



HAL
open science

Métastabilité d'EDP stochastiques et déterminants de Fredholm

Nils Berglund

► **To cite this version:**

Nils Berglund. Métastabilité d'EDP stochastiques et déterminants de Fredholm. 2020, Gazette de Mathématiciens, No 163, p 14-25. hal-02441580

HAL Id: hal-02441580

<https://hal.science/hal-02441580v1>

Submitted on 15 Jan 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Métastabilité d'EDP stochastiques et déterminants de Fredholm

Nils Berglund

15 janvier 2020

Résumé

La métastabilité apparaît lorsqu'un système thermodynamique, tel que l'eau en surfusion (qui est liquide à température négative), se retrouve du « mauvais » côté d'une transition de phase, et reste pendant un temps très long dans un état différent de son état d'équilibre. Il existe de nombreux modèles mathématiques décrivant ce phénomène, dont des modèles sur réseau à dynamique stochastique. Dans ce texte, nous allons nous intéresser à la métastabilité dans des équations aux dérivées partielles stochastiques (EDPS) paraboliques. Certaines de ces équations sont mal posées, et ce n'est que grâce à des progrès très récents dans la théorie des EDPS dites singulières qu'on sait construire des solutions, via à une procédure de renormalisation. L'étude de la métastabilité dans ces systèmes fait apparaître des liens inattendus avec la théorie des déterminants spectraux, dont les déterminants de Fredholm et de Carleman–Fredholm.

Article paru dans la *Gazette des Mathématiciens*, N° 163, Janvier 2020.

1 Introduction

Déposez une bouteille d'eau dans le compartiment à glace de votre réfrigérateur. Si l'eau est assez pure, en retirant la bouteille après quelques heures, vous trouverez l'eau qu'elle contient encore à l'état liquide, bien qu'à une température négative. On dit que l'eau est dans un état de surfusion. Agitez la bouteille, et vous verrez l'eau se transformer rapidement en glace.

L'eau en surfusion est un exemple d'état métastable. Dans un tel état, un système minimise localement un potentiel thermodynamique, tel que son énergie libre, mais pas globalement. La transition vers son état stable nécessite de franchir une barrière d'énergie, ce qui peut prendre beaucoup de temps si seules les fluctuations dues à l'agitation thermique entrent en jeu. Ainsi, la transformation de l'eau en surfusion en glace se fait par nucléation, c'est-à-dire par l'apparition de cristaux de glace qui croissent petit à petit.¹ La présence d'impuretés, ou un apport d'énergie de l'extérieur, peuvent toutefois accélérer le processus de solidification.

Il existe de nombreux modèles mathématiques décrivant le phénomène de la métastabilité. Les premiers à avoir été étudiés sont des modèles sur réseau, comme le modèle

1. Un cristal sphérique de rayon r modifie l'énergie du système de deux manières : d'une part, le fait que la glace est plus stable diminue l'énergie d'une quantité proportionnelle au volume du cristal, donc à r^3 ; d'autre part, l'interface entre le cristal et l'eau environnante augmente l'énergie d'un terme proportionnel à la surface du cristal, donc à r^2 . Pour de petites valeurs de r , la seconde contribution domine la première, alors que c'est l'inverse pour r assez grand. Pour cette raison, les cristaux de glace croissent très lentement tant que leur taille est plus petite qu'une valeur critique, pour laquelle le terme de volume et le terme de surface se compensent.

d'Ising avec une dynamique stochastique de type Metropolis–Hastings. On trouvera par exemple dans [8] un panorama de résultats sur la métastabilité dans les systèmes dynamiques stochastiques sur réseau. Le métastabilité apparaît toutefois également dans des systèmes continus, tels que les équations différentielles stochastiques, que nous allons évoquer dans la section 2, ainsi que les EDPs stochastiques que nous aborderons dans la section 3.

2 Diffusions réversibles

Le mouvement dans \mathbb{R}^n d'une particule Brownienne de masse m , soumise à une force dérivant d'un potentiel V , une force de frottement visqueuse, et des fluctuations thermiques, peut être décrit par l'équation de Langevin

$$m \frac{d^2 x_t}{dt^2} = -\nabla V(x_t) - \gamma \frac{dx_t}{dt} + \sigma \frac{dW_t}{dt},$$

où W_t est un mouvement Brownien (voir encart A), γ est un coefficient de frottement, et le paramètre positif σ est relié à la température. Nous supposons dans la suite que $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est un potentiel confinant (borné inférieurement et tendant vers l'infini assez rapidement), et nous sommes intéressés surtout au cas où σ est petit. De plus, nous écrirons $\sigma = \sqrt{2\varepsilon}$, afin de simplifier un certain nombre d'expressions.

Lorsque $\varepsilon = 0$, si la masse m de la particule est assez petite par rapport au coefficient de frottement γ , la particule s'approche sans osciller d'un minimum local de V . On dit que son mouvement est *suramorti*. Pour ε quelconque et dans la limite de m/γ très petit, on peut montrer qu'après un changement d'unités, le mouvement de la particule Brownienne est décrit par l'équation plus simple du premier ordre

$$\frac{dx_t}{dt} = -\nabla V(x_t) + \sqrt{2\varepsilon} \frac{dW_t}{dt}, \quad (1)$$

qu'on appelle une équation de Langevin suramortie. Mathématiquement parlant, c'est un exemple d'équation différentielle stochastique (EDS), et sa solution est aussi appelée une *diffusion*.

Par exemple, en dimension $n = 1$, si $V(x) = \frac{1}{2}x^2$ l'équation (1) devient

$$\frac{dx_t}{dt} = -x_t + \sqrt{2\varepsilon} \frac{dW_t}{dt}, \quad (2)$$

et décrit un oscillateur harmonique suramorti soumis à un bruit thermique. Sa solution est appelée un *processus d'Ornstein–Uhlenbeck*.

Une manière de décrire les solutions de (1) est de déterminer leurs probabilités de transition $p_t(x, y)$. Celles-ci sont telles que si la particule démarre du point x au temps 0, alors la probabilité $\mathbb{P}^x\{x_t \in A\}$ de la trouver dans une région A en un temps $t > 0$ s'écrit comme

$$\mathbb{P}^x\{x_t \in A\} = \int_A p_t(x, y) dy.$$

On sait que $p_t(x, y)$ satisfait l'équation de Fokker–Planck

$$\partial_t p_t = \nabla \cdot (\nabla V p_t) + \varepsilon \Delta p_t \quad (3)$$

(les opérateurs Δ et ∇ agissant sur la variable y). Le terme $\nabla \cdot (\nabla V p_t)$ a pour effet de transporter p_t d'une distance proportionnelle à $-\nabla V$, alors que $\varepsilon \Delta p_t$ est un terme de

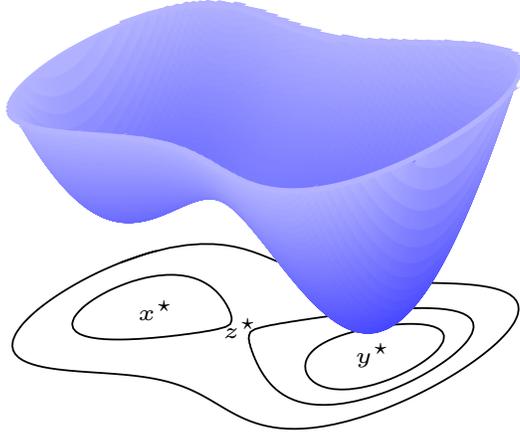


FIGURE 1 – Un potentiel à deux puits. Les minima locaux x^* et y^* sont séparés par un point selle z^* .

diffusion, qui tend à élargir la distribution de x_t . Dans le cas du processus d'Ornstein–Uhlenbeck (2), on peut vérifier que

$$p_t(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon(1 - e^{-2t})}} \exp\left\{-\frac{(y - xe^{-t})^2}{2\varepsilon(1 - e^{-2t})}\right\}, \quad (4)$$

c'est-à-dire que x_t suit une loi normale d'espérance xe^{-t} et de variance $\varepsilon(1 - e^{-2t})$. Remarquons que lorsque t tend vers l'infini, cette loi tend vers une loi normale centrée de variance ε : plus la température est faible, plus la variance est petite, et les fluctuations de x_t sont moins importantes.

