



HAL
open science

Méthodes stochastiques en dynamique moléculaire

Nicolas Perrin

► **To cite this version:**

Nicolas Perrin. Méthodes stochastiques en dynamique moléculaire. Mathématiques générales [math.GM]. Université Nice Sophia Antipolis, 2013. Français. NNT : 2013NICE4011 . tel-00833886

HAL Id: tel-00833886

<https://theses.hal.science/tel-00833886>

Submitted on 13 Jun 2013

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.

UNIVERSITÉ NICE-SOPHIA ANTIPOLIS – UFR Sciences

École Doctorale Sciences Fondamentales et Appliquées

THÈSE

pour obtenir le titre de

Docteur en Sciences

de l'UNIVERSITÉ de Nice-Sophia Antipolis

Spécialité MATHÉMATIQUES

présentée et soutenue par

Nicolas PERRIN

Méthodes stochastiques en dynamique moléculaire

Thèse dirigée par

M. Nicolas CHAMPAGNAT et

M. Denis TALAY

soutenue le 20 mars 2013

Membres du jury :

M.	Philippe	BRIAND	Rapporteur et examinateur
M.	Nicolas	CHAMPAGNAT	Directeur de thèse
M.	François	DELARUE	Examineur
Mme	Nicole	EL KAROUI	Présidente
M.	Stéphane	MENOZZI	Rapporteur et examinateur
M.	Denis	TALAY	Directeur de thèse

Laboratoire Jean-Alexandre Dieudonné, Université de Nice, Parc Valrose, 06108 NICE
Équipe TOSCA, INRIA Sophia Antipolis Méditerranée, 06560 SOPHIA ANTIPOLIS

UNIVERSITÉ NICE-SOPHIA ANTIPOLIS – UFR Sciences

École Doctorale Sciences Fondamentales et Appliquées

THÈSE

pour obtenir le titre de

Docteur en Sciences

de l'UNIVERSITÉ de Nice-Sophia Antipolis

Spécialité MATHÉMATIQUES

présentée et soutenue par

Nicolas PERRIN

Méthodes stochastiques en dynamique moléculaire

Thèse dirigée par

M. Nicolas CHAMPAGNAT et

M. Denis TALAY

soutenue le 20 mars 2013

Membres du jury :

M.	Philippe	BRIAND	Rapporteur et examinateur
M.	Nicolas	CHAMPAGNAT	Directeur de thèse
M.	François	DELARUE	Examineur
Mme	Nicole	EL KAROUI	Présidente
M.	Stéphane	MENOZZI	Rapporteur et examinateur
M.	Denis	TALAY	Directeur de thèse

Laboratoire Jean-Alexandre Dieudonné, Université de Nice, Parc Valrose, 06108 NICE
Équipe TOSCA, INRIA Sophia Antipolis Méditerranée, 06560 SOPHIA ANTIPOLIS

*À la mémoire de mes grands-parents, Jacqueline, Raymonde et Marcel,
à mon grand-père, Paul,
mes parents, Bernadette et Patrice,
mes frères, Rémi et Bruno,
ma femme, Julie,
ma fille, Prune,*

Remerciements

Je souhaiterais tout d'abord dédier cette thèse à Paul Malliavin qui fût à l'origine du thème principal et d'un des axes de recherche de cette thèse.

Je souhaiterais ensuite pouvoir remercier mes directeurs de thèse Nicolas Champagnat et Denis Talay pour la confiance qu'ils m'ont accordé en me proposant cette thèse, pour leurs conseils, notamment de rédaction, et leur travail de relecture, mais aussi pour m'avoir permis de découvrir le métier de chercheur... et la région de Nice!

Je remercie aussi Philippe Briand et Stéphane Menozzi d'avoir bien voulu rapporter cette thèse ainsi que pour les remarques qu'ils m'ont apporté. Je remercie aussi Philippe pour son invitation à Chambéry, ce fut deux jours très agréables et enrichissants. Je remercie Nicole El Karoui d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse malgré un emploi du temps probablement très chargé. Je la remercie également d'avoir partagé son taxi un jour de neige à Sophia (événement nettement plus improbable)! Je remercie enfin François Delarue pour sa participation à mon jury mais aussi pour la qualité de ses travaux dirigés de probabilité lorsque j'étais en maîtrise. J'ai également beaucoup apprécié assurer en retour ses TD lors de ces trois années de thèse. Concluons en rappelant que le cours de Philippe sur les ÉDSR me fut d'une très grande aide lorsque j'étudiais, pendant le stage du DEA de Nicole, l'article de François et Stéphane!

Je remercie bien sur aussi Christine Faber pour toute son aide (notamment administrative) et sa très grande gentillesse. Merci à Étienne Tanre pour ses comptes rendus de la scène politique grassoise, quel dommage que son déménagement ait coïncidé avec les derniers jours de rédaction (finalement prolongée de quelques mois il est vrai)!

Je remercie également mes compagnons d'infortune. Dalia pour avoir partagé de si nombreuses pauses cafés mais aussi cette période si délicate qu'est la rédaction. Félicitations pour ta soutenance! Hubert pour avoir partagé le stress du bus de 18h45. Félicitations à toi aussi! Julien mon co-bureau avec qui j'ai partagé doutes et choix musicaux douteux (Y en a marre d'ABBA), qui a su me remotiver si souvent et, qui m'a permis de vivre un rêve de gosse! le distributeur de sucreries qui disfonctionne. Laurent pour m'avoir encouragé à faire mes dossiers de candidatures en ligne, pour son obsession des croissants (et bientôt des scones à Londres?) et pour sa patience lors de nos deux jours de randonnée dans la Vallée des Merveilles. Sébastien pour m'avoir montré la force du bouddhisme : *ultra iron man* et thèse de mathématiques, tu ne dois plus être très loin de l'éveil. J'ai aussi une pensée pour Paul-Éric et la bande de doctorants de Valrose.

Un très bref remerciement au déménageur qui me soutint avec beaucoup d'aplomb, le mètre à la main, qu'un camion de 5 m. sur 2 m. sur 2 m. a un volume de 30 m³. «Faîtes le calcul!»

Mais les mathématiques ne se résument pas qu'à la thèse, il y a les développements aussi! Je remercie aussi Chloé (qui ne manque pas d'r avec ses tours hyperboliques), Ben (à qui je pardonne volontiers d'être Lyonnais) et Philippe mes co-agrégatifs, qui rendaient agréables les matinées de 6h du samedi à Orsay, les très longs trajets de retour d'une des extrémités du segment B de RER et les séances de révisions à la BU de Jussieu. Merci aussi Philippe de m'avoir fait découvrir ton développement fétiche Banach-Tarski, les pubs de Nice et ta piscine de Tourettes.

Il serait difficile de ne pas mentionner ici les boulets : Alex, Dan, Pat, Piers et Rol qui ont rendu la 5/2, les colles et les concours (un peu trop?) amusants. Je persiste et signe, j'étais là le jour de l'anecdote de l'écharpe. Merci beaucoup Rol pour ton travail de relecture du manuscrit et tes très bons conseils!

Je ne pourrais bien sûr citer tous les professeurs de mathématiques qui m'ont introduit à l'analyse complexe ou harmonique, la topologie, la théorie de Galois ou les probabilités lors de ma scolarité mais je souhaiterais remercier tout particulièrement Mr. Antetomaso pour tout ce qu'il m'a apporté en maths spé et Mme Chiarelli dans les cours de laquelle il était si passionnant de faire de la géométrie avec Thalès, Pythagore et Al Kashi.

Je remercie aussi mes parents, Bernadette et Patrice, pour leur soutien (notamment mathématiques) et conseils tout au long de mes études. Commencées par la garderie de Jussieu, j'ai été ravi qu'elles se poursuivent en partie à Paris 7 et Orsay. De plus, c'est quand même plus facile de réviser avec son exemplaire familial du Rudin quand on est dans une bibliothèque pleines d'agrégatifs.

Je remercie enfin ma femme Julie pour son amour et soutien indéfectible lors de ces trois ans et demi qui comprirent une thèse, une grossesse, un mariage, deux déménagements et ces six derniers mois, des soirs et we entiers, après le travail, pour achever la rédaction. C'est promis maintenant on peut prendre des vacances! Enfin merci à ma fille Prune pour sa bonne humeur perpétuelle et surtout, merci d'avoir fait tes nuits si rapidement!

Liste des symboles

Notations usuelles

- A^* Transposée de la matrice A
 $[x]_+$ Partie positive de $x \in \mathbb{R}$
 δ_x Mesure de Dirac au point $x \in \mathbb{R}^d$
 ∂_t Dérivée partielle par rapport à la variable t

Espaces fonctionnels

- $\mathcal{C}^0(E; F)$ Ensemble des fonctions continues de E dans F
 $\mathcal{C}^{k,l}(E \times F)$ Ensemble des fonctions définies sur l'espace produit $E \times F$ de classe \mathcal{C}^k sur E et de classe \mathcal{C}^l sur F
 $\mathcal{C}_b^k(E; F)$ Ensemble des fonctions k fois continuellement dérivables sur l'espace E à valeurs dans l'espace F à dérivées bornées, $k \geq 1$
 $\mathcal{W}^{k,p}(E)$ Ensemble des fonctions admettant des dérivées au sens des distributions de classe L^p sur l'ensemble E jusqu'à l'ordre k , pour $p \in [1, \infty]$ et $k \geq 1$
 $H^k(E)$ Ensemble des fonctions de classe $\mathcal{W}^{k,2}$ sur l'ensemble E pour $k \geq 1$
 $L^p(0, T; E)$ Ensemble des fonctions de $[0, T]$ dans l'espace E de classe L^p
 $L^p(E \times F, \mu \otimes \nu)$ Ensemble des fonctions de classe L^p sur l'ensemble produit $E \times F$ pour la mesure produit $\mu \otimes \nu$ avec $p \in [1, \infty]$

Notations probabilistes

- $(\mathcal{B}_t)_{t \geq 0}$ Filtration canonique $(\mathcal{B}_t)_{t \geq 0}$ associée à $\mathcal{C}^0([0, \infty); \mathbb{R}^d)$
 $(L_t^0(X))_{t \geq 0}$ Processus de temps local en 0 du processus X
 \mathcal{B} Tribu borélienne de \mathbb{R}^d
 $\mathbb{P}_x \{\xi | B\}$ Probabilité conditionnelle de la variable aléatoire ξ sachant l'événement B sous la loi \mathbb{P}_x

Notations de la partie I

- \mathcal{L} Générateur de l'équation de Poisson-Boltzmann, voir équation (2.10)
 $\nabla^{\text{ext}} u$ Gradient extérieur de u , voir équation (2.4)
 $\nabla^{\text{int}} u$ Gradient intérieur de u , voir équation (2.3)

$d(\cdot, E)$	Distance à l'ensemble E
∂D	Frontière de l'ouvert D
D	Ouvert borné de \mathbb{R}^d contenant strictement $\bar{\Omega}_{\text{int}}$
ϵ	Fonction modélisant la permittivité diélectrique du système moléculaire, voir équation (2.6)
κ	Fonction modifiée de Debye-Hückel diélectrique du système moléculaire, voir équation (2.8)
Γ	Sous-variété compacte de classe \mathcal{C}^∞ modélisant la frontière entre la molécule et le solvant, page 40
\mathcal{N}	Voisinage de Γ , page 40
Ω_{ext}	Complémentaire du compact $\Omega_{\text{int}} \cup \Gamma$ dans \mathbb{R}^d modélisant le solvant, page 40
Ω_{int}	Domaine borné, simplement connexe, de frontière Γ modélisant l'intérieur de la molécule, page 39
ρ	Extension de classe $\mathcal{C}_b^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{R})$ de la distance signée à Γ , page 40
\vec{n}	Vecteur unité normal à la surface Γ pointant vers l'extérieur

Chapitre 1.

Introduction

La thématique de cette thèse est l'étude de méthodes stochastiques en dynamique moléculaire. La dynamique moléculaire, et plus généralement la modélisation moléculaire, sont des domaines en pleine expansion faisant apparaître de grandes difficultés mathématiques : grandes dimensions et fortes différences d'échelles de temps notamment. Nous avons traité plus particulièrement dans cette thèse deux questions : l'interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire qui décrit le potentiel électrostatique d'un système moléculaire, et la question de la détection des variables lentes et rapides d'une dynamique moléculaire (par exemple de repliement de protéines).

L'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire [BBC06] se présente sous la forme d'une équation aux dérivées partielles elliptique semi-linéaire [Eva10]. Cette équation fait intervenir un opérateur du second ordre sous forme divergence à coefficient discontinu. Nous démontrons dans cette thèse un résultat d'existence, d'unicité et de régularité dans un espace fonctionnel bien choisi de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire nous permettant de montrer que cette unique solution admet une représentation probabiliste en termes d'équations différentielles stochastiques rétrogrades [PP92, Par99, BDH⁺03]. Cette représentation s'effectue grâce à une étude des équations différentielles stochastiques rétrogrades à temps final aléatoire et à coefficient non strictement monotone.

Dans ce chapitre introductif, nous présentons dans un premier temps la modélisation et la simulation moléculaire. Nous décrivons les réponses que doivent apporter la modélisation moléculaire et son pendant numérique : la simulation moléculaire, mais aussi les questions qu'elles induisent. Enfin, dans un deuxième temps, nous décrivons le contenu des chapitres qui constituent cette thèse, en énonçant les principaux résultats et en donnant les idées fortes de leurs démonstrations.

1.1. Introduction à la modélisation et à la dynamique moléculaire

Nous effectuons ici un tour d'horizon de la modélisation et de la simulation moléculaire (et renvoyons à [Lea01, LSR10] pour plus de détails).

Commençons par définir ce que sont la modélisation et la simulation moléculaire. Une *molécule* est un assemblage chimique de plusieurs atomes (par exemple une mo-

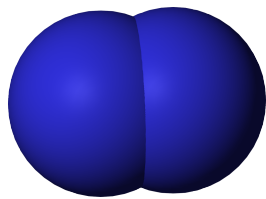


FIGURE 1.1.: Molécule de dihydrogène.

Crédit et source de l'image :
Wikipedia - CC by SA

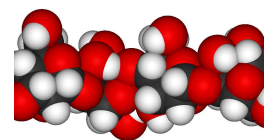


FIGURE 1.2.: Portion de molécule de cellulose.

Crédit et source de l'image :
Wikipedia - CC by SA

lécule d'eau composée de deux atomes d'hydrogène et d'un atome d'oxygène ou une molécule d'aspirine composée de neuf atomes de carbone, huit atomes d'hydrogène et quatre atomes d'oxygène). Le nombre d'atomes constituant une molécule peut varier de quelques atomes - comme dans le cas du dihydrogène H_2 - figure 1.1, de l'eau H_2O ou du gaz carbonique CO_2 - à plusieurs dizaines de milliers d'atomes - molécules de cellulose $(C_6H_{10}O_5)_n$ par exemple figure 1.2 - ou des protéines.

Un *système moléculaire* est un ensemble de plusieurs molécules interagissant entre elles (une ou plusieurs protéines dans un solvant composé de molécules d'eau et d'ions Na^+ et Cl^- par exemple).

La *modélisation moléculaire* est la description physique et mathématique de molécules ou de systèmes moléculaires. Cette description doit faciliter la connaissance du comportement du système. Elle doit permettre de mieux comprendre des concepts aussi variés que le repliement des protéines et l'impact des *conformations* (c'est-à-dire des dispositions géométriques de la molécule) sur les propriétés chimiques ou biologiques des protéines (*protein folding*) - figure 1.3 - ou encore l'interaction de systèmes moléculaires complexes comprenant plusieurs molécules (*molecular docking*) - figure 1.4. Mais elle doit aussi faciliter le calcul de quantités macroscopiques (c'est-à-dire des quantités mesurables à grande échelle, en particulier à échelle humaine) de systèmes moléculaires comme la pression, la température ou l'énergie libre (*free energy*). Ses applications théoriques ou pratiques sont larges et variées : chimie, pharmacologie ou agrochimie notamment.

Très souvent la taille des systèmes, c'est-à-dire le nombre de molécules impliquées dans les systèmes modélisés rend impossible toute résolution explicite du modèle. Il est alors nécessaire de s'aider d'un ordinateur pour simuler numériquement le comportement du système. La *simulation moléculaire* est l'étude numérique des molécules ou des systèmes moléculaires.

1.1.1. Modélisation d'un système moléculaire

Le modèle quantique

Considérons une molécule ou un ensemble de molécules. Les modèles moléculaires les plus précis sont les modèles quantiques. Ces modèles prennent en compte les effets quantiques du système étudié, c'est-à-dire qu'ils se placent à l'échelle des constituants des atomes : les électrons et nucléons, pour décrire leur comportement. Ainsi, le mouvement

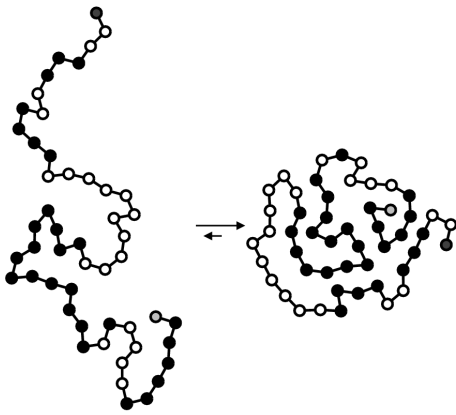


FIGURE 1.3.: Repliement de protéines
Crédit et source de l'image :
Wikipedia - CC by SA

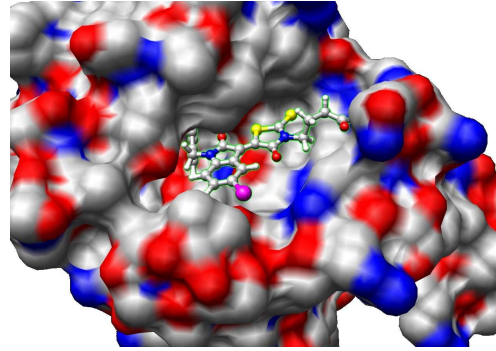


FIGURE 1.4.: Petite molécule
interagissant avec une
protéine.
Crédit et source de l'image :
Chaos - Wikipedia - CC by SA

d'une particule (électron ou nucléon) est décrit par la solution de l'équation de Schrödinger [Sch26] reliant la masse m et l'énergie E de la particule, la constante de Planck et le potentiel \mathcal{V} engendrant le champ de forces dans lequel est plongée la particule.

Le *champ gravitationnel* engendre par exemple des forces d'attraction entre deux objets ayant une masse (à l'échelle atomique - bien que non significatives devant les autres forces en jeu, humaine ou stellaire) : la pomme de Newton et la Terre sont ainsi attirées l'une vers l'autre. Un autre exemple, significatif au niveau moléculaire, est celui d'une particule électriquement chargée placée dans un système de particules chargées. Cette particule est alors soumise à un champ de forces engendré par le système appelé *champ électrique*. Des particules de charges de signes opposés seront attirées l'une vers l'autre, tandis que des particules de charges de mêmes signes se repousseront mutuellement. Si le système de particules électriquement chargées est au repos, c'est à dire que les particules sont immobiles, ce champ de forces est appelé *champ électrostatique* - figures 1.5 et 1.6.

Du fait du très grand nombre d'atomes constituant les molécules, et donc du très grand nombre de leurs constituants, l'équation de Schrödinger [Sch26] n'est cependant résoluble explicitement que pour un nombre réduit de systèmes ne comprenant que quelques particules, aussi est-il intéressant de chercher à simplifier le modèle en un modèle permettant une résolution numérique plus simple.

L'approximation de Born-Oppenheimer [BO27] est l'une des premières tentatives dans ce sens. Cette approximation, initialement introduite pour traiter le cas de la molécule H_2^+ , tire parti du fait que les masses des électrons sont très petites devant celles des nucléons. On peut alors supposer que les électrons réagissent instantanément aux mouvements des atomes, autrement dit la fonction d'onde des électrons ne dépend que des positions des nucléons et non de leurs moments. On peut exprimer la fonction d'onde de la molécule sous la forme du produit de la fonction d'onde des nucléons et de celle des électrons tandis que l'énergie du système peut s'écrire comme la somme de l'énergie nucléaire (autrement dit l'énergie des nucléons) et de l'énergie électronique (c'est-à-dire

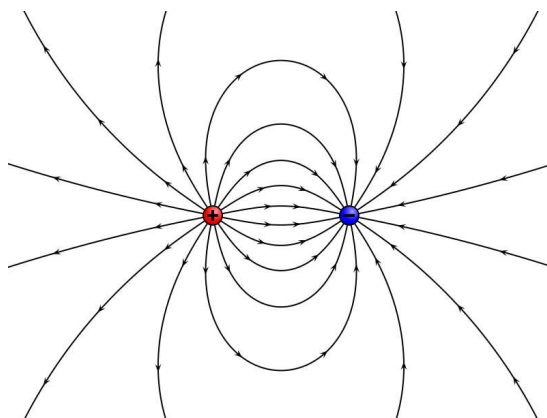


FIGURE 1.5.: Champ électrostatique de deux particules de charges opposées.
Crédit et source de l'image : Geek3 - Wikipedia - CC by SA

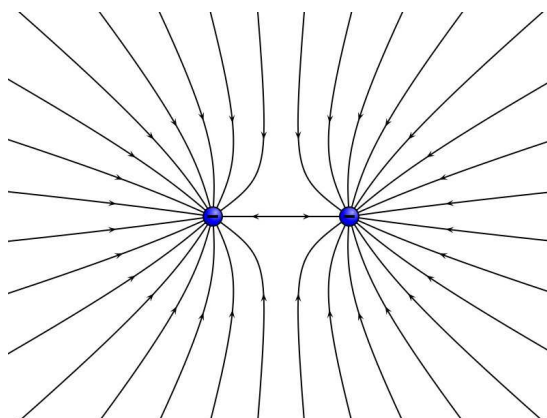


FIGURE 1.6.: Champ électrostatique de deux particules de charges de même signe.
Crédit et source de l'image : Geek3 - Wikipedia - CC by SA

l'énergie des électrons)

L'approximation de Born-Oppenheimer [BO27] consiste *in fine* à calculer pour chaque arrangement de nucléons la fonction d'onde des électrons à position des nucléons fixée. Elle permet donc de décomposer en deux étapes la résolution de l'équation de Schrödinger [Sch26]. Malgré l'approximation de Born-Oppenheimer [BO27], le nombre d'électrons et de nucléons rendent impossible le calcul dès que l'on considère une molécule de plus de quelques atomes. Il est nécessaire de considérer un modèle classique (en opposition au modèle quantique), c'est-à-dire un modèle ne décrivant plus des particules à l'échelle quantique, mais des particules à l'échelle atomique : les atomes, que l'on suppose soumis à l'influence de divers potentiels.

Modélisation du potentiel

Considérons maintenant un système atomique, et discutons des différentes manières de modéliser les potentiels auxquels dans lesquels sont plongés les atomes du système.

La modélisation de l'*énergie potentielle* qui doit reproduire les interactions atomiques du système peut s'effectuer de diverses manières. Détaillons les deux principales modélisations des potentiels impliqués dans un système moléculaire : les potentiels *ab initio* d'interactions et les potentiels empiriques d'interactions. Le lecteur pourra se reporter au chapitre d'introduction de [LSR10] ou aux chapitres trois et quatre de [Lea01] pour une description conséquente du sujet.

Potentiels *ab initio* d'interactions La première classe de potentiels est celle des potentiels dits *ab initio*. Ces potentiels d'interactions du système atomique sont dérivés directement des propriétés du système noyaux-électrons. Se plaçant dans l'approximation de Born-Oppenheimer [BO27] qui consiste à calculer l'énergie du système en ayant fixé la position X_i des atomes de charge Q_i . Le potentiel \mathcal{V} apparaît alors comme la somme de l'énergie dérivant des *interactions de Coulomb* (de type électrostatique) et de l'*énergie électronique* (énergie des électrons) à l'état fondamental. L'*état fondamental* correspond à un état des électrons dans lequel leur énergie est la plus faible.

Les simulations numériques des potentiels *ab initio* ont un coût numérique trop important pour pouvoir être utilisées pour d'autres systèmes que des systèmes de petite taille. Il est donc nécessaire d'avoir une autre modélisation des potentiels d'interactions.

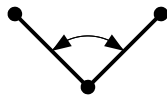
Potentiels empiriques d'interactions Les *potentiels empiriques d'interactions* sont des familles paramétrées de potentiels que l'on calibre en approchant les potentiels *ab initio* de petits systèmes atomiques afin de les utiliser sur de grands systèmes. Pour une première modélisation, on peut distinguer quatre grandes familles de forces d'interactions :

1. les *forces d'étirement des liaisons* (*bond stretching*). La liaison est la modélisation du partage d'un ou plusieurs électrons par deux atomes, on parle de liaison simple, double ou triple. Les liaisons sont modélisées par des traits pleins dans les schémas suivant.



