QSD pour les processus de Langevin

Julien Reygner

École des Ponts
ParisTech

Collaboration avec T. Lelièvre et M. Ramil

Outline

Processus de Langevin

Objectif : simulation des **systèmes moléculaires thermostatés**.

Processus de Langevin

N particules, (q_t, p_t) positions-vitesses dans l'espace des phases $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, $d = 3N$.

$$\begin{cases} \mathrm{d}q_t = p_t \mathrm{d}t \\ \underbrace{\mathrm{d}p_t = -\nabla V(q_t)\mathrm{d}t}_{\text{hamiltonien}} \quad \underbrace{-\gamma p_t \mathrm{d}t + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t}_{\text{thermostat}} \end{cases}$$

$V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ **potentiel**, $\beta^{-1} > 0$ **température**, $\gamma > 0$ **amortissement.**

$\rightsquigarrow$ Le générateur infinitésimal est **dégénéré** (mais reste **hypoelliptique**).

Processus de Langevin

Objectif : simulation des **systèmes moléculaires thermostatés.**

Processus de Langevin

N particules, (q_t, p_t) positions-vitesses dans l'espace des phases $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, $d = 3N$.

$$\begin{cases} \mathrm{d}q_t = p_t \mathrm{d}t \\ \mathrm{d}p_t = \underbrace{-\nabla V(q_t)\mathrm{d}t}_{\text{hamiltonien}} \quad \underbrace{-\gamma p_t \mathrm{d}t + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t}_{\text{thermostat}} \end{cases}$$

$V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ **potentiel**, $\beta^{-1} > 0$ **température**, $\gamma > 0$ **amortissement.**

$\rightsquigarrow$ Le générateur infinitésimal est **dégénéré** (mais reste **hypoelliptique**).

Limite **suramortie** $\gamma \to +\infty$: $(q_{\gamma t})_{t \in [0,T]}$ converge (en loi) vers

Processus de Langevin suramorti

$$\mathrm{d}\overline{q}_t = -\nabla V(\overline{q}_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t \qquad \text{dans } \mathbb{R}^d.$$

$\rightsquigarrow$ Le générateur infinitésimal est **uniformément elliptique**.

Mesures invariantes

Pour le processus de Langevin :

$$\nu(\mathrm{d}q\mathrm{d}p) = \frac{1}{Z_\beta} \exp\left(-\beta\left(V(q) + \frac{|p|^2}{2}\right)\right) \mathrm{d}q\mathrm{d}p, \qquad \textbf{non réversible}.$$

Pour le processus de Langevin suramorti :

$$\overline{\nu}(\mathrm{d}q) = \frac{1}{\overline{Z}_\beta} \exp\left(-\beta V(q)\right) \mathrm{d}q, \qquad \textbf{réversible}.$$

- Les deux processus peuvent être utilisés pour échantillonner la **mesure de Gibbs** $\overline{\nu}$.
- $(q_t, p_t)_{t\geq 0}$ **plus intéressant** pour les applications en dynamique moléculaire, mais **plus difficile** à étudier.

Métastabilité

À basse température β^{-1}, **séparation d'échelles de temps** :

- **thermalisation** : **convergence rapide** de q_t ou $\overline{q}_t$ vers un **minimum local de** V ;
- **tunneling** : fluctuations du brownien provoquent des changements **brusques et imprévisibles** de région dans l'espace des phases.

Olivieri, Vares – Large deviations and metastability, '05

Métastabilité

À basse température β^{-1}, **séparation d'échelles de temps** :

- **thermalisation** : **convergence rapide** de q_t ou $\overline{q}_t$ vers un **minimum local de** V ;
- **tunneling** : fluctuations du brownien provoquent des changements **brusques et imprévisibles** de région dans l'espace des phases.

Olivieri, Vares – Large deviations and metastability, '05

Après thermalisation, **équilibre local** décrit par **Distribution Quasistationnaire (QSD)**

$$\pi \text{ telle que} \qquad \forall t \geq 0, \quad \pi(\cdot) = \mathbb{P}_\pi(X_t \in \cdot | \tau > t), \qquad \tau := \inf\{t \geq 0 : X_t \notin D\}.$$

Langevin	Langevin suramorti
$X_t = (q_t, p_t)$	$X_t = \overline{q}_t$
$D = \mathcal{O} \times \mathbb{R}^d$	$D = \mathcal{O}$

Typiquement, $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}^d$ **ouvert borné connexe**.