Pour des potentiels V généraux, on ne sait pas résoudre l'équation de Fokker–Planck (3). Toutefois, on sait que la limite lorsque $t \rightarrow \infty$ de $p_t(x, y)$ est toujours égale à

$$\pi(y) = \frac{1}{Z} e^{-V(y)/\varepsilon}$$

où Z est une constante de normalisation telle que l'intégrale de $\pi(y)$ vaille 1. En fait,² $\pi(y)dy$ est aussi une mesure de probabilité invariante du processus, c'est-à-dire que

$$\int_{\mathbb{R}^n} \pi(x)p_t(x, y)dx = \pi(y) \quad \forall y \in \mathbb{R}^n, \forall t > 0.$$

Mieux, on sait montrer que la diffusion $(x_t)_{t \geq 0}$ est réversible par rapport à π : ses probabilités de transition satisfont la condition d'équilibre détaillé

$$\pi(x)p_t(x, y) = \pi(y)p_t(y, x) \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n, \forall t > 0. \quad (5)$$

Cette relation se vérifie aisément dans le cas des probabilités de transition (4) du processus d'Ornstein–Uhlenbeck. Physiquement, elle signifie que si l'on renverse le sens du temps, les trajectoires gardent la même probabilité. Autrement dit, si l'on filmait le système à l'équilibre et qu'on passait le film à l'envers, on serait incapable de détecter une différence.

2. L'invariance de π suit du fait que π appartient au noyau de l'opérateur de Fokker–Planck apparaissant au membre de droite de l'équation (3), ce qui équivaut à la condition $\varepsilon \nabla \cdot (e^{-V/\varepsilon} \nabla (e^{V/\varepsilon} \pi)) = 0$. La relation d'équilibre détaillé (5) vient du fait que cet opérateur est auto-adjoint dans l'espace L^2 muni du poids $e^{V/\varepsilon}$.

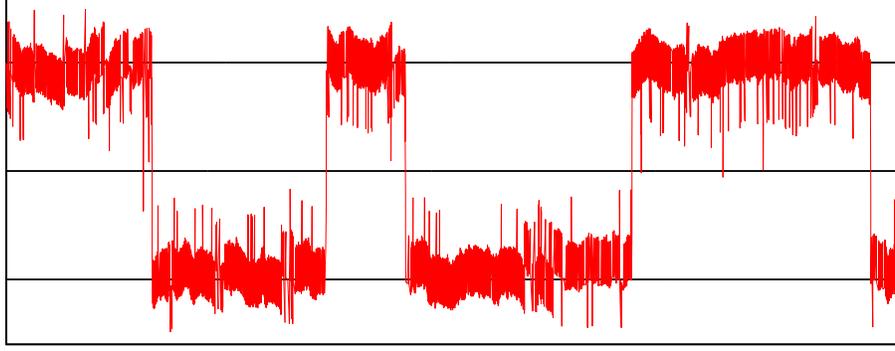


FIGURE 2 – Une trajectoire x_t de l’EDS (1) dans un cas de dimension 1, avec le potentiel $V(x) = \frac{1}{4}x^4 - \frac{1}{2}x^2$. La trajectoire passe la plupart du temps à fluctuer autour des deux minima locaux $x^* = -1$ et $y^* = 1$ du potentiel V , avec des transitions occasionnelles d’un minimum vers l’autre. Dans cette simulation, ε a été choisi relativement grand pour que des transitions soient observables durant le temps de la simulation.

La métastabilité se manifeste dans le système (1) dès que V admet plus d’un minimum local. Considérons le cas le plus simple où V est un potentiel à deux puits, c’est-à-dire que V admet exactement deux minima locaux x^* et y^* , ainsi qu’un point selle z^* (Figure 1). Les deux minima locaux représentent deux états métastables du système, car les solutions de l’EDS (1) passent beaucoup de temps au voisinage de ces points (Figure 2).

La question centrale est alors la suivante. Supposons que la diffusion démarre dans le premier minimum local x^* , et soit $\mathcal{B}_\delta(y^*)$ une boule de petit rayon δ centrée au second minimum. Quel est le comportement, pour ε petit, du premier temps où x_t visite $\mathcal{B}_\delta(y^*)$, noté $\tau = \inf\{t > 0 \mid x_t \in \mathcal{B}_\delta(y^*)\}$?

2.1 Loi d’Arrhenius et théorie des grandes déviations

Une première réponse à cette question fut proposée dès la fin du XIXe siècle par Jacobus van t’Hoff, puis justifiée physiquement par Svante Arrhenius [1] : la valeur moyenne de τ (son espérance) se comporte comme $e^{[V(z^*) - V(x^*)]/\varepsilon}$. Elle est donc exponentiellement grande dans la hauteur de la barrière de potentiel entre les deux minima locaux de V . Lorsque ε tend vers 0, le temps de transition moyen tend très rapidement vers l’infini, reflétant le fait qu’aucune transition n’est possible en l’absence de fluctuation thermique. Inversement, lorsque ε augmente, le temps moyen entre transitions devient de plus en plus court.

Une version rigoureuse de cette loi dite *d’Arrhenius* peut être déduite de la *théorie des grandes déviations*, développée dans le contexte des EDS par Mark Freidlin et Alexander Wentzell dans les années 1960–70 [11]. L’idée de l’approche est la suivante. On fixe un intervalle de temps $[0, T]$, et on associe à toute trajectoire déterministe dérivable $\gamma : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ la *fonction taux*

$$\mathcal{I}_{[0, T]}(\gamma) = \frac{1}{2} \int_0^T \left\| \frac{d\gamma}{dt}(t) + \nabla V(\gamma(t)) \right\|^2 dt. \quad (6)$$

Remarquons que cette fonction est nulle si et seulement si $\gamma(t)$ satisfait l’équation $\frac{d\gamma}{dt}(t) = -\nabla V(\gamma(t))$, c’est-à-dire (1) pour $\varepsilon = 0$. Sinon, $\mathcal{I}_{[0, T]}(\gamma)$ est strictement positive, et mesure le « coût » pour que x_t reste proche de $\gamma(t)$. En effet, le principe des grandes déviations

pour les diffusions affirme que la probabilité que cela arrive est proche (dans un sens précis) de l'exponentielle de $-\mathcal{I}_{[0,T]}(\gamma)/(2\varepsilon)$.