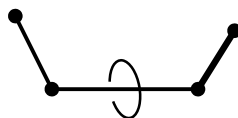
forces d'étirement de liaison

2. les *forces de courbure des angles (angle bending)*



forces de courbure d'angle

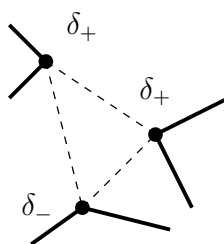
3. les *forces de torsion (bond rotation)*,



forces de torsion

4. les forces d'interactions hors liaisons (*non-bonded interactions*) comprenant

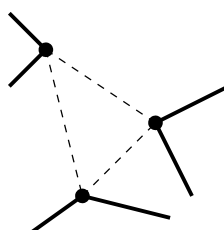
a) les *forces électrostatiques*



forces électrostatiques pour des atomes de charges δ_- et δ_+

et,

b) les *forces de van der Waals*



forces de van der Waals

Pour un système composé de N atomes de positions représentées par un objet mathématique \mathbf{r}^N (comprenant les distances l_i entre atomes liés, les angles θ_i formés

par les liaisons et les distances r_{ij} entre atomes), l'énergie potentielle associée peut être exprimée de la manière suivante

$$\mathcal{V}(\mathbf{r}^N) = \sum_{\text{liaison}} \frac{k_i}{2} (l_i - l_{i,0})^2 + \sum_{\text{angles}} \frac{k_i}{2} (\theta_i - \theta_{i,0})^2 + \sum_{\text{torsions}} \frac{V_{n_i}}{2} (1 + \cos(n_i \omega_i - \gamma_i)) \\ + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \left(\frac{q_i q_j}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}} + 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \right).$$

1. Le premier terme modélise les interactions entre deux atomes liés. Ainsi les incréments d'énergie obtenus lorsque la distance l_i entre deux atomes liés par une liaison de raideur k_i s'écarte de la distance de référence $l_{i,0}$ sont modélisés ici par un potentiel harmonique (suivant en cela la loi de Hooke [Lea01]).
2. Le deuxième terme modélise les interactions d'angle entre trois atomes par un potentiel harmonique dépendant de l'écart à un angle de référence $\theta_{0,i}$ de l'angle θ_i et de la raideur k_i de la liaison.
3. Le troisième terme modélise le potentiel de torsion. La constante γ_i est le facteur de phase modélisant la valeur minimale de l'angle de torsion ω_i . Pour une liaison de multiplicité n_i , la constante V_{n_i} est la barrière d'énergie.
4. Le quatrième terme regroupe
 - a) les potentiels d'interactions hors liaisons où les interactions de van der Waals sont modélisées par un potentiel de Lennard-Jones et
 - b) les interactions électrostatiques modélisées par un potentiel de Coulomb.

La modélisation à l'aide de l'équation de Poisson-Boltzmann [BBC06] est l'une des modélisations du potentiel empirique d'interactions électrostatiques. Cette modélisation fait partie de la sous-famille des modélisations avec solvant implicite. C'est-à-dire que l'interaction des molécules du solvant avec les molécules du soluté n'est plus modélisée explicitement à l'aide de la loi de Coulomb en faisant intervenir chacune des molécules du solvant. Dans ce type de modèle, l'interaction est modélisée de manière globale : le potentiel électrostatique contient ainsi une partie provenant des charges des atomes de la molécule et un terme de contribution globale du solvant.

1.1.2. Simulation et dynamique moléculaire

Maintenant que nous avons introduit la modélisation moléculaire, présentons les objectifs et la mise en œuvre de la simulation moléculaire. La *dynamique moléculaire* a pour objectif de simuler numériquement des phases condensées de systèmes moléculaires (c'est-à-dire des systèmes liquides ou solides en solution, en opposition aux phases gazeuses). Ces simulations numériques ont pour but de comprendre, prédire et calculer des propriétés du système étudié, mais aussi d'appréhender des processus temporels comme le repliement d'une protéine (figure 1.3) ou l'absorption de molécules par une surface ou un solide (figure 1.4).

On peut donc diviser les objectifs en trois catégories principales : analyse conformationnelle, calculs de quantités macroscopiques et simulation de trajectoires. L'*analyse conformationnelle* s'intéresse à la conformation (ou structure géométrique) d'une molécule. Le *calcul de quantités macroscopiques* a pour but de prédire les valeurs de quantité comme la température ou la pression du système. La *simulation de trajectoires* permet d'avoir un aperçu numérique de l'évolution de la géométrie d'une molécule ou d'un système moléculaire au cours du temps.

Analyse conformationnelle L'un des enjeux de la dynamique moléculaire est l'*analyse conformationnelle* de molécules. La géométrie d'une molécule, en tant que structure tridimensionnelle, peut déterminer ses propriétés physiques, chimiques mais aussi biologiques. L'analyse conformationnelle est l'étude de la structure des molécules et de son influence sur les propriétés précitées. Cette analyse nécessite la recherche des conformations qui correspondent à des *minima* d'énergie (notons cependant qu'une conformation active ne correspond pas nécessairement à un *minimum* d'énergie). La recherche de telles conformations s'effectue en deux étapes : le choix de la position initiale, puis la recherche du plus proche point de minimisation d'énergie. Le choix de la structure initiale est donc une part importante de l'analyse conformationnelle.

La géométrie de la surface d'énergie rend très difficile l'étude de ses *minima*. Enumérons quelques méthodes de recherches utilisées : algorithmes de recherche systématique, **approches probabilistes**, études géométrique des distances, **dynamique moléculaire** et jeu internet de résolution de puzzle (www.foldt.it/portal) ! Nous renvoyons aux chapitres 9 et 10 de [Lea01] pour une présentation détaillée de ces méthodes.

Calcul de quantités macroscopiques L'objectif est de calculer des quantités macroscopiques ou thermodynamiques d'un système moléculaire. Une quantité macroscopique A (ou *observable*) liée au système telle que la pression, la chaleur est mesurée expérimentalement comme une moyenne temporelle des valeurs instantanées. Il est possible de simuler de deux manières différentes cette quantité.

La première en considérant une **dynamique moléculaire** : partant d'une distribution initiale et des équations de mouvement, on calcule l'espérance de l'observable à un instant t . La simulation se fait par le biais de simulations numériques de trajectoires du système moléculaire. La quantité simulée s'obtient alors en prenant la moyenne temporelle de la quantité considérée.

La seconde se fait par **échantillonnage** : se donnant les probabilités pour différents états Γ^N (représentant l'espace des phases des N atomes, c'est-à-dire le couple position-vitesse, habituellement \mathbb{R}^{6N}) sous forme d'une distribution ρ , on calcule l'espérance de l'observable. En ajoutant *une hypothèse d'ergodicité*, il est alors possible de conclure que cette moyenne statistique est égale à la moyenne temporelle. Sous des hypothèses de constance du nombre N de particules, du volume V et de la température T , on peut choisir pour densité μ la distribution de Boltzmann

$$\mu(\Gamma^N) = \exp(-E(\Gamma^N)/k_B T)/Q \quad (1.1)$$

doivent intervenir l'énergie E du système et une constante de renormalisation Q , appelée *fonction de partition*.

À partir de la fonction de partition, on peut définir une quantité macroscopique importante en thermodynamique et biochimie : l'*énergie libre* [LSR10], définie comme le logarithme de la fonction de partition. L'énergie libre permet de comparer la vraisemblance de divers états macroscopiques paramétrés ou satisfaisants une contrainte macroscopique par exemple.

Simulation de trajectoires On s'intéresse ici à la simulation numérique de trajectoires du système moléculaire, ceci dans le but de calculer la «vraie» dynamique du système. Ceci est par exemple utile dans l'étude du repliement de protéines (figure 1.3) ou de la modélisation de l'interaction entre plusieurs molécules (figure 1.4).

Cette dynamique est déterministe et simulée à l'aide d'un schéma numérique : par exemple en effectuant une discrétisation temporelle, et en calculant à chaque pas de temps les forces inter-atomiques s'exerçant sur les atomes du système (voir par exemple [Jed05] pour une introduction aux schémas numériques de simulation de solutions d'équations aux dérivées partielles).

1.1.3. Méthodes de simulation moléculaire

Énumérons quelques méthodes utilisées en simulation moléculaire. On peut classer ces méthodes en trois groupes : les méthodes de dynamique moléculaire, les méthodes de Monte-Carlo [MU49] ou méthode d'échantillonnage (chapitre 2 et suivants de [LL10]) et les méthodes probabilistes de recherche de conformation.

La mise en œuvre d'une simulation par dynamique moléculaire ou méthodes de Monte-Carlo suit la même trame :

1. choix d'une configuration initiale,
2. phase de recherche d'équilibre,
3. phase de calcul des propriétés.

Selon l'objectif de la simulation, l'une ou l'autre de ces méthodes doit être choisie. Ainsi si l'objectif est de calculer des quantités physiques ou chimiques dépendant du temps, il est préférable de mettre en œuvre une méthode de dynamique moléculaire donnant l'évolution temporelle du système. D'un autre côté, si l'objectif est de calculer des quantités à température ou pression constante par exemple, c'est le calcul par méthode de Monte-Carlo [MU49] qui est privilégié.

Dynamique moléculaire

La méthode de dynamique moléculaire a pour but de simuler une trajectoire du système. Une fois donnée une position initiale, les étapes de la dynamique sont données en intégrant les lois de mouvement de Newton :

1. le principe d'inertie,
2. le principe fondamental de la dynamique de translation,

3. le principe des actions réciproques.

La trajectoire est alors obtenue en résolvant les équations différentielles données par la seconde loi de Newton et se résumant pour une particule x de masse m soumise à une force F (dérivant par exemple du potentiel \mathcal{V}) par l'équation :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F = - \text{grad } \mathcal{V} \quad (1.2)$$

Soulignons qu'au delà du choix du modèle (par exemple modèle basique des boules de billard où l'on suppose que les atomes sont des sphères parfaites se déplaçant à vitesses constantes entre deux collisions ou encore atomes soumis à des potentiels continus de la forme de ceux présentés dans la section 1.1.1 par exemple), le pas de temps d'intégration numérique est un élément important (et son choix une première difficulté) : trop petit, il rend impossible la simulation dans une échelle de temps correspondant au phénomène que l'on souhaite observer, trop grand, il ne permet pas de détecter certains phénomènes et l'algorithme doit faire face à des sauts importants d'énergie entre deux positions. Le choix du pas de temps doit donc être calibré sur l'échelle de temps la plus courte des mouvements mis en oeuvre dans la dynamique.

La deuxième difficulté est provoquée par le nombre très important d'atomes intervenant dans un système moléculaire composé d'une ou plusieurs molécules plongées dans un solvant par exemple. On se tourne alors vers des modèles où les effets du solvant apparaissent par le biais d'un potentiel ou d'un terme stochastique.

L'équation de Langevin [Lan08] est ainsi un exemple de modèle stochastique incorporant deux effets physiques du solvant : les collisions aléatoires du solvant avec le soluté, et les frictions du soluté dans le solvant. Ce modèle nécessite l'introduction d'un coefficient de friction γ et d'un mouvement brownien B associé à un coefficient de diffusion σ . Ces deux coefficients γ et σ sont liés par une relation dite de *fluctuation-dissipation*

$$\sigma \sigma^* = 2 \frac{\gamma}{k_B T},$$

ceci afin de garantir que la mesure canonique ρ - équation (1.1) avec $E = \mathcal{V}$ - à la température T considérée est bien échantillonnée.

La justification de l'équation de Langevin [Lan08] a été étudiée dans une série d'articles (citons par exemple [JKRH01, GKS04, KS04, Akk06]) basés sur l'approche de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73] que nous présentons dans l'annexe B.

Méthodes probabilistes pour la recherche de conformation

Décrivons quelques méthodes probabilistes pour la recherche de conformation. La méthode « naïve » consiste à déplacer tous les atomes de la molécule en ajoutant de l'aléa sur les coordonnées spatiales de chaque atome. Bien qu'elle soit très simple à mettre en oeuvre, son principal inconvénient est qu'il est difficile de minimiser l'énergie car elle fournit souvent des structures éloignées de la réalité.

Une manière simple de réduire le nombre de degrés de liberté est de faire tourner aléatoirement les liaisons de rotation en gardant fixes longueur et angles des liaisons.

Cette méthode a l'avantage par rapport à la précédente de fournir des conformations plus réalistes.

Le choix de la condition initiale à chaque étape peut se faire de trois façons :

1. en utilisant le résultat des méthodes précitées,
2. en tirant aléatoirement une configuration après pondération parmi les configurations déjà sélectionnées.
3. en ne sélectionnant que des conformations de basse énergie et en ne s'autorisant que les structures dont l'énergie est plus basse que celle du résultat de l'itération précédente, ou en effectuant le choix par un algorithme de Métropolis Monte Carlo par exemple (on tire une loi uniforme sur le segment $[0, 1]$, et on ne s'autorise que des structures dont le facteur de Boltzmann de la différence d'énergie est plus grande que le tirage).

L'algorithme s'arrête quand il ne génère plus de conformations significativement différentes des précédentes.

1.2. Partie I : équation de Poisson-Boltzmann

Cette thèse est décomposée en deux parties inégales. La première partie - la plus complète - traite des équations de Poisson-Boltzmann linéaire et non-linéaire. Nous donnons dans cette partie un résultat établissant une interprétation probabiliste de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire [BBC06] à l'aide de la solution d'une équation différentielle stochastique rétrograde (initialement énoncée dans [Per12]). La seconde partie - plus courte et nettement plus prospective - traite du problème de la réduction du nombre de variables d'une dynamique moléculaire. Elle établit les bases d'une étude d'un estimateur proposé par Paul Malliavin lors de communications personnelles [Mal06] à Denis Talay.

Dans la première partie, nous proposons une étude d'algorithmes probabilistes simulant les solutions d'équations paraboliques de Poisson-Boltzmann linéaire. Nous donnons de plus une nouvelle interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire [BBC06]. Cette équation est une *équation aux dérivées partielles elliptique semi-linéaire d'ordre deux* [Eva10], c'est-à-dire une équation dont le terme principal est un opérateur linéaire d'ordre deux (ici sous forme divergence) et qui contient des termes d'ordres zéro non linéaires. Elle modélise le potentiel électrostatique d'une molécule plongée dans un solvant. Sa résolution doit permettre de calculer les forces électrostatiques agissant sur les atomes de la molécule et ainsi d'appliquer la seconde loi de Newton - équation (1.2). Elle fait partie de la catégorie des modèles à solvant implicite, c'est-à-dire que la contribution du solvant sur le potentiel électrostatique ne se fait pas par le biais de chaque composant chargé du solvant mais par le biais d'une contribution générale. La nouvelle interprétation probabiliste que nous proposons fait appel aux *équations différentielles stochastiques rétrogrades* [PP92, Par99, BDH⁺03].

1.2.1. Chapitre 2 : préliminaires

Dans ce premier chapitre, nous posons le cadre géométrique dans lequel nous allons nous placer dans cette partie. Puis nous présentons la modélisation biologique justifiant de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire [BBC06]. Nous présentons ensuite une interprétation probabiliste de la classe d'opérateurs sous forme divergence apparaissant dans l'équation de Poisson-Boltzmann [BCMT10], et donnons la formule de Feynman-Kac adaptée aux solutions de ces équations [BCMT10]. Enfin nous concluons cette partie en introduisant la théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades [Par99, BDH⁺03] qui nous est utile dans le chapitre portant sur l'interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire [BBC06].

Cadre géométrique

Nous présentons le cadre géométrique utilisé pour modéliser la molécule dans son solvant. La molécule est modélisée par un ouvert connexe borné Ω_{int} de \mathbb{R}^3 . Le solvant est modélisé par le domaine Ω_{ext} formé par le complémentaire Ω_{int} dans \mathbb{R}^3 . L'interface entre la molécule et le solvant est notée Γ (figure 1.7).

Nous supposons que la surface Γ est régulière (sous-variété compacte de classe \mathcal{C}^∞) et qu'il est possible de construire une famille de redressements locaux de classe \mathcal{C}^∞ (lemme 2.1.1) vérifiant certaines propriétés. Cette famille de redressements locaux est utilisée dans les démonstrations des théorèmes 3.1.2 et 4.3.2. Notons \mathcal{N} un voisinage de la surface Γ , et définissons π la projection sur le bord Γ , \vec{n} le vecteur normal à Γ orienté vers l'extérieur (figure 1.7) et ρ une extension régulière de la distance signée au bord Γ positive à l'extérieur et négative à l'intérieur.

Équations de Poisson-Boltzmann

En justifiant la forme des équations linéaire et non-linéaire de Poisson-Boltzmann en dynamique moléculaire [BBC06], nous introduisons une fonction ϵ strictement positive et constante par morceaux (figure 1.7) de la forme suivante

$$\epsilon(x) = \begin{cases} \epsilon_{\text{int}} > 0, & x \in \Omega_{\text{int}}, \\ \epsilon_{\text{ext}} > 0, & x \in \Omega_{\text{ext}}, \end{cases}$$

modélisant la *permittivité* du système moléculaire composé de la molécule et du solvant. Définissons aussi une fonction κ constante par morceaux (figure 1.7) de la forme

$$\kappa(x) = \begin{cases} 0, & x \in \Omega_{\text{int}}, \\ \kappa > 0, & x \in \Omega_{\text{ext}}. \end{cases} \quad (1.3)$$

Nous donnons en (2.11) le générateur \mathcal{L} associé aux équations de Poisson-Boltzmann

$$\mathcal{L} = \nabla \cdot (\epsilon \nabla). \quad (1.4)$$

Les différents problèmes de Poisson-Boltzmann étudiés dans cette thèse sont les suivants :

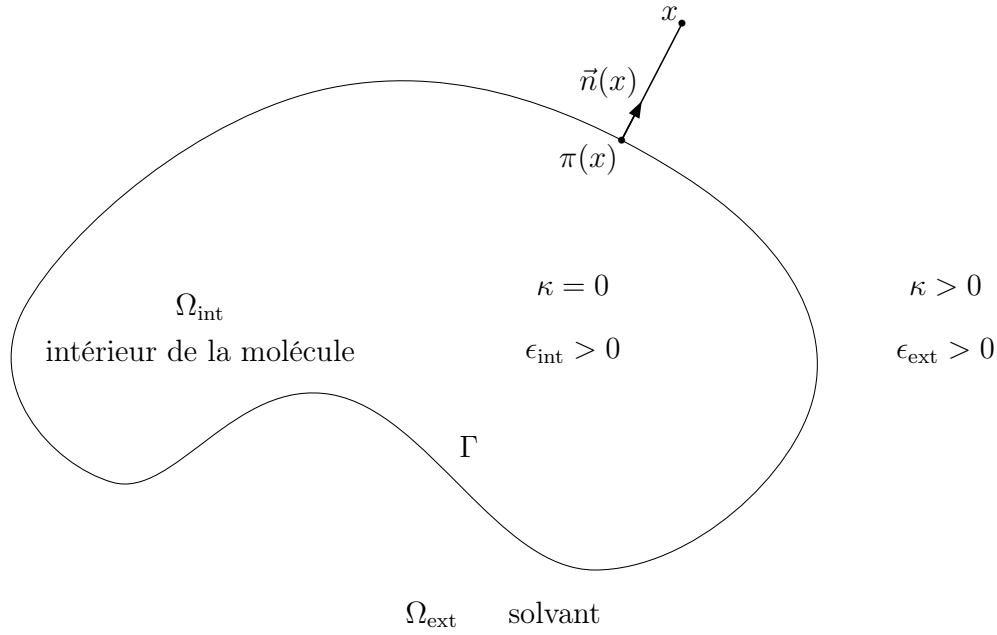


FIGURE 1.7.: Modélisation géométrique du système moléculaire

- le problème parabolique linéaire localisé dans un ouvert D contenant strictement Ω_{int} et à bord régulier énoncé en (2.12)

$$\begin{cases} \partial_t u(t, x) - \mathcal{L} u(t, x) + \kappa^2(x) u(t, x) = g(x) & \text{sur }]0, T[\times D, \\ u(0, x) = h(x) & \text{sur } D, \\ u(t, x) = 0 & \text{sur } [0, T] \times \partial D, \end{cases} \quad (1.5)$$

pour deux fonctions g et h . Ce problème est traité dans le chapitre 3. Nous y étudions principalement un algorithme probabiliste de simulation de la solution et donnons une estimation de l'erreur associée ;

- le problème elliptique non-linéaire énoncé en (2.13)

$$-\mathcal{L} u(x) + \kappa^2(x) \sinh u(x) = g(x), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad (1.6)$$

pour un terme source g sous forme de combinaison linéaire de mesures de Dirac

$$g(x) = \sum_{i=1}^N q_i \delta_{x_i}(x),$$

avec q_i charge de l'atome i et δ_{x_i} mesure de Dirac en la position de l'atome et N le nombre d'atomes de la molécule. Nous donnons dans le chapitre 4 une nouvelle interprétation probabiliste de ce problème à l'aide d'équations différentielles stochastiques rétrogrades [PP92].

Interprétation probabiliste d'une classe d'opérateurs sous forme divergence

Rappelons tout d'abord qu'afin d'assouplir les hypothèses pour une équation différentielle stochastique, il est intéressant d'introduire la notion de *solution faible* d'équation différentielle stochastique. La solution faible n'est pas construite sur un espace de probabilité donné mais comprend intrinsèquement dans sa solution la construction de l'espace de probabilité et du mouvement brownien. En particulier, l'unicité n'est plus trajectoirelle mais en loi. Un *problème de martingale* [SV69] est une interprétation de la notion de solution faible où la référence à un mouvement brownien a en particulier disparu.

Nous rappelons dans cette section l'interprétation probabiliste des opérateurs sous forme divergence (1.4) qui a été faite dans [BCMT10]. Cette interprétation probabiliste nécessite la résolution d'un problème de martingale donné dans la définition 2.3.2. Le théorème 2.3.3 donne l'existence et l'unicité de la solution de ce problème de martingale sous la forme de la solution faible de l'équation différentielle stochastique suivante (équation (2.14))

$$\begin{cases} X_t &= x + \int_0^t \sqrt{2\epsilon(X_s)} dB_s + \frac{\epsilon_{\text{ext}} - \epsilon_{\text{int}}}{2\epsilon_{\text{ext}}} \int_0^t \vec{n}(X_s) dL_s^0(D), \\ D_t &= \rho(X_t), \end{cases} \quad (1.7)$$

où B est un mouvement brownien standard de dimension d , \vec{n} le vecteur normal au bord Γ dirigé vers l'extérieur (figure 1.7), $(L_t^0(D))_{t \geq 0}$ est le processus de temps local en zéro [RY99] de la semi-martingale continue D^x et ρ la distance signée au bord Γ .

Le temps local d'un processus réel Y en un point y , peut être vu comme la limite normalisée du temps de séjour du processus autour du point y :

$$L_t^y(Y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_0^t (\mathbf{1}_{\{y < Y_{s+\epsilon}\}} - \mathbf{1}_{\{y < Y_s\}}) (Y_{s+\epsilon} - Y_s) ds,$$

où $\mathbf{1}_{\{A\}}$ est la fonction indicatrice de l'événement A .

Formules probabilistes adaptées aux équations de Poisson-Boltzmann

La forme avec temps local de l'équation différentielle stochastique (1.7) et la régularité des solutions des équations de type Poisson-Boltzmann (1.5) et (1.6) nécessitent des formules d'Itô et de Feynman-Kac adaptées (théorèmes 2.3.4 et 2.3.5 établis dans [BCMT10]).

Théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades

L'un des outils probabilistes utilisés pour donner une interprétation probabiliste des solutions d'équations aux dérivées partielles semi-linéaires est la théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades [PP92, Par99, BDH⁺03].

Une *équation différentielle stochastique rétrograde* est un problème stochastique en temps rétrograde caractérisé par la donnée d'un *horizon* T , d'une *condition terminale* vectorielle aléatoire ξ , et d'une fonction aléatoire dépendant du temps t et de deux

vecteurs y et z appelée *générateur*. La solution se présente sous la forme d'un couple de vecteurs (Y, Z) de processus vérifiant

$$\begin{cases} dY_t = -f(t, Y_t, Z_t)dt + Z_t dB_t, & t \in [0, T], \\ Y_T = \xi. \end{cases}$$

Ces équations peuvent être à horizon T fini ou aléatoire. Nous en donnons les définitions en 2.4.1 et 2.4.3 respectivement. Nous donnons aussi dans cette section des théorèmes d'existence et d'unicité des solutions à ces deux catégories d'équations (théorèmes 2.4.2 et 2.4.4). Enfin, nous donnons le lien très fort existant entre solutions d'équations aux dérivées partielles et d'équations différentielles stochastiques rétrogrades (théorème 2.4.5).

Soit L un opérateur différentiel du second ordre de la forme

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^k (\sigma \sigma^*)_{i,j}(t, x) \partial_{i,j} + b(t, x) \nabla, \quad (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}^d.$$

Sous les hypothèses classiques [KS91] sur la matrice σ et le vecteur b , il existe une solution forte X associée à L et solution de l'équation différentielle stochastique

$$X_s^{t,x} = x + \int_t^s b(u, X_u^{t,x}) du + \int_t^s \sigma(u, X_u^{t,x}) dB_u, \quad t \geq s, x \in \mathbb{R}^d.$$

Dans le cas des équations différentielles stochastiques rétrogrades associées à une équation aux dérivées partielles, le générateur de l'équation dépend du temps et des aléas par le biais du processus X associé à l'opérateur L .

De plus, à l'équation elliptique

$$Lu(x) + f(x, u(x), \nabla u \sigma(x)) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad (1.8)$$

on peut associer l'équation différentielle stochastique rétrograde de générateur f , d'horizon infini et de condition terminale nulle, s'écrivant pour tous réels t et T tels que $0 \leq t \leq T$ et pour toute condition initiale x du processus X^x

$$Y_t^x = Y_T^x + \int_t^T f(X_u^x, Y_u^x, Z_u^x) du - \int_t^T Z_u^x dB_u. \quad (1.9)$$

Sous des hypothèses de régularité sur le générateur f énoncées en **(h1)** de la section 2.4, nous avons le théorème suivant.

