

# Etude systématique des transitions dans l'équation de Ginzburg–Landau stochastique par l'algorithme *adaptive multilevel splitting*

Freddy Bouchet<sup>1</sup>, Joran Rolland<sup>2</sup> & Eric Simonnet<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Physique, Ecole Normale Supérieure de Lyon, 46, allée d'Italie, 69007,

<sup>2</sup> Institut du Non linéaire de Nice, UMR 7335, 1361 route des Lucioles, 06560 Valbonne  
joran.rolland@inln.cnrs.fr

**Résumé.** Ce compte rendu décrit l'étude des trajectoires réactives entre les deux états métastables de l'équation de Ginzburg–Landau stochastique. La distribution complète des trajectoires réactives est calculée en utilisant un algorithme de mutation/sélection appelé algorithme de branchement aléatoire multi-niveau adaptatif (Adaptive Multilevel Splitting algorithme, AMS). L'espace des phases de l'EDPS, et par conséquent, les chemins possibles, est paramétré par la taille du domaine. Dans la limite de faible bruit, il apparaît un excellent accord entre le résultat de l'AMS et des prédictions de Grandes Déviations. Ces prédictions sont en accord en ce qui concerne le type de chemin choisi, présentant un seul front, le temps de premier passage moyen, et la probabilité de passage. De plus, des arguments simples permettent de déterminer le comportement de la durée moyenne des trajectoires réactives ainsi que la limite de validité des résultats de grandes déviations, lorsque la taille du domaine est grande et/ou le bruit important. En dehors des limites où les prédictions sont valides, l'AMS permet toujours de déterminer les propriétés de trajectoires réactives.

## 1 Introduction

Les transitions entre états métastables se manifestent dès qu'une source de bruit est présente dans un système ayant plusieurs positions d'équilibre. Elles présentent un intérêt tout particulier lorsqu'elles se produisent dans des systèmes à grand nombre de degrés de liberté, comme par exemple, les équations aux dérivées partielles stochastiques (EDPS) issues entre autres de la mécanique des fluides. Afin de tester les approches d'étude de ces EDPS, on étudie un système simple mais riche, l'équation de Ginzburg–Landau Stochastique qui apparaît dans de nombreux domaines de la physique, allant des transitions de phase (où elle est parfois dite équation d'Allen-Cahn) aux sciences du climat (où elle est appelée équation de Chafee-Infante).

Une fois adimensionnée, avec des conditions de bord de Dirichlet, elle s'écrit :

$$\partial_t A = \partial_x^2 A + (A - A^3) + \sqrt{\frac{2}{\beta}} \eta, \quad A(0) = A(L) = 0, \quad \langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = \delta(t - t') \delta(x - x'), \quad (1)$$

avec  $L$  la taille du système,  $\eta$  un bruit blanc en temps et en espace et  $\beta$  l'inverse de la température. Une grande partie de sa simplicité provient du fait qu'elle dérive d'un potentiel :

$$\partial_t A = -\frac{\delta V}{\delta A} + \sqrt{\frac{2}{\beta}} \eta, \quad V = \int_0^L dx \left( -\frac{1}{2} A^2 + \frac{1}{4} A^4 + \frac{1}{2} (\partial_x A)^2 \right), \quad (2)$$

ce qui simplifie l'étude de l'espace des phases et de la mesure invariante. On peut en particulier montrer que les deux états métastables sont  $A_0^\pm \simeq \pm 1$  et qu'ils sont séparés par  $2n+1$  points cols si  $n\pi \leq L < (n+1)\pi$ . Ces points cols sont  $A = 0$  et des paires de solutions  $A_k$  à  $k$  fronts,  $1 \leq k \leq n$  [2] (voir figure 1 (a)).