Métastabilité

À basse température β^{-1}, **séparation d'échelles de temps** :

- **thermalisation** : **convergence rapide** de q_t ou $\overline{q}_t$ vers un **minimum local de** V ;
- **tunneling** : fluctuations du brownien provoquent des changements **brusques et imprévisibles** de région dans l'espace des phases.

Olivieri, Vares – Large deviations and metastability, '05

Après thermalisation, **équilibre local** décrit par **Distribution Quasistationnaire (QSD)**

$$\pi \text{ telle que} \qquad \forall t \geq 0, \quad \pi(\cdot) = \mathbb{P}_\pi(X_t \in \cdot | \tau > t), \qquad \tau := \inf\{t \geq 0 : X_t \notin D\}.$$

Langevin	Langevin suramorti
$X_t = (q_t, p_t)$	$X_t = \overline{q}_t$
$D = \mathcal{O} \times \mathbb{R}^d$	$D = \mathcal{O}$

Typiquement, $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}^d$ **ouvert borné connexe**.

- Sous la QSD, temps de sortie **exponentiel** et **indépendant** du point de sortie.
  Collet, Martinez, San Martin – Quasi-stationary distributions, '13
- Utile pour étude théorique / justification de méthodes numériques (kMC, ParRep...)
  Di Gesù, Lelièvre, Le Peutrec, Nectoux – Ann. PDE '19
  Le Bris, Lelièvre, Luskin, Perez – Monte Carlo Methods Appl. '12

But de l'exposé

Questions :

- existence et unicité de la QSD dans D ?
- interprétation spectrale ?
- convergence de $\mathbb{P}(X_t \in \cdot | \tau > t)$ vers la QSD ?

Langevin	**Langevin suramorti**
$X_t = (q_t, p_t)$	$X_t = \overline{q}_t$
$D = \mathcal{O} \times \mathbb{R}^d$	$D = \mathcal{O}$

Outline

Approche spectrale

Le Bris, Lelièvre, Luskin, Perez – Monte Carlo Methods Appl. ’12

$$\boxed{\mathrm{d}\overline{q}_t = -\nabla V(\overline{q}_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t \quad \text{dans } \mathbb{R}^d.}$$

- Générateur infinitésimal : $\overline{L} = \beta^{-1}\Delta + \nabla V \cdot \nabla$.
- On pose $\overline{\tau} := \inf\{t \geq 0 : \overline{q}_t \notin \mathcal{O}\}$, pour $\mathcal{O}$ ouvert borné connexe régulier.

Approche spectrale

Le Bris, Lelièvre, Luskin, Perez – Monte Carlo Methods Appl. '12

$$\boxed{\mathrm{d}\overline{q}_t = -\nabla V(\overline{q}_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t \quad \text{dans } \mathbb{R}^d.}$$

- Générateur infinitésimal : $\overline{L} = \beta^{-1}\Delta + \nabla V \cdot \nabla$.
- On pose $\overline{\tau} := \inf\{t \geq 0 : \overline{q}_t \notin \mathcal{O}\}$, pour $\mathcal{O}$ ouvert borné connexe régulier.

Deux ingrédients principaux :

- **Feynman–Kac** : $\overline{u}(t,q) := \mathbb{E}_q[f(\overline{q}_t)\mathbb{1}_{\{t<\overline{\tau}\}}]$ unique solution classique de

$$\begin{cases} \partial_t \overline{u} = \overline{L}\overline{u}, & t > 0, \quad q \in \mathcal{O}, \\ \overline{u} = 0, & t > 0, \quad q \in \partial\mathcal{O}, \\ \overline{u} = f, & t = 0, \quad q \in \mathcal{O}. \end{cases}$$

- **Spectre de** $\overline{L}$ (avec condition de Dirichlet homogène sur $\partial\mathcal{O}$) :
  $\rightsquigarrow$ opérateur auto-adjoint dans $\mathbf{L}^2(\mathcal{O}, \overline{\nu})$, spectre discret $0 > -\overline{\lambda}_1 > -\overline{\lambda}_2 \geq \cdots$,
  $\rightsquigarrow$ premier vecteur propre $\overline{u}_1 \geq 0$ et tel que

$$\overline{\pi} := \frac{\overline{u}_1 \overline{\nu}}{\displaystyle\int_{\mathcal{O}} \overline{u}_1 \overline{\nu}} \quad \text{vérfie} \quad \begin{cases} \overline{L}^* \overline{\pi} = -\overline{\lambda}_1 \overline{\pi}, & q \in \mathcal{O}, \\ \overline{\pi} = 0, & q \in \partial\mathcal{O}. \end{cases}$$

Intégration par parties

But : montrer que $\overline{\pi}$ est une QSD.