Théorème 1.2.1 (Théorème 5.1 [Par99]). *Supposons que l'équation (1.8) admette une solution $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^k)$ telle que, pour une constante λ liée à la constante de monotonie du générateur f (hypothèse **(h1)** de la section 2.4),*

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\lambda t} \|(\nabla u \sigma)(X_t^x)\|^2 dt \right] < \infty. \quad (1.10)$$

Alors, pour x dans \mathbb{R}^d , le couple $(u(X_t^x), (\nabla u \sigma)(X_t^x))_{t \geq 0}$ est la solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde (1.9). En particulier, on a l'identité $u(x) = Y_0^x$ pour x dans \mathbb{R}^d .

Remarque. Soulignons que l'hypothèse (1.10) est très contraignante et impose très souvent que λ soit strictement négatif. Aussi pour utiliser cette théorie dans le cas de l'équation non-linéaire de Poisson-Boltzmann (1.6) il a été nécessaire de démontrer des généralisations des théorèmes usuels [Par99, BDH⁺03]; c'est l'objet de la section 4.2.1.

Remarque. Il existe aussi un lien entre les solutions d'équations différentielles stochastiques rétrogrades et les solutions de viscosité de l'équation aux dérivées partielles associées (voir [Par99]).

1.2.2. Chapitre 3 : erreur faible d'un schéma d'approximation numérique du processus X

Dans ce chapitre nous nous intéressons à la simulation des solutions d'une version parabolique de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire (1.5). Cette approximation se base sur un schéma de discrétisation pour (1.7) pour lequel nous analysons l'erreur faible. Nous commençons par donner un résultat de résolution par technique d'analyse des équations aux dérivées partielles de l'équation suivi de l'interprétation probabiliste des solutions. Puis nous présentons divers algorithmes d'approximation numérique de ces solutions avant d'étudier leur erreur faible.

Résolution de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire parabolique

Après avoir posé le problème que l'on cherche à résoudre - équation (1.5), nous donnons un résultat d'existence d'unicité et de régularité de la solution :

Théorème (Théorème 3.1.1). *Le problème parabolique (1.5) a une unique solution u dans l'intersection des espaces $L^2(0, T; H_0^1(D))$ et $\mathcal{C}([0, T]; L^2(D))$. Cette solution appartient de plus à l'espace $\mathcal{C}_b^0([0, T] \times \bar{D}) \cap \mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \bar{\Omega}_{\text{int}}) \cap \mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \bar{\Omega}_{\text{ext}})$. Il existe une fonction r de $\mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \bar{D})$ telle que dans un voisinage \mathcal{N} de Γ (défini dans la section (2.1)),*

$$r(t, x) = \left(\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\epsilon_{\text{ext}}} - 1 \right) \nabla^{\text{int}} u(t, \pi(x)) \cdot \vec{n}(\pi(x)), \quad x \in \mathcal{N}.$$

La fonction \hat{u} définie sur \mathbb{R}^d par

$$\hat{u}(t, x) := u(t, x) - r(t, x)[\rho(x)]_+, \quad x \in \mathbb{R}^d$$

appartient alors à l'intersection des espaces $L^2(0, T; W_{\text{loc}}^{2,\infty}(\mathbb{R}^d))$ et $\mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d \setminus \Gamma)$.

Les principales étapes de la démonstration sont les suivantes.

- Nous commençons par donner l'existence et l'unicité de la solution faible.
- Puis nous montrons que cette solution vérifie les conditions de bord en étudiant la régularité de la trace de la solution sur la surface Γ de discontinuité. Pour ce faire, nous redressons localement la surface Γ et montrons la régularité de la fonction redressée à l'aide d'estimations d'énergie.

- Nous concluons enfin en montrant la régularité souhaitée à l'aide de deux sous-problèmes sur Ω_{int} et Ω_{ext} de bord Γ .

Ce plan de démonstration est similaire à celui que nous utilisons dans le chapitre portant sur l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire et à celui utilisé dans [BCMT10].

Interprétation probabiliste, algorithmes et analyse d'erreur faible.

Nous donnons ensuite une interprétation probabiliste de la solution. Introduisons u_0 la solution de

$$\begin{cases} \partial_t u_0(t, x) - \epsilon_{\text{int}} \Delta u_0(t, x) = g(x), & (t, x) \in]0, T] \times \mathbb{R}^3, \\ u_0(0, x) = 0, & x \in \Omega_{\text{int}}. \end{cases}$$

Fixons h réel strictement positif, et définissons Ω_{int}^h l'ensemble des points de Ω_{int} situés à une distance $d(x, \Gamma)$ de Γ plus grande que h . Soit $\tau_{\partial D}$ le temps d'atteinte du bord ∂D par le processus X (1.7)

$$\tau_{\partial D} := \inf \{t \geq 0 \mid X_t \in \partial D\},$$

et pour k entier plus grand qu'un, les suites de temps d'atteinte par ce même processus X de Ω_{int}^h et Γ

$$\begin{aligned} \tau_k &:= \inf \{t \geq \tau'_{k-1} \mid X_t \in \Omega_{\text{int}}^h\}, \\ \tau'_k &:= \inf \{t \geq \tau_k \mid X_t \in \Gamma\}, \end{aligned}$$

avec la convention que $\tau'_0 = 0$.

Théorème 1.2.2 (Théorème 3.2.1). *Soient \mathbb{P}_x la loi de la solution faible X de l'équation (1.7) avec condition initiale $X_0 = x$ dans \mathbb{R}^3 et u la solution au problème parabolique (1.5). Alors, pour tout x dans \mathbb{R}^3 et tout t dans le segment $[0, T]$,*

$$\begin{aligned} u(t, x) &= \sum_{k=1}^{\infty} \left(\mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau_k, X_{\tau_k}) \exp \left(- \int_0^{\tau_k} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_k < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \right. \\ &\quad \left. - \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau'_k, X_{\tau'_k}) \exp \left(- \int_0^{\tau'_k} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_k < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \right) \\ &\quad + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \right]. \end{aligned}$$

Afin de construire un algorithme de simulation de la solution, nous présentons l'algorithme (3.1) de marche sur les sphères arrêtée «SWOS» (*Stopped Walk On Sphere*).

Cet algorithme est une version arrêtée à un instant t fixé de l'algorithme de marche sur les sphères [Sim08] dont le principe est le suivant (figure 1.8) : partant d'un point y_0 d'un domaine D (par exemple Ω_{int} ou Ω_{ext}), et étant donné un critère d'arrêt ϵ strictement positif, la position à l'étape suivante de l'algorithme est simulée comme suit :

On calcule le rayon r_0 de la plus grande sphère de centre y_0 incluse dans le domaine D ,

1. si $r_0 > \epsilon$, on simule la position de sortie de la sphère en tirant une loi uniforme sur la sphère et on passe à l'étape suivante,
2. sinon, on arrête l'algorithme et l'on projette sur Γ .

Cet algorithme a l'intérêt d'accélérer les trajectoires dans les régions de peu d'intérêt (régions loin du bord ∂D) et d'affiner la trajectoire lorsqu'elle s'approche du bord.

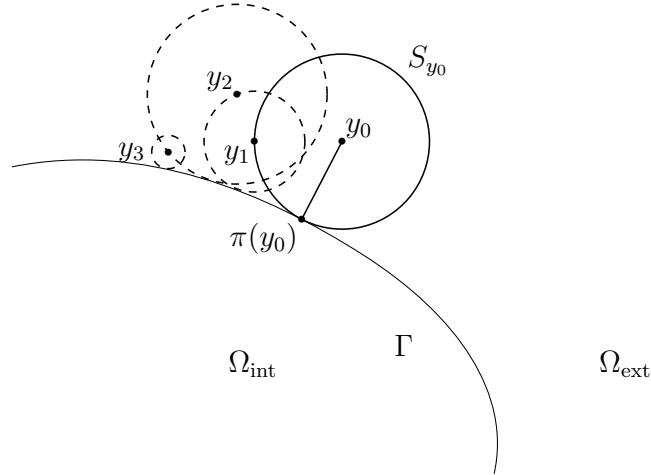


FIGURE 1.8.: Algorithme de marche sur les sphères

Tirant parti du fait que la loi du temps de sortie d'une boule par un mouvement brownien est indépendante de la loi de la position de sortie de la boule, et que la loi de la position à t fixé conditionnellement au fait que t soit plus petit que le temps de sortie de la sphère est connue [BS02], nous proposons une version arrêtée de cet algorithme (algorithme 3.1). Partant d'un point y_0 du domaine D , la position suivante est simulée ainsi :

1. on calcule le rayon r_0 de la plus grande sphère de centre y_0 incluse dans le domaine D ,
2. si $r_0 > \epsilon$, on simule le temps de sortie τ_0 de cette sphère.
 - a) si τ_0 est inférieur à t , on simule de manière indépendante et uniforme la position de sortie de la sphère et on passe à l'étape suivante,
 - b) sinon, on simule la position en t en tirant de manière uniforme un point sur la sphère de rayon donnée par une variable aléatoire \mathbf{r} suivant la loi d'un processus de Bessel de dimension 3 au temps t conditionnellement au fait que ce processus n'a pas atteint r_0 avant l'instant t (lemme 3.3.2), on arrête l'algorithme et on projette sur le bord Γ .
3. si $r_0 < \epsilon$, on arrête l'algorithme.

Afin de rendre compte d'un terme linéaire d'ordre 0 dans l'équation aux dérivées partielles (1.5) et de réduire la taille des trajectoires améliorant ainsi l'efficacité de l'algorithme de simulation, il est intéressant de tuer la diffusion lors de ses passages

Algorithme 1.1 Algorithme générique

Soit $x_0 \in \Omega_{\text{int}}$, $t \in \mathbb{R}^+$. $k \leftarrow 0$, $score \leftarrow 0$ **loop****if** $x_k \in \Omega_{\text{int}}$ **then** $(\tau'_k, \text{sortie}(x_k)) = \text{SWOS}(t - \tau_k)$ $score \leftarrow score - u_0(t - \tau'_k, \text{sortie}(x_k))$,**if** $\tau'_k = t$ **then****return** t , $score$ **end if****else** $test, t_k, \text{sortie}(x_k) = \text{SWOS}(\bar{\kappa}^2/2\epsilon_{\text{ext}}, t - \tau'_k)$ Soit (A_k, B_k) une variable aléatoire indépendante de toutes les précédentes distribuée comme $(A_{\text{sortie}(x_k)}, B_{\text{sortie}(x_k)})$.**if** B_k **then****return** t_k , $score$ **else if** $t_k = t$ **then** $score \leftarrow score + h(\text{sortie}(x_k))$ **return** t , $score$ **end if****end if** $x_{k+1} \leftarrow \text{sortie}(X_k) + A_k$ **if** $x_{k+1} \in \Omega_{\text{int}}$ **then** $\tau_{k+1} \leftarrow t_k$ $score \leftarrow score + u_0(t - \tau_{k+1}, x_{k+1})$ **end if** $k \leftarrow k + 1$ **end loop**

dans le domaine Ω_{ext} de la manière suivante ; ceci peut être intégré à l'algorithme de la manière suivante.

Introduisons une variable aléatoire Y de loi exponentielle de paramètre un, indépendante du mouvement brownien B sous-jacent. Définissons l'instant de mort θ par l'expression dépendant de $\bar{\kappa}^2$ (voir équations (1.3) et (1.5)) :

$$\theta = \inf \{t \geq 0; \bar{\kappa}^2 t \wedge \tau_0 \geq Y\}.$$

L'interprétation donnée dans le théorème 1.2.2 permet la construction d'un algorithme (algorithme 3.2) de simulation de la solution de l'équation (1.5) basé sur l'algorithme de marche sur les sphères arrêtée pour simuler les trajectoires de X dans Ω_{int} et Ω_{ext} (avec éventuellement deux taux de mort différents).

Soit $(A_x, B_x)_{x \in \Gamma}$ une famille de variables aléatoires où A_x est à valeurs dans \mathbb{R}^3 et B_x dans $\{0, 1\}$. L'indice x représente la position de X sur Γ , le vecteur aléatoire A_x représente la position où la particule est repoussée pour simuler la sortie de la bande et $B_x = 0$ si et seulement si la particule est tuée avant ce remplacement. On note dans l'algorithme *sortie*(x) la position de sortie résultant de l'algorithme de marche sur les sphères arrêtée.

Nous effectuons enfin une analyse de l'erreur faible commise en approchant la solution u par la simulation \bar{u}_h^{algo} obtenue par l'algorithme 1.1. Cette erreur faible dépend de la distance h à laquelle on repousse la diffusion après qu'elle ait atteint la surface Γ et de la distance ϵ d'arrêt de l'algorithme de marche sur les sphères arrêtée.

Théorème (Théorème 3.4.2). *Supposons que*

$$\mathbb{E} [\|A_x\|^2] = O(h^2), \quad \mathbb{P} \{B_{x,t} = 0\} = O(h^2),$$

$$\nabla^{\text{int}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}}\}} + \nabla^{\text{ext}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} = O(h^2) \quad (1.11)$$

et que l'on peut choisir η petit tel que pour tout x sur la surface Γ , et pour une constante δ strictement positive, on ait

$$\mathbb{P} \{|\rho(x + A_x)| \in [\eta h, \eta^{-1} h]\} \geq \delta.$$

Alors l'erreur faible de l'algorithme de simulation générique est en $O(h + \epsilon/h)$:

$$\sup_{x_0 \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} |\bar{u}_h^{\text{algo}}(s, x_0) - (u - u_0)(s, x_0)| = O(h + \epsilon/h).$$

1.2.3. Chapitre 4 : interprétation probabiliste de l'équation non-linéaire de Poisson-Boltzmann

Dans ce chapitre, nous donnons les résultats principaux de la thèse : l'énoncé d'un résultat d'existence, d'unicité et de régularité de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire [BBC06]

$$-\nabla \cdot (\epsilon(x) \nabla u(x)) + \kappa^2(x) \sinh u(x) = g(x), \quad (1.12)$$

où le terme source g est une somme de mesure de Dirac δ .

$$g(x) = \sum_{i=1}^N q_i \delta_{x_i}(x), \quad x \in \mathbb{R}^3,$$

et son interprétation probabiliste à l'aide d'équations différentielles stochastiques rétrogrades [PP92, Par99, BDH⁺03] à temps final aléatoire et à coefficient non strictement monotone

L'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire (1.12) est à terme source constitué d'une combinaison linéaire de mesure de Dirac en les centres des atomes, donc singulier. La première étape pour l'interprétation probabiliste est de traiter la singularité en décomposant la solution de l'équation comme la somme d'une fonction connue singulière et de la solution d'une équation de Poisson-Boltzmann à terme source régulier et support compact. C'est cette équation qui nous servira de base à notre étude.

La deuxième étape est de généraliser le théorème 1.2.1 afin de pouvoir interpréter l'équation non-linéaire de Poisson-Boltzmann à terme source régulier à l'aide d'une équation différentielle stochastique rétrograde. Une fois cette étape effectuée, nous montrons l'existence, l'unicité et la régularité de la solution à l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire à terme source régulier. Nous avons placé dans une dernière section la démonstration de lemmes techniques.

Singularité du terme source

La contribution des charges des atomes de la molécule au potentiel électrostatique est modélisée par une combinaison linéaire de mesures de Dirac positionnées en les centres des atomes. Pour traiter la singularité du terme source, nous écrivons la solution de l'équation (1.12) comme la somme d'une fonction singulière connue (impliquant des fonctions de Green) et de la solution d'une équation de Poisson-Boltzmann avec terme source régulier et à support compact dans Ω_{int} .

Soient χ une fonction \mathcal{C}^∞ à support compact inclus dans Ω_{int} vérifiant $\chi(x) = 1$ au voisinage des points $\{x_1, \dots, x_N\}$ et soit $u_0 = \sum_i G_i$ où

$$G_i(x) = \frac{q_i}{4\pi\epsilon_{\text{int}}} \frac{1}{|x - x_i|}, \quad x \in \mathbb{R}^3 \quad (1.13)$$

qui vérifie dans \mathbb{R}^3

$$-\nabla \cdot (\epsilon_{\text{int}} \nabla G_i) = q_i \delta_i.$$

La fonction G_i est la fonction de Green associée à la masse de Dirac positionnée en x_i . Définissons la fonction \tilde{g} de régularité \mathcal{C}^∞ sur \mathbb{R}^3 par

$$\tilde{g}(x) = \epsilon_{\text{int}} (u_0(x) \Delta \chi(x) + \nabla u_0(x) \cdot \nabla \chi(x)), \quad x \in \mathbb{R}^3.$$

Dans la suite du chapitre, nous traitons de l'interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire avec terme source régulier \tilde{g} satisfaite par $v = u - \chi u_0$

$$-\nabla \cdot (\epsilon(x) \nabla v(x)) + \kappa^2(x) \sinh(v(x)) = \tilde{g}(x), \quad x \in \mathbb{R}^3. \quad (1.14)$$

Interprétation probabiliste en terme d'ÉDSR

L'équation non-linéaire de Poisson-Boltzmann (1.14) a la particularité d'avoir son terme non-linéaire ($\kappa^2(\cdot) \sinh u(\cdot)$) identiquement nul sur l'ouvert Ω_{int} d'intérieur non vide, et donc non strictement monotone.. Ceci entraîne l'impossibilité d'appliquer le théorème 1.2.1 à l'équation différentielle stochastique rétrograde associée :

$$Y_t^x = Y_T^x + \int_t^T (\tilde{g}(X_s^x) - \kappa^2(X_s^x) \sinh Y_s^x) ds - \int_t^T Z_s^x dB_s, \quad 0 \leq t \leq T \quad (1.15)$$

de générateur $(t, x, y) \rightarrow f(X_t^x, y) := \tilde{g}(X_t^x) - \kappa^2(X_t^x) \sinh y$ défini pour $t > 0$, $x \in \mathbb{R}^3$, $y \in \mathbb{R}$ et où X^x est la solution faible de l'équation (1.7). Il a donc été nécessaire de généraliser ces résultats aux cas d'équations différentielles stochastiques rétrogrades à *générateur* (fonction correspondant à la partie non linéaire de l'équation aux dérivées partielles) non strictement monotone, c'est-à-dire vérifiant l'existence d'une constante μ non nécessairement strictement négative telle que pour tout t, y, y', z on ait presque sûrement,

$$\langle y - y', f(t, y, z) - f(t, y', z) \rangle \leq \mu |y - y'|^2.$$

Cette généralisation est donnée dans le théorème 4.2.3 dont les principales hypothèses sont les suivantes : étant donné un temps d'arrêt τ sur un espace de probabilité muni d'une filtration \mathcal{F} et d'un mouvement brownien B vectoriel, un générateur f et une condition terminale ξ , supposons que

(h1) le générateur f vérifie les propriétés suivantes :

a) **Lipschitz** : pour tout t, y, y' presque sûrement,

$$|f(t, y, z) - f(t, y, z')| \leq K(t) \|z - z'\|$$

avec K processus progressivement mesurable borné majoré par une constante \bar{K} ,

b) **monotonie** : pour tout t, y, y', z presque sûrement,

$$\langle y - y', f(t, y, z) - f(t, y', z) \rangle \leq \mu(t) |y - y'|^2$$

avec μ processus progressivement mesurable borné majoré par une constante $\bar{\mu}$, et

c) **intégrabilité** : pour un processus λ progressivement mesurable vérifiant

$$2\mu(t) + K^2(t) < \lambda(t)$$

pour tout t dans \mathbb{R}^+ ,

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\tau e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |f(t, 0, 0)|^2 dt \right] < \infty$$

(h2) la condition finale ξ est une variable aléatoire \mathcal{F}_τ -mesurable vérifiant les deux inégalités

$$\mathbb{E} \left[e^{\int_0^\tau \lambda(s) ds} |\xi|^2 \right] < \infty$$

et

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\tau e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |f(t, e^{-1/2 \int_0^t \tilde{\lambda}(s) ds} \bar{\xi}_t, e^{-1/2 \int_0^t \tilde{\lambda}(s) ds} \bar{\eta}_t)|^2 dt \right] < \infty,$$

où $\tilde{\lambda}(t) := 2\mu(t) - K^2(t)$, $\bar{\xi} = e^{\int_0^\tau \tilde{\lambda}(s) ds} \xi$, $\bar{\xi}_t = \mathbb{E} [\bar{\xi} | \mathcal{F}_t]$ et $\bar{\eta}$ processus prévisible vérifiant

$$\begin{aligned} \bar{\xi} &= \mathbb{E} [\bar{\xi}] + \int_0^\infty \bar{\eta}_t dB_t, \\ \mathbb{E} \left[\int_0^\infty |\bar{\eta}_t|^2 dt \right] &< \infty. \end{aligned}$$

Théorème 1.2.3 (Théorème 4.2.3). *Sous les hypothèses précédentes, il existe une unique solution (Y, Z) à l'équation différentielle stochastique rétrograde de paramètres (τ, ξ, f) qui, pour tout processus λ progressivement mesurable satisfaisant $\lambda(\cdot) - 2\mu(\cdot) - K^2(\cdot) > \bar{\lambda} > 0$, vérifie l'inégalité suivante,*

$$\|(Y, Z)\|_{\lambda(\cdot)}^2 \leq C \mathbb{E} \left[e^{\int_0^\infty \lambda(s) ds} |\xi|^2 + \int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |f(t, 0, 0)|^2 dt \right] < \infty.$$

La démonstration de ce théorème adopte le plan de démonstration usuel [Par99]. Notre généralisation a la particularité de permettre aux constantes de Lipschitz K et de monotonie μ de dépendre du temps et des aléas sous forme de processus progressivement mesurables. En particulier, il est maintenant nécessaire de montrer une estimation fine du temps d'occupation des domaines Ω_{int} et Ω_{ext} par la solution faible X de l'équation (1.7). La démonstration de ce point est située dans la section 4.4.3.

La deuxième particularité de l'équation de Poisson-Boltzmann, à savoir l'opérateur sous forme divergence à coefficient discontinu, nécessite aussi une soigneuse attention. L'apparition d'un terme de temps local dans l'équation différentielle stochastique (1.7) associée ne permet plus l'utilisation du théorème de représentation des martingales browniennes [KS91] soutenant la théorie des équations différentielles stochastiques. Cependant, la propriété d'unicité en loi [BCMT10] de la diffusion (1.7) autorise l'application d'un théorème plus général de représentation des martingales donné dans [JS03]. Ce théorème permet la construction de solutions d'équations différentielles stochastiques rétrogrades dont le générateur dépend d'une unique solution faible d'équations différentielles stochastiques.

Remarque. Notons qu'en montrant le théorème 4.2.3 nous sommes allés au delà des hypothèses nécessaires pour l'équation de Poisson-Boltzmann en autorisant la constante de Lipschitz à dépendre du temps et des aléas sous la forme d'un processus progressivement mesurable, en considérant des équations différentielles stochastiques rétrogrades vectorielles, mais aussi en démontrant la partie existence du théorème 4.2.3.

Application à l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire

Nous donnons ensuite un résultat d'existence, d'unicité et de régularité de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire avec terme source régulier (1.14). Introduisons le sous-espace M de l'espace de Hilbert séparable $H^1(\mathbb{R}^3)$ défini comme suit

$$M := \{v \in H^1(\mathbb{R}^3) \mid \cosh^2 v - 1 \in L^1(\mathbb{R}^3)\}.$$

Théorème 1.2.4 (Théorème 4.3.2). *L'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire avec terme source régularisé (1.14) admet une unique solution faible v dans $M \subset H^1(\mathbb{R}^3)$. Cette solution appartient à l'intersection $C_b^0(\mathbb{R}^3) \cap C^2(\mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Omega}_{\text{int}}) \cap C^2(\mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Omega}_{\text{ext}})$, et sa trace $v|_{\Gamma}$ est dans $C^3(\Gamma)$. Il existe de plus une fonction r dans $C^2(\mathbb{R}^3)$ telle que dans un voisinage \mathcal{N} de Γ*

$$r(x) = \left(\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\epsilon_{\text{ext}}} - 1 \right) \nabla^{\text{int}} v(\pi(x)) \cdot \vec{n}(\pi(x)), \quad \forall x \in \mathcal{N},$$

et vérifiant que l'application définie par

$$\hat{v}(x) := v(x) - r(x)[\rho(x)]_+, \quad x \in \mathbb{R}^3$$

est dans $C^2(\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma) \cap W_{\text{loc}}^{2,\infty}$. Enfin, le gradient ∇v est dans $L^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Éléments de démonstration du théorème 1.2.4. L'**existence et l'unicité** de la solution à l'équation (1.14) sont montrés à l'aide d'une méthode de minimisation d'énergie. Nous définissons l'énergie sur $H^1(\mathbb{R}^3)$ de la manière suivante

$$\mathcal{E}(v) := \begin{cases} \int \left(\frac{\epsilon(y)}{2} |\nabla v(y)|^2 + \kappa^2(y) (\cosh(v(y)) - 1) - \tilde{g}(y)v(y) \right) dy, & v \in M \\ +\infty, & v \notin M. \end{cases}$$

Nous montrons que l'énergie \mathcal{E} est semi-continue inférieurement, convexe et coercive sur l'espace réflexif $H^1(\mathbb{R}^3)$. Soulignons que la justification de la coercivité demande un traitement soigneux dû au fait que la fonction κ s'annule sur l'ouvert d'intérieur non vide Ω_{int} .

Détaillons maintenant les étapes de la démonstration de la **régularité**. Nous montrons dans le lemme 4.3.10 que la solution v est dans $L^\infty(\Omega_{\text{ext}})$. Puis nous montrons la régularité de la trace de v au bord Γ , à l'aide d'un redressement local du bord. Nous montrons à l'aide de contrôle sur la norme $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ que la solution redressée est localement régulière dans les directions tangentielles à la surface Γ : la solution redressée \tilde{v} est de classe $H^{1,4,4}(\mathcal{V})$ sur les voisinages \mathcal{V} de Γ donnés dans le lemme 2.1.1. La démonstration de ces propriétés utilise à plusieurs reprises une inégalité de type Sobolev.

