p}})^{-4} \qquad \text{(I–5.15)}$$

et la probabilité qu'il y ait n blobs noués est $p_n = \mathrm{C}^n_{N_{\text{blob}}}\,p^n_{\text{blob}}\,\left(1-p_{\text{blob}}\right)^{N_{\text{blob}}-n}$. On en déduit que le nombre moyen de blobs noués vaut

$$\langle n\rangle = \sum_{n=0}^{N_{\text{blob}}} n\,p_n = N_{\text{blob}}\,p_{\text{blob}} = \frac{1}{2\mathcal{N}_0^2}\,(f\ell_{\text{p}})^{-2}\,\frac{L}{\ell_{\text{p}}}. \qquad \text{(I–5.16)}$$

On estime la correction topologique en faisant l'hypothèse que la grande majorité des nœuds formés sont des trèfles et que les trèfles gauches et droits sont équiprobables. Cette correction est proportionnelle à la longueur, et représente donc une correction relative aux fluctuations calculées dans le chapitre 4.

$$\frac{\langle (Wr^{\text{t}})^2\rangle}{\langle Wr^2\rangle} \simeq \frac{9}{2\gamma\mathcal{N}_0^2}(f\ell_{\text{p}})^{-2} \simeq 7{,}64\times 10^{-4}\,(f\ell_{\text{p}})^{-2} \qquad \text{(I–5.17)}$$

Pour une chaîne soumise à une force de 0,1 pN la correction relative donnée par notre calcul est de 0,05 %. Les résultats du chapitre 4 dans tout le domaine expérimental ne pas modifiés.

Remarque Pour ce dernier résultat, on a négligé la possibilité que la chaîne de blob fasse un nœud (un « supernœud »), qui est très faible.

Résultats numériques

Lorsque la force appliquée à la molécule d'ADN est très grande, et que la molécule est très étirée, il n'y a pas de nœud. On étudie maintenant la proportion de nœuds en fonction de la force. On l'a tracée pour un ensemble de plusieurs échantillons de 100.000 chaînes de huit longueurs de persistance avec $\ell_{\text{p}} = 30$. L'allure générale de la courbe est semblable à celle de la fluctuation de la vrille en fonction de la force. On remarque que la courbe se comporte comme $\exp(-2f\ell_{\text{p}})$. Ici la longueur de la chaîne est trop courte pour pouvoir comparer ce résultat avec l'équation (I–5.17). La description en terme de blobs n'est valable que lorsque $f\ell_{\text{p}} \geqslant 0{,}5$ environ.

Il n'y a presque plus de nœuds pour des forces de l'ordre de $f\ell_{\text{p}} \gtrsim 1$, c'est–à–dire que dans le domaine des forces expérimentales la correction (I–5.12) est très faible et que les résultats du chapitre 4 sont corrects à une très bonne précision, même pour les chaînes courtes.

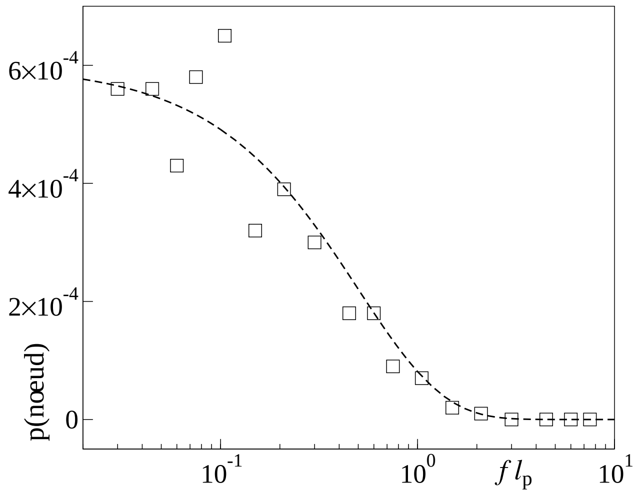


fig. 5.7: *Probabilité de présence d'un nœud en fonction de la force pour des chaînes de 8 longueurs de persistance avec* $\ell_p = 30$. *Chaque point a été calculé avec* 100. 000 *chaînes. L'incertitude sur chaque valeur est très grande. On constate cependant une allure générale proche de la courbe de fluctuation de la vrille en fonction de la force (figure 4.12). La courbe en pointillé est* $\sim \exp(-2f\ell_p)$. *Ici la description en blobs n'est valable que pour* $f\ell_p \geqslant 0{,}5$ *environ.*

5.5 Conclusion

Nous avons étudié l'influence de la formation de nœuds sur les fluctuations de la vrille et montré que les fluctuations calculées au chapitre 4 sont la somme de deux termes : les fluctuations stochastiques et les fluctuations topologiques. Seules les fluctuations stochastiques existent dans les expériences, car le secteur topologique est fixé. L'étude des fluctuations topologiques reste un sujet ouvert, dont la poursuite nécessitera une meilleure compréhension de la probabilité de formation d'un nœud donné. Cette correction est faible et ne remet pas en cause les résultats du chapitre 4 pour des forces assez grandes. On s'attend cependant à ce que la réponse mécanique d'une chaîne nouée diffère selon le type de nœud formé.

Nous avons également montré que la probabilité de formation d'un nœud décroît exponentiellement avec la force pour des chaînes courtes, et en loi de puissance pour des chaînes longues, ce qui minimise encore l'influence déjà faible des nœuds sur les fluctuations de la vrille. Il reste beaucoup de questions à traiter sur le nouage des polymères. L'énergie de courbure est déterminante dans cette étude (Fáry, 1948). Les travaux de Milnor sur l'embobinage (« crookedness ») semblent se rapprocher de notre concept de segment retourné (Milnor, 1949). Notre approche avec contrainte pourrait se révéler fructueuse pour la compréhension des mécanismes du nouage.