

Distribution quasi-stationnaire pour les processus de Langevin

Julien REYGNER, CERMICS, École des Ponts ParisTech - Champs-sur-Marne

Soient $F : \mathbf{R}^d \rightarrow \mathbf{R}^d$ un champ de forces et $\beta^{-1} > 0$ un paramètre de température. Le *processus de Langevin* $(q_t, p_t)_{t \geq 0}$ est défini dans l'espace des phases $\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d$ par les équations différentielles stochastiques

$$\begin{cases} dq_t = p_t dt, \\ dp_t = F(q_t) dt - \gamma p_t dt + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}} dB_t, \end{cases} \quad (1)$$

où $(B_t)_{t \geq 0}$ est un mouvement brownien dans \mathbf{R}^d et $\gamma > 0$ est un paramètre dit de *friction*. Ce processus est fréquemment employé en dynamique moléculaire pour la simulation de systèmes physiques en contact avec un thermostat. Lorsque $\gamma \rightarrow +\infty$, le processus changé de temps $(q_{\gamma t})_{t \geq 0}$ converge en loi vers la solution $(\bar{q}_t)_{t \geq 0}$ de l'équation différentielle stochastique

$$d\bar{q}_t = F(\bar{q}_t) dt + \sqrt{2\beta^{-1}} dB_t, \quad (2)$$

appelée *processus de Langevin suramorti*.

Dans de nombreuses situations physiques d'intérêt, les processus $(q_t, p_t)_{t \geq 0}$ et $(\bar{q}_t)_{t \geq 0}$ présentent le phénomène de séparation d'échelles de temps suivant : rapidement, ils sont attirés dans des régions, dites *métastables*, dans lesquelles ils sont distribués sous un « équilibre local » indépendant de leur passé ; sur des temps (beaucoup) plus longs, ils effectuent des transitions en apparence imprévisibles entre ces différentes régions métastables. Un exemple de métastabilité induite par des effets *énergétiques* correspond au cas où le paramètre de température β^{-1} est petit et les régions métastables pour (1) et (2) sont respectivement de la forme $O \times \mathbf{R}^d$ et O , où O est un bassin d'attraction du système dynamique déterministe $\dot{q}_t = F(q_t)$.

L'équilibre local dans une région métastable est décrit rigoureusement par la notion de *distribution quasi-stationnaire*. L'étude de cet objet est utile en particulier pour la justification et l'amélioration d'algorithmes *accélérés* qui permettent d'échantillonner efficacement des transitions entre régions métastables, sans avoir à simuler complètement les trajectoires du processus. La théorie des distributions quasi-stationnaires est bien comprise pour le processus de Langevin suramorti (2) dans des ensembles O bornés, en particulier en raison du fait que ce processus de diffusion est *uniformément elliptique*. Le but de cet exposé sera de présenter des résultats concernant le processus de Langevin (1) dans des domaines de la forme $O \times \mathbf{R}^d$, dont l'étude est rendue plus délicate par le fait que ce processus est *dégénéré*.

Ce sont des travaux en collaboration avec Tony Lelièvre et Mouad Ramil.