Convergence uniforme d'un processus de Fleming-Viot dans un cas métastable de mort brutale

En collaboration avec Pierre Monmarché

Lucas Journel

Laboratoire Jacques-Louis Lions

19/09/2022

Motivation

$$U : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}_+,$$

un potentiel chimique.

$$\mathrm{d}X_t = -\nabla U(X_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}B_t.$$

$$\mathbb{R}^d = \cup_i D_i,$$

D_i bassin d'attraction pour la descente de gradient.

$$\Pi(x) = i, \quad x \in D_i.$$

But : simuler la trajectoire $\Pi(X_t)$.

Motivation

$$\mathrm{d}X_t = -\nabla U(X_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}B_t.$$

$D \subset \mathbb{R}^d$ ouvert borné, on note :

$$\tau_{\partial D} = \inf\left\{t \geqslant 0, X_t \notin D\right\}.$$

But

Simuler $(\tau_{\partial D}, X_{\tau_{\partial D}})$.

$$\tau_{\partial D} \sim e^{U_0/\varepsilon}, \quad U_0 = \min_{\partial D} U - \min_{D} U.$$

Motivation

$$\mathrm{d}X_t = -\nabla U(X_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}B_t.$$

$D \subset \mathbb{R}^d$,

$$t_{mix} \approx e^{c^*/\varepsilon},$$

plus grande barrière d'énergie :

$$c^* = \sup_{\substack{x_1 \text{ min loc} \\ x_2 \text{ min glob}}} E(x_1, x_2),$$

avec

$$E(x_1, x_2) = \inf_{\substack{\xi(0) = x_1 \\ \xi(1) = x_2}} \left\{ \max_{0 \leqslant t \leqslant 1} U(\xi(t)) - U(x_1) - U(x_2) \right\}.$$

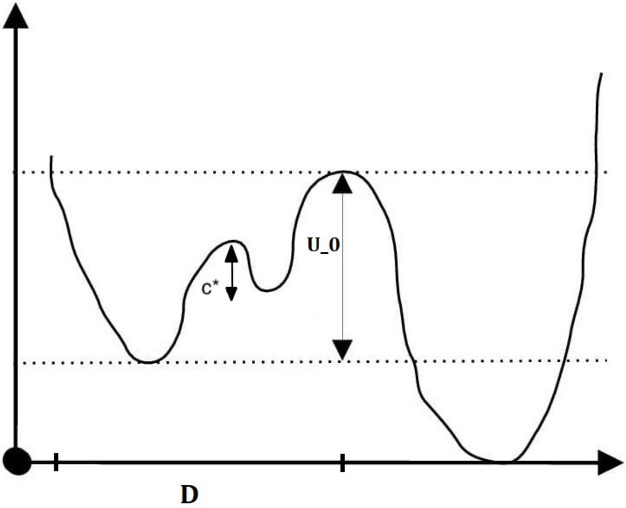

Figure – Exemple de potentiel U

Motivation

Il existe une mesure de probabilité $\nu \in \mathcal{M}^1(D)$, et $\mu, \lambda > 0$ tel que :

$$\lambda \approx e^{c^*/\varepsilon} \ll e^{U_0/\varepsilon} \approx \mu,$$

et pour $t > \lambda$:

$$\mathcal{L}(X_t | \tau_{\partial D} > t) \approx \nu.$$

Partant de ν, $\tau_{\partial D}$ est une variable aléatoire exponentielle de param. μ :

$$\mathbb{P}_\nu(\tau_{\partial D} > t) = e^{-\mu t},$$

$X_{\tau_{\partial D}}$ et $\tau_{\partial D}$ sont indépendants.

Motivation

$N \in \mathbb{N},\ T_1, \ldots, T_N$ variable exponentielle de paramètre λ indépendantes,

$$\inf T_i \sim Exp(N\lambda).$$

Motivation

$N \in \mathbb{N}$, $T_1, \dots, T_N$ variable exponentielle de paramètre λ indépendantes,

$$\inf T_i \sim Exp(N\lambda).$$

$$X_0^1, \dots, X_0^N \sim \nu,$$
$$T = \inf_i \tau_{\partial D}^i, \quad I = \operatorname{argmin} \tau_{\partial D}^i,$$
$$T, X_T^I \text{ sont indépendants}, \quad X_T^I \sim X_{\tau_{\partial D}}, \quad T \sim Exp(N\lambda).$$

Algorithme des répliques parallèles

But

Simuler $(\tau_{\partial D}, X_{\tau_{\partial D}})$.

- Decorrelation step : on attend que $\mathcal{L}aw(X_t) \approx \nu$.
- **Dephasing step** : on produit N copies indépendantes de ν.
- Parallele step : on lance en parallèle N copies indépendantes de la dynamique et on attend le premier évènement de sortie.

