Métastabilité pour une EDPS en dimension 1

Florent Barret, Thèse sous la direction de Sylvie Méléard (École Polytechnique) et Anton Bovier (Université de Bonn)

CMAP
École Polytechnique
Palaiseau

19 Avril 2012, CIRM, Jeunes Probabilistes et Statisticiens, Marseille

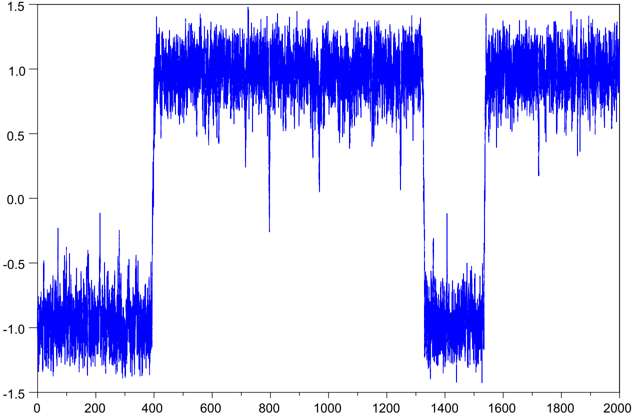
Phénomème de métastabilité d'un système dynamique :

1. présence d'un équilibre apparent (état métastable)
2. brusque changement de régime (transition)
3. stabilisation dans un autre régime.

Exemples :

- surfusion, condensation (transition de phase)
- magnétisation (modèle d'Ising)
- climatologie, neurologie, écologie...

état métastable = état "transitoire persistant".
Échelles de temps des phénomènes.

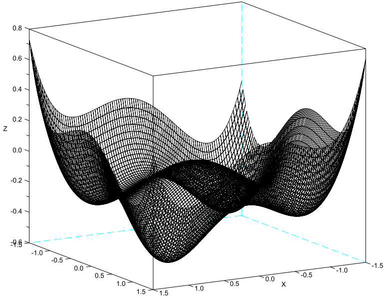


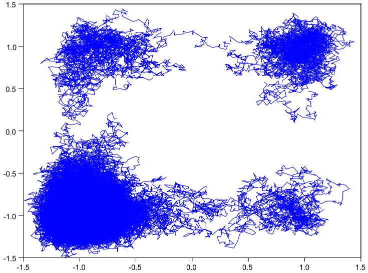
Diffusion dans un potentiel bistable :

$$\mathrm{d}X_t = (X_t - X_t^3)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}W_t$$

Questions

- Quelle est la loi des temps de transitions ?
  $\tau(B) = \inf\{t > 0, X_t \in B\}$
- Quel est la trajectoire la plus probable pour une transition ?
- Comment estimer l'espérance du temps de transition ?





Approche et résultats communs pour des processus markoviens

1. Chaînes de Markov (temps discret ou continu) : modèle d'Ising, Curie-Weiss...
2. Diffusions : équations différentielles stochastiques
3. EDP stochastiques

Résultats similaires : loi limite exponentielle, formule de Kramers.

Techniques

- Principe de grandes déviations, méthodes trajectorielles (Freidlin, Wentzell, Olivieri, Vares, Martinelli ...)
- Théorie du potentiel (Bovier, Gayrard, Klein, Eckhoff, den Hollander, Ioffe...)

Diffusion sur $\mathbb{R}^N$

$$\mathrm{d}X_t = -\nabla F(X_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}W_t$$

où

- F potentiel $\mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$
- W mouvement brownien
- ε paramètre positif (température).

Hypothèses sur F : régularité, convexité hors d'un compact.
Processus markovien réversible : mesure invariante (mesure de Gibbs)

$$\mu_\varepsilon(\mathrm{d}x) = e^{-\frac{F(x)}{\varepsilon}}\mathrm{d}x$$

Générateur infinitésimal $\mathcal{L}_\varepsilon$ défini négatif, symétrique dans $L^2(\mu_\varepsilon)$,

$$\mathcal{L}_\varepsilon f(x) = -\nabla F(x)\cdot\nabla f(x) + \varepsilon\Delta f(x) = \varepsilon e^{\frac{F(x)}{\varepsilon}}\nabla\cdot\left(e^{-\frac{F(x)}{\varepsilon}}\nabla f(x)\right)$$