Lemme 1.2.5 (Type Sobolev). *Donnons-nous un compact K de \mathbb{R}^d et u dans $\mathcal{W}^{1,p}(K)$ vérifiant $\partial_i u$ dans $L^{n_i(d-1)}(K)$, alors u est dans $L^m(K)$, où $m = \sum_{i=1}^d n_i$.*

Ce lemme permet d'obtenir des informations sur la régularité d'une fonction dont les dérivées partielles ont différents niveaux de régularité, c'est le cas de la solution à l'équation de Poisson-Boltzmann dont la régularité près de la surface Γ est différente dans les directions normales et tangentielles à la surface.

La régularité $\mathcal{C}^{2+\alpha}$ ($0 < \alpha < 1$) obtenue, nous concluons en traitant la régularité des deux sous-problèmes sur Ω_{int} et Ω_{ext} à l'aide de résultats provenant de [GT01]. \square

Ce résultat est suivi du théorème principal de la thèse (théorème 4.3.3) qui établit l'interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire sous la forme de la somme d'une fonction connue singulière et de la solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde (1.15).

Théorème 1.2.6 (Théorème 4.3.3). *L'équation de Poisson-Boltzmann (1.12) admet l'interprétation probabiliste suivante*

$$u(x) = \chi(x)u_0(x) + Y_0^x, \quad x \in \mathbb{R}^3$$

où Y_0^x est la solution (Y^x, Z^x) de l'équation différentielle stochastique rétrograde (1.15) et la fonction u_0 est donnée par la combinaison de noyaux de Green

$$u_0(x) = \sum_i \frac{q_i}{4\pi\epsilon_{\text{int}}} \frac{1}{|x - x_i|}, \quad x \in \mathbb{R}^3.$$

avec q_i et x_i les charge et position de l'atome d'indice i .

Éléments de démonstration du théorème 1.2.6. Nous énonçons un théorème d'existence, d'unicité et de régularité de la solution v dans $H^1(\mathbb{R}^3)$ à l'équation de Poisson-Boltzmann régularisée (théorème 1.2.4). Cette solution vérifie les conditions du théorème 4.2.8 (corollaire du théorème 1.2.3) liant solutions d'équation aux dérivées partielles et solutions d'équation différentielle stochastique rétrograde.

Le générateur $(x, y) \rightarrow \tilde{g}(x) - \kappa^2(x) \sinh(y)$ vérifiant les hypothèses de ce théorème, il s'applique donc à cette solution v et permet de conclure. L'une de ces hypothèses est une hypothèse d'intégrabilité exponentielle de la fonction $\lambda(\cdot)$ définie dans le théorème 1.2.3. La preuve de cette condition repose sur le lemme suivant 1.2.7 (dont la démonstration est donnée dans la section 4.4). \square

Lemme 1.2.7 (Lemme 4.3.4). *Soit X la solution faible de l'équation (1.7) pour x dans \mathbb{R}^3 associée à l'opérateur $\mathcal{L} := \nabla(\epsilon\nabla)$. Il existe un choix de réels $p > 0$ et $q > 0$, tel que*

$$\mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty \exp \left\{ \int_0^t \lambda(X_s) ds \right\} |f(X_t, 0)|^2 dt \right] < \infty \quad (1.16)$$

où $\lambda(X_s) = p\mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} - q\mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}}$.

Avant de donner des éléments de démonstration du lemme 1.2.7, nous donnons deux résultats très utiles sur la transformée de Laplace du temps de sortie d'un intervalle par un mouvement brownien et un processus de Bessel [RY99] pour des valeurs α positives. Ces deux lemmes vont ainsi permettre de trouver le paramètre p strictement positif du lemme 1.2.7.

Lemme 1.2.8 (Lemme 4.4.1). *Soient B un mouvement brownien réel partant de x dans $[0, R]$, τ le temps d'atteinte de $\{-R, R\}$ par ce brownien, et un réel α vérifiant $0 < \alpha < \frac{\pi^2}{8R^2}$, alors*

$$\mathbb{E}_x [e^{\alpha\tau}] = \frac{\cos \sqrt{2\alpha}x}{\cos \sqrt{2\alpha}R}. \quad (1.17)$$

Lemme 1.2.9 (Lemme 4.4.2). *Soient $|B|$ un processus de Bessel de dimension 3 partant de $|x| \in [0, R]$, τ le temps d'atteinte de R par ce processus de Bessel, et un réel α vérifiant $0 < \alpha < \frac{\pi^2}{8R^2}$, alors*

$$\mathbb{E}_{|x|} [e^{\alpha\tau}] = \frac{\text{sinc} \sqrt{2\alpha}|x|}{\text{sinc} \sqrt{2\alpha}R}, \quad (1.18)$$

où l'on a défini

$$\text{sinc}(x) := \begin{cases} \frac{\sin x}{x}, & x \in \mathbb{R}^*, \\ 1, & x = 0. \end{cases}$$

Éléments de démonstration du lemme 1.2.7. Détaillons les principaux arguments utilisés :

1. le processus X solution faible de l'équation (1.7) vérifie la propriété de Markov forte,
2. les processus $(X_{t/2\epsilon_{\text{int}}})_{t \geq 0}$ et $(X_{t/2\epsilon_{\text{ext}}})_{t \geq 0}$ ont une trajectoire brownienne tant qu'ils restent respectivement dans Ω_{int} et Ω_{ext} ,
3. la distance du processus X à la frontière Γ a un comportement de mouvement brownien biaisé (*Skew Brownian Motion*) [Lej06] sur une bande \mathcal{W} autour de la frontière Γ . Ce dernier point est vrai à une transformation de Girsanov près.

Nous introduisons deux suites de temps d'arrêt : la suite $(\theta_k)_k$ des temps de sortie de la bande \mathcal{W} et la suite $(\tau_k)_k$ des temps d'atteinte de la frontière Γ . Puis nous décomposons, à l'aide de ces deux suites, l'intégrale de l'exponentielle dans la fonctionnelle (1.16) :

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\ &= \mathbf{1}_{\tau_1 < \infty} \int_0^{\tau_1} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\ & \quad + \sum_{k=1}^\infty \mathbf{1}_{\tau_k < \infty} \int_{\tau_k}^{\theta_k} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\ & \quad + \mathbf{1}_{\tau_k < \infty} \int_{\theta_k}^{\tau_{k+1}} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\ &= \sum_{k=1}^\infty C_k (A_k + B_k) \mathbf{1}_{\tau_k < \infty} \end{aligned} \quad (1.19)$$

où l'on a posé

$$\begin{aligned} A_k &:= \int_{\tau_k}^{\theta_k} \exp \left\{ p \int_{\tau_k}^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_{\tau_k}^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\ B_k &:= \int_{\theta_k}^{\tau_{k+1}} \exp \left\{ p \int_{\theta_k}^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_{\theta_k}^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\ C_k &:= \exp \left\{ p \int_0^{\tau_k} \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^{\tau_k} \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} \end{aligned}$$

Les lemmes 1.2.8 et 1.2.9 permettent alors de traiter chacun des termes et montrer que la série (1.19) est convergente en espérance. \square

1.3. Partie II : estimateur de Malliavin

Au vu de la taille et du caractère prospectif de cette partie, nous n'entrons que peu dans les détails comparativement à la première partie. Nous résumons ici la question à laquelle nous avons tenté de répondre, les interrogations et difficultés que nous avons rencontrées, et les pistes que nous voyons pour résoudre ces difficultés

1.3.1. Objectif

Nous nous intéressons dans cette partie à la réduction du nombre de variables d'un système dynamique. Les systèmes moléculaires (molécules étudiées - soluté - plongées dans un solvant constitué de molécules) contiennent un très grand nombre de variables. La très grande taille des systèmes pose d'importantes difficultés numériques lorsque l'on souhaite les simuler ; aussi la question de la réduction du nombre de variables est un élément clef de la modélisation et des simulations moléculaires. La manière naturelle de contourner ces difficultés numériques est d'approcher le système étudié par un système de plus petite taille et donc plus aisément simulable. La question principale est donc d'arriver à modéliser un système de plus petite dimension approchant le système moléculaire. Le choix des variables d'intérêt apparaît en filigrane de cette question, et c'est sur l'étude d'une méthode de séparation des variables que porte ce chapitre.

1.3.2. Préliminaires

Dans un premier temps, nous présentons les systèmes dynamiques à composantes lentes et rapides [FW98, KP03, BG06]. Nous posons les notations et présentons des exemples illustrant la variété de comportements de ces systèmes.

Puis dans un deuxième temps, nous présentons la théorie spectrale des processus stationnaires [GS80] à la base de l'estimateur proposé par Paul Malliavin. Un *processus stationnaire au sens large* est un processus dont l'espérance chaque instant est indépendante du temps, et dont la covariance avec retard s à chaque instant est une fonction ne dépendant que du retard s . À un processus stationnaire au sens large, il est possible

d'associer une fonction appelée *densité spectrale du processus*. La densité spectrale est la transformée de Fourier de la fonction de covariance avec retard. C'est un outil très utilisé en théorie du signal. Il associe à un processus la distribution de ses fréquences et permet ainsi d'obtenir des informations sur ce processus.

Systèmes dynamiques

Nous présentons dans cette section les systèmes dynamiques à deux échelles de temps en rappelant les notations usuelles et en présentant des exemples classiques illustrant la richesse des comportements de ce type de système. Pour cette présentation, nous avons choisi de suivre le chapitre d'introduction de [BG06]. Nous renvoyons à [FW98, KP03, BG06] pour une présentation des nombreux résultats mathématiques portant sur ces systèmes.

Systèmes dynamiques déterministes à composantes lentes et rapides

Notations Soit ϵ petit le paramètre de séparation d'échelle. Un système dynamique déterministe à composantes vectorielles lentes x et rapides y peut s'écrire de la manière suivante

$$\begin{cases} \frac{dx_t}{dt} = F(x_t, y_t), \\ \frac{dy_t}{dt} = \frac{1}{\epsilon} f(x_t, y_t). \end{cases} \quad (1.20)$$

On appelle *variables lentes du système* les variables x et *variables rapides* les variables y . Le même système considéré sur l'échelle de temps rapide, c'est-à-dire en ayant effectué le changement de temps $s = t\epsilon$ s'écrit de manière équivalente :

$$\begin{cases} \frac{dx_s}{dt} = \epsilon F(x_s, y_s), \\ \frac{dy_s}{ds} = f(x_s, y_s). \end{cases} \quad (1.21)$$

Remarque. On garde tout au long de cette sous-section la convention que t représente un temps à l'échelle lente, et s un temps à l'échelle rapide.

Les systèmes à deux échelles de temps peuvent avoir différents comportements dépendant essentiellement des propriétés du système lentement perturbé par un paramètre λ

$$\frac{dy_s}{ds} = f(\lambda, y_s). \quad (1.22)$$

Afin d'illustrer la richesse de comportements, nous donnons dans le paragraphe suivant quelques exemples de système dynamique.

Divers comportements Le premier cas de figure est celui où la dynamique rapide décrite par l'équation (1.22) admet un point asymptotique d'équilibre $\varphi(\lambda)$ pour tout

paramètre λ . La sous-variété décrite par φ est appelée *sous-variété lente*. Le comportement limite en ϵ petit de la composante lente est alors donné par la dynamique autonome suivante [BG06]

$$\frac{dx_t}{dt} = F(x_t, \varphi(x_t)).$$

La composante rapide y trouve quant-à-elle instantanément à chaque instant sa position d'équilibre fonction de x . On obtient ainsi dans ce cas de figure pour la variable lente x une dynamique autonome, et l'on a réduit la taille du système.

Dans le cas où le système lentement perturbé (1.22) admet un point d'équilibre dépendant régulièrement du paramètre λ , la dynamique autonome est obtenue par un procédé d'homogénéisation de la dynamique lente par rapport à la mesure invariante du système (1.22). Si par contre le système lentement perturbé admet des points de bifurcation, d'autres cas de figures peuvent apparaître comme : des sauts entre diverses parties de sous-variétés lentes, des oscillations de relaxation pendant lesquelles alternent des phases lentes et rapides (exemple du vase de Tantale se remplissant doucement jusqu'à enclenchement d'un siphon vidant le vase rapidement - figure 1.9), des cycles d'hystérésis (figure 1.10) lors desquels le système suit avec retard l'évolution périodique du paramètre λ ou des retards de bifurcation par exemple pour lesquels le système continue pendant un certain temps sur une branche instable après qu'une bifurcation ait eu lieu.

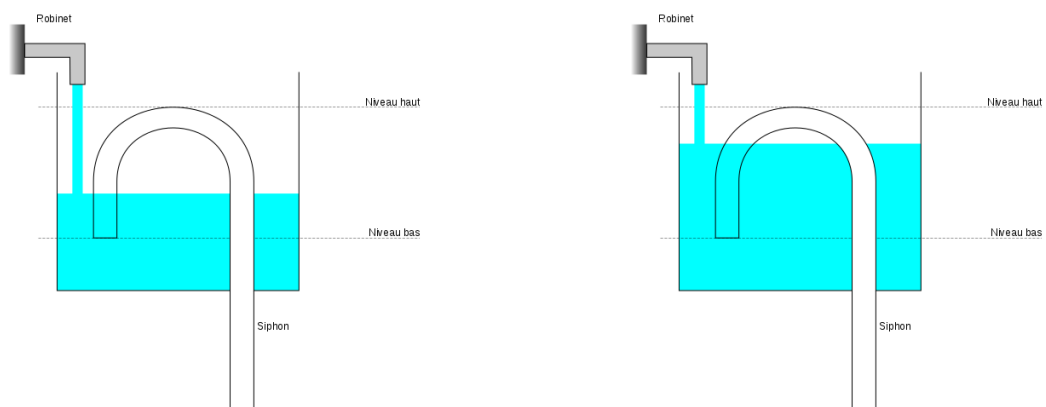
Systèmes dynamiques stochastiques à composantes lentes et rapides En ajoutant du bruit à un système d'équations différentielles ordinaires à composantes lentes et rapides on obtient une équation différentielle stochastique à composantes lentes-rapides. Dans le cas stochastique s'ajoutent de nouveaux temps caractéristiques (par exemple temps de Kramer [BG06]). On peut considérer que trois cas de figure apparaissent :

- le cas où le temps de Kramer est largement supérieur aux échelles de temps déterministes, auquel cas le système suit l'évolution déterministe sur de grands intervalles de temps avec de rares transitions entre sous-variétés d'équilibres ;
- le cas où le temps de Kramer est largement inférieur aux échelles de temps déterministes auquel cas le comportement du système est donné par sa mesure invariante ;
- le cas où le temps de Kramer est compris entre les échelles de temps déterministes lentes et rapides, auquel cas les transitions entre différents états d'équilibre de la composante lente sont fréquentes alors que la composante rapide n'est que peu affectée par les perturbations stochastiques. Dans ce cas, des phénomènes de résonance stochastique peuvent aussi apparaître.

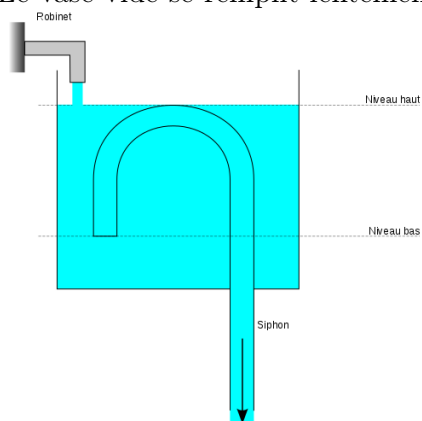
Processus stationnaire et analyse spectrale

Nous rappelons tout d'abord quelques notions sur les processus stationnaires au sens large [GS80] avant d'aborder l'analyse spectrale de cette catégorie de processus.

Processus stationnaires au sens large

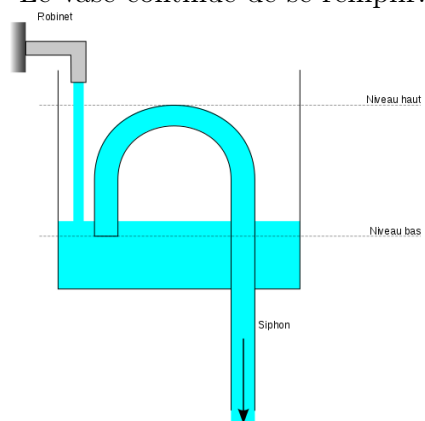


Le vase vide se remplit lentement.



Lorsque le liquide arrive au niveau haut, le siphon s'amorce et aspire le liquide du vase plus vite qu'il ne se remplit.

Le vase continue de se remplir.



Le siphon vide le vase jusqu'à ce qu'il se désamorce en atteignant le niveau bas. Le cycle recommence

FIGURE 1.9.: Vase de Tantale
Crédits et source des images et légendes : LLM - Wikipedia - CC by SA

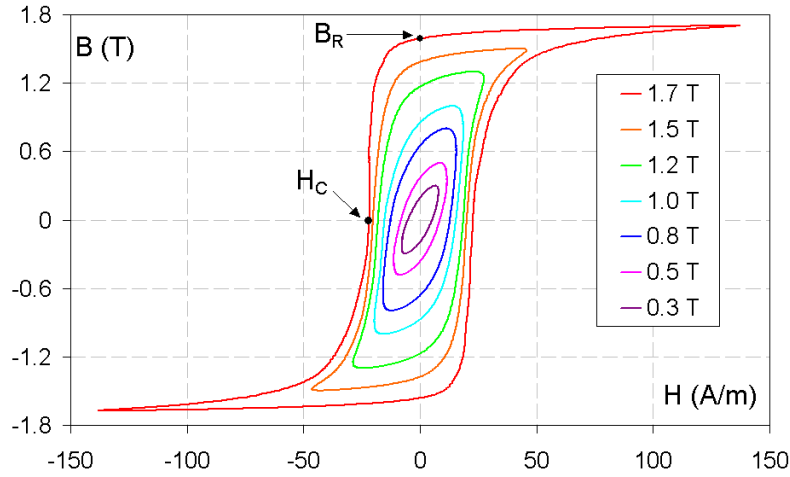


FIGURE 1.10.: Cycles d'hystérésis de l'aimantation d'un matériau ferromagnétique (acier électrique standard à grain orienté). B_R est le champ rémanent (aimantation rémanente) et H_C est le champ coercitif (le champ nécessaire pour désaimanter).

Crédits et source des image et légende : Zureks - Wikipedia - CC by SA

Définition 1.3.1. Un processus aléatoire $(\xi(t))_{t \in \mathbb{R}} = (\xi^1(t), \dots, \xi^d(t))_{t \in \mathbb{R}}$ à valeurs dans \mathbb{R}^d est dit *stationnaire au sens large* (ou *du second ordre*) si

$$\mathbb{E} [|\xi(t)|^2] < \infty, \quad t \in \mathbb{R}$$

et s'il existe une constante m et une fonction matricielle continue $R(\cdot)$ telles que

$$\begin{cases} \mathbb{E} [\xi(t)] = m, & t \in \mathbb{R} \\ \mathbb{E} [(\xi(t) - m)(\xi(s) - m)] = R(t - s), & s < t \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

La fonction R s'appelle *fonction de corrélation* du processus ξ .

Analyse spectrale de processus stationnaire au sens large Dans cette section, nous nous plaçons sous des hypothèses de stationnarité des processus. Notons que dans le cas de la dynamique moléculaire, l'irréversibilité des dynamiques (du fait de la convergence du système vers un point d'équilibre) invalide cette hypothèse. Cependant, les simulations de dynamique n'étant effectuées que sur des intervalles de temps très petits devant l'échelle de temps de la dynamique complète, l'hypothèse de stationnarité peut peut-être se justifier ; cela reste une question ouverte.

Introduisons maintenant les notions d'énergie, de puissance et de densité spectrale pour les processus stationnaires au sens large.

Définition 1.3.2. – On appelle *énergie* transférée par le processus aléatoire ξ pendant l'intervalle de temps $]t_1, t_2[$ la quantité

$$\int_{t_1}^{t_2} |\xi|^2(t) dt$$

et énergie totale transférée par le processus ξ l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2(t) dt$$

si elle existe.

– On appelle *puissance moyenne* d'un processus aléatoire ξ la limite

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T |\xi|^2(t) dt.$$

Théorème 1.3.3 (théorème de Khintchine [GS80]). *Pour qu'une fonction matricielle continue R soit fonction matricielle de corrélation d'un processus stationnaire au sens large il est nécessaire et suffisant qu'elle admette la représentation*

$$R(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iut} dF(u) \tag{1.23}$$

où F est une fonction matricielle telle que

1. quels que soient u_1 et u_2 , $u_1 < u_2$, la matrice $\Delta F(u) = F(u_2) - F(u_1)$ est définie positive ;
2. les limites $F(\infty) = \lim_{u \rightarrow \infty} F(u)$ et $F(-\infty) = \lim_{u \rightarrow -\infty} F(u)$ existent et vérifient $\text{Tr} \{F(\infty) - F(-\infty)\} < \infty$.

Remarque. Les deux hypothèses 1 et 2 garantissent que la représentation intégrale (1.23) a un sens.

Définition 1.3.4. On appelle la fonction F définie à une constante près la *fonction spectrale* du processus associé à R . Si de plus, la fonction matricielle F est absolument continue, on peut alors l'écrire sous la forme

$$F(u) = \int_{-\infty}^u f(s) ds,$$

où la fonction f est dite *densité spectrale* du processus.

Remarque. Dans ce cas là, on a la relation suivante entre covariance avec retard et densité spectrale

$$R(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iut} f(u) du,$$

c'est-à-dire que la densité spectrale du processus s'obtient par transformée de Fourier inverse de la fonction de corrélation du processus

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iut} \mathbb{E} [(\xi(t+s) - m)(\xi(s) - m)] dt.$$

La proposition de Paul Malliavin est la suivante : à partir de l'estimation du processus de covariance avec retard, il doit être possible de séparer les composantes lentes des composantes rapides en sélectionnant les composantes contribuant le plus aux mouvements de basses fréquences.

1.3.3. Présentation de la méthode

Paul Malliavin lors de communications personnelles à Denis Talay a proposé une méthode de séparation des variables lentes et rapides d'un système. Elle est basée sur des méthodes d'analyse de Fourier issue de la théorie du signal. Donnons-en brièvement le principe.

Supposons que l'on ait une trajectoire de dynamique moléculaire d'une durée petite devant l'échelle de temps de la dynamique complète. Par trajectoire de dynamique moléculaire, nous entendons l'ensemble des N trajectoires tri-dimensionnelles de chacun des atomes s constituant le système moléculaire. Après avoir recentré temporellement et spatialement les trajectoires, nous pouvons calculer les matrices de covariance avec retard de la dynamique (notée $\hat{R}_{k,l}^{i,j}$ pour les dimensions i et j de deux atomes d'indices k et l). Puis nous prenons la moyenne sur les retards avec pondération temporelle (selon un noyau V_τ privilégiant les petits retards - τ est la taille maximale des retards que nous autorisons). La matrice \hat{S}_τ obtenue est notre matrice d'estimation de Malliavin (insistons ici sur le fait qu'elle n'a aucun rapport avec les matrices de covariance apparaissant dans la théorie - bien connue des probabilistes - du calcul de Malliavin).

Paul Malliavin indique ensuite de conserver les n plus grandes valeurs propres qui doivent donc intuitivement correspondre aux mouvements lents de la molécule. Puis pour sélectionner les variables lentes ou d'intérêts, il propose de calculer le poids de chaque atome a dans chacun des vecteurs propres normalisés $(f_i)_{i=1,\dots,n}$ conservés. Chaque coordonnée f_i^a du vecteur f_i représente le poids de l'atome a dans le vecteur propre d'indice i . On définit alors la *norme lente* pour un atome a , comme

$$\|a\|^2 = \sum_{i=1}^n (f_i^a)^2.$$

Cette norme lente doit permettre de mesurer la contribution de l'atome a aux mouvements lents. Ainsi une grande norme doit correspondre à un atome participant de manière importante aux mouvements lents de la protéine. La détection des variables lentes du système moléculaire est ensuite complétée par l'élaboration d'une dynamique réduite ne faisant intervenir que les variables lentes présélectionnées. La méthode de réduction de la dynamique proposée par Paul Malliavin est celle de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73] dont nous donnons un aperçu dans l'annexe B.

1.3.4. Questions que la méthode pose

Le principe de la méthode introduit, nous allons voir tout au long de ce chapitre qu'elle pose de nombreuses questions auxquelles nous n'avons pas toujours pu répondre. Nous pouvons d'ores et déjà en énoncer quelques-unes.

La première question naturelle est la suivante : que cherchons nous à détecter ? Ce qui conduit à se poser de nombreuses questions : quelle serait la définition mathématique de ces variables lentes ou d'intérêt : est-ce des atomes, des groupes d'atomes ou des centres de masse d'atomes ? Et en quels sens sont-ils lents : est-ce au sens usuel des systèmes dynamiques à plusieurs échelles ou dans un autre sens à déterminer ?

D'autres questions sont plus techniques et ont trait aux hypothèses mathématiques qu'il nous est nécessaire d'énoncer : peut-on et doit-on supposer la stationnarité des processus impliqués ? Quelle est l'échelle de temps des variables que nous détectons, sont-elles petites devant la taille de la trajectoire ou de l'ordre de la trajectoire utilisée ?

1.3.5. Tentatives de réponses

Nous présentons dans ce chapitre quelques raisonnements dont le but est de préciser ces questions et les hypothèses sous lesquelles il sera nécessaire de travailler.