Différentes approches ont été utilisées pour étudier les transitions entre les deux états en présence de bruit. Une application du Principe de Freidlin–Wentzell de grandes déviations dans des domaines de taille finie a conduit à la minimisation de l'action correspondante pour une durée de trajectoire fixée [3]. Cependant, cela ne présente aucune assurance quant au fait que les instantons calculés reproduisent les

trajectoires réactives à grand  $\beta$ . Dans l'autre limite,  $L \rightarrow \infty$ , il a été proposé que les trajectoires réactives correspondaient à une marche aléatoire des fronts [9,11].

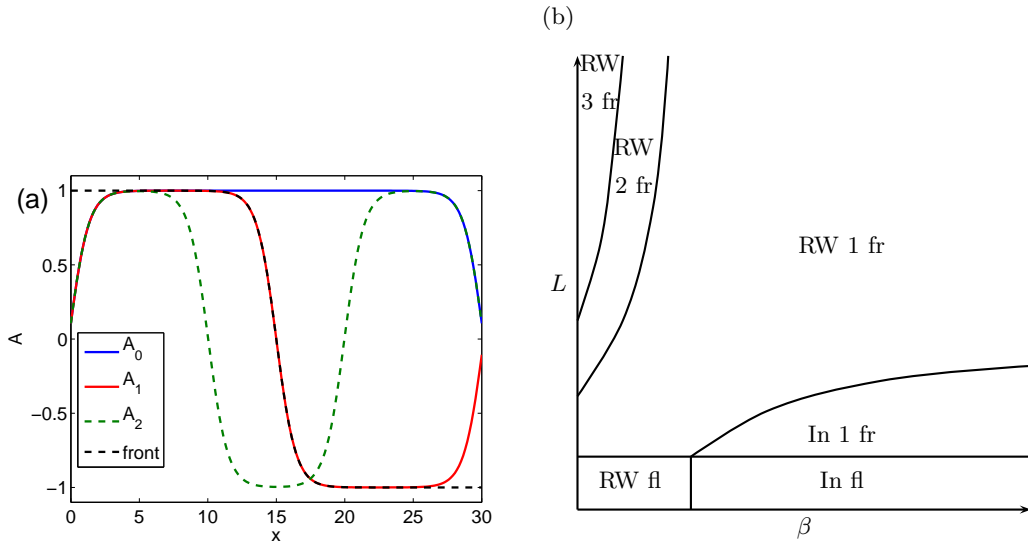
Pour étudier les trajectoires réactives pour l'ensemble des valeurs de  $\beta, L$  et mettre en perspective les prédictions théoriques et leurs limites de validité on utilise un algorithme de mutation/sélection, l'Adaptive Multilevel Splitting. Il permet de calculer la distribution des trajectoires réactives en simulant  $N$  dynamiques parallèles du système, appelées clones, de manière itérative : en supprimant les trajectoires allant le moins loin et en les rebranchant sur des trajectoires allant plus loin [1,6,8]. Le compte rendu de l'application de cet algorithme à l'équation de Ginzburg–Landau Stochastique est organisé comme suit : On présente d'abord les méthodes d'étude, quelles soient théoriques (§ 2.1) ou numériques (§ 2.2). On présente ensuite les résultats de l'étude numérique, d'abord de manière qualitative (§ 3.1) puis en regard des prédictions analytiques (§ 3.2). On discute finalement ces résultats dans la conclusion (§ 4)

## 2 Traiter la métastabilité

Dans cette section on décrit les méthodes pour déterminer les trajectoires réactives. Une trajectoire réactive est une trajectoire qui part d'un voisinage  $\mathcal{A}$  (par exemple une hypersurface  $\mathcal{C}$  ou une condition initiale) et atteint l'ensemble  $\mathcal{B}$  sans revenir dans  $\mathcal{A}$  (Fig. 2 (a)). On les distingue des premiers passages qui sont des trajectoires partant de  $\mathcal{A}$  puis atteignant  $\mathcal{B}$  après un certain nombre d'excursions et de retours possibles dans  $\mathcal{A}$ .