Résultats de Freidlin-Wentzell (1984) : **asymptotique exponentielle**
Si m^-, m^+ uniques minima de F avec $F(m^-) \geqslant F(m^+)$ séparés par un unique point selle $\widehat{s}$, on a

$$\mathbb{E}_{m^-}(\tau_\varepsilon(B_\rho(m^+))) \asymp e^{\frac{\widehat{F}(m^-,m^+)}{\varepsilon}} = e^{\frac{F(\widehat{s})-F(m^-)}{\varepsilon}}$$

Dans des configurations plus complexes : mêmes type de résultats, approximation par une chaine de Markov (Freidlin-Wentzell 1984, Olivieri-Vares 2005).

Bovier, Eckhoff, Gayrard, Klein, 2004-2005 :

$$\mathrm{d}X_t = -\nabla F(X_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}W_t$$

Formule dite d'Eyring-Kramers (pour un potentiel F non dégénéré)

$$\mathbb{E}_{m_-}(\tau_\varepsilon(B_+)) = \frac{2\pi}{|\lambda^-(\widehat{s})|}\sqrt{\frac{|\det \mathcal{H}F(\widehat{s})|}{\det \mathcal{H}F(m^-)}}\, e^{\frac{\widehat{F}(m^-,m^+)}{\varepsilon}}(1+\Psi(\varepsilon))$$

où $\Psi(\varepsilon) = o(\left|\varepsilon \ln^3 \varepsilon\right|^{1/2})$. $\mathcal{H}F$ matrice hessienne de F et $\lambda^-(\widehat{s})$ l'unique valeur propre négative de $\mathcal{H}F(\widehat{s})$.

Lien très fort avec les premièrs valeurs propres du générateur infinitésimal.

EDPS sur $[0,1] \times \mathbb{R}+$

$$\begin{cases} \partial_t u(x,t) & = \gamma \partial^2_{xx} u(x,t) - V'(u(x,t)) + \sqrt{2\varepsilon}\dot{W} \\ u(x,0) & = u_0(x) \end{cases}$$

où

- u_0, fonction continue sur $[0,1]$
- γ un paramètre strictement positif
- W un bruit blanc espace-temps
- $\varepsilon > 0$ un paramètre (température).

Présence de conditions au bord (Dirichlet, Neumann, périodique).
$V(x) = \frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2}$ Allen-Cahn (Faris, Jona-Lasinio 1982)

$$\partial_t u(x,t) = \gamma \partial^2_{xx} u(x,t) - u^3(x,t) + u(x,t) + \sqrt{2\varepsilon}\dot{W}$$

Bruit blanc espace-temps

Analogue du mouvement Brownien à valeurs dans $L^2[0,1]$.
Définition informelle : (e_k) base hilbertienne de $L^2[0,1]$:

$$W(t) = \sum_k B_k(t) e_k. \tag{1}$$

Ne converge pas dans L^2 !
Autre définition (Walsh 86) : mesure aléatoire L^2 : pour tout $f \in L^2([0,1] \times [0,T])$ prévisible et B borélien

$$f \cdot W(B)_t = \int_0^t \int_B f(x,s) W(\mathrm{d}x, \mathrm{d}s) \tag{2}$$

est une martingale L^2

$$\langle f \cdot W(B) \rangle_t = \int_0^t \int_B f^2(x,s) \mathrm{d}x \mathrm{d}s. \tag{3}$$

Permet de définir une solution intégrale (sens faible fonctionnel) trajectorielle (solution forte en probabilité).

On peut réecrire l'EDPS

$$\partial_t u = -\frac{\delta S}{\delta u} + \sqrt{2\varepsilon} W$$

Flot de gradient en dimension infinie : pour $\phi \in H^1([0,1])$

$$S(\phi) = \int_0^1 \frac{\gamma}{2} \left|\phi'\right|^2 (x) + V(\phi(x)) \mathrm{d}x$$

Développement de Taylor à l'ordre 2 pour ϕ, k régulières :

$$S(\phi + k) = S(\phi) + \int_0^1 \frac{\delta S}{\delta \phi}(x) k(x) + \frac{1}{2} \frac{\delta^2 S}{\delta \phi^2}(k)(x) k(x) \mathrm{d}x + o(\|k\|_{C^2}^2)$$

$$\frac{\delta S}{\delta \phi}(x) = -\gamma \phi''(x) + V'(\phi(x))$$

$$\frac{\delta^2 S}{\delta \phi^2}(k) = -\gamma k'' + V''(\phi) k =: L_\phi k$$

L_ϕ : Opérateur de Strum-Liouville sur $[0, 1]$.