REF : [Aristoffa, Lelièvre, Simpson 14] [Binder, Lelièvre, Simpson 14] [Le Bris, Lelièvre, Luskin, Perez 18]

Processus tué

Definition

X processus stochastique dans $E \cup \{\delta\}$ tel que :

$$X_s = \delta \implies \forall t \geqslant s, X_t = \delta.$$

Temps de mort :

$$\tau = \inf \{t \geqslant 0, X_t = \delta\}.$$

Exemple

$D \subset \mathbb{R}^d$, X_t processus de Langevin sur-amorti,
$X_0 \in D$,
$E = D$, $\delta = \{\partial D\}$.

Processus d'Ornstein-Uhlenbeck tué

Mesure quasi-stationnaire

Definition

ν est une mesure quasi-stationnaire (QSD) si pour tout $t \geqslant 0$:

$$\mathbb{P}_\nu(X_t \in \cdot | \tau > t) = \nu.$$

Existence ? Unicité ?
Convergence en temps de la loi de X_t conditionnée à sa survie $\mathcal{L}aw(X_t|\tau > t)$ vers une mesure quasi-stationnaire ?
Échantillonage ?

Propriété (Le Bris, Lelièvre, Luskin, Perez 18)

Il existe une unique mesure quasi-stationnaire ν pour le processus de Langevin sur-amorti tué au bord d'un domaine et :

$$\mathcal{L}aw(X_t|\tau > t) \to \nu.$$

Processus de Fleming-Viot

Definition

Soit $N \in \mathbb{N}$, $\mu_0^N \in \mathcal{M}^1(E^N)$.
Soit $(X_0^i)_{1 \leqslant i \leqslant N}$ une variable aléatoire de loi μ_0^N.
Pour tout $1 \leqslant i \leqslant N$, soit $(\bar{X}_t^i)$ des processus de même loi que (X_t), avec condition initiale X_0^i, et :

$$\tau_1 = \min_i \inf \left\{ t \geqslant 0, \bar{X}_t^i \notin D \right\}.$$

Pour $i \neq i_1$, $0 \leqslant t \leqslant \tau_1$, ou $i = i_1$ et $1 \leqslant t < \tau_1$, on définit :

$$X_t^i = \bar{X}_t^i,$$

et

$$X_{\tau_1}^{i_1} = \bar{X}_{\tau_1}^{I_1^i}.$$

Processus de FV issu de processus d'Ornstein-Uhlenbeck

Propagation du chaos

Propagation du chaos

On dit qu'il y a propagation du chaos si $\mu_0^N = \mu_0^{\otimes N}$ implique :
$\forall t \geqslant 0, \exists \mu_t \in \mathcal{M}^1(E)$, $\forall i \neq j$:

$$\mathcal{L}(X_t^i, X_t^j) \to \mu_t^{\otimes 2},$$

lorsque $N \to \infty$.

But

Si $\mu_0^N = \mu_0^{\otimes N}$, alors :

$$\pi^N(\mathbf{X}_t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \delta_{X_t^i} \to \mathcal{L}(X_t | \tau > t).$$

But

Soit P^N le semi-groupe du processus de FV avec dynamique sous-jacente :

$$\mathrm{d}X_t = -\nabla U(X_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}B_t,$$

tué au bord de D.

$$\begin{tikzcd}
P_t^N \arrow[r, "N\to\infty"] \arrow[d, "t\to\infty"] & \mathcal{L}aw(X_t | \tau_{\partial D} > t) \arrow[d] \\
\nu_\infty^N \arrow[r] & \nu
\end{tikzcd}$$

Hypothèses

- $D \subset \mathbb{R}^d$ est ouvert, borné, connexe et sa frontière est $\mathcal{C}^2$.
- $U : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}_+$ est lisse sur un voisinage de $\overline{D}$.
- $\min_D U = 0$.
- $U|_{\partial D}$ est constant, et
$$U_0 = U|_{\partial D} > c^*.$$
- Pour $x \in \partial D$, on note $n(x)$ la normale extérieure à ∂D.
  Pour tout $x \in \partial D$,
$$n(x) \cdot \nabla U(x) > 0.$$

Convergence en temps long

Soit P^N le semi-groupe du processus de FV avec dynamique sous-jacente :

$$dX_t = -\nabla U(X_t)dt + \sqrt{2\varepsilon}dB_t,$$

tué au bord de D.