### 2.1 Approche théorique

On peut traiter de manière analytique les deux limites " $\beta \rightarrow \infty$ " et " $\beta \rightarrow 0$ ". On énonce ici les démarches et principaux résultats auxquels elles mènent, ainsi que le sens qu'il faut donner à ces deux limites.



**Figure 1.** (a) : minima du potentiel et points cols calculés par une méthode de Newton, on ajoute une approximation analytique du point col  $A_1$ . (b) : Schéma de principe des trajectoires réactives possibles. RW : marche aléatoire, In : instanton type trajectory ; fl : retournement, trajectoire sans front, 1,2,3... fr : trajectoire avec 1, 2, 3,... front(s).

La limite la plus classique est  $\beta \rightarrow \infty$ , en effet, dans ce cas, on peut déduire la trajectoire la plus probable  $A(t)$ , dite instanton, ainsi que la probabilité de l'observer  $\alpha$  du principe de Freidlin–Wentzell de

grandes déviations [7] :

$$A(t) = \arg \min_{B,T} \underbrace{\int_{-T}^T dt \left( \partial_t B + \frac{\delta V}{\delta A}(B) \right)^2}_{S(B)}, P(A) \simeq \exp \left( -\frac{\beta S(A)}{2} \right). \quad (3)$$

On prend garde au fait que le minimum de l'action correspondante  $S$  n'est atteint que dans la limite  $T \rightarrow \infty$  [10] et que les minimisations à durée de trajectoire fixées ne correspondent qu'à des cas particuliers [3,9]. Dans le cas d'une dynamique dérivant d'un potentiel  $V$ , le résultat se simplifie grandement : l'instanton passe par le col le plus bas de  $V$ ,  $A_s$ ,  $A$  correspond à une montée au col puis une relaxation déterministe, et la probabilité de passage est donnée par la différence de potentiel entre  $A_0$  et  $A_s$  :

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} A(t) = A_0^+, A(0) = A_s, \lim_{t \rightarrow +\infty} A(t) = A_0^- \\ \partial_t A(t) = +\frac{\delta V}{\delta A} \Leftrightarrow t < 0, \partial_t A(t) = -\frac{\delta V}{\delta A} \Leftrightarrow t > 0, \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\ln \alpha}{\beta} = -\underbrace{(V(A_s) - V(A_0))}_{\Delta V}. \quad (4)$$

Pour  $L \lesssim 6$ ,  $A_s = 0$  et  $L \gtrsim 6$ ,  $A_s = A_1$  (Fig. 1 (b)) : cela nous indique que les trajectoires les plus probables dans la limite du bruit tendant vers 0 sont soit des retournements globaux, soit l'apparition d'un front à un bord, puis son déplacement vers l'autre bord. Cela nous indique de plus les points cols à prendre en compte lorsque l'on calcule le temps de premier passage moyen par la théorie d'Eyring–Kramers [5].

La trajectoire passe un temps  $\tau \propto \ln(\beta)$  au voisinage du point col. Le préfacteur est typiquement donné par la plus grande valeur propre positive du Hessian de  $V$  :  $\lambda$ . On peut montrer qu'il croît comme  $\lambda \propto \exp(L/\sqrt{2})$ .

Les théories de Freidlin–Wentzell et d'Eyring–Kramers sont des théories de point col et cessent d'être valides lorsque l'approximation du col n'est plus bonne, soit typiquement quand  $\lambda\beta \simeq 1$ . Cela donne une limite dans le plan  $\beta, L$  au delà de laquelle ne plus s'attendre à des trajectoires réactives de type instanton (Fig. 1 (b)). Dans l'autre limite,  $L/\ln(\beta) \rightarrow \infty$ , les trajectoires correspondent sensiblement à des marches aléatoires pour lesquelles le potentiel se fait peu sentir. Dans ce cas, en prenant en compte le coût en potentiel pour la création de  $n$  fronts et l'ensemble des configurations pour la position des fronts, on peut montrer qu'une trajectoire à  $n$  front est la plus probable si :

$$L \exp(-\beta\Delta V) - 1 \leq n \leq L \exp(-\beta\Delta V). \quad (5)$$

Cela permet de compléter le diagramme de phase (Fig. 1 (b)). L'utilisation de l'approximation analytique de  $A_1$  (Fig. 1) permet d'estimer  $\Delta V = 2\sqrt{2}/3 + O(\exp(-L))$ .