On peut également estimer la probabilité $p(T) = \mathbb{P}^{x^*} \{\tau \leq T\}$ que la diffusion partant de x^* atteigne la boule $\mathcal{B}_\delta(y^*)$ en un temps T au plus. Observons pour cela que pour tout $T_1 \in [0, T]$, la fonction taux est supérieure ou égale à $\mathcal{I}_{[0,T_1]}(\gamma)$, qui peut aussi s'écrire

$$\mathcal{I}_{[0,T_1]}(\gamma) = \frac{1}{2} \int_0^{T_1} \left\| \frac{d\gamma}{dt}(t) - \nabla V(\gamma(t)) \right\|^2 dt + 2 \int_0^{T_1} \frac{d\gamma}{dt}(t) \cdot \nabla V(\gamma(t)) dt.$$

Le second terme s'intègre et vaut $2[V(\gamma(T_1)) - V(\gamma(0))]$. Comme le potentiel le long de toute trajectoire γ reliant x^* à $\mathcal{B}_\delta(y^*)$ atteint au moins la valeur $V(z^*)$, le principe de grandes déviations montre que $p(T)$ est au plus d'ordre $e^{-[V(z^*) - V(x^*)]/\varepsilon}$. On peut de plus construire une trajectoire de x^* à $\mathcal{B}_\delta(y^*)$ de coût $2[V(z^*) - V(x^*) + R(T)]$ où $R(T)$ est un reste tendant vers 0 lorsque $T \rightarrow \infty$.³ On conclut alors en comparant le processus à un processus de Bernoulli, effectuant des tentatives indépendantes d'atteindre $\mathcal{B}_\delta(y^*)$ pendant les intervalles de temps $[kT, (k+1)T]$, chacune avec probabilité de succès $p(T)$, dont l'espérance est égale à $1/p(T)$. Les erreurs faites en comparant les deux processus deviennent en effet négligeables dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$.⁴

2.2 Loi d'Eyring–Kramers et théorie du potentiel

La loi d'Eyring–Kramers, proposée dans les années 1930 [9, 14], est plus précise que la loi d'Arrhenius,⁵ puisqu'elle décrit le préfacteur du temps de transition moyen. Dénotons par $\text{Hess } V(x)$ la matrice Hessienne du potentiel V au point x , qu'on supposera toujours non dégénérée (c'est-à-dire de déterminant non nul). Toutes les valeurs propres de la matrice $\text{Hess } V(x^*)$ sont positives, alors que la matrice $\text{Hess } V(z^*)$ admet une unique valeur propre négative, que nous noterons $\lambda_-(z^*)$.⁶

Dans cette situation, la loi d'Eyring–Kramers affirme que

$$\mathbb{E}^{x^*}[\tau] = \frac{2\pi}{|\lambda_-(z^*)|} \sqrt{\frac{|\det \text{Hess } V(z^*)|}{\det \text{Hess } V(x^*)}} e^{[V(z^*) - V(x^*)]/\varepsilon} [1 + R(\varepsilon)], \quad (7)$$

où $R(\varepsilon)$ est un reste tendant vers 0 dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Il existe actuellement plusieurs méthodes permettant de démontrer ce résultat. Dans la suite de cette section, nous allons expliquer celle basée sur la théorie du potentiel, développée par Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayraud et Markus Klein dans les années 2000 [6], qui se prête à une généralisation aux EDPs stochastiques (les lecteurs qui ne s'intéressent pas à ces précisions techniques sont invités à passer directement à la section 3).

3. Pour T assez grand, on relie des points voisins de x^* et z^* en un temps $(T-1)/2$ par une trajectoire sur laquelle $\frac{d\gamma}{dt}(t) = +\nabla V(\gamma(t))$, de coût proche de $2[V(z^*) - V(x^*)]$. Puis on relie un point proche de z^* à $\mathcal{B}_\delta(y^*)$ en un temps $(T-1)/2$ par une trajectoire déterministe de coût nul. Enfin, on utilise le temps 1 restant pour compléter ces deux bouts de trajectoires par des segments de droites, de coût négligeable.

4. L'énoncé précis du résultat est que le temps de transition moyen $\mathbb{E}^{x^*}[\tau]$ satisfait $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \ln \mathbb{E}^{x^*}[\tau] = V(z^*) - V(x^*)$.

5. La loi d'Eyring–Kramers a en effet été proposée une trentaine d'années avant qu'on ne dispose d'une preuve de la loi d'Arrhenius.

6. En effet, si $\text{Hess } V(z^*)$ admettait plusieurs valeurs propres négatives, on pourrait trouver un chemin plus économique en termes d'altitude maximale pour aller de x^* à y^* . Par exemple, en dimension 2, les points stationnaires de V auxquels la Hessienne admet deux valeurs propres négatives sont des maxima locaux de V , alors que nous sommes intéressés aux cols, caractérisés par une valeur propre de chaque signe.

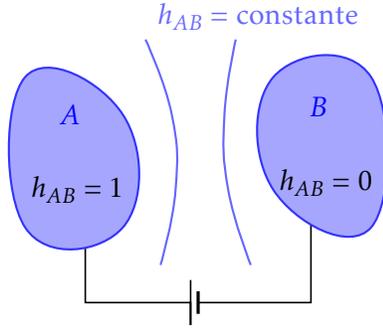


FIGURE 3 – Le potentiel d'équilibre h_{AB} décrit, dans le cas $V = 0$, le potentiel électrique dans un condensateur formé de deux conducteurs A et B , respectivement au potentiel 1 et 0.

Fixons deux ensembles disjoints $A, B \subset \mathbb{R}^n$, à bord lisse — pensez à des voisinages des minima x^* et y^* du potentiel V . L'observation de base est que la *formule de Dynkin* (ou formule d'Itô pour les temps d'arrêt) permet d'exprimer plusieurs quantités probabilistes intéressantes comme solutions d'EDPs. Par exemple, la fonction $w_B(x) = \mathbb{E}^x[\tau_B]$, donnant l'espérance du temps d'atteinte de B partant de x , satisfait le *problème de Poisson*

$$\begin{cases} (\mathcal{L}w_B)(x) = -1 & x \in B^c, \\ w_B(x) = 0 & x \in B, \end{cases} \quad (8)$$

où \mathcal{L} est l'opérateur différentiel

$$\mathcal{L} = \varepsilon \Delta - \nabla V \cdot \nabla,$$

appelé *générateur* de la diffusion $(x_t)_{t \geq 0}$ (c'est l'adjoint dans L^2 de l'opérateur de Fokker-Planck apparaissant dans (3)).

La solution de l'équation de Poisson (8) peut être représentée sous la forme

$$w_B(x) = - \int_{B^c} G_{B^c}(x, y) dy, \quad (9)$$

où G_{B^c} est la *fonction de Green* associée à B^c , solution de

$$\begin{cases} (\mathcal{L}G_{B^c})(x, y) = \delta(x - y) & x \in B^c, \\ G_{B^c}(x, y) = 0 & x \in B. \end{cases}$$

La réversibilité implique que G_{B^c} satisfait la *relation d'équilibre détaillé*

$$e^{-V(x)/\varepsilon} G_{B^c}(x, y) = e^{-V(y)/\varepsilon} G_{B^c}(y, x) \quad \forall x, y \in B^c. \quad (10)$$

Dans le cas $V = 0$, la fonction de Green a une interprétation électrostatique : $G_{B^c}(x, y)$ est la valeur en x du potentiel électrique créé par une charge unité placée en y , lorsque le domaine B est occupé par un conducteur à potentiel nul.

Une seconde quantité importante est le *potentiel d'équilibre* $h_{AB}(x) = \mathbb{P}^x\{\tau_A < \tau_B\}$, aussi appelé « committor » : il donne la probabilité, partant de x , d'atteindre l'ensemble A avant l'ensemble B . C'est une fonction \mathcal{L} -harmonique, qui satisfait le *problème de Dirichlet*

$$\begin{cases} (\mathcal{L}h_{AB})(x) = 0 & x \in (A \cup B)^c, \\ h_{AB}(x) = 1 & x \in A, \\ h_{AB}(x) = 0 & x \in B. \end{cases}$$

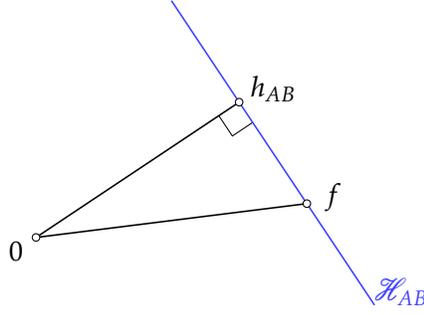


FIGURE 4 – Le principe de Dirichlet affirme que la capacité minimise la distance à l’origine, mesurée par la forme de Dirichlet, parmi l’ensemble \mathcal{H}_{AB} des fonctions h valant 1 en A et 0 en B . Cela découle du fait que $\langle f, -\mathcal{L}h_{AB} \rangle_\pi$ est constante pour $f \in \mathcal{H}_{AB}$.