Étude du cas linéaire

Nous avons dans un premier temps étudié un modèle se présentant sous la forme d'un processus d'Ornstein-Uhlenbeck multi-dimensionnel. Après avoir mené les calculs le plus loin possible dans le cas général, nous tirons parti de l'existence d'une formule explicite de l'exponentielle de matrice carrée de taille deux pour aller plus loin dans les calculs. Nous montrons ainsi que la méthode permet effectivement de séparer deux valeurs propres d'ordre différent. À partir du cas linéaire, nous proposons une première tentative de généralisation au cas non-linéaire. Cette généralisation s'effectuerait à l'aide d'une semi-homogénéisation du système, au sens où nous approchons le système initial par un système constitué de la version homogénéisée et donc autonome des variables lentes et des équations rapides dépendante du paramètre ϵ de séparation d'échelle.

Perspectives

Modèles étudiés Afin de tenter de généraliser au cas non-linéaire nous avons étudié formellement deux catégories de modèle stochastique à deux échelles de temps. Les deux modèles diffèrent par la dépendance en ϵ le paramètre de séparation d'échelle. Le système considéré est le suivant

$$\begin{cases} dX_t^\epsilon = F(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon, t)dt + \Sigma(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon)dB_t^X, \\ dY_t^\epsilon = \frac{1}{\epsilon}f(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon, t)dt + \frac{\beta(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon}}\sigma(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon)dB_t^Y, \end{cases} \quad (1.24)$$

où X et Y sont à valeurs vectorielles respectivement dans \mathbb{R}^d et \mathbb{R}^k . Le premier modèle est décrit dans [KP03] et suppose que $\beta(\epsilon) = o(\epsilon)$. Le second modèle consiste à supposer que $\beta(\epsilon) = O(1)$ et on peut en trouver une description dans [BG06].

Étude formelle du premier modèle L'étude formelle du premier modèle semble indiquer qu'il est nécessaire d'avoir une relation linéaire entre les variables lentes et rapides à l'équilibre. Insistons sur le fait que cela n'impose pas une hypothèse de linéarité du système, mais seulement que le point de départ de la dynamique est dans un bassin d'attraction de la position d'équilibre donnée par une fonction φ linéaire vérifiant $f(x, \varphi(x)) = 0$.

Soulignons aussi que ce raisonnement s'applique à la matrice de covariance sans retard, et que nous n'utilisons absolument pas les informations données par les matrices de covariance avec retard.

Étude formelle du second modèle L'étude formelle du second modèle semble quant à elle indiquer qu'il est nécessaire d'ajouter une hypothèse de réversibilité en temps des processus, au moins pour les composantes rapides à composante lente fixée. De plus cette perspective nécessite des propriétés de mélange et utilise les matrices de covariance avec retard.

Première partie .
Équations de type
Poisson-Boltzmann

Chapitre 2.

Préliminaires

Dans cette partie, nous nous plaçons dans le cadre moléculaire suivant : étant donnée une molécule plongée dans un solvant, nous cherchons à donner une interprétation probabiliste du potentiel électrostatique auquel est soumis cette molécule. Ce potentiel est solution de l'équation de Poisson-Boltzmann [BBC06]. L'interprétation probabiliste de cette équation, c'est-à-dire la modélisation équivalente par des processus de diffusion doit permettre d'utiliser l'efficacité numérique des méthodes stochastiques (méthode de type Monte-Carlo [MU49] par exemple) pour la simulation des équations de Poisson-Boltzmann.

La molécule plongée dans un solvant peut être modélisée par une forme géométrique Ω_{int} connexe et compact dans un espace de dimension trois Ω_{ext} représentant le solvant. Nous commençons par introduire ce cadre géométrique dans lequel nous nous plaçons dans la suite et les notations associées. Nous décrivons les hypothèses géométriques permettant d'interpréter en terme de processus de diffusion la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann.

Ensuite nous présentons les équations de Poisson-Boltzmann en dynamique moléculaire [BBC06]. Ces équations permettent de modéliser le potentiel électrostatique d'un système moléculaire composé d'une molécule plongé dans un solvant. Nous détaillons le raisonnement biologique permettant d'aboutir aux équations de Poisson-Boltzmann. Ces équations faisant intervenir des opérateurs sous forme divergence, nous donnons ensuite leur interprétation probabiliste initialement introduite dans [BCMT10].

Nous concluons enfin ce chapitre en présentant la théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades [PP92, Par99, BDH⁺03] et le lien qu'ont ces équations avec les équations aux dérivées partielles semi-linéaires.

2.1. Notations et géométrie sous-jacente aux équations de Poisson-Boltzmann

Définitions et notations

Soit un entier d supérieur ou égal à un représentant la dimension de l'espace. Considérons un domaine Ω_{int} borné, simplement connexe, de frontière $\Gamma := \partial\Omega_{\text{int}}$. On suppose notamment que Γ est une sous-variété compacte de classe \mathcal{C}^∞ (hypothèse éventuellement affaiblie dans certaines sections), vérifiant une condition de sphère intérieure et

extérieure. Définissons Ω_{ext} comme le complémentaire de $\Omega_{\text{int}} \cup \Gamma$ dans \mathbb{R}^d . Soient D un domaine ouvert borné de \mathbb{R}^d contenant strictement $\Omega_{\text{int}} \cup \Gamma$ et dont le bord est supposé régulier (vérifiant une condition de sphère extérieure).

La régularité du bord Γ permet de construire sur un voisinage \mathcal{N} de Γ une projection $\pi : \mathcal{N} \rightarrow \Gamma$ de classe \mathcal{C}_b^2 telle que,

$$|x - \pi(x)| = d(x, \Gamma), \quad x \in \mathcal{N} \quad (2.1)$$

avec $d(\cdot, \Gamma)$ la distance au bord Γ . Pour x sur Γ , notons $\vec{n}(x)$ le vecteur unité normal à la surface Γ au point x et pointant vers l'extérieur.

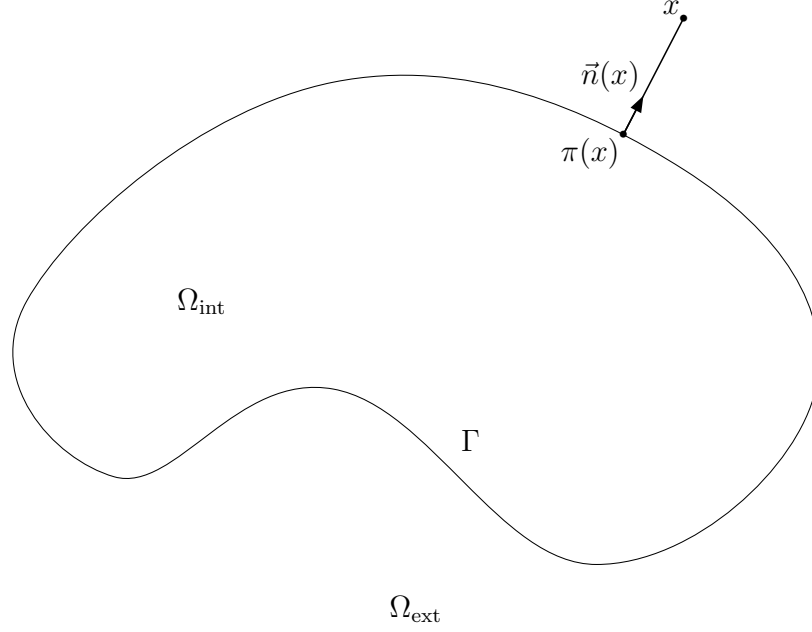


FIGURE 2.1.: Décomposition de \mathbb{R}^d en deux sous-domaines Ω_{int} et Ω_{ext} .

Définissons maintenant ρ une extension de classe $\mathcal{C}_b^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{R})$ de la distance signée à Γ définie sur \mathcal{N} par

$$\rho(x) := (x - \pi(x)) \cdot \vec{n}(\pi(x)), \quad x \in \mathcal{N}. \quad (2.2)$$

Le gradient de ρ est donné par

$$\nabla \rho(x) = \vec{n}(\pi(x)), \quad x \in \mathcal{N} \quad (2.3)$$

et l'on définit ∇^{int} et ∇^{ext} , pour une application u définie sur \mathbb{R}^d , respectivement par

$$\nabla^{\text{int}} u(y) := \begin{cases} \lim_{\substack{x \in \Omega_{\text{int}} \\ x \rightarrow y}} \nabla u(x), & y \in \Gamma, \\ \nabla u(y), & y \notin \Gamma, \end{cases} \quad (2.4)$$

et

$$\nabla^{\text{ext}} u(y) := \begin{cases} \lim_{\substack{x \in \Omega_{\text{ext}} \\ x \rightarrow y}} \nabla u(x), & y \in \Gamma, \\ \nabla u(y), & y \notin \Gamma. \end{cases} \quad (2.5)$$

Lemmes techniques

Énonçons enfin un lemme classique dont la démonstration est donnée par exemple dans [BCMT10] (Proposition 2.1) qui nous est utile dans la suite de cette thèse car il nous permet de localiser certaines démonstrations au voisinage de Γ (cf. démonstrations du lemme 3.1.2 et du théorème 4.3.2).

Lemme 2.1.1. *Il existe un recouvrement de Γ par une famille d'ouverts bornés $\mathcal{U}_1, \dots, \mathcal{U}_M$ et une famille ψ_1, \dots, ψ_M de redressements locaux \mathcal{C}^∞ de Γ , telles que pour tout indice i dans $\{1, \dots, M\}$, la fonction ψ_i soit un \mathcal{C}_b^2 difféomorphisme de \mathcal{U}_i dans $\psi_i(\mathcal{U}_i)$ admettant un prolongement de classe \mathcal{C}_b^2 sur $\bar{\mathcal{U}}_i$ et satisfaisant pour tout x dans $\bar{\mathcal{U}}_i$*

$$\begin{aligned} \psi_i^1(x) &= \rho(x), \\ \nabla \psi_i^k(x) \cdot \vec{n}(\pi(x)) &= 0, \quad \forall k \in \{2, \dots, d\}, \\ \frac{\partial \psi_i^{-1}}{\partial x_1}(\psi_i(x)) &= \vec{n}(\pi(x)). \end{aligned}$$

Supposons fixé un indice i de $\{1, \dots, M\}$, et notons $\psi = \psi_i$, $\mathcal{U} = \mathcal{U}_i$ et $\mathcal{V} = \psi(\mathcal{U})$. Posons pour tout y dans \mathcal{V} , $\tilde{v}(y) = v(\psi^{-1}(y))$, $\tilde{\epsilon}(y) = \epsilon(\psi^{-1}(y))$, $\tilde{g}(y) = g(\psi^{-1}(y))$, $\tilde{\kappa}(y) = \kappa(\psi^{-1}(y))$ et $M(y) = J\psi(\psi^{-1}(y))$. Nous avons le lemme suivant dont la démonstration peut-être trouvée dans [BCMT10].

Lemme 2.1.2 (Lemme A.1 de [BCMT10]). *Pour tout indice i de $\{1, \dots, d\}$, nous avons la relation suivante sur le voisinage \mathcal{V} ,*

$$\sum_{k=1}^d \partial_k (M_{ik} \det J\psi^{-1}) = 0.$$

2.2. Équations de Poisson-Boltzmann

2.2.1. Introduction à l'équation de Poisson-Boltzmann en dynamique moléculaire

Le potentiel électrostatique d'un système moléculaire de permittivité ϵ et de distribution de charge ρ_c est donné, pour x dans \mathbb{R}^3 , par l'équation de Poisson

$$-\nabla \cdot (\epsilon(x) \nabla u(x)) = 4\pi \rho_c(x).$$

Considérons le cas d'une molécule plongée dans un solvant aqueux. La distribution de charge ρ_c peut être décomposée comme la somme de la contribution ρ_m de la molécule et de ρ_s du solvant.

La molécule est modélisée sous la forme d'un système fini de charges centrées en la position des N atomes de la molécule, et sa distribution de charge ρ_m est donnée par

$$\rho_m(x) = \sum_{i=1}^N q_i \delta_{x_i}(x), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad (2.6)$$

où q_i dans \mathbb{R} et x_i dans \mathbb{R}^3 sont les charge et position de l'atome i et où δ_x est la mesure de Dirac au point x dans \mathbb{R}^3 . La contribution ρ_s du solvant est modélisée par le champ de distribution des m différents types d'ions du solvant :

$$\rho_s(x) = e_c \sum_{j=1}^m \bar{n}_j z_j \exp \{ -e_c z_j u(x)/kT - V_j(x)/kT \}, \quad x \in \mathbb{R}^3,$$

où \bar{n}_j est le nombre d'ions du type j , z_j est la valence des ions de type j , e_c est la charge élémentaire, V_j modélise l'effet stérique entre les ions de type j et la molécule.

Dans le cas d'un électrolyte tel que NaCl où $q_1 = 1$ et $q_2 = -1$, l'équation de Poisson se simplifie et s'écrit, pour x dans \mathbb{R}^3 ,

$$-\nabla \cdot (\epsilon(x) \nabla u(x)) + 8\pi e_c \bar{n} e^{-V(x)/kT} \sinh \{ e_c u(x)/kT \} = 4\pi \sum_{i=1}^N q_i \delta_{x_i}(x).$$

Considérons le domaine Ω_{int} , de frontière $\Gamma := \partial\Omega_{\text{int}}$ régulière et définissons Ω_{ext} comme le complémentaire de $\Omega_{\text{int}} \cup \Gamma$ dans \mathbb{R}^d présentées dans la section 2.1. Les ouverts Ω_{int} et Ω_{ext} modélisent respectivement l'intérieur de la molécule et le solvant (*cf.* figure 2.2).

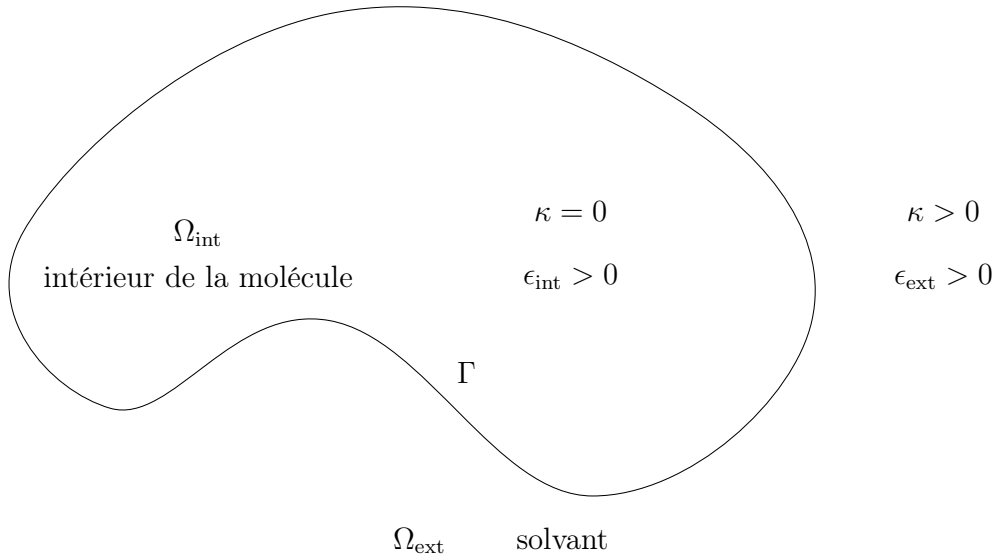


FIGURE 2.2.: Modélisation géométrique de la molécule

La permittivité diélectrique ϵ est représentée par une fonction discontinue prenant deux valeurs selon que l'on se place à l'intérieur de la molécule Ω_{int} (permittivité du vide) ou à l'extérieur Ω_{ext} (permittivité du solvant) :

$$\epsilon(x) = \begin{cases} \epsilon_{\text{int}} > 0, & x \in \Omega_{\text{int}}, \\ \epsilon_{\text{ext}} > 0, & x \in \Omega_{\text{ext}}. \end{cases} \quad (2.7)$$

Dans la suite, on étudiera l'équation de Poisson-Boltzmann non linéaire

$$-\nabla \cdot (\epsilon(x)\nabla u(x)) + \kappa^2(x) \sinh \{u(x)\} = g(x), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad (2.8)$$

où l'on a approché la fonction $e^{-V(\cdot)/kT} \frac{8\pi e_c^2 I}{kT}$ avec $I = \frac{1}{2} \sum_s \bar{n}_s z_s^2$ par la fonction modifiée de Debye-Hückel

$$\kappa(x) = \begin{cases} 0, & x \in \Omega_{\text{int}} \\ \bar{\kappa} > 0, & x \in \Omega_{\text{ext}}. \end{cases} \quad (2.9)$$

Cette interprétation probabiliste nécessite le traitement des trois difficultés suivantes :

1. discontinuité dans le coefficient de l'opérateur sous forme divergence (section 2.3) ;
2. terme source singulier (section 4.1) ;
3. non linéarité de l'équation (chapitre 4).

Remarque. Notons qu'en supposant le terme $e_c u(\cdot)$ petit devant kT et en approchant \sinh par le premier terme de son développement de Taylor, il est possible d'obtenir, pour x dans \mathbb{R}^3 , une version linéaire de l'équation de Poisson-Boltzmann

$$-\nabla \cdot (\epsilon(x)\nabla u(x)) + \kappa^2(x)u(x) = g(x), \quad (2.10)$$

dont l'interprétation probabiliste est traitée dans [BCMT10] est en partie présentée dans la sous-section 2.3.

2.2.2. Équations parabolique et elliptique de type Poisson-Boltzmann

Problèmes paraboliques et elliptiques

Nous appelons, dans la suite de ce manuscrit, équation de Poisson-Boltzmann toute équation parabolique ou elliptique engendré par le générateur \mathcal{L} défini par

$$\mathcal{L} = \nabla \cdot (\epsilon \nabla), \quad (2.11)$$

où ϵ est la fonction définie en (2.7) constante par morceaux de \mathbb{R}^d dans $]0, \infty[$ dont la surface de discontinuité est la surface Γ . Nous traitons plus particulièrement des deux problèmes suivants :

Problème parabolique linéaire Dans le chapitre 3 , nous considérons le problème parabolique homogène en temps suivant :

$$\begin{cases} \partial_t u(t, x) - \mathcal{L} u(t, x) + k(x)u(t, x) = g(x) & \text{sur }]0, T[\times D, \\ u(0, x) = h(x) & \text{sur } D, \\ u(t, x) = 0 & \text{sur } [0, T] \times \partial D, \end{cases} \quad (2.12)$$

pour trois fonctions k , g et h . Puis nous considérons le cas particulier où $k = \kappa^2$ (définie en (2.9)), $g = \rho_m$ (définie en (2.6)).

Problème elliptique non-linéaire Dans le chapitre 4 , nous étudions le problème elliptique non-linéaire :

$$-\mathcal{L}u(x) + \kappa^2(x) \sinh u(x) = g(x), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad (2.13)$$

pour le terme source $g = \rho_m$ (défini en (2.6)).

2.3. Interprétation probabiliste d'une classe d'opérateurs sous forme divergence

2.3.1. Notion de solution faible

Pour traiter le cas des équations différentielles stochastiques sous des conditions affaiblies ne permettant pas de montrer l'existence d'une solution forte, il est usuel d'introduire la notion de solution faible. La solution n'est alors plus construite dans un espace de probabilité donné, mais la construction de la solution faible comprend la construction d'un espace de probabilité et d'un mouvement brownien. L'unicité n'est alors plus trajectorielle mais en loi.

Définition 2.3.1. Pour une condition initiale x dans \mathbb{R}^d , on appelle solution faible d'une équation différentielle stochastique un sextuplet

$$(\Omega, \mathcal{F}^x, (\mathcal{F}_t^x)_{t \geq 0}, \mathbb{P}_x, (B_t)_{t \geq 0}, (X_t)_{t \geq 0})$$

où $(\Omega, \mathcal{F}^x, (\mathcal{F}_t^x)_{t \geq 0}, \mathbb{P}_x)$ est un espace de probabilité, B est un mouvement brownien standard de dimension d par rapport à la filtration $(\mathcal{F}_t^x)_{t \geq 0}$, et X est une solution de l'équation différentielle stochastique adaptée par rapport à la filtration $(\mathcal{F}_t^x)_{t \geq 0}$ et vérifiant $\mathbb{P}_x \{X_0 = x\} = 1$.

Stroock et Varadhan [SV69] interprètent la notion de solution faible à l'aide d'un problème de martingale (où la référence à un mouvement brownien a en particulier disparu).

2.3.2. Problème de martingale associé à l'opérateur sous forme divergence

Une interprétation probabiliste des opérateurs sous forme divergence \mathcal{L} défini en (2.11) est donnée dans [BCMT10]. Citons aussi les travaux de [MT06], [LM06] en dimension un, [LM10] en dimension supérieure à 1 ou encore de [FOT11] au sujet des processus Markov associés à une forme de Dirichlet. Cette interprétation permet d'interpréter des équations aux dérivées partielles de type elliptique ou parabolique engendré par \mathcal{L} . Elle est liée au problème de martingale suivant :

Définition 2.3.2. 1. Soit $(\mathcal{C}, \mathcal{B})$ l'ensemble $\mathcal{C}^0([0, \infty), \mathbb{R}^d)$ des fonctions continues w de $[0, \infty)$ dans \mathbb{R}^d muni de la tribu borélienne \mathcal{B} et de la filtration canonique $(\mathcal{B}_t)_{t \geq 0}$.

2.3. Interprétation probabiliste d'une classe d'opérateurs sous forme divergence

Une famille de mesures de probabilité \mathbb{P}_x sur $(\mathcal{C}, \mathcal{B})$ est solution du *problème de martingale pour l'opérateur \mathcal{L}* si, pour tout x dans \mathbb{R}^d , on a

$$\mathbb{P}_x \{w \in \mathcal{C} | w(0) = x\} = 1,$$

et, pour tout ϕ vérifiant

$$\begin{aligned} \phi &\in \mathcal{C}_b^0(\mathbb{R}^d) \cap \mathcal{C}_b^2(\mathbb{R}^d \setminus \Gamma), \\ \epsilon \nabla \phi \cdot \vec{n}(\pi) &\in \mathcal{C}_b^0(\mathcal{N}), \end{aligned}$$

où \mathcal{N} est le voisinage de Γ défini en (2.1), le processus

$$M_t^\phi(w) := \phi(w(t)) - \phi(w(0)) - \int_0^t \mathcal{L} \phi(w(s)) ds$$

est une martingale par rapport à $(\mathcal{B}_t)_{t \geq 0}$ sous la loi \mathbb{P}_x .

2. Le problème de martingale est *bien posé* si il existe une unique famille de probabilité $(\mathbb{P}_x)_{x \in \mathbb{R}^d}$ solution du problème de martingale pour l'opérateur \mathcal{L} .

Il est démontré dans [BCMT10] que l'unique solution de ce problème de martingale est la loi \mathbb{P}_x de toute solution faible

$$(\Omega, \mathcal{F}^x, (\mathcal{F}_t^x)_{t \geq 0}, \mathbb{P}_x, (B_t)_{t \geq 0}, (X_t)_{t \geq 0})$$

de l'équation différentielle stochastique

$$\begin{cases} X_t &= x + \int_0^t \sqrt{2\epsilon(X_s)} dB_s + \frac{\epsilon_{\text{ext}} - \epsilon_{\text{int}}}{2\epsilon_{\text{ext}}} \int_0^t \vec{n}(X_s) dL_s^0(D), \\ D_t &= \rho(X_t), \end{cases} \quad (2.14)$$

où B est un mouvement brownien standard de dimension d par rapport à la filtration $(\mathcal{F}_t^x)_{t \geq 0}$, $(L_t^0(D))_{t \geq 0}$ est le processus de temps local en zéro [RY99] de la semimartingale continue D et ρ est l'extension de la distance au bord définie en (2.2). Le temps local d'un processus réel Y en un point y peut être vu comme la limite normalisée du temps de séjour du processus autour du point y :

$$L_t^y(Y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_0^t (\mathbf{1}_{\{y < Y_{s+\epsilon}\}} - \mathbf{1}_{\{y < Y_s\}}) (Y_{s+\epsilon} - Y_s) ds.$$

Résumons les théorèmes 2.4, 2.10 et 2.14 de [BCMT10] donnant l'existence et l'unicité de la solution faible à l'équation (2.14).

Théorème 2.3.3 (Théorèmes 2.4, 2.10 et 2.14 de [BCMT10]). *Il existe une unique solution faible à l'équation (2.14) au sens des lois de probabilités. Pour tout x dans \mathbb{R}^d , la loi \mathbb{P}_x du processus X associé à la solution faible de l'équation (2.14) partant du point x est solution du problème de martingale énoncé dans la définition 1.*

Cette unique solution faible est utilisée dans la nouvelle interprétation probabiliste que nous proposons dans le chapitre 4.

2.3.3. Interprétation probabiliste de solutions régulières aux équations de Poisson-Boltzmann : formule de Feynman-Kac

Formule d'Itô généralisée

Commençons par donner une généralisation aux fonctions dépendantes du temps du théorème 2.8 de [BCMT10].

Théorème 2.3.4. *Supposons que Γ soit une sous-variété compacte de \mathbb{R}^d . Soit u une fonction de \mathbb{R}^d telle qu'il existe une fonction r dans l'intersection de $L^2(0, T; W_{\text{loc}}^{2,\infty}(\mathbb{R}^d))$ et de $\mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d \setminus \Gamma)$ vérifiant que la fonction*

$$\hat{u}(t, x) := u(t, x) - r(t, x)[\rho(x)]_+$$

soit elle aussi dans $L^2(0, T; W_{\text{loc}}^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d \setminus \Gamma)$.