## 2.2 Approche Numérique : Adaptive Multilevel Splitting

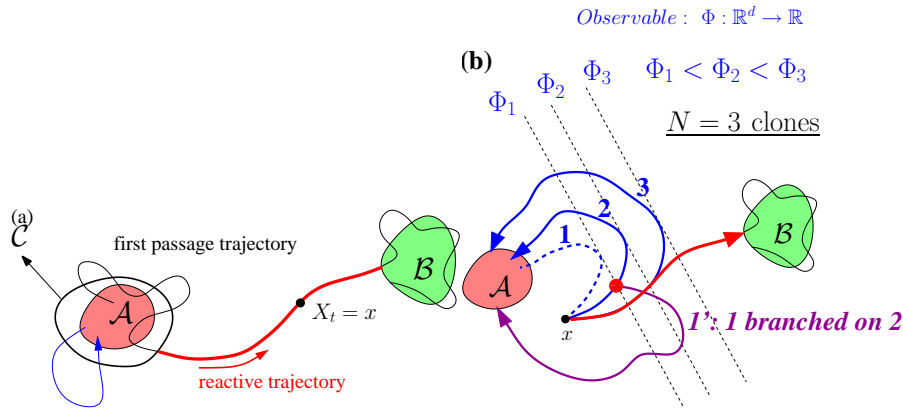
On commence par résumer le principe de l'algorithme. Des descriptions détaillées et des études de convergence peuvent être trouvées dans la littérature [1,4,6,8]. On utilise une application vers  $\mathbb{R}$ ,  $\phi$ , dite coordonnée réactionnelle, qui repère la distance relative d'un champ  $A$  par rapport aux deux minima métastables. Dans cette étude, on peut en utiliser deux, une dite linéaire,  $\phi_l$ , et une autre que l'on qualifie de norme  $\phi_n$  :

$$\phi_l = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\int dx A(x)}{\int dx A_0^+(x)} \right), \phi_n = \phi_l + \left| \frac{\frac{1}{L} \int dx A A_1}{\sqrt{\frac{1}{L} \int dx A_1^2}} \right|. \quad (6)$$

La coordonnée réactionnelle  $\phi$  varie continuellement de 0 à 1 de  $A_0^+$  à  $A_0^-$ .

L'algorithme calcule  $N$  trajectoires réactives et la probabilité de passage associée comme suit (Fig. 2 (b)) :

- On commence par réaliser  $N$  dynamiques stochastiques indépendantes du modèle,  $A^n(t)$ , en l’occurrence l’équation de Ginzburg–Landau, partant de  $\mathcal{A}$ , jusqu’à ce qu’elles atteignent  $\mathcal{C}$  puis, soit retournent dans  $\mathcal{A}$ , soit atteignent  $\mathcal{B}$ . On fixe le nombre d’itérations à  $k = 1$ .
- À chaque étape  $k$ , la trajectoire qui atteint le plus petit  $\phi_{\max}^n = \max_t \phi(A^n(t)) = l_k$  est supprimée, une autre trajectoire  $m \neq n$  est tirée de manière uniforme parmi les  $N - 1$  bonnes trajectoires. Puisque le temps est discrétisé avec un pas  $dt$ ,  $\phi(A^m)$  franchit pour la première fois  $l_k$  au temps  $t_i$ , tel que  $\phi(A^m(t_i)) < l_k < \phi(A^m(t_i + dt))$ . On pose  $A^n(t) = A^m(t), \forall t \leq t_i + dt$ . La trajectoire  $A_n$  évolue ensuite selon une dynamique stochastique indépendante des autres jusqu’à ce qu’elle atteigne soit  $\mathcal{A}$  soit  $\mathcal{B}$ . On pose  $k = k + 1$ .
- L’algorithme s’arrête à l’étape  $k + 1$  telle que  $l_{k+1} \geq 1$ . Cela signifie que  $N$  trajectoires partant  $\mathcal{A}$  et partant de  $\mathcal{B}$  ont été générées.