Théorème (J, Monmarché 22)

$c^* < a < U_0$, on note $t_\varepsilon = e^{a/\varepsilon}$. Alors $\exists \varepsilon_0, c, C > 0$ tel que $\forall 0 < \varepsilon < \varepsilon_0$, $N \in \mathbb{N}$, $\mu, \nu \in \mathcal{M}^1(D^N)$, $t \geqslant 0$:

$$\|\mu P_t^N - \nu P_t^N\|_{TV} \leqslant CN(1-c)^{t/t_\varepsilon}.$$

En particulier, $\exists!\ \nu_\infty^{N,\varepsilon}$ mesure invariante, et convergence à une vitesse indépendante de N.

Distance de Wasserstein

Definition

Soit d une distance sur $\mathbb{R}^n$, et

$$\mathcal{M}^1_d(\mathbb{R}^n) = \left\{ \mu \text{ proba t.q.} \int_{\mathbb{R}^n} d(x,y)\mu(\mathrm{d}x) < \infty, \text{ pour un certain } y \right\}.$$

Alors pour tout $\mu, \nu \in \mathcal{M}^1_d(\mathbb{R}^d)$, on définit :

$$W_d(\mu,\nu) = \inf \left\{ \mathbb{E}(d(X,Y)), \mathcal{L}(X) = \mu, \mathcal{L}(Y) = \nu \right\}.$$

W_d est une distance sur $\mathcal{M}^1_d(\mathbb{R}^n)$ et $(\mathcal{M}^1_d(\mathbb{R}^n), W_d)$ est complet (sous les bonnes hypothèses).

B voisinage de ∂D,

$$A(x) = \#\{i; x_i \in B\}.$$

$$V : D \to \mathbb{R}_+.$$

$$\mathrm{d}(\mathrm{x},\mathrm{y}) = \sum_{i=1}^{N} \mathbb{1}_{x_i \neq y_i} \left(1 + \beta V(x_i) + \beta V(y_i)\right) + (1 + V_0) N \left(\mathbb{1}_{A(\mathrm{x}) > \alpha N} + \mathbb{1}_{A(\mathrm{y}) > \alpha N}\right) \mathbb{1}_{\mathrm{x} \neq \mathrm{y}},$$

avec $\alpha, \beta, V_0 > 0$.

- $\mathbb{1}_{x \neq y} \to$ distance en variation totale.
- $V \to$ fonction de Lyapunov, tel que $V|_{\partial D} = V_0$.
- $\mathbb{1}_{A(\mathrm{x}) > \alpha N} + \mathbb{1}_{A(\mathrm{y}) > \alpha N} \to$ fonction de Lyapunov "globale".

Inégalité fonctionelles

$\tilde{U} : \mathbb{T}_L^d \to \mathbb{R}_+$ lisse, $\mu_\varepsilon(\mathrm{d}x) \propto e^{-\tilde{U}(x)/\varepsilon}\mathrm{d}x$.

Théorème (Holley, Kusuoka, Strook 89)

μ_ε vérifie une inégalité de Poincaré et de Sobolev : il existe $p > 2$, $C, \lambda_\varepsilon > 0$, tel que :

$$\varepsilon \ln(\lambda_\varepsilon) \to -c^*$$

quand $\varepsilon \to 0$, et pour tout $f : \mathbb{T}^d \mapsto \mathbb{R}$ lisse, tel que $\int_{\mathbb{T}_L^d} f \mathrm{d}\mu_\varepsilon = 0$:

$$\lambda_\varepsilon \int_{\mathbb{T}_L^d} f^2 \mathrm{d}\mu_\varepsilon \leqslant \int_{\mathbb{T}_L^d} |\nabla f|^2 \mathrm{d}\mu_\varepsilon \quad \text{(PI)},$$

$$\left(\int_{\mathbb{T}_L^d} f^p \mathrm{d}\mu_\varepsilon\right)^{\frac{2}{p}} \leqslant C e^{\|\tilde{U}\|_\infty/\varepsilon} \left(\int_{\mathbb{T}_L^d} f^2 \mathrm{d}\mu_\varepsilon + \int_{\mathbb{T}_L^d} |\nabla f|^2 \mathrm{d}\mu_\varepsilon\right) \quad \text{(SI)}.$$

Couplage et temps de mort

$$
\mathrm{d}\tilde{X}_t = -\nabla \tilde{U}(\tilde{X}_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}B_t, \quad X_t \in \mathbb{T}_L^d.
$$

$$
\mathrm{d}X_t = -\nabla U(X_t)\mathrm{d}t + \sqrt{2\varepsilon}\mathrm{d}B_t, \quad X_t \in D.
$$

Théorème (théorie de Freidlin-Wentzell)

Sous les bonnes hypothèses, si B est un voisinage de ∂D :

$$
\sup_{x \in D \setminus B} \lim_{\varepsilon \to 0} \mathbb{P}(e^{(U_0-\gamma)/\varepsilon} < \tau_{\partial D} < e^{(U_0+\gamma)/\varepsilon}) = 1,
$$

pour tout $\gamma > 0$.