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbb{E}_{\overline{\pi}}\left[f(\overline{q}_t)\mathbb{1}_{\{t<\overline{\tau}\}}\right] &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathcal{O}} \underbrace{\mathbb{E}_q\left[f(\overline{q}_t)\mathbb{1}_{\{t<\overline{\tau}\}}\right]}_{=\overline{u}(t,q)} \overline{\pi}(\mathrm{d}q) \\
&= \int_{\mathcal{O}} \partial_t \overline{u}(t,q)\overline{\pi}(\mathrm{d}q) \\
&= \int_{\mathcal{O}} \overline{L}\overline{u}(t,q)\overline{\pi}(\mathrm{d}q) && \text{(Feynman–Kac)} \\
&= \int_{\mathcal{O}} \overline{u}(t,q)\overline{L}^*\overline{\pi}(\mathrm{d}q) && \text{(CL sur } \overline{u} \text{ et } \overline{\pi}\text{)} \\
&= -\overline{\lambda}_1 \int_{\mathcal{O}} \overline{u}(t,q)\overline{\pi}(\mathrm{d}q) && \text{(Pb VP sur } \overline{\pi}\text{)} \\
&= -\overline{\lambda}_1 \mathbb{E}_{\overline{\pi}}\left[f(\overline{q}_t)\mathbb{1}_{\{t<\overline{\tau}\}}\right],
\end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{\overline{\pi}}\left[f(\overline{q}_t)\mathbb{1}_{\{t<\overline{\tau}\}}\right] &= \mathrm{e}^{-\overline{\lambda}_1 t}\overline{\pi}(f) && \text{(CI sur } \overline{u}\text{)} \\
&= \mathbb{P}_{\overline{\pi}}(t < \overline{\tau})\overline{\pi}(f) && \text{(avec } f = 1\text{)}
\end{aligned}$$

et donc $\overline{\pi}$ **est une QSD**.

Convergence exponentielle et unicité

Calculs dans la même veine :

- **décomposition spectrale** de $\overline{L}$ donne

$$\forall t \geq 0, \qquad \left\| \mathbb{P}_{\overline{\mu}}(\overline{q}_t \in \cdot | t < \overline{\tau}) - \overline{\pi}(\cdot) \right\|_{\mathrm{TV}} \leq C(\overline{\mu}) \mathrm{e}^{-(\overline{\lambda}_2 - \overline{\lambda}_1)t},$$

  à condition que $\mathrm{d}\overline{\mu}/\mathrm{d}\overline{\nu} \in \mathbf{L}^2(\mathcal{O}, \overline{\nu})$;
- **régularisation parabolique :** pour toute condition initiale $\overline{\mu}$, à tout temps $t > 0$, $\mathrm{Loi}_{\overline{\mu}}(\overline{q}_t | t < \overline{\tau})$ a une densité bornée par rapport à $\overline{\nu}$.

$\rightsquigarrow$ Prouve **unicité de la QSD** !

Diffusion uniformément elliptique, non-réversible

Remarque : pour des chaînes de Markov à espace d'états fini,

- la **réversibilité** ne joue pas un rôle très important dans l'étude de la QSD,
- c'est plutôt le **théorème de Perron–Frobenius** qui est utile.

Darroch, Seneta – J. Appl. Probab. '67

Diffusion uniformément elliptique, non-réversible

Remarque : pour des chaînes de Markov à espace d'états fini,

- la **réversibilité** ne joue pas un rôle très important dans l'étude de la QSD,
- c'est plutôt le **théorème de Perron–Frobenius** qui est utile.

Darroch, Seneta – J. Appl. Probab. '67

Un cas plus général :

$$\mathrm{d}\overline{q}_t = F(\overline{q}_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t,$$

avec $F : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ pas nécessairement gradient.

- Mesure invariante **non explicite**, processus **non réversible**.
- Feynman–Kac ne change pas.
- Valeur propre **principale** $\overline{\lambda}_1$ reste simple, vecteur propre (à gauche) reste ≥ 0.
- Outils : **compacité** du semi-groupe, théorème de **Krein–Rutman**, **irréductibilité**.