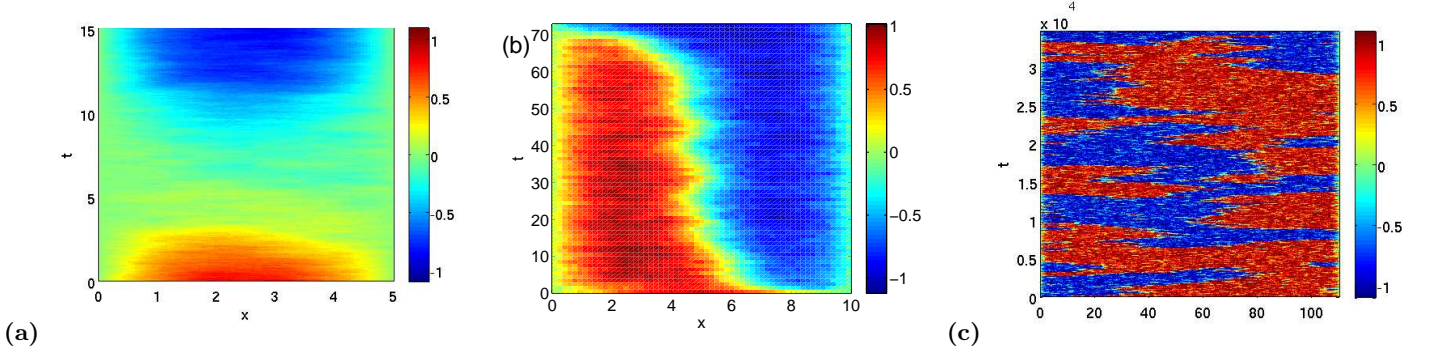
**Figure 2.** (a) : schéma de principe des trajectoires réactives et premiers passages entre deux ensembles  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{B}$ . (b) : schéma de principe de l’AMS.

De manière heuristique, on peut montrer que la quantité  $\hat{\alpha} = (1 - 1/N)^k$  est un bon estimateur de la probabilité d’atteindre  $\mathcal{B}$  avant  $\mathcal{A}$ , partant de  $\mathcal{C}$  [1,6,8]. On prend garde au fait que  $k$  et donc  $\hat{\alpha}$  sont des variables aléatoires, qui donnent des valeurs différentes à chaque réalisation indépendante de l’algorithme. Les propriétés statistiques de  $k$  et de  $\hat{\alpha}$  dépendent très fortement du nombre de clones  $N$  et du bon choix de la coordonnée réactionnelle. Ces deux quantités sont aussi centrales pour la bonne convergence du calcul que le pas d’espace  $dx$  ou le pas de temps  $dt$  [1,4,6,8]. Dans le meilleurs des cas, pour  $N$  grand et  $\beta$  pas trop petit, il est possible d’établir un théorème central limite qui montre que les fluctuations de  $k$  et  $\hat{\alpha}$  sont gaussiennes, et en particulier la variance de  $\sqrt{N}(\hat{\alpha} - \alpha)$  est égale à  $-\alpha^2 \log \alpha$ . L’estimateur  $\hat{\alpha}$  possède en général un biais tendant vers 0 en  $1/N$ .