Alors pour toute solution faible X de l'équation (2.14), on a presque sûrement que pour tout t vérifiant $0 \leq t \leq T$,

$$\begin{aligned} u(t, X_t) &= u(0, X_0) + \int_0^t \sqrt{2\epsilon(X_s)} \nabla^{\text{int}} u(s, X_s) dB_s \\ &+ \int_0^t (\partial_t u(s, X_s) + \mathcal{L} u(s, X_s)) \mathbf{1}_{\{X_s \notin \Gamma\}} ds \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^t \left(r(s, X_s) + \frac{\epsilon_{\text{ext}} - \epsilon_{\text{int}}}{\epsilon_{\text{ext}}} \nabla^{\text{int}} u(s, X_s) \cdot \vec{n}(X_s) \right) dL_s^0(D) \end{aligned}$$

où $D_t := \rho(X_t)$.

Formule de Feynman-Kac

Sous l'hypothèse que les coefficients de l'équation (2.12) permettent d'obtenir l'existence d'une solution u vérifiant les hypothèses du lemme d'Itô généralisé (théorème 2.3.4), nous avons l'interprétation probabiliste suivante du problème parabolique (3.1) (et généralisation du théorème 2.18 de [BCMT10] au cas parabolique) :

Théorème 2.3.5. *Pour tout x dans \mathbb{R}^d , soit \mathbb{P}_x la loi de la solution faible X avec condition initiale $X_0 = x$ de l'équation (2.14). Alors, pour tout t dans le segment $[0, T]$,*

$$u(t, x) = \mathbb{E}_x \left[\int_0^t e^{-\int_0^r \kappa^2(X_s) ds} g(X_r) dr + e^{-\int_0^t \kappa^2(X_s) ds} h(X_t) \right].$$

Démonstration. Application de la formule d'Itô généralisée (théorème 2.3.4). □

2.4. Théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades

Une des méthodes probabilistes pour traiter des équations aux dérivées partielles semi-linéaires est l'utilisation d'équations différentielles stochastiques rétrogrades [PP92, Par99, BDH⁺03].

Les équations différentielles stochastiques rétrogrades furent initialement introduites dans [Bis73] sous des hypothèses de linéarité. C'est dans [PP92] que furent donnés les premiers résultats d'existence et d'unicité pour le cas d'équations non-linéaires. Ces résultats furent notamment généralisés par la suite dans [EPQ97, Par99, BDH⁺03, BPS05]. Parmi les principaux champs d'application hors équations aux dérivées partielles semi-linéaires, citons la finance [EKPQ97] ou le contrôle stochastique [Pen93].

Il existe de nombreuses méthodes de simulation des solutions basées par exemple sur les méthodes de Monte-Carlo et le calcul de Malliavin [BT04, BET09], de quantification [BP03, BPP05, DM06] ou plus récemment une méthode basée sur l'utilisation de chaos de Wiener [BL12]

Nous donnons dans cette section des rappels de la théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades et renvoyons aux articles cités précédemment pour les démonstrations. Dans un premier temps, nous donnons des résultats portant sur les équations différentielles stochastiques rétrogrades à horizon fini et aléatoire. Puis nous détaillons les liens entre ces équations et les équations aux dérivées partielles semi-linéaires.

2.4.1. Introduction

Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace de probabilité complet, et B un mouvement brownien de dimension d sur cet espace engendrant la filtration complétée $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$. Soit un réel strictement positif T et ξ une variable aléatoire mesurable par rapport à \mathcal{F}_T à valeurs dans \mathbb{R}^k . Le réel T et la variable aléatoire ξ sont respectivement l'*horizon* et la *condition terminale* de notre problème.

Posons-nous la question suivante : étant donnée une variable aléatoire ξ mesurable par rapport à \mathcal{F}_T , est-il possible de trouver un processus Y adapté à la filtration $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ tel que $Y_T = \xi$ et vérifiant une équation différentielle du type

$$-\frac{dY_t}{dt} = f(Y_t), \quad t \in [0, T] ?$$

Prenons l'exemple de la fonction f identiquement nulle car il permet de comprendre le point essentiel qui soutient la résolution des ÉDSR : le théorème de représentation des martingales browniennes [KS91]. L'hypothèse que le processus Y soit adapté à la filtration $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ implique que le processus constant $Y_t = \xi$ pour tout t dans le segment $[0, T]$ n'est pas solution. La meilleure approximation adaptée à la filtration $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ est la martingale $Y_t = \mathbb{E}[\xi | \mathcal{F}_t]$. Dans le cas où la filtration $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ est celle d'un mouvement brownien B le théorème de représentation des martingales browniennes [KS91] donne

l'existence d'un processus Z de carré intégrable et adapté à la filtration $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ vérifiant :

$$Y_t = \mathbb{E} [\xi | \mathcal{F}_t] = \mathbb{E} [\xi] + \int_0^t Z_s dB_s,$$

ce qui peut se réécrire sous la forme intégrale suivante

$$Y_t = \xi - \int_t^T Z_s dB_s,$$

ou en forme différentielle

$$\begin{cases} dY_t = -Z_t dB_t, & t \in [0, T], \\ Y_T = \xi. \end{cases}$$

Intégrons cette nouvelle variable Z dans l'équation de départ pour obtenir une équation générale de la forme

$$\begin{cases} dY_t = -f(t, Y_t, Z_t)dt + Z_t dB_t, & t \in [0, T], \\ Y_T = \xi. \end{cases}$$

Le processus Z a pour rôle principal de rendre le processus Y adapté à la filtration $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$. Nous détaillons dans la suite de cette section les principaux résultats d'existence et d'unicité des solutions de ces équations, ainsi qu'un résultat liant équations différentielles stochastiques rétrogrades et équations aux dérivées partielles semi-linéaires et elliptiques.

2.4.2. ÉDSR à horizon fini

Soit f une application aléatoire de $[0, T] \times \Omega \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{k \times d}$ à valeurs dans \mathbb{R}^k . Supposons de plus que le processus $(f(t, y, z))_{0 \leq t \leq T}$ est progressivement mesurable pour tout y et tout z dans \mathbb{R}^k et $\mathbb{R}^{k \times d}$ respectivement. La fonction f est appelée le *générateur* de l'équation. Par commodité, nous n'écrivons pas la dépendance en ω de la fonction f .

Considérons dans cette sous-section, l'équation différentielle stochastique rétrograde de générateur f et de condition terminale ξ , définie pour tout réel t vérifiant $0 \leq t \leq T$:

$$Y_t = \xi + \int_t^T f(r, Y_r, Z_r)dr - \int_t^T Z_r dB_r. \quad (2.15)$$

Définition 2.4.1. Une solution de l'équation (2.15) est un couple de processus (Y, Z) vérifiant les trois propriétés

1. les processus Y et Z sont progressivement mesurables à valeurs respectivement dans \mathbb{R}^k et $\mathbb{R}^{k \times d}$,
2. la quantité $\int_0^T (|f(r, Y_r, Z_r)| + \|Z_r\|^2) dr$ est presque sûrement finie,
3. l'équation (2.15) est vérifiée presque sûrement.

2.4. Théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades

On a un résultat d'existence et d'unicité (théorème 4.2 de [BDH⁺03]) sous les hypothèses suivantes :

(H1) le générateur f vérifie les hypothèses suivantes

- a) **continuité** : pour tout (t, z) dans $[0, T] \times \mathbb{R}^{k \times d}$, la fonction $y \rightarrow f(t, y, z)$ est continue presque sûrement,
- b) **lipschitzianité** : $|f(t, y, z) - f(t, y, z')| \leq K \|z - z'\|$ presque sûrement pour tout (t, y, y') dans $[0, T] \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^k$, avec K constante positive,
- c) **monotonie** : pour tout (t, y, y', z) dans $[0, T] \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{k \times d}$ on a presque sûrement,

$$\langle y - y', f(t, y, z) - f(t, y', z) \rangle \leq \mu |y - y'|^2$$

avec μ constante réelle, et

d) **intégrabilité** :

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_0^T |f(t, 0, 0)| dt \right)^2 \right] < \infty$$

e) pour tout réel $r > 0$,

$$\sup_{|y| \leq r} |f(t, y, 0) - f(t, 0, 0)| \in L^1([0, T] \times \Omega, dt \otimes \mathbb{P}),$$

(H2) la condition finale ξ est une variable aléatoire mesurable par rapport à \mathcal{F}_T vérifiant

$$\mathbb{E} [|\xi|^2] < \infty.$$

Théorème 2.4.2 (Théorème 4.2 de [BDH⁺03]). *Sous les hypothèses (H1) et (H2), l'équation différentielle stochastique rétrograde (2.15) a une unique solution vérifiant*

$$\mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t \leq T} |Y_t|^2 + \int_0^T \|Z_s\|^2 dt \right] < \infty.$$

Éléments de démonstration. On montre le théorème en ajoutant une hypothèse de Lipschitz uniformément en y du générateur f . Pour cela, on considère l'application qui à un couple de processus (U, V) associe le couple (Y, Z) où le processus Y est défini comme l'espérance conditionnelle

$$Y_t = \mathbb{E} \left[\xi + \int_t^T f(s, U_s, V_s) ds \middle| \mathcal{F}_t \right], \quad 0 \leq t \leq T,$$

et le processus Z est donné par le théorème de représentation des martingales browniennes [KS91] appliqué à la variable aléatoire

$$\xi + \int_0^T f(s, U_s, V_s) ds.$$

En appliquant une méthode de point fixe à cette application, on obtient une unique solution à l'équation (2.15) sous des hypothèses de lipchitzianité en y du générateur.

Ensuite, on construit une suite de générateurs bornés et Lipschitz uniformément en y et de conditions terminales bornées approchant respectivement le générateur et la condition terminale. Pour chacune des équations différentielles stochastiques rétrogrades associée, on construit une solution vérifiant certaines inégalités à l'aide de l'étape précédente .

On montre enfin que la suite ainsi construite est de Cauchy et que la limite est la solution de l'équation (2.15). \square

2.4.3. ÉDSR à horizon aléatoire

Supposons maintenant que l'horizon du problème est donné par un temps d'arrêt τ (éventuellement infini) pour la filtration $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$. Les équations différentielles stochastiques rétrogrades à horizon aléatoire ont comme application principale l'interprétation probabiliste de problème elliptique semi-linéaire sur un domaine D (horizon aléatoire donné par le temps d'atteinte du bord ∂D par un processus) ou sur \mathbb{R}^d tout entier (horizon infini).

Définition 2.4.3. Un couple (Y, Z) de processus progressivement mesurables dans $\mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{k \times d}$ est solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde de paramètres (ξ, f) à horizon aléatoire τ si sur l'ensemble $\{t \geq \tau\}$, $Y_t = \xi$ et $Z_t = 0$ presque sûrement, et si

1. la quantité $\int_0^\infty (|f(r, Y_r, Z_r)| \mathbf{1}_{\{t \leq \tau\}} + \|Z_r\|^2) dr$ est presque sûrement finie,
2. et pour tous réels t, T tels que $0 \leq t \leq T$, presque sûrement,

$$Y_{t \wedge \tau} = Y_{T \wedge \tau} + \int_{t \wedge \tau}^{T \wedge \tau} f(r, Y_r, Z_r) dr - \int_{t \wedge \tau}^{T \wedge \tau} Z_r dB_r. \quad (2.16)$$

Il existe pour l'équation (2.16) une unique solution sous des hypothèses légèrement différentes (théorème 5.2 de [BDH⁺03]) :

(h1) le générateur f vérifie

- a) l'hypothèse de **continuité** (H1) - a),
- b) l'hypothèse de **lipschitzianité** (H1) - b),
- c) l'hypothèse de **monotonie** (H1) - c),
- d) une hypothèse d'**intégrabilité** : il existe un réel λ vérifiant $\lambda > \nu := 2\mu + K^2$ et tel que

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_0^\tau e^{\lambda t} |f(t, 0, 0)|^2 dt \right)^2 \right] < \infty,$$

- e) pour tout réel $r > 0$ et tout entier n

$$\sup_{|y| \leq r} |f(t, y, 0) - f(t, 0, 0)| \in L^1([0, n] \times \Omega, dt \otimes \mathbb{P}),$$

(h2) la condition finale ξ est une variable aléatoire \mathcal{F}_τ -mesurable vérifiant

$$\mathbb{E} [e^{\lambda\tau} |\xi|^2] < \infty.$$

et

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\tau e^{\lambda t} |f(t, e^{-1/2\nu t} \bar{\xi}_t, e^{-1/2\nu t} \bar{\eta}_t)|^2 dt \right] < \infty, \quad (2.17)$$

où $\bar{\xi} = e^{\nu\tau} \xi$, $\bar{\xi}_t = \mathbb{E} [\bar{\xi} | \mathcal{F}_t]$ et $\bar{\eta}$ processus prévisible vérifiant

$$\begin{aligned} \bar{\xi} &= \mathbb{E} [\bar{\xi}] + \int_0^\infty \bar{\eta}_t dB_t, \\ \mathbb{E} \left[\int_0^\infty |\bar{\eta}_t|^2 dt \right] &< \infty. \end{aligned}$$

Théorème 2.4.4 (Théorème 5.2 de [BDH⁺03]). *Sous les hypothèses (h1) et (h2), l'équation différentielle stochastique rétrograde (2.16) a une unique solution vérifiant*

$$\mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t \leq \tau} e^{\lambda t} |Y_t|^2 + \int_0^\tau e^{\lambda t} (|Y_t|^2 + \|Z_r\|^2) dt \right] \leq C \mathbb{E} \left[e^{\lambda\tau} |\xi|^2 + \int_0^\tau e^{\lambda t} |f(t, 0, 0)|^2 dt \right]$$

avec une constante C dépendant de K et μ .

Éléments de démonstration. On construit une suite de solutions en se ramenant à un problème à horizon borné pour lequel on peut appliquer le théorème 2.4.2. On conclut en montrant que cette suite est une suite de Cauchy dont la limite est solution de l'équation (2.16). \square

Remarque. La condition d'intégrabilité (h1)-d) impose en pratique un choix de λ strictement négatif c'est-à-dire des conditions de stricte monotonie (choix de μ strictement négatif). Nous donnons dans la section 4.2.1 une généralisation de ce théorème où l'on autorise les constantes μ , K et λ à dépendre du temps et des aléas. Cette généralisation nous permet d'assouplir l'hypothèse d'intégrabilité (h1)-d) en permettant à la constante λ d'être un processus prenant des valeurs strictement positives. L'hypothèse de stricte monotonie peut ainsi être assouplie et nous pouvons appliquer à l'équation de Poisson-Boltzmann la théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades.

2.4.4. Liens entre ÉDSR et ÉDP

Présentons maintenant les liens entre équations différentielles stochastiques rétrogrades à horizon aléatoire et équations aux dérivées partielles elliptiques sur \mathbb{R}^d tout entier d'autre part. Par souci de concision nous ne présentons ni l'application aux problèmes paraboliques semi-linéaires ni l'application aux problèmes elliptiques semi-linéaires sur un domaine D et renvoyons à [Par99] pour ces résultats.

Soit L un opérateur différentiel du second ordre de la forme

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^k (\sigma\sigma^*)_{i,j}(t, x) \partial_{i,j} + b(t, x) \nabla. \quad (2.18)$$

Sous les hypothèses usuelles sur la matrice σ et le vecteur b [Par99], il existe un processus X associé à L et solution de l'équation différentielle stochastique pour tout temps t réel positif

$$X_t^x = x + \int_0^t b(u, X_u^x) du + \int_0^t \sigma(u, X_u^x) dB_u. \quad (2.19)$$

Dans le cas des équations différentielles stochastiques rétrogrades associées à un problème elliptique semi-linéaire, le générateur de l'équation différentielle stochastique rétrograde dépend du temps et des aléas par le biais du processus X associé à L .

À l'équation elliptique

$$\mathcal{L}u(x) + f(t, x, u(x), \nabla u\sigma(x)) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad (2.20)$$

on peut associer l'équation différentielle stochastique rétrograde de générateur f , d'horizon infini et de condition terminale nulle, s'écrivant pour tous réels t et T tels que $0 \leq t \leq T$

$$Y_t^x = Y_T^x + \int_t^T f(u, X_u^x, Y_u^x, Z_u^x) du - \int_t^T Z_u^x dB_u. \quad (2.21)$$

Supposons que le générateur $f(X^x, \cdot, \cdot)$ vérifie les hypothèses **(h1)**, alors le lien entre solutions de l'équation différentielle stochastique rétrograde (2.21) et le problème elliptique semi-linéaire (2.20) est donné par le théorème suivant.

Théorème 2.4.5. *Supposons que le problème elliptique (2.20) admette une solution $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^k)$ telle que pour la constante λ apparaissant dans l'hypothèse **(h1)**,*

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\lambda t} \|(\nabla u\sigma)(X_t^x)\|^2 dt \right] < \infty.$$

Alors, pour tout x dans \mathbb{R}^d , le couple $(u(X_t^x), (\nabla u\sigma)(X_t^x))_{t \geq 0}$ est la solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde (2.21). En particulier, on a l'identité $u(x) = Y_0^x$ pour x dans \mathbb{R}^d .

Éléments de démonstration. Application de la formule d'Itô à la fonction u et au processus X_t^x . □

Remarque. En introduisant le temps d'atteinte du bord d'un domaine D , les équations différentielles stochastiques rétrogrades donnent une interprétation probabiliste des solutions à un problème elliptique sur D avec condition de Dirichlet au bord. Nous plaçant dans cette thèse sur \mathbb{R}^d tout entier, nous n'abordons pas ce sujet.

Chapitre 3.

Analyse et approximation numérique de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire parabolique

Dans cette partie, nous adaptons au cas parabolique les méthodes de simulation et analyses d'erreur présentées dans le cas elliptique dans [BCMT10]. Ce chapitre a trois principaux intérêts. Le premier est qu'il permet d'introduire des objets et méthodes largement utilisés dans le chapitre principal 4. Ainsi, nous retrouvons le même type de démonstration de la régularité des solutions aux problèmes paraboliques (2.12) et elliptiques (2.13). Le second est d'initier un travail nécessaire vers la simulation numérique des solutions de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire elliptique à l'aide d'équations différentielles stochastiques rétrogrades : le passage au parabolique. Le troisième est la construction d'un schéma de discrétisation de la solution X de l'équation (2.14) et l'analyse de son erreur faible.

3.1. Résolution de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire parabolique

Nous considérons dans ce chapitre, pour trois fonctions k , g et h , le problème linéaire parabolique homogène en temps sur un domaine D de \mathbb{R}^d comprenant strictement Ω_{int} :

$$\begin{cases} \partial_t u(t, x) - \mathcal{L} u(t, x) + k(x)u(t, x) = g(x), & (t, x) \in]0, T[\times D, \\ u(0, x) = h(x), & x \in D, \\ u(t, x) = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \partial D, \end{cases} \quad (3.1)$$

avec u vérifiant les conditions de transmission

$$\epsilon_{\text{int}} \nabla^{\text{int}} u(t, x) \cdot \vec{n}(x) = \epsilon_{\text{ext}} \nabla^{\text{ext}} u(t, x) \cdot \vec{n}(x), \quad (t, x) \in [0, T] \times \Gamma. \quad (3.2)$$

Nous pouvons donner un résultat d'existence, d'unicité et de régularité de la solution u sous les hypothèses suivantes :

1. la frontière ∂D satisfait la condition de sphère extérieure en tout point,

2. les fonctions h et $\tilde{h} := g + \mathcal{L}h - kh$ sont dans $L^2(D) \cap \mathcal{C}^\alpha(D)$ pour α dans $]0, 1[$, et vérifient les conditions de transmission (3.2),
3. la fonction g est à support compact dans \mathbb{R}^d et de classe \mathcal{C}_b^∞ sur $\Omega_{\text{int}} \cup \Gamma$ et $(D \cap \Omega_{\text{ext}}) \cup \Gamma$,
4. la fonction k est de classe \mathcal{C}_b^∞ sur $\bar{\Omega}_{\text{int}}$ et $D \cap \bar{\Omega}_{\text{ext}}$.

Théorème 3.1.1. *Le problème parabolique (3.1) a une unique solution u dans l'espace $L^2(0, T; H_0^1(D)) \cap \mathcal{C}([0, T]; L^2(D))$. Cette solution appartient de plus à l'espace $\mathcal{C}_b^0([0, T] \times \bar{D}) \cap \mathcal{C}^{1,2}([0, T], \bar{\Omega}_{\text{int}}) \cap \mathcal{C}^{1,2}([0, T], \bar{\Omega}_{\text{ext}} \cap D)$. Il existe une fonction r de $\mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \bar{D})$ telle que, pour $x \in \mathcal{N}$,*

$$r(t, x) = \left(\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\epsilon_{\text{ext}}} - 1 \right) \nabla^{\text{int}} u(t, \pi(x)) \cdot \vec{n}(\pi(x)).$$

La fonction \hat{u} définie pour x dans \mathbb{R}^d par

$$\hat{u}(t, x) := u(t, x) - r(t, x)[\rho(x)]_+$$

appartient de plus à l'intersection de $L^2(0, T; W_{\text{loc}}^{2,\infty}(\mathbb{R}^d))$ et $\mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d \setminus \Gamma)$.

Remarque. Notons que nous n'avons pu trouver dans la littérature de résultat donnant directement la régularité souhaitée de la solution. Dans [LSU67], les résultats ne sont pas suffisants, le livre renvoie cependant à [LRU66] rédigé en russe pour des résultats de régularité. Aussi avons nous choisi de démontrer le théorème 3.1.1 sous des hypothèses adaptées aux équations de Poisson-Boltzmann.

Démonstration de la régularité de \hat{u} . Supposons l'existence d'une solution u dans l'espace $\mathcal{C}_b^0([0, T] \times \bar{D}) \cap \mathcal{C}^{1,2}([0, T], \bar{\Omega}_{\text{int}}) \cap \mathcal{C}^{1,2}([0, T], \bar{\Omega}_{\text{ext}} \cap D)$ et vérifiant les conditions de transmission (3.2). Vérifions que la fonction \hat{u} appartient à l'intersection des espaces $L^2(0, T; W_{\text{loc}}^{2,\infty}(\mathbb{R}^d))$ et $\mathcal{C}^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d \setminus \Gamma)$.

Les fonctions r et ρ étant de classe $\mathcal{C}^2(\bar{\Omega}_{\text{int}})$ et $\mathcal{C}^2(\bar{\Omega}_{\text{ext}})$, il en est de même de la fonction \hat{u} . On a sur la frontière Γ l'égalité suivante

$$\nabla^{\text{int}} \hat{u}(t, x) = \nabla^{\text{int}} u(t, x), \quad x \in \Gamma.$$

Sur la surface Γ nous avons $\rho(x) = 0$ et $\nabla \rho(x) = \vec{n}(\pi(x))$ (cf. équations (2.2) et (2.3)), aussi, pour x sur Γ , nous avons que

$$\begin{aligned} & \nabla^{\text{ext}} (\nabla^{\text{int}} u(t, x) \cdot \vec{n}(x) \rho(x)) \\ &= (\nabla^{\text{int}} u(t, x) \cdot \nabla^{\text{ext}}) (\rho(x) \vec{n}(x)) + \nabla^{\text{int}} u(t, x) \times (\nabla^{\text{ext}} (\rho(x) \vec{n}(x))) \\ &= (\nabla^{\text{int}} u(t, x) \cdot \vec{n}(x)) \vec{n}(x) + \nabla^{\text{int}} u(t, x) \times (\nabla^{\text{ext}} (\rho(x) \vec{n}(x))) \\ &= \nabla^{\text{int}} u(t, x) + \nabla^{\text{int}} u(t, x) \times (\nabla^{\text{ext}} \rho(x) \times \vec{n}(x) + \rho(x) \nabla \vec{n}(x)) \\ &= \nabla^{\text{int}} u(t, x) \end{aligned}$$

3.1. Résolution de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire parabolique

où l'on a noté « \times » le produit vectoriel. Nous avons donc pour x sur Γ

$$\begin{aligned}\nabla^{\text{ext}}\hat{u}(t, x) &= \nabla^{\text{ext}}u(t, x) - \left(\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\epsilon_{\text{ext}}} - 1\right) \nabla^{\text{ext}}(\nabla^{\text{int}}u(t, x) \cdot \vec{n}(x)\rho(x)) \\ &= \nabla^{\text{ext}}u(t, x) - \left(\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\epsilon_{\text{ext}}} - 1\right) \nabla^{\text{int}}u(t, x) \\ &= \nabla^{\text{int}}\hat{u}(t, x),\end{aligned}$$

par l'hypothèse (3.2) vérifiée par u . La fonction \hat{u} est donc de classe \mathcal{C}^1 sur le domaine D .

Nous pouvons alors conclure que \hat{u} est dans l'espace $\mathcal{W}_{\text{loc}}^{2,\infty}(D)$ (en vérifiant que pour toute fonction test ϕ , et toute dérivée seconde on a $\|\hat{u}\partial_{ij}\phi\|_{L_{\text{loc}}^\infty} \leq C\|\phi\|_{L^1}$ pour une constante C). \square

Remarque. La régularité de \hat{u} nous permet par la suite d'appliquer le lemme d'Itô généralisé (théorème 2.3.4).