On se place dans la situation la plus simple : S a trois points stationnaires, solutions de

$$\frac{\delta S}{\delta \phi} = -\gamma \phi''(x) + V'(\phi(x)) = 0$$

avec les conditions au bord.

1. ϕ^+, ϕ^- deux minima
2. $\widehat{\sigma}$ l'unique point selle entre ϕ^+ et ϕ^-.

Exemple : $V(x) = \frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2}$ et $\gamma > \gamma_0 = \frac{1}{\pi^2}$ (Allen-Cahn)

- deux minima $\phi^+ = +\mathbb{1}$, $\phi^- = -\mathbb{1}$ (conditions au bord de Neumann)
- $\widehat{s} = 0$ le point selle

Résultat Principal

Pour $S(\phi^-) \geqslant S(\phi^+)$, on pose $B^+ = B_\rho^{L^2}(\phi^+) \cap \{\|\phi\|_{H^1} < C\}$ pour $\rho > 0$ autour de ϕ^+

$$\mathbb{E}_{\phi^-}\left[\tau_\varepsilon\left(B^+\right)\right] = \frac{2\pi}{|\lambda^-(\widehat{\sigma})|}\sqrt{\left|\frac{\mathrm{Det}\, L_{\hat{\sigma}}}{\mathrm{Det}\, L_{\phi^-}}\right|}e^{\widehat{S}(\phi^-,\phi^+)/\varepsilon}\left(1+\Psi(\varepsilon)\right)$$

où $\widehat{S}(\phi^-,\phi^+) = S(\widehat{\sigma}) - S(\phi^-)$. On définit

$$\frac{\mathrm{Det}\, L_{\hat{\sigma}}}{\mathrm{Det}\, L_{\phi^-}} = \prod_{k\geqslant 0}\frac{\lambda_k(\widehat{\sigma})}{\lambda_k(\phi^-)}.$$

converge car $\lambda_k = c\gamma k^2 + O(1)$ pour $k \geqslant 0$.
Analogue infini dimensionnel de la formule d'Eyring-Kramers

Exemple Allen-Cahn avec conditions de Neumann pour $\gamma > \gamma_0 = \frac{1}{\pi^2}$: on a donc $\phi^+ = \mathbb{1}$, $\phi^- = -\mathbb{1}$ et $\widehat{\sigma} = 0$. On a

$$S(\phi) = \int_0^1 \frac{\gamma}{2}\phi'^2(x) + \frac{1}{4}\phi(x)^4 - \frac{1}{2}\phi(x)^2 \mathrm{d}x$$
$$L_\phi h = -\gamma h'' + (3\phi^2 - 1)h$$

On obtient

$$S(\phi^\pm) = -\frac{1}{4} \qquad S(\widehat{\sigma}) = 0$$
$$L_{\phi^\pm} h = -\gamma h'' + 2h \qquad L_{\widehat{\sigma}} h = -\gamma h'' - h$$
$$\lambda_k(\phi^\pm) = \gamma\pi^2 k^2 + 2 \qquad \lambda_k(\widehat{\sigma}) = \gamma\pi^2 k^2 - 1$$

Déterminants Fonctionnels

Pour les conditions au bord de Neumann,

$$\frac{\mathrm{Det}\, L_{\hat\sigma}}{\mathrm{Det}\, L_{\phi^-}} = \frac{\hat s'(1)}{f^{-\prime}(1)}$$

où $\hat s$ et f^- sont solutions des problèmes de Cauchy

$$\begin{aligned} L_{\hat\sigma}\hat s &= 0 & \hat s(0) &= 1 & \hat s'(0) &= 0 \\ L_{\phi^-} f^- &= 0 & f^-(0) &= 1 & f^{-\prime}(0) &= 0. \end{aligned}$$