### 3 Résultats numériques

#### 3.1 Types de trajectoires

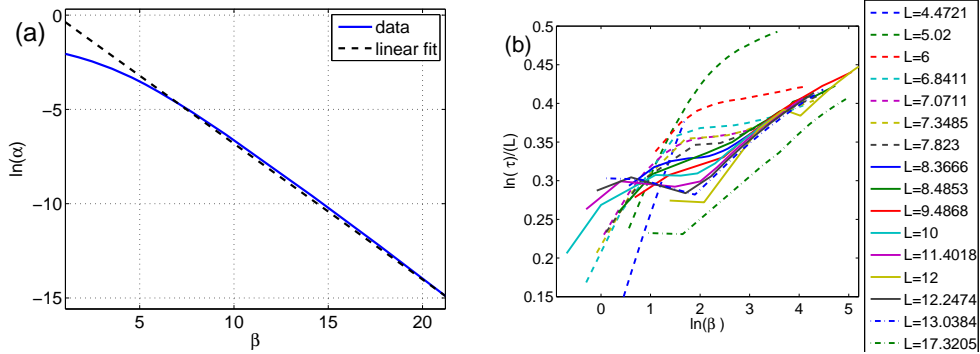
À l’aide de diagrammes spatio-temporel des trajectoires réactives calculées (Fig. 3), on peut facilement caractériser les propriétés des trajectoires prédites. Ainsi pour de très grandes valeurs de  $\beta$ , on reproduit les instantons “retournement” pour  $L \lesssim 6$  (Fig. 3 (a)) et à un front pour  $L \gtrsim 6$  (Fig. 3 (b)). Dans l’autre limite, on observe des trajectoires à plusieurs fronts qui suivent une marche aléatoire (Fig. 1 (c)). On note que pour ces paramètres, on ne se trouve pas encore dans la zone où les trajectoires à plus d’un front sont les plus probable, moins de la moitié de la distribution de trajectoires (les plus rapides et les plus longues) contiennent plus d’un front.



**Figure 3.** (a) : retournement global dans un domaine de taille  $L = 5$  pour  $\beta = 300$ . (b) : trajectoire à un front dans un domaine de taille  $L = 10$  pour  $\beta = 150$ . (c) : longue marche aléatoire de fronts dans un domaine de taille  $L = 110$  pour  $\beta = 7$ .

### 3.2 Limite $\ln(\beta)/L \rightarrow \infty$

Dans cette limite, on peut illustrer les résultats analytiques. On présente ici le calcul de la probabilité de passage (Fig. 4 (a)) et des durées moyennes de trajectoires réactives (Fig. 4 (b)). Le calcul des temps de premier passage moyen sont cohérents avec les prédictions analytiques. On note que lorsque  $\beta$  est suffisamment important, on rejoint la limite de décroissance exponentielle de la probabilité de passage. Un ajustement linéaire montre une pente légèrement inférieure à 1, ce qui est quantitativement cohérent avec les estimations analytique de  $\Delta V \simeq 2\sqrt{2}/3$  dans la limite  $L$  grand. Ce résultat se retrouve pour toute la gamme de taille pour laquelle le col  $A_1$  est le plus bas.



**Figure 4.** (a) : Exemple de  $\ln(\alpha)$  fonction de  $\beta$  avec l'ajustement correspondant. (b) : logarithme de la durée moyenne des trajectoires réactives remise à l'échelle en fonction du logarithme de  $\beta$

Dans la limite  $\beta$  grand, on peut vérifier la loi d'échelle de la durée moyenne des trajectoires réactives  $\tau \propto \ln(\beta) \exp(L/\sqrt{2})$ . Tracer  $\tau$  en fonction de  $\ln(\beta)$  permet de vérifier le scaling de  $\tau$  en fonction de  $\beta$ . Tracer  $\ln(\tau)/L$  en fonction de  $\beta$  pour une large gamme de tailles permet de vérifier la loi d'échelle en  $L$  (Fig. 4) : les données tombent sur une courbe maîtresse à grand  $\beta$ .