Le potentiel d’équilibre admet également une expression intégrale en termes de la fonction de Green, à savoir

$$h_{AB}(x) = - \int_{\partial A} G_{B^c}(x, y) e_{AB}(dy), \quad (11)$$

où e_{AB} est une mesure concentrée sur ∂A , appelée *mesure d’équilibre*, définie par

$$e_{AB}(dx) = (-\mathcal{L}h_{AB})(dx).$$

L’interprétation électrostatique de h_{AB} est que c’est le potentiel électrique dans un condensateur, formé de deux conducteurs en A et B , respectivement au potentiel 1 et 0 (Figure 3). Enfin, la *capacité*

$$\text{cap}(A, B) = \int_{\partial A} e^{-V(x)/\varepsilon} e_{AB}(dx)$$

est la constante de normalisation assurant que

$$\nu_{AB}(dx) = \frac{1}{\text{cap}(A, B)} e^{-V(x)/\varepsilon} e_{AB}(dx)$$

soit une mesure de probabilité sur ∂A . En électrostatique, $\text{cap}(A, B)$ s’interprète comme la charge totale dans le condensateur (qui est bien égale à la capacité pour une différence de potentiel unité).

En combinant les expressions (9) de w_B et (11) de h_{AB} avec la relation d’équilibre détaillé (10) de la fonction de Green, on obtient la relation

$$\int_{\partial A} \mathbb{E}^x[\tau_B] \nu_{AB}(dx) = \frac{1}{\text{cap}(A, B)} \int_{B^c} e^{-V(x)/\varepsilon} h_{AB}(x) dx, \quad (12)$$

qui est essentielle pour l’approche par la théorie du potentiel. En prenant pour A une petite boule centrée en x^* , on peut en effet montrer (soit à l’aide d’inégalités de Harnack, soit par un argument de couplage) que $\mathbb{E}^x[\tau_B]$ varie très peu sur ∂A . Le membre de gauche de (12) est donc proche de l’espérance cherchée $\mathbb{E}^{x^*}[\tau_B]$. Quant au membre de droite, on commence par observer que si B est une petite boule centrée en y^* , alors h_{AB} est proche de 1 dans le bassin d’attraction de x^* , et exponentiellement petite (dans un sens qu’on contrôle) dans le bassin de y^* . La méthode de Laplace permet alors de montrer que

$$\int_{B^c} e^{-V(x)/\varepsilon} h_{AB}(x) dx \simeq \sqrt{\frac{(2\pi\varepsilon)^n}{\det \text{Hess } V(x^*)}} e^{-V(x^*)/\varepsilon}. \quad (13)$$

Il reste donc à estimer la capacité. Ceci peut être fait à l'aide de principes variationnels. La *forme de Dirichlet* est la forme quadratique associée au générateur, qui peut s'écrire, à l'aide d'une intégration par parties (identité de Green) comme

$$\mathcal{E}(f, f) = \langle f, -\mathcal{L}f \rangle_\pi = \varepsilon \int_{\mathbb{R}^n} e^{-V(x)/\varepsilon} \|\nabla f(x)\|^2 dx,$$

où $\langle f, g \rangle_\pi$ est le produit scalaire avec poids $\pi(x)$. Le *principe de Dirichlet* affirme que la capacité $\text{cap}(A, B)$ est égale à la borne inférieure de la forme de Dirichlet sur toutes les fonctions valant 1 en A et 0 en B , et que cet infimum est atteint pour $f = h_{AB}$. C'est une conséquence directe du fait que $\langle f, -\mathcal{L}h_{AB} \rangle_\pi = \text{cap}(A, B)$ pour tous les f satisfaisant ces mêmes conditions aux bords, et de l'inégalité de Cauchy–Schwarz (voir Figure 4). En électrostatique, la forme de Dirichlet s'interprète comme l'énergie électrostatique du condensateur, qui est effectivement minimale dans l'état d'équilibre.

Une borne inférieure à la capacité peut être obtenue à l'aide du *principe de Thomson*. Pour un champ de vecteurs $\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, on définit la forme quadratique

$$\mathcal{D}(\varphi, \varphi) = \frac{1}{\varepsilon} \int_{(A \cup B)^c} e^{V(x)/\varepsilon} \|\varphi(x)\|^2 dx.$$

Le principe de Thomson affirme que l'inverse de la capacité est l'infimum de \mathcal{D} sur tous les champs de vecteurs de divergence nulle, et dont le flux sur ∂A est égal à 1.

En choisissant des fonctions tests adéquates pour les deux principes variationnels (qu'on devine en s'inspirant du cas de la dimension 1, qui peut être résolu explicitement), on trouve

$$\text{cap}(A, B) \simeq \frac{|\lambda_-(z^*)|}{2\pi} \sqrt{\frac{(2\pi\varepsilon)^n}{|\det \text{Hess } V(z^*)|}} e^{-V(z^*)/\varepsilon}$$

En prenant le rapport entre (13) et cette dernière expression, on obtient bien la formule d'Eyring–Kramers (7).

3 Métastabilité pour l'équation d'Allen–Cahn

Notre objectif est maintenant de quantifier la métastabilité, de manière similaire aux EDS, pour des équations aux dérivées partielles stochastiques (EDPS). Nous allons considérer ici l'équation d'Allen–Cahn

$$\partial_t \phi = \Delta \phi + \phi - \phi^3 + \sqrt{2\varepsilon} \xi, \quad (14)$$

qui est un modèle simple de séparation de phases, dans un mélange de glace et d'eau par exemple, ou encore dans un alliage. C'est également l'une des EDPS les plus simples présentant un comportement métastable.

L'inconnue est un champ $\phi(t, x)$, où la variable spatiale x appartient au tore $\mathbb{T}_L^d = (\mathbb{R}/L\mathbb{Z})^d$ de taille L (on pourrait travailler avec le tore unité quitte à introduire un paramètre de viscosité devant le Laplacien). Le terme ξ dénote ce que l'on appelle un *bruit blanc espace-temps*. Intuitivement, ξ représente un bruit Brownien agissant de manière indépendante en tout point de l'espace, ce qui se traduit par la relation

$$\mathbb{E}[\xi(t, x)\xi(s, y)] = \delta(t - s)\delta(x - y). \quad (15)$$

La définition mathématique de ξ est que c'est une distribution aléatoire gaussienne, centrée, et de covariance donnée par

$$\mathbb{E}[\langle \xi, \varphi_1 \rangle \langle \xi, \varphi_2 \rangle] = \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle_{L^2}$$

pour tout couple de fonctions tests $\varphi_1, \varphi_2 \in L^2$. En effet, en remplaçant formellement les fonctions test par des distributions de Dirac, on retrouve la relation (15). De plus, si $\varphi_T(t, x)$ vaut 1 si $t \in [0, T]$ et x appartient à un ensemble $A \subset \mathbb{T}_L^d$, et 0 sinon, alors $W_T = \langle \xi, \varphi_T \rangle$ est un mouvement Brownien.

On peut considérer (14) comme un analogue en dimension infinie de la diffusion gradient (1), pour le potentiel

$$V(\phi) = \int_{\mathbb{T}_L^d} \left(\frac{1}{2} \|\nabla \phi(x)\|^2 - \frac{1}{2} \phi(x)^2 + \frac{1}{4} \phi(x)^4 \right) dx. \quad (16)$$

En effet, pour toute fonction périodique ψ , la dérivée de Gâteaux de V dans la direction ψ vaut

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{V(\phi + h\psi) - V(\phi)}{h} = \int_{\mathbb{T}_L^d} (\nabla \phi(x) \cdot \nabla \psi(x) - \phi(x)\psi(x) + \phi(x)^3\psi(x)) dx.$$

Une intégration par parties du terme en $\nabla \phi \cdot \nabla \psi$ montre que cette dérivée est précisément égale au produit scalaire $-\langle \Delta \phi + \phi - \phi^3, \psi \rangle_{L^2}$ du membre de droite de (14) avec ψ , changé de signe.