Fonction de Lyapunov

Il existe $V : D \to \mathbb{R}_+$, constant sur ∂D, $\sup_D V = V|_{\partial D} = V_0$,

$$\mathbb{E}(V(X^i_{t_\varepsilon})) \leqslant \gamma \mathbb{E}(V(X^i_0)) + C(1-\gamma),$$

$0 < \gamma < 1$, $C < V_0/4$.

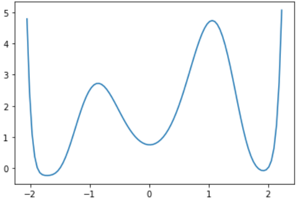

Figure – Potentiel U

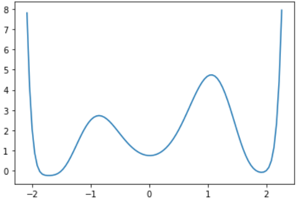

Figure – Lyapunov V

Particules proches de la frontière

B voisinage de ∂D tel que $\min_B V > 3C$. Pour $x = (x_1, \cdots, x_N)$, soit :

$$A(x) = \#\{i; x_i \in B\},$$

Lemme

Pour tout $\alpha > 0$, il existe $\varepsilon_0 > 0$ tel que pour tout $\varepsilon < \varepsilon_0$, il existe $0 < q_\varepsilon < 1$ tel que pour tout $N \in \mathbb{N}$ et $x \in D^N$:

$$\mathbb{P}_x(A(X_{t_\varepsilon}) > \alpha N) \leqslant q_\varepsilon^N,$$

et $\lim_{\varepsilon \to 0} q_\varepsilon = 0$.

Probabilité de découplage

B voisinage de ∂D tel que $\min_B V > 3C$. Pour $x = (x_1, \cdots, x_N)$, soit :

$$A(x) = \#\left\{i; x_i \in B\right\},$$

Lemme

$\exists C, \varepsilon_0 > 0$ tel que $\forall 0 < \varepsilon < \varepsilon_0$, $0 < \alpha < 1/2$, $N \in \mathbb{N}$, $x, y \in D^N$ tel que $\mathbb{1}_{A(x) > \alpha N} + \mathbb{1}_{A(y) > \alpha N} = 0$, $1 \leqslant i \leqslant N$ tel que $x_i = y_i$:

$$\mathbb{P}_{x,y}\left(X^i_{t_\varepsilon} \neq Y^i_{t_\varepsilon}\right) \leqslant \begin{cases} p_\varepsilon C_3 \bar{d}(x,y)/N & \text{if } x_i \notin B \\ C_3 \bar{d}(x,y)/N & \text{if } x_i \in B \end{cases}$$

avec $\bar{d}(x,y) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i \neq y_i}$.

Propagation du chaos

Théorème (Villemonais 14)

$\forall \mu_0 \in \mathcal{M}^1(D^N)$, $(X_0^i) \sim \mu_0$, $\forall f : D \to \mathbb{R}_+$ borné, $\varepsilon > 0$ et $t \geqslant 0$:

$$\mathbb{E}\left(\left|\int_D f \mathrm{d}\pi^N(\mathbf{X}_t) - \mathbb{E}_{\pi^N(\mathbf{X}_0)}\left(f(X_t) | \tau_{\partial D} > t\right)\right|\right) \leqslant \frac{2(1+\sqrt{2})\|f\|_\infty}{\sqrt{N}} \sqrt{\mathbb{E}\left(\frac{1}{\mathbb{P}_{\pi^N(\mathbf{X}_0)}\left(\tau_{\partial D} > t\right)^2}\right)}.$$

Théorème (J, Monmarché 22)

$\forall \mu_0 \in \mathcal{M}^1(D)$, $\exists \varepsilon_0 > 0$, tel que $\forall 0 < \varepsilon < \varepsilon_0$, $N \in \mathbb{N}$, $\exists C_\varepsilon, \eta_\varepsilon > 0$ tel que $\forall f : D \to \mathbb{R}_+$ borné :

$$\sup_{t \geqslant 0} \mathbb{E}\left(\left|\int_D f \mathrm{d}\pi^N(\mathbf{X}_t) - \mathbb{E}_{\mu_0}\left(f\left(X_t\right) | \tau > t\right)\right|\right) \leqslant \frac{C_\varepsilon \|f\|_\infty}{N^{\eta_\varepsilon}}.$$

MERCI POUR VOTRE ATTENTION