## 4 Discussion

Ce compte rendu présente le calcul des trajectoires réactives entre les deux positions métastables de l'équation de Ginzburg–Landau Stochastique. En étendant des résultats précédents sur l'application du Principe de Freidlin–Wentzell de grandes déviations au calcul d'instantons et de la probabilité d'observer

une trajectoire reactive, on peut faire des prédictions réalistes sur le comportement à faible bruit de cette SPDE. On peut de plus placer la limite “faible bruit” dans l’espace des paramètre et déterminer le comportement des trajectoires réactives (multiplication du nombre des fronts) lorsqu’on dépasse cette limite.

La principale nouveauté consiste en l’application d’un algorithme de calcul de trajectoires réactives, Adaptive Multilevel Splitting, pour calculer numériquement ces trajectoires, en particulier dans les régimes de taille ou d’amplitude de bruit où les prédictions théoriques ne sont pas valides. Dans la gamme de paramètres où elles sont valides, le calcul numérique permet de vérifier les prédictions.

Le succès de l’application de l’algorithme à un système très accessible à la théorie, mais malgré tout très riche, encourage l’étude de systèmes plus généraux, notamment les systèmes non-gradients issus de la turbulence par ex. et moins accessibles à la théorie. Les systèmes modèles de métastabilité d’écoulements géophysiques en font partie. Des exemples typiques sont les modèles de transitions entre circulation thermique et circulation saline dans l’Atlantique nord, modélisée par une équation de Cahn–Hilliard, aux modèles de circulation océanique moyenne latitude poussés par les vents, décrits par l’équation d’Euler Stochastique. Ce dernier cas présente bien plus de difficultés théoriques que les systèmes de type gradient.

## Références

1. F. Cérou, Arnaud Guyader, Tony Lelièvre, Florent Malrieu, *On the Length of one-dimensional reactive paths*, ALEA, Lat. Am. J. Probab. Math. Stat., **10**, 359–389 (2013).
2. W.G. Faris, G. Jona-Lasinio, *Large fluctuations for a nonlinear heat equation with noise*, J. Phys. A : Math. Gen., **15**, 3025–3055 (1982).
3. W. E, W. Ren, E. Vanden-Eijden, *Minimum action method for the study of rare events*, Communication on pure and applied mathematics, **57**, 1–20 (2004).
4. E. Simonnet, *Combinatorial analysis of the adaptive last particle method*, Submitted to statistics and computing (2013), J. Rolland, *Numerical convergence study of the computation of reactive trajectories by adaptive multilevel splitting*, (2013).
5. P. Hänggi, P. Talkner, M. Borkovec, *Reaction-rate : fifty years after Kramers* Rev. Mod. Phys., **62**, 251–342 (1990).
6. F. Cérou, A. Guyader, T. Lelièvre, D. Pommier, *A multiple replica approach to simulate reactive trajectories* J. Chem. Phys., **134**, 054108 (2011).
7. H. Touchette, *The large deviation approach to statistical mechanics* Phys. Rep., **478**, 1–69 (2009).
8. F. Cérou, A. Guyader, *Adaptive multilevel splitting for rare event analysis*, Stochastic analysis and application, **25**, 417–443 (2007).
9. H.C. Fogedby, J. Hertz, A. Svane, *Wall propagation and nucleation in a metastable two-level system* Phys. Rev. E, **70**, 031105 (2004).
10. X. Wan, X. Zhou, W. E, *Study of the noise-induced transition and the exploration of the phase space for the kuramoto Sivashinsky equation using the minimum action method*, Non Lin., **23**, 475–493 (2010).
11. S. Brascosco, P. Buttà, A. De Masi, E. Presutti, *Interface fluctuations and coupling in the D=1 Ginzburg–Landau Equation with Noise*, J. theoret. Probab., **11**, 25–80 (1998).
12. G.L. Eyink, *Statistical hydrodynamics of the thermohaline circulation in a two-dimensional model*, Tellus, **57**, 100–115 (2005).