Les solutions stationnaires de (14) dans le cas déterministe $\varepsilon = 0$ sont les points critiques de V . Parmi ces points critiques, il n'en existe que deux qui sont des minima locaux, et jouent donc le même rôle que x^* et y^* dans le cas des diffusions : ce sont les solutions identiquement égales à ± 1 , que nous noterons ϕ_{\pm}^* . Si ϕ représente un mélange d'eau et de glace, alors ϕ_{-}^* et ϕ_{+}^* représentent respectivement la glace pure et l'eau pure. Selon la taille L du domaine, il existe un ou plusieurs autres points critiques. Dans ce qui suit, pour simplifier, nous allons nous concentrer sur le cas $L < 2\pi$. Alors, l'unique autre point critique est la fonction identiquement nulle, que nous noterons ϕ_{trans}^* car il s'agit de l'état de transition pour aller de ϕ_{-}^* à ϕ_{+}^* . Il joue le même rôle que z^* dans le cas des diffusions.

La Figure 5 donne un exemple d'évolution temporelle d'une solution de (14) en dimension 2.⁷ Celle-ci présente un phénomène de séparation progressive des phases (en physique du solide, par exemple pour la séparation des phases d'un alliage, on parle aussi de *décomposition spinodale*), qui correspond à une convergence assez lente vers l'un des états stables ϕ_{\pm}^* . Une différence par rapport au cas de la diffusion de dimension 1 représenté dans la Figure 2 est que l'on observe pendant longtemps un mélange des deux phases. Ce n'est qu'au bout d'un temps très long (dépassant ce qui est montré sur la Figure 5) que le système s'approche d'une phase pure, soit bleue, soit rouge. Cela est dû au fait que la condition initiale, aléatoire à moyenne nulle, incite le champ à s'approcher d'abord du point selle ϕ_{trans}^* (qui est également de moyenne nulle), avant d'être finalement attiré par ϕ_{-}^* ou ϕ_{+}^* . Comme, de plus, on est en dimension infinie, le système a beaucoup de « place » lui permettant d'évoluer avant de converger vers un équilibre.

7. On trouvera des animations sur les pages <https://www.idpoisson.fr/berglund/simchain.html> pour la dimension 1, et <https://www.idpoisson.fr/berglund/simac.html> pour la dimension 2. Voir aussi la page YouTube <http://tinyurl.com/q43b61f>. Par ailleurs, on trouvera des simulations interactives aux adresses <https://experiences.math.cnrs.fr/Equation-aux-Derivees-Partielles.html> et <https://experiences.math.cnrs.fr/Equation-aux-Derivees-Partielles-69.html>.

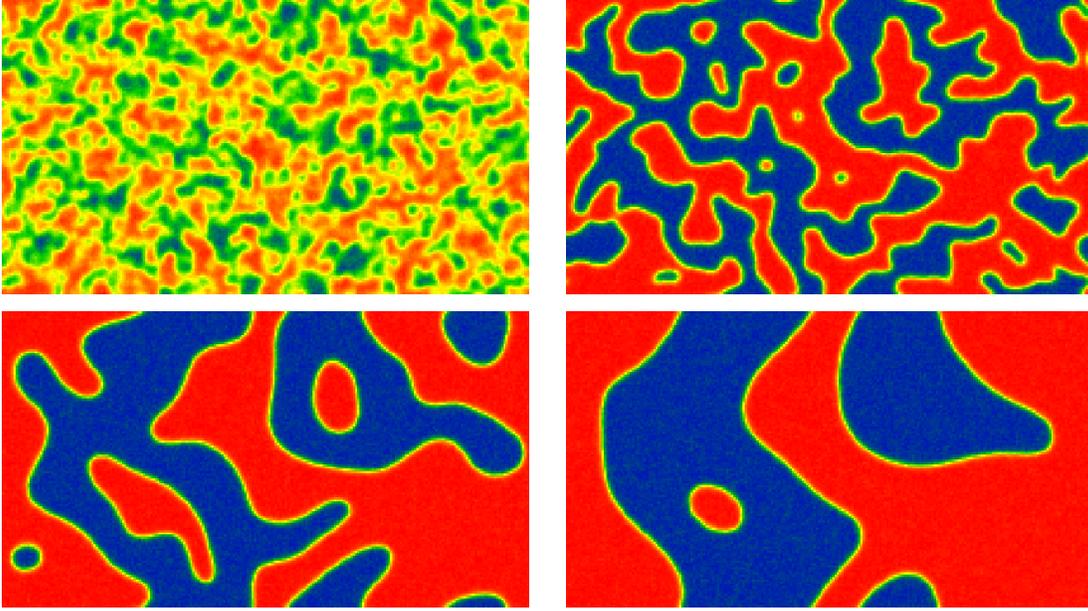


FIGURE 5 – Évolution temporelle d’une solution de l’équation d’Allen–Cahn stochastique sur un tore de dimension 2, illustrant le phénomène de décomposition spinodale, ou séparation lente des phases. Les couleurs rouge et bleue représentent, respectivement, des régions où le champ ϕ est proche de 1 et de -1 , alors que le jaune correspond à ϕ proche de 0. L’effet principal du bruit sur ces simulations est de rendre les phases rouge et bleue légèrement granulaires. Les interfaces entre les deux phases restent relativement lisses, ce qui est dû à l’effet régularisant du Laplacien.

Si, contrairement à ce qui est montré dans la Figure 5, on démarrerait la simulation dans l’une des phases pures, par exemple ϕ_-^* , on verrait le système rester très longtemps près de cet état, avant de faire une transition vers l’autre phase, c’est-à-dire ϕ_+^* . Puis, après un autre intervalle de temps très long, on le verrait retourner près de l’état initial, et ainsi de suite. La valeur moyenne du champ se comporterait donc un peu comme dans la Figure 2. On a donc bien affaire à un phénomène de métastabilité. Une question naturelle qui se pose ici pour $\varepsilon > 0$ est la suivante : si l’on démarre avec une condition initiale proche de ϕ_-^* , quelle est l’asymptotique précise du temps nécessaire à atteindre un petit voisinage (dans une norme appropriée) de la solution ϕ_+^* ?

3.1 Dimension 1 : déterminants de Fredholm

Dans le cas de la dimension $d = 1$, William Faris et Giovanni Jona-Lasinio ont établi dans [10] un principe de grandes déviations, ayant pour fonction taux (comparer à l’expression (6) de la fonction taux d’une diffusion)

$$\mathcal{I}_{[0,T]}(\gamma) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\mathbb{T}_L} \left[\frac{\partial \gamma}{\partial t}(t,x) - \frac{\partial^2 \gamma}{\partial x^2}(t,x) - \gamma(t,x) + \gamma(t,x)^3 \right]^2 dx dt. \quad (17)$$

Soit τ le temps de première atteinte d’une boule $B = \{\phi : \|\phi - \phi_+^*\|_{L^\infty} < \delta\}$, avec $\delta > 0$ petit et indépendant de ε . Par une méthode tout à fait analogue à celle discutée dans la section 2.1, on obtient que τ satisfait la loi d’Arrhenius

$$\mathbb{E}^{\phi_-^*}[\tau] \simeq e^{[V(\phi_{\text{trans}}^*) - V(\phi_-^*)]/\varepsilon}.$$