Démonstration. Les théorèmes 13.1 et 10.1 de [LSU67] impliquent l'existence et l'unicité d'une solution au sens faible dans $L^2(0, T; H_0^1(D)) \cap \mathcal{C}([0, T]; L^2(D))$ qui est de plus dans l'espace $\mathcal{C}^{\alpha/2, \alpha}([0, T] \times \bar{D})$, et qui vérifie les conditions de transmission (3.2) en Γ . De plus, la restriction de cette solution est de régularité $\mathcal{C}^{1+\alpha/2, 2+\alpha}$ sur les domaines $]0, T] \times \Omega_{\text{int}}$ et $]0, T] \times \Omega_{\text{ext}} \cap D$ et de régularité $\mathcal{C}^{1+\alpha, 1+\alpha}$ sur les domaines $]0, T] \times \bar{\Omega}_{\text{int}}$ et $]0, T] \times \bar{\Omega}_{\text{ext}} \cap D$. Vérifions maintenant que cette solution u est dans $\mathcal{C}^{1,2}([0, T], \bar{\Omega}_{\text{int}})$ et $\mathcal{C}^{1,2}([0, T], \bar{\Omega}_{\text{ext}} \cap D)$.

Commençons par montrer la régularité en temps. La dérivée en temps u_t de la solution u vérifie le problème suivant

$$\begin{cases} \partial_t w(t, x) - \mathcal{L}w(t, x) + k(x)w(t, x) = 0, & (t, x) \in]0, T[\times D, \\ w(0, x) = g(x) + \mathcal{L}h(x) - k(x)h(x) =: \tilde{h}(x), & x \in D, \\ w(t, x) = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \partial D. \end{cases}$$

Ce problème par les théorèmes 13.1 et 10.1 de [LSU67] admet une unique solution hölderienne en temps sur $[0, T]$. Sa primitive en temps vérifie le problème (3.1) et par unicité de la solution nous pouvons conclure quant au caractère $\mathcal{C}^{1+\alpha}$ sur $[0, T]$ de la solution u .

Afin d'obtenir la régularité en espace sur les deux sous-domaines $\bar{\Omega}_{\text{int}} \cap D$ et $\bar{\Omega}_{\text{ext}} \cap D$, montrons maintenant que la trace sur la surface Γ de la solution u admet une régularité de classe \mathcal{C}^∞ .

Lemme 3.1.2. *Les traces $u|_\Gamma$ et $\partial_t u|_\Gamma$ au bord Γ de u et $\partial_t u$ respectivement sont $\mathcal{C}^\infty(\Gamma)$.*

Démonstration du lemme 3.1.2. Considérons la famille ψ_1, \dots, ψ_M de redressements locaux de Γ donnée dans le lemme 2.1.1 et de classe \mathcal{C}^∞ , définis sur des voisinages $\mathcal{U}_1, \dots, \mathcal{U}_M$ de Γ . Fixons un indice i de $\{1, \dots, M\}$, et notons

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}_i \cap D, \quad \psi = \psi_i \text{ et } \mathcal{V} = \psi(\mathcal{U}).$$

Définissons maintenant pour t dans le segment $[0, T[$ et y dans le voisinage \mathcal{V} ,

$$v(t, y) = u(t, \psi^{-1}(y)), \tilde{\epsilon}(y) = \epsilon(\psi^{-1}(y)), \tilde{g}(y) = g(\psi^{-1}(y)), \tilde{k}(y) = k(\psi^{-1}(y)) \text{ et} \\ M(y) = (M_{ij}(y))_{1 \leq i, j \leq 3} = J\psi(\psi^{-1}(y)).$$

De la propriété de \mathcal{C}^∞ -difféomorphisme de \mathcal{U} dans \mathcal{V} de ψ , nous pouvons déduire que v appartient à l'espace $L^2(0, T; H_{\text{loc}}^1(\mathcal{V}))$. L'équation parabolique vérifiée par v est la suivante :

$$\begin{cases} \partial_t v(t, y) - \nabla \cdot [\tilde{\epsilon}(y)M(y)\nabla v(t, y)] + \tilde{k}(y)v(t, y) = \tilde{g}(y) & \text{sur } [0, T] \times \mathcal{V}, \\ v(0, y) = \tilde{h}(y) & \text{sur } \mathcal{V}. \end{cases} \quad (3.3)$$

Montrons que pour tout indice l de $\{2, \dots, d\}$, le gradient $\nabla(\partial_l v)$ est dans l'espace $L^2(0, T; L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V}))$. Du fait que $\tilde{\epsilon}$ et \tilde{k} sont constants dans les directions $\{2, \dots, d\}$, nous obtenons que $\partial_l v$ vérifie l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \partial_t \partial_l v - \sum_{i, j, k=1}^d M_{ik} \partial_k \tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_l \partial_j v + \tilde{k} \partial_l v \\ = \partial_l \tilde{g} + \sum_{i, j, k=1}^d M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} \partial_l M_{ij} \partial_j v) + \sum_{i, j, k=1}^d \partial_l M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j v). \end{aligned}$$

Choisissons une fonction $\chi \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathcal{U})$ et posons $w = \chi \partial_l v$. La fonction w vérifie l'équation

$$\begin{aligned} \partial_t \partial_l w - \sum_{i, j, k=1}^d M_{ik} \partial_k \tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j w + \tilde{k} w \\ = \chi \partial_l \tilde{g} + \sum_{i, j, k=1}^d \chi M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} \partial_l M_{ij} \partial_j v) + \sum_{i, j, k=1}^d \chi \partial_l M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j v) \\ - \sum_{i, j, k=1}^d M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j \chi \partial_l v) - \sum_{i, j, k=1}^d \tilde{\epsilon} M_{ik} M_{ij} \partial_k \chi \partial_l v. \end{aligned}$$

Multiplions maintenant l'équation précédente par $w \det J\psi^{-1}$, intégrons sur \mathcal{V} , effectuons une intégration par partie pour chaque terme faisant intervenir des dérivées partielles

3.1. Résolution de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire parabolique

de $\tilde{\epsilon}$ et utilisons le lemme 2.1.2 pour obtenir

$$\begin{aligned}
& \partial_t \int_{\mathcal{V}} w^2(t, y) \det J\psi^{-1} dy + \int_{\mathcal{V}} \tilde{\epsilon}(y) M^2(y) |\nabla w(t, y)|^2 dy \\
& \quad + \int_{\mathcal{V}} \tilde{k}(y) w^2(t, y) \det J\psi^{-1} dy \\
& = \int_{\mathcal{V}} \chi^2(y) \partial_t \tilde{g}(y) w(t, y) \det J\psi^{-1} dy \\
& \quad - \int_{\mathcal{V}} \sum_{i,j,k=1}^d \tilde{\epsilon} \partial_i M_{ij} \partial_j v \partial_k (\chi M_{ik} w(t, y) \det J\psi^{-1}) dy \\
& \quad - \int_{\mathcal{V}} \tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j v \partial_k (\chi \partial_i M_{ik} w(t, y) \det J\psi^{-1}) dy \\
& \quad + \int_{\mathcal{V}} \sum_{i,j,k=1}^d \tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j \chi \partial_i v(t, y) \partial_k (M_{ik} w(t, y) \det J\psi^{-1}) dy \\
& \quad - \int_{\mathcal{V}} \sum_{i,j,k=1}^d \tilde{\epsilon} M_{ik} M_{ij} \partial_k \chi \partial_i v(t, y) w(t, y) \det J\psi^{-1} dy.
\end{aligned}$$

Ainsi nous avons l'inégalité

$$\begin{aligned}
& \partial_t \int_{\text{Supp}(\chi)} |w(t, y)|^2 dy + \int_{\mathcal{V}} \tilde{\epsilon}(y) |M(y) \nabla w(t, y)|^2 dy \\
& \leq C \left(\int_{\text{Supp}(\chi)} (|w(t, y)|^2 + |w(t, y)|) dy \right. \\
& \quad \left. + \int_{\text{Supp}(\chi)} (|\nabla v(t, y) \cdot \nabla w(t, y)| + |\nabla \partial_i v(t, y) w(t, y)|) dy \right).
\end{aligned}$$

À l'aide de l'égalité sur le voisinage \mathcal{V} et pour t dans le segment $[0, T]$

$$\nabla \partial_i v = \partial_i v (\nabla w - \nabla \chi \partial_i v),$$

nous pouvons obtenir la majoration suivante

$$\int_{\text{Supp}(\chi)} |\nabla \partial_i v(t, y) w(t, y)| dy \leq C \int_{\text{Supp}(\chi)} (|\nabla v(t, y) \cdot \nabla w(t, y)| + |\nabla v(t, y)|^2) dy,$$

et ainsi obtenir à l'aide de l'égalité de Young,

$$\begin{aligned}
& \partial_t \int_{\text{Supp}(\chi)} |w(t, y)|^2 dy + \int_{\mathcal{V}} |\nabla w(t, y)|^2 dy \\
& \leq C \int_{\text{Supp}(\chi)} (|w(t, y)|^2 + |\nabla v(t, y)|^2) dy. \quad (3.4)
\end{aligned}$$

L'inégalité de Grönwall donne une majoration de la norme $L^2(\text{Supp}(\chi))$ de la fonction w :

$$\|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \leq e^{Ct} \left(\|w(0, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + C \int_0^t \|\nabla v(s, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 ds \right).$$

et nous avons ainsi la majoration suivante

$$\max_{t \in [0, T]} \|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \leq e^{CT} \left(\|w(0, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + C \int_0^T \|\nabla v(s, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 ds \right).$$

D'où en intégrant l'inégalité (3.4) entre 0 et T ,

$$\begin{aligned} \int_0^T \|\nabla w(t, \cdot)\|_{L^2(\mathcal{V})}^2 dt &\leq C \left(\max_{t \in [0, T]} \|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \\ &\quad \left. + \int_0^T \left(\|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + \|\nabla v(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right) dt \right). \end{aligned}$$

Nous avons donc montré que, pour tout indice l dans $\{2, \dots, d\}$, le gradient $\nabla(\partial_l v)$ est dans l'espace $L^2(0, T; L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V}))$.

Montrons maintenant par récurrence que, pour tout entier n positif, et pour tous indices k_1, \dots, k_n dans $\{2, \dots, d\}$,

$$\nabla(\partial_{k_1, \dots, k_n} v) \in L^2(0, T; L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})).$$

Supposons l'hypothèse vérifiée pour $n - 1$ positif. Fixons k_1, \dots, k_n dans $\{2, \dots, d\}$, choisissons χ dans $\mathcal{C}_c^\infty(\mathcal{V})$ et notons w la fonction $\chi \partial_{k_1, \dots, k_n} v$. Comme dans l'étape précédente, nous commençons par dériver l'équation (3.3) par rapport à y_{k_1}, \dots, y_{k_n} , puis nous écrivons l'équation vérifiée par w , que nous multiplions par le terme $w \det J\phi^{-1}$. Intégrons alors sur \mathcal{V} l'équation obtenue en effectuant des intégrations par partie des termes contenant une dérivée partielle de $\tilde{\epsilon}$, nous obtenons, pour tout t dans le segment $[0, T]$, l'inégalité

$$\begin{aligned} \partial_t \|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + \|\nabla w(t, \cdot)\|_{L^2(\mathcal{V})}^2 &\leq C \int_{\text{Supp}(\chi)} \left(|w(t, y)| + |w(t, y)|^2 \right. \\ &\quad \left. + |w(t, y)| \left(\sum_{j=0}^n \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} |\partial_{k_{i_1}, \dots, k_{i_j}} v(t, y)| \right) \right. \\ &\quad \left. + (|w(t, y)| + |\nabla w(t, y)|) \left(\sum_{j=0}^{n-1} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} |\nabla \partial_{k_{i_1}, \dots, k_{i_j}} v(t, y)| \right) \right. \\ &\quad \left. + |w(t, y) \nabla \partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, y)| \right) dy. \end{aligned}$$

3.1. Résolution de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire parabolique

En utilisant la relation

$$w(t, y) \nabla \partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, y) = \partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, y) (\nabla w(t, y) - \nabla \chi(y) \partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, y)),$$

valable pour tout t dans le segment $[0, T]$ et tout y dans \mathcal{V} , nous obtenons l'inégalité

$$\begin{aligned} \int_{\text{Supp}(\chi)} |w(t, y) \nabla \partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, y)| dy \\ \leq \int_{\text{Supp}(\chi)} (|\partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, y) \nabla w(t, y)| + |\partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, y)|^2) dy, \end{aligned}$$

et ainsi

$$\begin{aligned} \partial_t \|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + \|\nabla w(t, \cdot)\|_{L^2(\mathcal{V})}^2 \\ \leq C \left(\|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + \sum_{j=0}^n \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} \|\partial_{k_{i_1}, \dots, k_{i_j}} v(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \\ \left. + \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} \|\nabla \partial_{k_{i_1}, \dots, k_{i_j}} v(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \\ \left. + \|\partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right). \end{aligned}$$

Remarquons que la deuxième somme ne fait intervenir que des dérivées partielles de v d'ordre inférieur à n bornées en norme $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ par hypothèse de récurrence. Le lemme de Grönwall pour la fonction $t \rightarrow \|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2$ donne l'inégalité

$$\begin{aligned} \|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \\ \leq e^{Ct} \left(\|w(0, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \\ \left. + C \int_0^t \left(\sum_{j=0}^n \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} \|\partial_{k_{i_1}, \dots, k_{i_j}} v(s, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} \|\nabla \partial_{k_{i_1}, \dots, k_{i_j}} v(s, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \right. \\ \left. \left. + \|\partial_{k_1, \dots, k_n} v(s, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right) ds \right), \end{aligned}$$

et ainsi que

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \|\nabla w(t, \cdot)\|_{L^2(\mathcal{V})}^2 dt \\
 & \leq C \left(\max_{t \in [0, T]} \|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \\
 & \quad + \int_0^T \left(\|w(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + \|\nabla v(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \\
 & \quad \quad + \sum_{j=0}^n \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} \|\partial_{k_{i_1}, \dots, k_{i_j}} v(s, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \\
 & \quad \quad + \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} \|\nabla \partial_{k_{i_1}, \dots, k_{i_j}} v(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \\
 & \quad \quad \left. \left. + \|\partial_{k_1, \dots, k_n} v(t, \cdot)\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right) dt \right).
 \end{aligned}$$

Le gradient $\nabla(\partial_{k_1, \dots, k_n} v)$ est donc dans $L^2(0, T; L^2_{\text{loc}}(\mathcal{V}))$. Ainsi nous avons montré que v est dans l'espace $L^2(0, T; H^{1, \infty, \infty}_{\text{loc}}(D))$. Puis en appliquant pour tout t fixé dans $[0, T]$, un lemme de trace [Bre83] aux fonctions $v(t, \cdot)$ (rappelons que la solution u étant définie au sens classique ainsi que sa dérivée en temps, la fonction v l'est aussi), nous pouvons alors conclure quant au caractère \mathcal{C}^∞ de la restriction à la surface $\mathcal{V} \cap \Gamma$ de la fonction v . Le caractère \mathcal{C}^∞ -difféomorphisme de ψ permet de conclure quant à la régularité de la solution u sur la surface Γ .

Le même travail appliqué à la trace sur Γ de la dérivée en temps de la solution u permet d'obtenir le caractère $\mathcal{C}^\infty(\Gamma)$ de la trace de la dérivée partielle $\partial_t u$. \square

L'utilisation du lemme 5.1.1 de [Lun95] permet alors de conclure que la trace $u|_\Gamma$ est dans l'ensemble $\mathcal{C}^{1+\alpha/2, 2+\alpha}([0, T] \times \Gamma)$. Nous pouvons maintenant décomposer le problème (3.1) en deux sous-problèmes portant sur les domaines $\bar{\Omega}_{\text{int}}$ (rappelons que Ω_{int} est strictement inclus dans le domaine D) et $\bar{\Omega}_{\text{ext}} \cap D$:

$$\begin{cases} \partial_t u_{\text{int}}(t, x) - \mathcal{L} u_{\text{int}}(t, x) + k(x)u_{\text{int}}(t, x) = g(x), & (t, x) \in]0, T[\times \Omega_{\text{int}} \\ u_{\text{int}}(0, x) = h(x), & x \in \Omega_{\text{int}} \\ u_{\text{int}}(t, x) = u|_\Gamma(t, x), & (t, x) \in]0, T[\times \Gamma \end{cases} \quad (3.5)$$

et

$$\begin{cases} \partial_t u_{\text{ext}}(t, x) - \mathcal{L} u_{\text{ext}}(t, x) + k(x)u_{\text{ext}}(t, x) = g(x), & (t, x) \in]0, T[\times (\Omega_{\text{ext}} \cap D) \\ u_{\text{ext}}(0, x) = h(x), & x \in \Omega_{\text{ext}} \cap D \\ u_{\text{ext}}(t, x) = u|_\Gamma(t, x), & (t, x) \in]0, T[\times \Gamma \\ u_{\text{ext}}(t, x) = 0, & (t, x) \in]0, T[\times \partial D \end{cases} \quad (3.6)$$

L'application du théorème 5.1.15 de [Lun95] à ces deux sous-problèmes permet alors d'obtenir la régularité $\mathcal{C}^{1+\alpha/2, 2+\alpha}([0, T] \times \bar{\Omega}_{\text{int}})$ (respectivement $\mathcal{C}^{1+\alpha/2, 2+\alpha}([0, T] \times \bar{\Omega}_{\text{ext}})$)

de u_{int} (respectivement u_{ext}) pour α strictement compris entre 0 et 1, ce qui conclut la démonstration du théorème. □

3.2. Interprétation probabiliste

Nous tirons partie dans cette section du fait que le terme source $g = \rho_m$ (équation (2.6)), dans le cas de l'équation de Poisson-Boltzmann

$$\begin{cases} \partial_t u(t, x) - \mathcal{L}u(t, x) + \kappa^2(x)u(t, x) = g(x), & (t, x) \in]0, T[\times D, \\ u(0, x) = h(x), & x \in D, \\ u(t, x) = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \partial D, \end{cases} \quad (3.7)$$

est une combinaison linéaire de mesures de Dirac à support dans Ω_{int} .

Remarque. Soulignons que la suite de ce chapitre s'applique dans le cas de toute fonction κ positive constante dans Ω_{int} et Ω_{ext} . Dans le cas plus général où κ est strictement positive dans Ω_{int} , il est alors nécessaire de considérer une diffusion tuée dans le domaine intérieur (cf. section 3.3.1).

Signalons aussi le fait que le théorème 3.2.1 est valable pour toute fonction κ continue par morceaux et bornée.

Introduisons u_0 la solution de

$$\begin{cases} \partial_t u_0(t, x) - \epsilon_{\text{int}} \Delta u_0(t, x) = g(x), & (t, x) \in]0, T] \times \mathbb{R}^d, \\ u_0(0, x) = 0, & x \in \Omega_{\text{int}}, \end{cases} \quad (3.8)$$

Cette solution s'exprime à l'aide de la fonction de Green

$$G(t, x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_{\text{int}}t}} \exp\left(-\frac{\|x\|^2}{4\epsilon_{\text{int}}t}\right), \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^d$$

de la manière suivante

$$u_0(t, x) = \sum_{i=1}^N q_i \int_0^t G(t - \tau, x - x_i) d\tau.$$

Fixons h strictement positif, et définissons Ω_{int}^h l'ensemble des points de Ω_{int} situés à une distance $d(x, \Gamma)$ de Γ plus grande que h . Soit $\tau_{\partial D}$ le temps d'atteinte du bord ∂D

$$\tau_{\partial D} := \inf \{t \geq 0 \mid X_t \in \partial D\},$$

et pour k entier plus grand que un, les suites de temps d'atteinte

$$\begin{aligned} \tau_k &:= \inf \{t \geq \tau'_{k-1} \mid X_t \in \Omega_{\text{int}}^h\}, \\ \tau'_k &:= \inf \{t \geq \tau_k \mid X_t \in \Gamma\}, \end{aligned}$$

avec la convention que $\tau'_0 = 0$.

Théorème 3.2.1. Soient \mathbb{P}_x la loi de la solution faible X de l'équation (2.14) avec condition initiale $X_0 = x$ dans \mathbb{R}^d et u la solution au problème parabolique (3.7). Alors, pour tout x dans \mathbb{R}^d et tout t dans le segment $[0, T]$,

$$\begin{aligned} u(t, x) = & \sum_{k=1}^{\infty} \left(\mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau_k, X_{\tau_k}) \exp \left(- \int_0^{\tau_k} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_k < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \right. \\ & \left. - \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau'_k, X_{\tau'_k}) \exp \left(- \int_0^{\tau'_k} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_k < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \right) \\ & + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \right]. \end{aligned}$$

Démonstration. Des équations (3.7), (3.8) et du fait que κ est nul sur le domaine Ω_{int} et ϵ constant égal à ϵ_{int} , nous déduisons que la fonction $v = u - u_0$ vérifie sur le domaine Ω_{int} l'équation

$$\partial_t v - \epsilon_{\text{int}} \Delta v = 0.$$

En appliquant la formule d'Itô, pour x dans le domaine Ω_{int}^h et t dans le segment $[0, T]$,

$$\begin{aligned} u(t, x) = & \mathbb{E}_x \left[u(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) - u_0(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\ & + \mathbb{E}_x \left[u(t - t \wedge \tau_{\partial D}, X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) - u_0(t - t \wedge \tau_{\partial D}, X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 \geq t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] + u_0(t, x) \\ = & \mathbb{E}_x \left[u(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) - u_0(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\ & + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 \geq t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] + u_0(t, x) \end{aligned}$$

De plus, pour x dans le domaine $\mathbb{R}^d \setminus \Omega_{\text{int}}^h$ et t dans le segment $[0, T]$, la formule de Feynman-Kac donnée dans le théorème 2.3.5 donne l'égalité suivante,

$$\begin{aligned} u(t, x) = & \mathbb{E}_x \left[u(t - \tau_1, X_{\tau_1}) e^{-\int_0^{\tau_1} \kappa^2(X_s) ds} \mathbf{1}_{\{\tau_1 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\ & + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) e^{-\int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds} \mathbf{1}_{\{\tau_1 \geq t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right], \end{aligned}$$

d'où,

$$\begin{aligned} u(t - t'_1, X_{t'_1}) = & \mathbb{E}_x \left[u(t - \tau_2, X_{\tau_2}) \exp \left(- \int_{\tau'_1}^{\tau_2} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_2 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\ & + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_{\tau'_1}^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D} \leq \tau_2\}} \right] \\ = & \mathbb{E}_x \left[u(t - \tau_2, X_{\tau_2}) \exp \left(- \int_0^{\tau_2} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_2 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\ & + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D} \leq \tau_2\}} \right] \end{aligned}$$

car la fonction $\kappa_{|\Omega_{\text{int}}|}^2(\cdot)$ est identiquement nulle.

Ainsi, en combinant les deux expressions précédentes, nous obtenons que

$$\begin{aligned}
 u(t, x) &= u_0(t, x) + \mathbb{E}_x \left[u(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) - u_0(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 \geq t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &= u_0(t, x) - \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[u(t - \tau_2, X_{\tau_2}) \exp \left(- \int_0^{\tau_2} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_2 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D} \leq \tau_2\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 \geq t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &= u_0(t, x) - \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[(u - u_0)(t - \tau'_2, X_{\tau'_2}) \exp \left(- \int_0^{\tau_2} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_2 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau_2, X_{\tau_2}) \exp \left(- \int_0^{\tau_2} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_2 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_2 < t \wedge \tau_{\partial D} \leq \tau'_2\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{t \wedge \tau_{\partial D} \leq \tau_2\}} \right],
 \end{aligned}$$

et finalement,

$$\begin{aligned}
 u(t, x) &= u_0(t, x) - \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau_2, X_{\tau_2}) \exp \left(- \int_0^{\tau_2} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_2 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad - \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau'_2, X_{\tau'_2}) \exp \left(- \int_0^{\tau_2} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_2 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[u(t - \tau'_2, X_{\tau'_2}) \exp \left(- \int_0^{\tau_2} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_2 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 &\quad + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{t \wedge \tau_{\partial D} \leq \tau'_2\}} \right].
 \end{aligned}$$

Par la proposition 2.15 de [BCMT10], on sait que $|X_t|$ tend vers l'infini presque sûrement lorsque t tend vers l'infini. Le processus étant continu cela implique que nous avons presque sûrement, pour m assez grand $\tau_m = +\infty$ d'une part et $\tau_{\partial D}$ fini d'autre

part. Nous concluons alors par récurrence pour obtenir l'égalité espérée

$$\begin{aligned}
 u(t, x) = & u_0(t, x) - \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau'_1, X_{\tau'_1}) \mathbf{1}_{\{\tau'_1 < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \\
 & + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau_k, X_{\tau_k}) \exp \left(- \int_0^{\tau_k} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau_k < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \right. \\
 & \left. - \mathbb{E}_x \left[u_0(t - \tau'_k, X_{\tau'_k}) \exp \left(- \int_0^{\tau_k} \kappa^2(X_s) ds \right) \mathbf{1}_{\{\tau'_k < t \wedge \tau_{\partial D}\}} \right] \right) \\
 & + \mathbb{E}_x \left[h(X_{t \wedge \tau_{\partial D}}) \exp \left(- \int_0^{t \wedge \tau_{\partial D}} \kappa^2(X_s) ds \right) \right].
 \end{aligned}$$

□

3.3. Différents algorithmes probabilistes de simulation et d'approximation

Rappelons tout d'abord que la particule suivant la dynamique donnée par l'équation différentielle stochastique (2.14) a des trajectoires browniennes dans les deux sous-domaines Ω_{int} et Ω_{ext} de \mathbb{R}^3 . Afin de mettre en oeuvre des algorithmes de simulation de trajectoire de cette particule, il nous est nécessaire de rappeler différentes probabilités et lois associées à un mouvement brownien de dimension 3 [BS02]. Soit $|B|$ un processus de Bessel de dimension 3 (soit la norme d'un mouvement brownien B de dimension 3) partant de 0, et pour y positif soit τ_y le temps d'atteinte de y par ce processus de Bessel. Soit F la fonction de répartition de la loi normale $\mathcal{N}(0, 1)$.