Gong, Qian, Zhao – Probab. Theory Related Fields '88

Diffusion uniformément elliptique, non-réversible

Remarque : pour des chaînes de Markov à espace d'états fini,

- la **réversibilité** ne joue pas un rôle très important dans l'étude de la QSD,
- c'est plutôt le **théorème de Perron–Frobenius** qui est utile.

Darroch, Seneta – J. Appl. Probab. '67

Un cas plus général :

$$\mathrm{d}\overline{q}_t = F(\overline{q}_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t,$$

avec $F : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ pas nécessairement gradient.

- Mesure invariante **non explicite**, processus **non réversible**.
- Feynman–Kac ne change pas.
- Valeur propre **principale** $\overline{\lambda}_1$ reste simple, vecteur propre (à gauche) reste ≥ 0.
- Outils : **compacité** du semi-groupe, théorème de **Krein–Rutman**, **irréductibilité**.

Gong, Qian, Zhao – Probab. Theory Related Fields '88

Autres approches (récentes) : Lyapounov + Doeblin

Champagnat, Coulibaly-Pasquier, Villemonais – Sém. Probab. '18

Champagnat, Villemonais – arXiv:1712.08092

Outline

Cadre et difficultés principales

Rappel de l'équation de Langevin :

$$\begin{cases} \mathrm{d}q_t = p_t \mathrm{d}t, \\ \mathrm{d}p_t = -\nabla V(q_t)\mathrm{d}t - \gamma p_t \mathrm{d}t + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t, \end{cases}$$

avec $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, $\gamma > 0$.

- **Non réversible, non elliptique**.
- Domaine d'intérêt $D = \mathcal{O} \times \mathbb{R}^d$ **non borné**.

Cadre et difficultés principales

Rappel de l'équation de Langevin :

$$\begin{cases} \mathrm{d}q_t = p_t \mathrm{d}t, \\ \mathrm{d}p_t = -\nabla V(q_t)\mathrm{d}t - \gamma p_t \mathrm{d}t + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t, \end{cases}$$

avec $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, $\gamma > 0$.

- **Non réversible, non elliptique**.
- Domaine d'intérêt $D = \mathcal{O} \times \mathbb{R}^d$ **non borné**.

On traite en fait une classe plus générale :

$$\boxed{\begin{cases} \mathrm{d}q_t = p_t \mathrm{d}t, \\ \mathrm{d}p_t = F(q_t)\mathrm{d}t - \gamma p_t \mathrm{d}t + \sigma \mathrm{d}B_t, \end{cases}}$$

avec $F : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ régulière, $\gamma \in \mathbb{R}$ et $\sigma > 0$.

- Générateur infinitésimal $L = \frac{\sigma^2}{2}\Delta_p + (F(q) - \gamma p) \cdot \nabla_p + p \cdot \nabla_q$.
- On pose $\tau = \inf\{t > 0 : q_t \notin \mathcal{O}\}$.

On notera aussi $X_t = (q_t, p_t)$.

Formule de Feynman–Kac

Lelièvre, Ramil, R. – arXiv:2010.10157

- $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}^d$ ouvert, borné, connexe, régulier, de normale sortante $n(q)$.
- On introduit la partition de $\partial D = \partial\mathcal{O} \times \mathbb{R}^d$ en

$$\begin{aligned} \Gamma^+ &:= \{x = (q,p) \in \partial\mathcal{O} \times \mathbb{R}^d : p \cdot n(q) > 0\}, \\ \Gamma^0 &:= \{x = (q,p) \in \partial\mathcal{O} \times \mathbb{R}^d : p \cdot n(q) = 0\}, \\ \Gamma^- &:= \{x = (q,p) \in \partial\mathcal{O} \times \mathbb{R}^d : p \cdot n(q) < 0\}. \end{aligned}$$

Résultat préliminaire : si $X_0 = (q_0, p_0) \in D \cup \Gamma^-$, alors $X_\tau = (q_\tau, p_\tau) \in \Gamma^+$.