Qu'en est-il de la loi d'Eyring–Kramers ? Si nous voulons extrapoler l'expression (7) obtenue en dimension finie, il nous faut d'abord déterminer l'analogue des matrices Hessiennes de V aux points critiques. Une intégration par parties montre que le développement limité d'ordre 2 du potentiel autour de $\phi_{\text{trans}}^* = 0$ s'écrit

$$V(\phi) = \frac{1}{2} \langle \phi, [-\Delta - 1] \phi \rangle_{L^2} + \mathcal{O}(\phi^4),$$

ce qui nous permet d'identifier $\text{Hess } V(\phi_{\text{trans}}^*)$ avec la forme quadratique $-\Delta - 1$. Un argument similaire appliqué en ϕ_-^* montre que $\text{Hess } V(\phi_-^*)$ s'identifie à $-\Delta + 2$.⁸ Pris séparément, ces deux opérateurs n'ont pas de déterminant bien défini. Toutefois, leur rapport peut s'écrire

$$\det((-\Delta + 2)(-\Delta - 1)^{-1}) = \det(\mathbb{1} + 3(-\Delta - 1)^{-1}). \quad (18)$$

Il s'agit d'un *déterminant de Fredholm*, un objet qui permet de généraliser le polynôme caractéristique à des opérateurs en dimension infinie.⁹ Pour voir que ce déterminant converge, notons que les valeurs propres λ_k de $3(-\Delta - 1)^{-1}$ décroissent comme $1/k^2$ pour k grand. Le logarithme du déterminant se comporte donc comme la somme des $\ln(1 + \lambda_k)$, c'est-à-dire la somme des λ_k , ou encore la trace de $3(-\Delta - 1)^{-1}$. Le critère de Riemann nous confirme que cette somme converge, on dit que $3(-\Delta - 1)^{-1}$ est *de classe trace*. En fait, en utilisant deux identités d'Euler sur les produits infinis, on peut obtenir la valeur explicite

$$\det(\mathbb{1} + 3(-\Delta - 1)^{-1}) = -\frac{\sinh^2(L/\sqrt{2})}{\sin^2(L/2)}.$$

Le théorème suivant est un cas particulier d'un résultat montré dans [5] (et aussi d'un résultat de [2], obtenu par une approche différente).

Théorème 3.1. *Pour $L < 2\pi$, on a*

$$\mathbb{E}^{\phi_-^*}[\tau] = \frac{2\pi}{|\lambda_-(\phi_{\text{trans}}^*)|} \frac{e^{[V(\phi_{\text{trans}}^*) - V(\phi_-^*)]/\varepsilon}}{\sqrt{|\det(\mathbb{1} + 3(-\Delta - 1)^{-1})|}} [1 + R(\varepsilon, \delta)], \quad (19)$$

où $\lambda_-(\phi_{\text{trans}}^*) = -1$ est la plus petite valeur propre de $-\Delta - 1$, et $R(\varepsilon, \delta)$ est un terme d'erreur convergeant vers 0 lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. (La vitesse de cette convergence dépend de L , elle devient plus lente lorsque L s'approche de 2π .)

Donnons une esquisse de la démonstration du Théorème 3.1. La première étape consiste en une *approximation de Galerkin spectrale*. Soit $\{e_k\}_{k \in \mathbb{Z}}$ une base de Fourier de $L^2(\mathbb{T}_L)$, et pour un entier positif N (appelé *paramètre de coupure ultra-violette*), soit P_N la projection sur l'espace \mathcal{H}_N engendré par $\{e_k\}_{|k| \leq N}$. L'équation projetée

$$\partial_t \phi_N = \Delta \phi_N + \phi_N - P_N(\phi_N^3) + \sqrt{2\varepsilon} P_N \xi$$

est alors équivalente à une EDS de dimension finie de la forme (1), avec V le potentiel (16) restreint à \mathcal{H}_N . On peut donc appliquer l'approche par la théorie du potentiel discutée dans la section 2.2, en prenant garde à bien gérer la dépendance des termes d'erreur dans le paramètre de coupure N , puis prendre la limite $N \rightarrow \infty$.

8. Les valeurs -1 et 2 sont les dérivées secondes de la fonction $\phi \mapsto \frac{1}{4}\phi^4 - \frac{1}{2}\phi^2$ en 0 et en -1 .

9. Les racines non nulles du polynôme caractéristique $c_M(t) = \det(t\mathbb{1} - M)$ d'une matrice M sont les inverses des racines de $\bar{c}_M(s) = \det(\mathbb{1} - sM)$. Le déterminant de Fredholm de $-sM$ est l'analogue de $\bar{c}_M(s)$ lorsque M est un opérateur linéaire de dimension infinie.

Une difficulté majeure est donc d’obtenir une estimation similaire à (19) pour l’approximation de Galerkin, avec un terme d’erreur $R(\varepsilon, \delta)$ qui ne dépende pas de N . Une idée clé de la démonstration consiste à décomposer le potentiel V en une partie quadratique et une partie d’ordre supérieur. Cela permet d’interpréter la capacité et l’intégrale du membre de droite de la relation (12) comme des espérances, sous une mesure Gaussienne, de certaines variables aléatoires, que l’on peut ensuite estimer à l’aide d’arguments probabilistes. On trouvera des détails sur ce calcul dans [3, Section 2.7].

3.2 Dimension 2 : déterminants de Carleman–Fredholm

Intéressons-nous maintenant à l’équation d’Allen–Cahn (14) sur le tore de dimension $d = 2$. Il s’avère que contrairement au cas $d = 1$, l’équation n’est plus bien posée ! C’est une conséquence du fait que le bruit blanc espace-temps est plus singulier en dimension 2 qu’en dimension 1. Dans [7], Giuseppe Da Prato et Arnaud Debussche ont résolu ce problème par un procédé de *renormalisation*, inspiré de la physique quantique des champs. Au lieu de (14), ils considèrent, pour $\delta > 0$, l’équation régularisée

$$\partial_t \phi = \Delta \phi + \phi + 3\varepsilon C_\delta \phi - \phi^3 + \sqrt{2\varepsilon} \xi^\delta. \quad (20)$$

Ici ξ^δ est une régularisation du bruit blanc spatio-temporel, définie comme la convolution $\rho^\delta * \xi$, où

$$\rho^\delta(t, x) = \frac{1}{\delta^4} \rho\left(\frac{t}{\delta^2}, \frac{x}{\delta}\right),$$

pour une fonction test ρ d’intégrale 1. Par conséquent, ρ^δ converge vers la distribution de Dirac lorsque δ tend vers 0. De plus, C_δ est une *constante de renormalisation* qui diverge comme $\ln(\delta^{-1})$ lorsque δ tend vers 0. Comme ξ^δ est une fonction, et non une distribution, l’équation dite *renormalisée* (20) admet des solutions pour tout $\delta > 0$. Da Prato et Debussche ont alors montré que ces solutions convergent vers une limite bien définie lorsque δ tend vers 0.

À première vue, on pourrait penser que les états d’équilibre stables de l’équation (20) se trouvent en $\pm\sqrt{1 + 3\varepsilon C_\delta}$, et tendent donc vers l’infini lorsque δ tend vers 0 à ε fixé. En fait, il n’en est rien — une première indication de cela est que Martin Hairer et Hendrik Weber ont démontré dans [13] un principe de grandes déviations, avec une fonction taux analogue à celle du cas unidimensionnel (voir (17)). Le point à noter est que comme en dimension 1, cette fonction taux ne fait pas apparaître de contre-terme de renormalisation. On en déduit la loi d’Arrhenius

$$\mathbb{E}^{\phi_-^*}[\tau] \simeq e^{[V(\phi_{\text{trans}}^*) - V(\phi_-^*)]/\varepsilon},$$

où V est le potentiel (16), indépendant de tout terme de renormalisation. Comme avant, τ est bien le temps de transition entre les équilibres ϕ_-^* et ϕ_+^* , situés en ± 1 . On peut interpréter ce résultat comme indiquant que le *contre-terme* $3\varepsilon C_\delta \phi$ sert uniquement à rendre la non-linéarité ϕ^3 bien définie.