Exemple Allen-Cahn

$$f^-(x) = \mathrm{ch}\left(\sqrt{\frac{2}{\gamma}}x\right) \quad \widehat{s}(x) = \cos\left(\frac{x}{\sqrt{\gamma}}\right) \quad \frac{\mathrm{Det}\, L_{\hat\sigma}}{\mathrm{Det}\, L_{\phi^-}} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sin\left(\frac{1}{\sqrt{\gamma}}\right)}{\mathrm{sh}\left(\sqrt{\frac{2}{\gamma}}\right)}$$

On construit une diffusion dans $\mathbb{R}^N$ telle que $X_t^i \approx u(\frac{i}{N}, t)$.

$$S_N(u) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{\gamma}{2} N^2 (u_{i+1} - u_i)^2 + V(u_i)$$

$$\mathrm{d}X_t = -N\nabla S_N(X_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon N}\mathrm{d}W_t$$

W_t étant définie à partir du bruit blanc

$$W_t^i = \sqrt{N} W\left(\left[\frac{i}{N}, \frac{i+1}{N}\right[\right)_t$$

Puis on construit l'interpolation linéaire u^N

$$X_t^i = u^N(\frac{i}{N}, t)$$

$$\mathrm{d}X_t^i = \frac{N^2\gamma}{2}\left[X_t^{i+1} - 2X_t^i + X_t^{i-1}\right]\mathrm{d}t - V'(X_t^i)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon N}\mathrm{d}W_t^i$$

Convergence

Theorem

Pour $u_0 \in C^3([0,1]),\ T > 0,\ p \geqslant 1$

$$\mathbb{E}\left[\left\|u^N - u\right\|_{\infty,T}^p\right]^{\frac{1}{p}} \xrightarrow[N\to\infty]{} 0.$$

et pour $\eta \in]0, \frac{1}{2}[$, *il existe* ξ *variable aléatoire finie presque surement*

$$\left\|u^N - u\right\|_{\infty,T} \leqslant \frac{\xi}{N^\eta}.$$

La preuve repose sur une formulation mild de la fonction linéaire par morceaux u^N, puis on procède par localisation (à cause de la linéarité non-bornée). Travaux de Funaki (83), Gyöngy (98) et avec Millet (05).

On prouve successivement :

1. ε fixé, convergence de l'espérance du temps d'atteinte pour le système discrétisé vers le temps pour l'EDPS.

$$\lim_{N\to\infty} \mathbb{E}_{\phi_N^-}\left[\tau_\varepsilon^N\left(B^+\right)\right] = \mathbb{E}_{\phi^-}\left[\tau_\varepsilon\left(B^+\right)\right].$$

2. N fixé, calcul de l'asymptote $a_N(\varepsilon)$ du temps de transition

$$\left|\frac{1}{a_N(\varepsilon)}\mathbb{E}_{\phi_N^-}\left[\tau_\varepsilon^N\left(B^+\right)\right] - 1\right| = \psi(\varepsilon, N) < \Psi(\varepsilon) = o(\left|\varepsilon \ln^3 \varepsilon\right|^{1/2})$$

avec $\Psi(\varepsilon)$ ne dépendant pas de N.

3. la limite $N \to \infty$ pour $a_N(\varepsilon)$ donne le candidat pour le temps de transition de l'EDPS

$$a(\varepsilon) = \lim_{N\to\infty} a_N(\varepsilon).$$

L'erreur à contrôler se décompose en deux parties

1. Le calcul lui-même (méthode de Laplace en dimension infinie)

$$\left| \frac{1}{a_N(\varepsilon)} \mathbb{E}_{\nu^N_-} \left[\tau_\varepsilon^N \left(B^+ \right) \right] - 1 \right| = \psi_1(\varepsilon, N) < \Psi_1(\varepsilon)$$

où ν_N^- probabilité d'équilibre sur ∂B_N^-.

2. Puis on prouve le résultat suivant

$$\frac{1}{a_N(\varepsilon)} \left| \mathbb{E}_{\nu_N^-} \left[\tau_\varepsilon^N \left(B^+ \right) \right] - \mathbb{E}_{\phi_N^-} \left[\tau_\varepsilon^N \left(B^+ \right) \right] \right| < \Psi_2(\varepsilon).$$

Il s'agit d'un résultat d'oubli de la condition initiale (Martinelli, Scoppola, Olivieri 1989).