Formule de Feynman–Kac

Lelièvre, Ramil, R. – arXiv:2010.10157

- $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}^d$ ouvert, borné, connexe, régulier, de normale sortante $n(q)$.
- On introduit la partition de $\partial D = \partial\mathcal{O} \times \mathbb{R}^d$ en

$$\begin{aligned}
\Gamma^+ &:= \{x = (q,p) \in \partial\mathcal{O} \times \mathbb{R}^d : p \cdot n(q) > 0\},\\
\Gamma^0 &:= \{x = (q,p) \in \partial\mathcal{O} \times \mathbb{R}^d : p \cdot n(q) = 0\},\\
\Gamma^- &:= \{x = (q,p) \in \partial\mathcal{O} \times \mathbb{R}^d : p \cdot n(q) < 0\}.
\end{aligned}$$

Résultat préliminaire : si $X_0 = (q_0, p_0) \in D \cup \Gamma^-$, alors $X_\tau = (q_\tau, p_\tau) \in \Gamma^+$.

Formule de Feynman–Kac

$u(t,x) := \mathbb{E}[f(X_t)\mathbb{1}_{\{t<\tau\}}]$ unique solution classique

$$\begin{cases}
\partial_t u = Lu, & t > 0, \quad x \in D,\\
u = 0, & t > 0, \quad x \in \Gamma^+ \cup \Gamma^0,\\
u = f, & t = 0, \quad x \in D,
\end{cases}$$

(équation de **Fokker–Planck cinétique**).

Preuve par **localisation** et **approximation parabolique + hypoellipticité**.
Approche variationnelle : **Armstrong, Mourrat – arXiv:1902.04037**

Densité de transition du semi-groupe tué

Le semi-groupe tué $(\mathsf{P}_t^D)_{t \geq 0}$ possède une densité de transition

$$\mathsf{P}_t^D f(x) := \mathbb{E}_x[f(X_t)\mathbb{1}_{\{t<\tau\}}] = \int_D \mathsf{p}_t^D(x,x')f(x')\mathrm{d}x', \qquad t > 0,$$

continue sur $\overline{D} \times \overline{D}$.

Densité de transition du semi-groupe tué

Le semi-groupe tué $(\mathsf{P}_t^D)_{t \geq 0}$ possède une densité de transition

$$\mathsf{P}_t^D f(x) := \mathbb{E}_x[f(X_t)\mathbb{1}_{\{t<\tau\}}] = \int_D \mathsf{p}_t^D(x,x')f(x')\mathrm{d}x', \qquad t > 0,$$

continue sur $\overline{D} \times \overline{D}$.

- Une **borne inf** : $\mathsf{p}_t^D(x,x') \begin{cases} > 0 & \text{si } x \notin \Gamma^+ \cup \Gamma^0 \text{ et } x' \notin \Gamma^- \cup \Gamma^0, \\ = 0 & \text{sinon.} \end{cases}$

  $\rightsquigarrow$ Harnack adapté de **Golse, Imbert, Mouhot, Vasseur – Ann. Sc. Norm. Super. Pisa ’19**

Densité de transition du semi-groupe tué

Le semi-groupe tué $(\mathsf{P}_t^D)_{t\geq 0}$ possède une densité de transition

$$\mathsf{P}_t^D f(x) := \mathbb{E}_x[f(X_t)\mathbb{1}_{\{t<\tau\}}] = \int_D \mathsf{p}_t^D(x,x')f(x')\mathrm{d}x', \qquad t>0,$$

continue sur $\overline{D}\times\overline{D}$.

- Une **borne inf** : $\mathsf{p}_t^D(x,x') \begin{cases} >0 & \text{si } x \notin \Gamma^+\cup\Gamma^0 \text{ et } x' \notin \Gamma^-\cup\Gamma^0, \\ =0 & \text{sinon.} \end{cases}$

  $\rightsquigarrow$ Harnack adapté de **Golse, Imbert, Mouhot, Vasseur – Ann. Sc. Norm. Super. Pisa '19**

- Une **borne sup** : pour tous $\alpha \in]0,1[$ et $T>0$, il existe $C(\alpha,T)$ tel que

$$\forall t\in[0,T], \qquad \mathsf{p}_t^D(x,x') \leq C(\alpha,T)\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)}(x,x'),$$

  avec $\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)}(x,x')$ la densité de transition du processus gaussien

$$\begin{cases} \mathrm{d}q_t^{(\alpha)} = p_t^{(\alpha)}\mathrm{d}t, \\ \mathrm{d}p_t^{(\alpha)} = -\gamma p_t^{(\alpha)}\mathrm{d}t + \dfrac{\sigma}{\sqrt{\alpha}}\mathrm{d}B_t. \end{cases}$$

  $\rightsquigarrow$ La constante $C(\alpha,T)$ dépend de d, $\|F\|_{\mathbf{L}^\infty(\mathcal{O})}$, γ, σ^2.