Et pour la loi d’Eyring–Kramers ? Ici, il s’avère que le déterminant de Fredholm (18) ne converge pas. En effet, $3(-\Delta - 1)^{-1}$ n’est plus de classe trace en dimension 2, puisque ses valeurs propres sont proportionnelles à $1/(k_1^2 + k_2^2)$ avec k_1 et k_2 deux entiers non nuls. Or la somme de ces valeurs propres diverge comme la série harmonique !

La solution à ce problème consiste tout d’abord à travailler, comme en dimension 1, avec une approximation de Galerkin spectrale avec coupure ultraviolette N . Au lieu de

régulariser le bruit blanc espace-temps par convolution, on peut à nouveau considérer sa projection de Galerkin spectrale $\xi_N = P_N \xi$, avec un contre-terme

$$3\varepsilon C_N = \frac{3\varepsilon}{L^2} \text{Tr}(P_N(-\Delta - 1)^{-1})$$

qui diverge comme $\ln(N)$ (la constante C_N est la variance du *champ libre Gaussien* tronqué¹⁰). Le potentiel renormalisé s'écrit alors

$$V_N(\phi) = \int_{\mathbb{T}_L^2} \left[\frac{1}{2} \|\nabla \phi(x)\|^2 + \frac{1}{4} \phi(x)^4 - \frac{1}{2} (1 + 3\varepsilon C_N) \phi(x)^2 \right] dx.$$

Le point crucial est alors de noter que

$$V_N(\phi_{\text{trans}}^*) - V_N(\phi_-^*) = \frac{L^2}{4} + \frac{3}{2} L^2 \varepsilon C_N.$$

Le nouveau terme $\frac{3}{2} L^2 \varepsilon C_N$ est précisément celui qui va faire converger le préfacteur. En effet, la formule d'Eyring–Kramers fait intervenir le facteur

$$\det(\mathbb{1} + 3P_N(-\Delta - 1)^{-1}) e^{-3\text{Tr}(P_N(-\Delta - 1)^{-1})},$$

qui admet une limite lorsque $N \rightarrow \infty$ (cela suit du fait que son logarithme se comporte comme la somme des $1/(k_1^2 + k_2^2)^2$). Il s'agit en fait d'une régularisation connue du déterminant de Fredholm, appelée aussi *déterminant de Carleman–Fredholm*, parfois notée $\det_2(\mathbb{1} + 3(-\Delta - 1)^{-1})$. Contrairement au déterminant de Fredholm, ce déterminant modifié est bien défini pour les opérateurs dont le carré est de classe trace, appelés *opérateurs de Hilbert–Schmidt*, dont $3(-\Delta - 1)^{-1}$ fait partie.

Le théorème suivant combine les résultats de [4] et [15].

Théorème 3.2. *Soit τ le temps d'atteinte d'une boule (dans la norme de Sobolev H^s pour un $s < 0$), centrée en ϕ_+^* . Pour $L < 2\pi$, on a*

$$\mathbb{E}^{\phi_+^*}[\tau] = \frac{2\pi}{|\lambda_-(\phi_{\text{trans}}^*)|} \frac{e^{[V(\phi_{\text{trans}}^*) - V(\phi_+^*)]/\varepsilon}}{\sqrt{|\det_2(\mathbb{1} + 3(-\Delta - 1)^{-1})|}} [1 + R(\varepsilon, \delta)], \quad (21)$$

où $\lambda_-(\phi_{\text{trans}}^*) = -1$ est la plus petite valeur propre de $-\Delta - 1$, et $R(\varepsilon, \delta)$ est un terme d'erreur convergeant vers 0 lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ (à une vitesse dépendant de L).

Ce résultat confirme que la renormalisation n'a pas pour effet de déplacer les états stationnaires, puisque le théorème s'applique bien aux états ϕ_{\pm}^* situés en ± 1 . En revanche, la procédure de renormalisation est nécessaire pour obtenir un préfacteur fini pour le temps de transition, puisque le rapport de déterminants spectraux et le contre-terme $\frac{3}{2} L^2 \varepsilon C_N$ dans le potentiel se compensent exactement.

4 Quelques problèmes ouverts

Une question naturelle est de savoir s'il existe une loi d'Eyring–Kramers pour l'équation d'Allen–Cahn en dimension $d = 3$ (en dimension 4, on ne s'attend pas à l'existence de

¹⁰. Pour plus d'informations sur le champ libre Gaussien, voir l'article de Rémi Rhodes dans la Gazette n° 157 (juillet 2018).

solutions non triviales à cette équation). Comme montré par Martin Hairer dans le très remarqué article [12]¹¹, qui lui a valu la Médaille Fields en 2014, la forme de l'équation renormalisée est alors

$$\partial_t \phi = \Delta \phi + \phi + [3\varepsilon C_\delta^{(1)} - 9\varepsilon^2 C_\delta^{(2)}] \phi - \phi^3 + \sqrt{2\varepsilon} \xi^\delta,$$

où $C_\delta^{(1)}$ et $C_\delta^{(2)}$ divergent respectivement comme δ^{-1} et $\ln(\delta^{-1})$. Le premier contre-terme provient de la même procédure de renormalisation qu'en dimension 2 (appelée *renormalisation de Wick*), et ne pose pas de nouvelle difficulté par rapport au cas $d = 2$. En revanche, le second contre-terme est propre à la dimension 3, et source de nombreuses difficultés. En particulier, contrairement au cas $d = 2$, la mesure invariante de l'équation d'Allen–Cahn est singulière par rapport au champ libre Gaussien.

On peut toutefois remarquer que $(-\Delta - 1)^{-1}$ reste Hilbert-Schmidt en dimension 3. Comme le second contre-terme apparaît avec un facteur ε^2 , on s'attend à ce qu'une formule d'Eyring–Kramers similaire à (21) reste valable ici. Avec Ajay Chandra, Giacomo Di Gesù et Hendrik Weber, nous sommes parvenus à établir une partie des bornes nécessaires à établir ce résultat. Toutefois, pour l'heure la borne inférieure sur la capacité nous résiste encore.

Bien entendu, il serait souhaitable d'obtenir des formules d'Eyring–Kramers pour d'autres EDPS que celle d'Allen–Cahn. Un exemple est l'équation de Cahn–Hilliard, qui décrit la séparation de phases dans des situations où le volume total de chaque phase est conservé, comme dans le cas de mélanges d'eau et d'huile. Toutefois, comme la plupart des modèles mathématiques de systèmes métastables, ces EDPS restent basées sur une dynamique sur réseau : chaque point du réseau est caractérisé par son état, mais reste fixé au même endroit. C'est un bon modèle pour certains alliages ou des matériaux ferromagnétiques, qui ont une structure cristalline, avec des atomes ou des spins de différents types attachés à chaque site. Pour un mélange d'eau et de glace, toutefois, il n'y a pas de réseau sous-jacent. L'un des grands défis de la théorie de la métastabilité est d'analyser des modèles tenant compte du fait que les cristaux de glace peuvent se déplacer à travers l'eau liquide, pour former des cristaux plus grands par agglomération.

A Encart : le mouvement Brownien

Le mouvement Brownien est un modèle mathématique pour le mouvement erratique d'une particule immergée dans un fluide, sous l'effet des collisions avec les molécules du fluide. Il fut observé pour la première fois par le naturaliste écossais Robert Brown en 1827, lors de l'étude au microscope de grains de pollen.

Les premières descriptions mathématiques du mouvement Brownien furent proposées par le mathématicien français Louis Bachelier en 1901, pour des applications en finance, et par Albert Einstein en 1905. Des variantes de leurs approches furent développées par Marian Smoluchowski en 1906 et par Paul Langevin en 1908. Les calculs d'Einstein permirent à Jean Perrin d'estimer expérimentalement le nombre d'Avogadro en 1909, ce qui lui valut le prix Nobel de physique en 1926.

Considérons le cas de la dimension 1, et supposons que la particule subit des collisions régulières, à intervalles de temps Δt . Entre deux collisions successives, la particule se déplace d'une distance Δx , avec probabilité $\frac{1}{2}$ soit vers la gauche, soit vers la droite. Sa

11. On pourra consulter l'article de François Delarue dans la Gazette n° 143 (janvier 2015) pour plus de détails sur la théorie introduite par Martin Hairer, appelée théorie des *structures de régularité*.

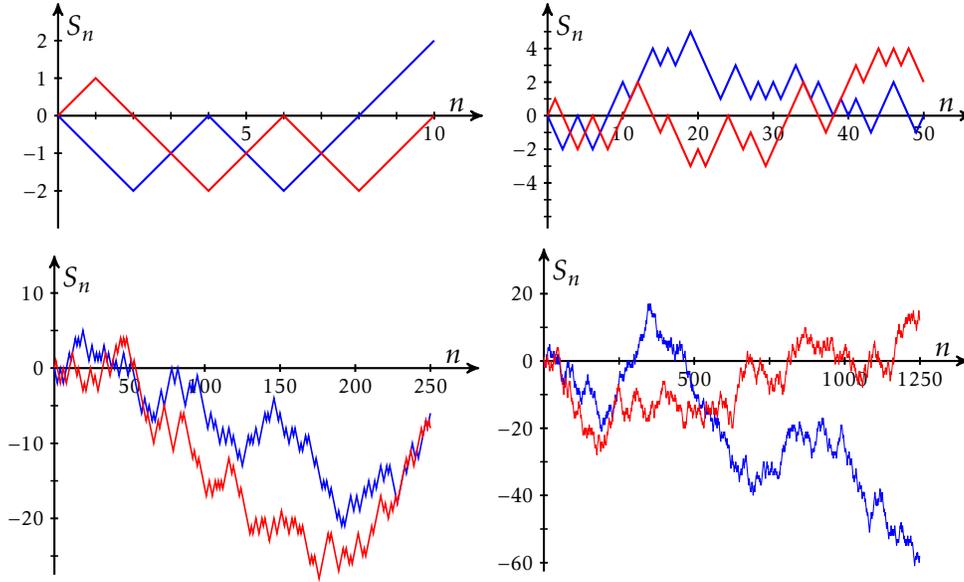


FIGURE 6 – Deux réalisations (l’une en rouge, l’autre en bleu) d’une marche aléatoire symétrique sur \mathbb{Z} , vues à différentes échelles. D’une image à la suivante, l’échelle horizontale est comprimée d’un facteur 5, alors que l’échelle verticale est comprimée d’un facteur $\sqrt{5}$.

position au temps $n\Delta t$ est donc donnée par $S_n\Delta x$, où S_n est une suite d’entiers telle que l’incrément $S_{n+1} - S_n$ vaille 1 ou -1 , chaque fois avec probabilité $\frac{1}{2}$. On suppose de plus que chaque incrément est indépendant de tous les incréments précédents. La suite des S_n s’appelle une marche aléatoire symétrique sur \mathbb{Z} (voir Figure 6).

Comme en pratique, les intervalles d’espace et de temps Δx et Δt sont très petits, il semble pertinent de les faire tendre vers zéro, afin d’obtenir un objet universel. Il s’avère que cette limite est intéressante seulement si Δt est proportionnel à Δx^2 (c’est une conséquence du théorème central limite). Cela revient à poser

$$W_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{n}} S_{\lfloor nt \rfloor}.$$

Cette définition s’avère être équivalente à imposer que pour tout $t > s \geq 0$, l’incrément $W_t - W_s$ suive une loi normale, centrée, de variance $t - s$, et soit indépendant des valeurs du processus jusqu’au temps s .

Norbert Wiener a montré en 1923 que les trajectoires $t \mapsto W_t$ sont continues (W_t est d’ailleurs aujourd’hui aussi connu sous le nom de *processus de Wiener*). D’autres propriétés de W_t furent établies notamment par Raymond Paley, Antoni Zygmund, et Paul Lévy. En particulier, on sait que les trajectoires du mouvement Brownien ne sont pas différentiables. Ceci pose un problème pour la définition de l’EDS (1), qu’on résout en définissant ses solutions comme celles de l’équation intégrale

$$x_t = x_0 - \int_0^t \nabla V(x_s) ds + \sqrt{2\varepsilon} W_t,$$

que l’on peut étudier par un argument de point fixe. La théorie fut généralisée par Kiyoshi Itô dans les années 1940. Son calcul stochastique permet de résoudre des variantes de (1) dans lesquelles le terme de bruit est multiplié par une fonction de x . Certaines

idées à la base du calcul stochastique avaient été découvertes indépendamment par Wolfgang Döblin, et envoyées à l'Académie des sciences dans un pli cacheté qui ne fut ouvert qu'en 2000.

Références

- [1] S. Arrhenius. On the reaction velocity of the inversion of cane sugar by acids. *J. Phys. Chem.*, 4 :226, 1889. In German. Translated and published in : Selected Readings in Chemical Kinetics, M.H. Back and K.J. Laidler (eds.), Pergamon, Oxford, 1967.
- [2] F. Barret. Sharp asymptotics of metastable transition times for one dimensional SPDEs. *Ann. Inst. Henri Poincaré Probab. Stat.*, 51(1) :129–166, 2015.
- [3] N. Berglund. An introduction to singular stochastic PDEs : Allen–Cahn equations, metastability and regularity structures. Lecture notes, Sarajevo Stochastic Analysis Winter School. arXiv/1901.07420, January 2019.
- [4] N. Berglund, G. Di Gesù, and H. Weber. An Eyring–Kramers law for the stochastic Allen–Cahn equation in dimension two. *Electron. J. Probab.*, 22 :1–27, 2017.
- [5] N. Berglund and B. Gentz. Sharp estimates for metastable lifetimes in parabolic SPDEs : Kramers' law and beyond. *Electron. J. Probab.*, 18 :no. 24, 58, 2013.
- [6] A. Bovier, M. Eckhoff, V. Gayrard, and M. Klein. Metastability in reversible diffusion processes. I. Sharp asymptotics for capacities and exit times. *J. Eur. Math. Soc. (JEMS)*, 6(4) :399–424, 2004.
- [7] G. Da Prato and A. Debussche. Strong solutions to the stochastic quantization equations. *Ann. Probab.*, 31(4) :1900–1916, 2003.
- [8] F. den Hollander. Metastability under stochastic dynamics. *Stochastic Process. Appl.*, 114(1) :1–26, 2004.
- [9] H. Eyring. The activated complex in chemical reactions. *Journal of Chemical Physics*, 3 :107–115, 1935.
- [10] W. G. Faris and G. Jona-Lasinio. Large fluctuations for a nonlinear heat equation with noise. *J. Phys. A*, 15(10) :3025–3055, 1982.
- [11] M. I. Freidlin and A. D. Wentzell. *Random Perturbations of Dynamical Systems*. Springer-Verlag, New York, second edition, 1998.
- [12] M. Hairer. A theory of regularity structures. *Invent. Math.*, 198(2) :269–504, 2014.
- [13] M. Hairer and H. Weber. Large deviations for white-noise driven, nonlinear stochastic PDEs in two and three dimensions. *Ann. Fac. Sci. Toulouse Math. (6)*, 24(1) :55–92, 2015.
- [14] H. A. Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, 7 :284–304, 1940.
- [15] P. Tsatsoulis and H. Weber. Exponential loss of memory for the 2-dimensional Allen–Cahn equation with small noise. arXiv :1808.04171, 2018.