Esquisse de preuve de la borne gaussienne

- Idée similaire à **Konakov, Menozzi, Molchanov – Ann. IHP Probab. Stat. '10**.
- Borne établie sur la densité de transition $\mathsf{p}_t(x, x')$ du processus **non tué**.
- Se transfère immédiatement à $\mathsf{p}_t^D(x, x') \leq \mathsf{p}_t(x, x')$.

Équation de Kolmogorov forward :

$$\partial_t \mathsf{p}_t(x, x') = L_{x'}^* \mathsf{p}_t(x, x') = \left(\widehat{L}_{x'}^{(1)} + F(q') \cdot \nabla_{p'} \right)^* \mathsf{p}_t(x, x')$$

Formulation mild (formule de Duhamel) :

$$\mathsf{p}_t(x, x') = \widehat{\mathsf{p}}_t^{(1)}(x, x') + \int_{s=0}^{t} \int_{x^\flat \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \mathsf{p}_s(x, x^\flat) F(q^\flat) \cdot \nabla_{p^\flat} \widehat{\mathsf{p}}_{t-s}^{(1)}(x^\flat, x') \mathrm{d}x^\flat \mathrm{d}s$$

- Le terme en rouge se contrôle par $\widehat{\mathsf{p}}_{t-s}^{(\alpha)}(x^\flat, x')$ pour $\alpha < 1$.
- On conclut en itérant l'argument.

Compacité et théorème de Krein–Rutman

Conséquence pour l'existence et l'unicité d'un vecteur propre :
Lelièvre, Ramil, R. – arXiv:2101.11999

- Rappel : $\mathsf{p}_t^D(x,x') \leq C(\alpha,T)\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)}(x,x')$.
- $\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)}(x,x')$ noyau **gaussien explicite**.
- Petit miracle : pour tout $t > 0$, $\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)} \in \mathbf{L}^1 \cap \mathbf{L}^\infty(D \times D)$.

Compacité et théorème de Krein–Rutman

Conséquence pour l'existence et l'unicité d'un vecteur propre :
Lelièvre, Ramil, R. – arXiv:2101.11999

- Rappel : $\mathsf{p}_t^D(x,x') \leq C(\alpha,T)\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)}(x,x')$.
- $\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)}(x,x')$ noyau **gaussien explicite**.
- Petit miracle : pour tout $t>0$, $\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)} \in \mathbf{L}^1 \cap \mathbf{L}^\infty(D \times D)$.

Conséquences :

- $\mathsf{P}_t^D : \mathbf{L}^2(D) \to \mathbf{L}^2(D)$ **compact**.
- $\forall p,q \in [1,\infty]$, $\mathsf{P}_t^D : \mathbf{L}^p(D) \to \mathbf{L}^q(D) \cap \mathbf{C}_\mathrm{b}(D)$ **continu** (en particulier, strong Feller).
- $\mathsf{P}_t^D : \mathbf{C}_\mathrm{b}(D) \to \mathbf{C}_\mathrm{b}(D)$ **compact**.

Version semi-classique : **Nier – Memoirs AMS '18**

Compacité et théorème de Krein–Rutman

Conséquence pour l'existence et l'unicité d'un vecteur propre :
Lelièvre, Ramil, R. – arXiv:2101.11999

- Rappel : $\mathsf{p}_t^D(x,x') \leq C(\alpha,T)\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)}(x,x')$.
- $\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)}(x,x')$ noyau **gaussien explicite**.
- Petit miracle : pour tout $t > 0$, $\widehat{\mathsf{p}}_t^{(\alpha)} \in \mathbf{L}^1 \cap \mathbf{L}^\infty(D \times D)$.

Conséquences :

- $\mathsf{P}_t^D : \mathbf{L}^2(D) \to \mathbf{L}^2(D)$ **compact**.
- $\forall p,q \in [1,\infty]$, $\mathsf{P}_t^D : \mathbf{L}^p(D) \to \mathbf{L}^q(D) \cap \mathbf{C}_\mathrm{b}(D)$ **continu** (en particulier, strong Feller).
- $\mathsf{P}_t^D : \mathbf{C}_\mathrm{b}(D) \to \mathbf{C}_\mathrm{b}(D)$ **compact**.

Version semi-classique : **Nier – Memoirs AMS '18**

Théorème de Krein–Rutman + propriété de semi-groupe :

- Le rayon spectral de P_t^D est valeur propre **simple**, et de la forme $\mathrm{e}^{-\lambda_1 t}$.
- Le vecteur propre associé peut être pris ≥ 0.

$\rightsquigarrow$ on a gagné !

Énoncé du résultat final

QSD pour le processus de Langevin

Sous les hypothèses :

- $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}^d$ ouvert non-vide, borné, connexe et régulier ;
- $F : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ de classe $\mathbf{C}^\infty$ sur $\overline{\mathcal{O}}$;

on a :

- il existe une unique QSD π sur $D = \mathcal{O} \times \mathbb{R}^d$ pour le processus de Langevin ;
- π possède une densité > 0 sur $D \cup \Gamma^+$, $= 0$ sur $\Gamma^- \cup \Gamma^0$;
- π est vecteur propre à gauche de P_t^D, associé à la valeur propre $\mathrm{e}^{-\lambda_1 t}$;
- il existe $\rho > 0$ tel que, pour toute condition initiale μ sur D, il existe $C(\mu)$ tel que

$$\forall t \geq 0, \qquad \|\mathbb{P}_\mu(X_t \in \cdot | t < \tau) - \pi(\cdot)\|_{\mathrm{TV}} \leq C(\mu)\mathrm{e}^{-\rho t}.$$

$\rightsquigarrow$ ρ est lié au trou spectral de L.

Résultats similaires : **Guillin, Nectoux, Wu – hal-03068461**

Outline

Limite suramortie

- Langevin suramorti : $\mathrm{d}\overline{q}_t = F(\overline{q}_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t$,
- Langevin : $\begin{cases} \mathrm{d}q_t = p_t \mathrm{d}t, \\ \mathrm{d}p_t = F(q_t)\mathrm{d}t - \gamma p_t \mathrm{d}t + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t, \end{cases}$
  avec $\gamma > 0$.

Rappel :

- quand $\gamma \to +\infty$, $(q_{\gamma t})_{t\in[0,T]}$ converge vers $(\overline{q}_t)_{t\in[0,T]}$,
- les mesures invariantes $\overline{\nu}(\mathrm{d}q)$ et $\nu(\mathrm{d}q\mathrm{d}p)$ vérifient

$$\nu(\mathrm{d}q\mathrm{d}p) = \overline{\nu}(\mathrm{d}q)\mathrm{M}_\beta(\mathrm{d}p), \qquad \mathrm{M}_\beta = \mathcal{N}_d(0, \beta^{-1}I_d).$$

Qu'en est-il des **QSD** ?

Limite suramortie

- Langevin suramorti : $\mathrm{d}\overline{q}_t = F(\overline{q}_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t$,
- Langevin : $\begin{cases} \mathrm{d}q_t = p_t \mathrm{d}t, \\ \mathrm{d}p_t = F(q_t)\mathrm{d}t - \gamma p_t \mathrm{d}t + \sqrt{2\gamma\beta^{-1}}\mathrm{d}B_t, \end{cases}$
  avec $\gamma > 0$.

Rappel :

- quand $\gamma \to +\infty$, $(q_{\gamma t})_{t\in[0,T]}$ converge vers $(\overline{q}_t)_{t\in[0,T]}$,
- les mesures invariantes $\overline{\nu}(\mathrm{d}q)$ et $\nu(\mathrm{d}q\mathrm{d}p)$ vérifient

$$\nu(\mathrm{d}q\mathrm{d}p) = \overline{\nu}(\mathrm{d}q)\mathrm{M}_\beta(\mathrm{d}p), \qquad \mathrm{M}_\beta = \mathcal{N}_d(0, \beta^{-1}I_d).$$

Qu'en est-il des **QSD** ?

- À γ fixé, **pas de structure produit** pour π car > 0 sur $D \cup \Gamma^+$ et $= 0$ sur $\Gamma^- \cup \Gamma^0$.
- **Ramil – arXiv:2103.00338** : **lorsque** $\gamma \to +\infty$,

$$\pi(\mathrm{d}q\mathrm{d}p) \to \overline{\pi}(\mathrm{d}q)\mathrm{M}_\beta(\mathrm{d}p), \qquad \lambda_1 \sim \frac{\overline{\lambda}_1}{\gamma}.$$

- Argument important : la borne gaussienne est suffisamment précise pour donner de la tension à l'échelle de temps γt.