Lemme 3.3.1 (Formule 1.1.4 de [BS02]). *La probabilité $\mathbb{P}_0(\tau_z \in]0, t])$ est donnée par*

$$\mathbb{P}_0(\tau_z \in]0, t]) = z \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{4}{\sqrt{t}} e^{-\frac{(2k+1)^2 z^2}{2t}} + \frac{2}{|2k+1|z} \left(1 - F \left(\frac{|2k+1|z}{\sqrt{2t}} \right) \right).$$

Lemme 3.3.2 (Formule 1.1.8 de [BS02]). *La densité de probabilité $\mathbb{P}_0(t < \tau_y, R_t \in dz)$, est donnée par*

$$\mathbb{P}_0(t < \tau_y, R_t \in dz) = \frac{z}{\sqrt{2\pi t}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{z + 2ky}{t} e^{-(z+2ky)^2/t} dz$$

de fonction de répartition

$$F_{R_{t \wedge \tau_y}}(z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} F \left(\frac{z}{\sqrt{t}} + \frac{2ky}{\sqrt{t}} \right) - F \left(\frac{2ky}{\sqrt{t}} \right) - \frac{z}{\sqrt{2\pi t}} e^{-(z+2ky)^2/2t}$$

Lemme 3.3.3 (Formule 2.0.1 de [BS02]). *Pour λ positif, la transformée de Laplace du temps de sortie de la boule de rayon y vérifie :*

$$\mathbb{E}_0[\exp(-\lambda\tau_y)] = \frac{y\sqrt{2\lambda}}{\sinh(y\sqrt{2\lambda})}$$

3.3.1. Algorithme de marche sur les sphères arrêtée

L'algorithme de marche sur les sphères (« *Walk On Spheres algorithms* » [ST95, Sim08]) est un algorithme efficace de simulation de trajectoires browniennes dans un domaine D (figure 3.1). Nous présentons ici une version arrêtée de cet algorithme. Partant d'un point y_0 du domaine D , la position suivante est simulée de la manière suivante :

1. on calcule le rayon r_0 de la plus grande sphère de centre y_0 incluse dans le domaine D ,
2. on simule le temps de sortie τ_0 de cette sphère dont la transformée de Laplace de la loi est rappelée dans le lemme 3.3.3.
3. a) si τ_0 est inférieur à t , on simule de manière indépendante et uniforme la position de sortie de la sphère et on recommence,
b) sinon, on simule la position en t en tirant de manière uniforme un point sur la sphère de rayon donné par une variable aléatoire \mathbf{r} dont la loi est donnée dans le lemme 3.3.2 et l'on arrête l'algorithme.

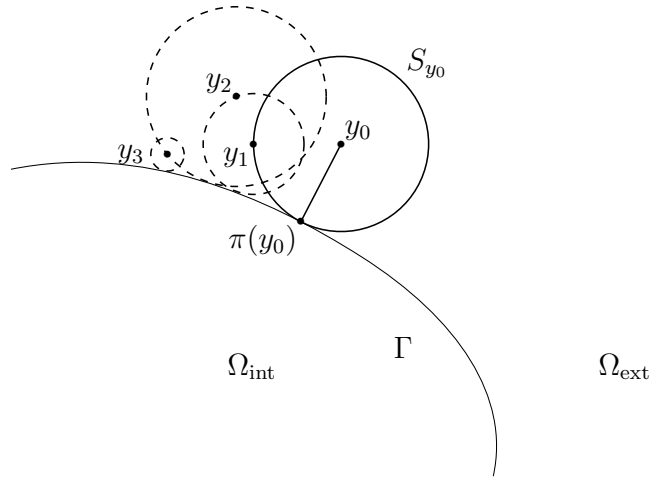


FIGURE 3.1.: Algorithme de marche sur les sphères

Afin de réduire la taille des trajectoires et ainsi d'améliorer l'efficacité de l'algorithme de simulation et de rendre compte du terme linéaire d'ordre zéro dans l'équation, il est intéressant de tuer la diffusion de la manière suivante. Introduisons une variable aléatoire Y de loi exponentielle de paramètre un, indépendante du mouvement brownien B sous-jacent. Définissons l'instant de mort θ par l'expression :

$$\theta = \inf \{t \geq 0; \kappa^2 (t \wedge \tau_0) \geq Y\},$$

et notons \tilde{B} le mouvement brownien tué à l'instant θ . Alors, pour toute fonction u solution de

$$\begin{cases} \partial_t u = \frac{1}{2} \Delta u - \kappa^2 u, & (t, x) \in [0, T] \times D, \\ u(0, \cdot) = h & x \in D, \end{cases}$$

la formule de Feynman-Kac donne

$$\begin{aligned}
 u(t, y_0) &= \mathbb{E}_{y_0} [u(t - t \wedge \tau_0, y_1) \exp(-\kappa^2 t \wedge \tau_0)] \\
 &= \mathbb{E}_{y_0} [u(t - t \wedge \tau_0, B_{t \wedge \tau_0}) \mathbb{P}\{Y > \kappa^2 (t \wedge \tau_0) | B\}] \\
 &= \mathbb{E}_{y_0} [u(t - t \wedge \tau_0, \tilde{B}_{t \wedge \tau_0}) \mathbf{1}_{\{Y > \kappa^2 (t \wedge \tau_0)\}}] \\
 &= \mathbb{E}_{y_0} [u(t - t \wedge \tau_0, \tilde{B}_{t \wedge \tau_0})].
 \end{aligned}$$

Prenons compte de ces différentes considérations, pour obtenir l'algorithme suivant de marche arrêtée sur les sphères. Cet algorithme retourne une variable booléenne (notée *test*) modélisant le fait que la diffusion simulée a été tuée ou non, le temps à la sortie de l'algorithme t_{sortie} et la position à la sortie de l'algorithme sortie notée $\text{sortie}(\cdot)$.

Algorithme 3.1 Algorithme de marche sur les sphères arrêtée «SWOS»

Soient $y_0 \in D$ et $t \in \mathbb{R}^+$,

$k \leftarrow 0$ et $\text{test} \leftarrow \text{faux}$

loop

$S_k = S(y_k, r_k)$ la plus grande sphère centrée en y_k incluse dans D ,

$\tau_{S_k} = \inf \{t > \tau_{S_{k-1}} | \dots\}$ le temps d'atteinte de la sphère S_k .

On simule τ_{S_k} (lemme 3.3.3).

$\text{test} \leftarrow \text{vrai}$ avec probabilité $\exp(-\kappa^2 (t \wedge \tau_{S_k}))$

if test then

return test

end if

if $\{t < \tau_{S_k}\}$ then

On simule la position en t qu'on note $\text{sortie}(y_0)$ (lemme 3.3.2).

$\text{temps_sortie} \leftarrow t$

return test, temps_sortie, sortie(y_0)

else

On simule y_{k+1} uniformément sur la sphère S_k .

end if

if $d(y_{k+1}, \partial D) < \epsilon$ then

$\text{sortie}(y_0) \leftarrow$ projection de y_{k+1} sur le bord ∂D .

$\text{temps_sortie} \leftarrow \tau_{S_k}$

return test, temps_sortie, sortie(y_0)

else

$k \leftarrow k + 1$

end if

end loop

Remarque. Du fait que la fonction κ^2 est nulle sur le domaine Ω_{int} et constante et strictement positive dans le domaine $\Omega_{\text{ext}} \cap D$, la particule admet des trajectoires browniennes dans le domaine Ω_{int} et browniennes tuées dans le domaine Ω_{ext} .

3.3. Différents algorithmes probabilistes de simulation et d'approximation

Notons N_ϵ le nombre aléatoire d'étapes dans l'algorithme, S_k l'événement «la particule est vivante à l'étape k de l'algorithme de marche sur les sphères», τ_i le temps d'atteinte de la sphère $S(y_i, r_i)$ à l'étape i , $t_1 = \text{temps_sortie} = \tau_{N_\epsilon}$, $\text{sortie}(y_0)$ la position de sortie de l'algorithme et y_{N_ϵ} le dernier point de l'algorithme avant projection sur le bord Γ on a alors le lemme suivant.

Lemme 3.3.4. *Pour y_0 dans le domaine Ω_{ext} , on a*

$$u(t, y_0) = \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{S_{N_\epsilon}\}} u(t - t_1, \text{sortie}(y_0))] + O(\epsilon).$$

Démonstration du lemme 3.3.4. En effet, pour tout $k \geq 1$,

$$u(t, y_0) = \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{S_1\}} u(t - \tau_1, y_1)] = \dots = \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{S_{k \wedge N_\epsilon}\}} u(t - \tau_{k \wedge N_\epsilon}, y_{k \wedge N_\epsilon})]$$

d'où par convergence dominée,

$$\begin{aligned} u(t, y_0) &= \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{S_{N_\epsilon}\}} u(t - t \wedge t_{N_\epsilon}, y_{N_\epsilon})] \\ &= \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{S_{N_\epsilon}\}} (u(t - t \wedge t_{N_\epsilon}, y_{N_\epsilon}) - u(t - t \wedge t_{N_\epsilon}, \text{sortie}(y_0)))] \\ &\quad + \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{S_{N_\epsilon}\}} u(t - t \wedge t_{N_\epsilon}, \text{sortie}(y_0))], \end{aligned}$$

or

$$|u(t - t \wedge t_{N_\epsilon}, y_{N_\epsilon}) - u(t - t \wedge t_{N_\epsilon}, \text{sortie}(y_0))| \leq \epsilon \|\nabla u\|_{L^\infty([0, t] \times \mathcal{V}_\epsilon(\Gamma))},$$

où $\mathcal{V}_\epsilon(\Gamma)$ est le voisinage de Γ de taille ϵ . On peut alors conclure grâce aux bornes du théorème 3.1.1 et à la compacité de la surface Γ . \square

3.3.2. Algorithme de simulation de la solution u

Nous donnons dans cette partie un exemple d'algorithme simulant la solution u de l'équation (3.7). Cet algorithme générique copie l'interprétation probabiliste du théorème 3.2.1. Nous introduisons une bande de largeur η entourant la frontière, et nous approchons la position de sortie de cette bande en repoussant hors de la bande la particule à une position aléatoire. L'algorithme à sauts symétriques normaux donné dans [BCMT10] repousse par exemple la particule à une distance fixe dans la direction normale à la surface aléatoirement dans Ω_{int} ou Ω_{ext} . Nous présentons dans la section suivante ces algorithmes et renvoyons à [MS04, Sim08, BCMT10, LM10] pour des discussions approfondies sur les manières de simuler la position de sortie de la bande et l'ordre d'erreur des simulations obtenues.

Soit $(A_x, B_x)_{x \in \Gamma}$ une famille de variables aléatoires où A_x est à valeurs dans \mathbb{R}^3 et B_x dans $\{0, 1\}$. L'indice x représente la position de X sur Γ , le vecteur aléatoire A_x représente la position où la particule est repoussée pour simuler la sortie de la bande et $B_x = 0$ si et seulement si la particule est tuée avant ce remplacement. On note dans l'algorithme $\text{sortie}(x)$ la position de sortie résultant de l'algorithme de marche sur les sphères arrêtée.

Algorithme 3.2 Algorithme générique

```

Soit  $x_0 \in \Omega_{\text{int}}$ ,  $t \in \mathbb{R}^+$ .
 $k \leftarrow 0$ ,  $score \leftarrow 0$ 
loop
  if  $x_k \in \Omega_{\text{int}}$  then
     $(\tau'_k, \text{sortie}(x_k)) = \text{SWOS}(t - \tau_k)$ 
     $score \leftarrow score - u_0(t - \tau'_k, \text{sortie}(x_k))$ ,
    if  $\tau'_k = t$  then
      return  $t, score$ 
    end if
  else
     $test, t_k, \text{sortie}(x_k) = \text{SWOS}(\bar{\kappa}^2/2\epsilon_{\text{ext}}, t - \tau'_k)$ 
    if  $test$  then
      return  $t_k, score$ 
    end if
    Soit  $(A_k, B_k)$  une variable aléatoire indépendante de toutes les précédentes
    distribuée comme  $(A_{\text{sortie}(x_k)}, B_{\text{sortie}(x_k)})$ .
    if  $B_k$  then
      return  $t_k, score$ 
    else if  $t_k = t$  then
       $score \leftarrow score + h(\text{sortie}(x_k))$ 
      return  $t, score$ 
    end if
  end if
   $x_{k+1} \leftarrow \text{sortie}(X_k) + A_k$ 
  if  $x_{k+1} \in \Omega_{\text{int}}$  then
     $\tau_{k+1} \leftarrow t_k$ 
     $score \leftarrow score + u_0(t - \tau_{k+1}, x_{k+1})$ 
  end if
   $k \leftarrow k + 1$ 
end loop

```

Dans la suite de ce chapitre, nous adoptons les notations suivantes. Nous écrivons dans les résultats suivants \bar{u} pour désigner la variable *score* et \bar{X} le processus constant par morceaux défini par la suite alternée des positions x_k et $\text{sortie}(x_k)$ de l'algorithme 1.1. Le résultat \bar{u} est une solution approchée de l'équation aux dérivées partielles (3.7) obtenue à l'aide du processus discrétisé \bar{X} approchant le processus X solution de l'équation (2.14). Nous étudions dans la suite l'erreur faible commise par la discrétisation du processus.

3.4. Analyse de l'erreur faible

Notons L_k , pour k supérieur ou égal à un, l'événement «*la particule est vivante à l'état x_k* ».

Lemme 3.4.1. *On a l'inégalité*

$$\begin{aligned} & \sup_{z \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} (\bar{u} - u + u_0)(s, z) \\ & \leq \sup_{x \in \Gamma, s \in [0, t]} \frac{|\mathbb{E}[B_x u(s, x + A_x)] - u(t, x)| + \epsilon \|\nabla u\|_{L^\infty}}{1 - \mathbb{E}[B_x \mathbf{1}_{\{x + A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}}] + \mathbb{E}[B_x \mathbf{1}_{\{x + A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}}] \mathbb{E}[\mathbf{1}_{\{L_1\}} | x_0 = x + A_x]]}. \end{aligned}$$

On a de plus le théorème suivant :

Théorème 3.4.2. *Supposons*

$$\mathbb{E}[\|A_x\|^2] = O(h^2) \quad , \quad \mathbb{P}\{B_{x,t} = 0\} = O(h^2), \quad (3.9)$$

$$\mathbb{E}[\nabla^{\text{int}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x + A_x \in \Omega_{\text{int}}\}} + \nabla^{\text{ext}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x + A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}}] = O(h^2) \quad (3.10)$$

et que l'on peut choisir η petit tel que pour tout x sur la surface Γ , et pour une constante δ strictement positive, on ait

$$\mathbb{P}\{|\rho(x + A_x)| \in [\eta h, \eta^{-1} h]\} \geq \delta. \quad (3.11)$$

Alors l'erreur faible de l'algorithme de simulation générique est en $O(h + \epsilon/h)$:

$$\sup_{x_0 \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} |\bar{u}(s, x_0) - (u - u_0)(s, x_0)| = O(h + \epsilon/h)$$

Remarque. Soulignons aussi que l'on peut prendre $B = 1$ presque sûrement dans la démonstration, mais que cela peut être important dans le cas on l'on souhaite obtenir un algorithme d'ordre supérieur. Les conditions de transmission (3.2) se retranscrivent quant à elles sous la forme de l'équation (3.10).

Les hypothèses portant sur les moments des variables aléatoires A et B sont vérifiées dans le cas des algorithmes de type «SNJ», «ANJ», «UANJ» ou «NTJ» que nous présentons brièvement [BCMT10].

SNJ Dans l'algorithme à saut normal symétrique (*Symmetric Normal Jump SNJ*), la particule est repoussée de la manière suivante

$$x + A_x = \begin{cases} x + h\vec{n}(x) & \text{avec probabilité } \frac{\epsilon_{\text{ext}}}{\epsilon_{\text{int}} + \epsilon_{\text{ext}}}, \\ x - h\vec{n}(x) & \text{avec probabilité } \frac{\epsilon_{\text{int}}}{\epsilon_{\text{int}} + \epsilon_{\text{ext}}}. \end{cases}$$

L'algorithme «SNJ» peut s'étendre des manières suivantes.

ANJ Une première extension est l'algorithme à saut normal asymétrique (*Asymmetric Normal Jump ANJ*) de paramètre α pris strictement positif

$$x + A_x = \begin{cases} x + \alpha h\vec{n}(x) & \text{avec probabilité } \frac{\epsilon_{\text{ext}}}{\alpha \epsilon_{\text{int}} + \epsilon_{\text{ext}}}, \\ x - h\vec{n}(x) & \text{avec probabilité } \frac{\alpha \epsilon_{\text{int}}}{\alpha \epsilon_{\text{int}} + \epsilon_{\text{ext}}}. \end{cases}$$

Le choix des probabilités est donné par le développement suivant de la solution u (équation (3.10))

$$(\epsilon_{\text{ext}} + \alpha\epsilon_{\text{int}})u(x) = \epsilon_{\text{ext}}u(x + \alpha h\vec{n}(x)) + \alpha\epsilon_{\text{int}}(x - h\vec{n}(x)) + O(h^2).$$

En choisissant le paramètre α strictement plus grand que 1, cet algorithme a l'avantage de repousser plus loin dans le domaine extérieur la particule et ainsi d'augmenter les chances de mort. Le gain numérique se fait cependant au détriment du biais de l'algorithme.

UANJ Une deuxième extension est l'algorithme à saut normal asymétrique non-biaisé. Cet algorithme tire parti de la géométrie de la molécule qui se présente sous forme d'une réunion de sphères. Il est conçu afin de supprimer tout le biais (hors biais induit par le paramètre ϵ) de l'algorithme dans le cas d'une molécule constituée d'une seule sphère. Nous le présentons dans ce cas particulier et renvoyons à [BCMT10] pour le cas général. Supposons donc que le domaine intérieur Ω_{int} soit une boule $B(0, R)$ de rayon R strictement positif. Fixons un point x de la surface Γ . Notons $\tau_{h,\alpha}$ le temps de sortie défini par

$$\tau_{h,\alpha} := \inf \{t \geq 0 \mid |X_t| = R - h \text{ ou } |X_t| = R + \alpha h\}$$

et notons $\tau_{h,\alpha}^{\text{ext}}$ la quantité de temps que le processus X a passé à l'extérieur

$$\tau_{h,\alpha}^{\text{ext}} := \int_0^{\tau_{h,\alpha}} \mathbf{1}_{\{X_t \in \Omega_{\text{ext}}\}} dt.$$

La distribution jointe du couple $(|X_{\tau_{h,\alpha}}|, \exp(-\bar{\kappa}^2 \tau_{h,\alpha}^{\text{ext}}))$ est indépendante de la position de départ x et connue [BCMT10]. L'étape de projection hors de la bande \mathcal{N} se fait de la manière suivante :

- Avec probabilité $\mathbb{P}_x \{|X_{\tau_{h,\alpha}}| = R - h\}$, on pose $x + A_x = x - h\vec{n}(x)$ et on tue la particule avec probabilité $1 - \mathbb{E}_x [\exp(-\bar{\kappa}^2 \tau_{h,\alpha}^{\text{ext}}) \mid |X_{\tau_{h,\alpha}}| = R - h]$.
- Sinon, on pose $x + A_x = x + \alpha h\vec{n}(x)$ et on tue la particule avec probabilité $1 - \mathbb{E}_x [\exp(-\bar{\kappa}^2 \tau_{h,\alpha}^{\text{ext}}) \mid |X_{\tau_{h,\alpha}}| = R + \alpha h]$.

Ce qui permet de retrouver à nouveau les conditions données dans les équations (3.9) et (3.10).

NTJ La dernière catégorie d'algorithme proposée dans [BCMT10] utilise des sauts non plus uniquement dans la direction normale à la surface Γ mais aussi dans des directions plus latérales. Nous renvoyons à [BCMT10] pour une présentation complète de ces algorithmes.

Nous donnons en corollaire immédiat du théorème 3.4.2 le résultat principal de ce chapitre. Ce corollaire donne une estimation de l'erreur faible de l'approximation du processus X par le processus simulé \tilde{X} obtenu par le biais de l'algorithme 1.1. Ce résultat est une première étape (cas linéaire) dans l'étude des simulations des solutions de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire à l'aide de l'interprétation probabiliste

par équations stochastiques différentielles rétrogrades. En effet une solution d'équation différentielle stochastique rétrograde à horizon infini est approchée par une solution de l'équation à horizon fini (autrement dit, on approche la solution d'un problème elliptique par la solution d'un problème parabolique à temps long).

Corollaire 3.4.3. *Soit f une fonction vérifiant l'hypothèse 2 du théorème 3.1.1. Nous avons l'estimation suivante de l'erreur faible*

$$\sup_{x_0 \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} |\mathbb{E}_x [f(X_t) - f(\bar{X}_t)]| = O(h + \epsilon/h),$$

où \bar{X}_t est la loi de la variable aléatoire obtenue par le biais de l'algorithme SWOS.

Démonstration du corollaire 3.4.3. Application du théorème 3.4.2 avec u_0 et κ pris identiquement nul et en utilisant que dans ce cas la fonction u solution de l'équation est donnée par $u(t, x) = \mathbb{E}_x [f(X_t)]$ (formule de Feynman-Kac donnée dans le théorème 2.3.5). \square

Démonstration du lemme 3.4.1. Soit un réel h strictement positif et petit. Soit $\bar{u}(t, x_0)$ l'espérance de la variable score obtenue par l'algorithme partant de x_0 . Soit un point $x_0 \in \Omega_{\text{int}}$ tel que $0 < h < d(x_0, \Gamma)$, par construction de l'algorithme, nous avons

$$\begin{aligned} \bar{u}(t, x_0) &= \mathbb{E} [-u_0(t - t_1, \text{sortie}(x_0))] \\ &\quad + \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{1}_{\{L_k\}} \mathbf{1}_{\{x_k \in \Omega_{\text{int}}\}} (u_0(t - t_k, x_k) - u_0(t - t_{k+1}, \text{sortie}(x_k))) \right]. \end{aligned}$$

De même, si $x_0 \in \Omega_{\text{ext}}$ est tel que $0 < h < d(x_0, \Gamma)$ nous avons

$$\begin{aligned} \bar{u}(t, x_0) &= \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{1}_{\{L_k\}} \mathbf{1}_{\{x_k \in \Omega_{\text{int}}\}} (u_0(t - t_k, x_k) - u_0(t - t_{k+1}, \text{sortie}(x_k))) \right]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Enfin, si x est sur la frontière Γ , l'expression de \bar{u} est donnée par

$$\begin{aligned} \bar{u}(t, x) &= -u_0(t, x) \\ &\quad + \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{1}_{\{L_k\}} \mathbf{1}_{\{x_k \in \Omega_{\text{int}}\}} (u_0(t - t_k, x_k) - u_0(t - t_{k+1}, \text{sortie}(x_k))) \right] \\ &= -u_0(t, x) \\ &\quad + \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \mathbf{1}_{\{x_1 \in \Omega_{\text{int}}\}} u_0(t - t_1, x_1)] - \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \mathbf{1}_{\{x_1 \in \Omega_{\text{int}}\}} u_0(t - t_2, \text{sortie}(x_1))] \\ &\quad + \mathbb{E} \left[\sum_{k=2}^{\infty} \mathbf{1}_{\{L_k\}} \mathbf{1}_{\{x_k \in \Omega_{\text{int}}\}} (u_0(t - t_k, x_k) - u_0(t - t_{k+1}, \text{sortie}(x_k))) \right] \\ &= -u_0(t, x) + \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \mathbf{1}_{\{x_1 \in \Omega_{\text{int}}\}} u_0(t - t_1, x_1)] + \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \bar{u}(t - t_1, x_1)] \end{aligned}$$

par expression (3.12) sur le domaine extérieur.

Ainsi nous obtenons pour un point x sur la frontière Γ ,

$$\begin{aligned}\bar{u}(t, x) - (u - u_0)(t, x) &= \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \mathbf{1}_{\{x_1 \in \Omega_{\text{int}}\}} u_0(t - t_1, x_1)] + \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \bar{u}(t - t_1, x_1)] - u(t, x)\end{aligned}$$

en exprimant x_1 sous la forme $x + A_x$, nous obtenons,

$$\begin{aligned}\bar{u}(t, x) - (u - u_0)(t, x) &= \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} u_0(t - t_1, x + A_x)] \\ &\quad + \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} \bar{u}(t - t_1, x + A_x)] \\ &\quad + \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \bar{u}(t - t_1, x + A_x)] - u(t, x) \\ &= \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} (\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, x + A_x)] \\ &\quad + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} u(t - t_1, x + A_x)] \\ &\quad + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \bar{u}(t - t_1, x + A_x)] - u(t, x) \\ &= \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} \mathbb{E} [(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x]] \\ &\quad + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} u(t - t_1, x + A_x)] \\ &\quad + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \bar{u}(t - t_1, x + A_x)] - u(t, x).\end{aligned}$$

Or nous avons pour un point $y \in \Omega_{\text{ext}}$,

$$\bar{u}(t, y) = \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{1}_{\{x_k \in \Omega_{\text{int}}\}} \mathbf{1}_{\{L_k\}} (u_0(t - t_k, x_k) - u_0(t - t_{k+1}, \text{sortie}(x_k))) \right]$$

et comme le point $\text{sortie}(y)$ est situé sur Γ nous pouvons écrire

$$\begin{aligned}\bar{u}(s, \text{sortie}(y)) &= \mathbb{E} [-u_0(s, \text{sortie}(y))] \\ &\quad + \mathbb{E} \left[\sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{1}_{\{x_k \in \Omega_{\text{int}}\}} \mathbf{1}_{\{L_k\}} (u_0(s - t_k, x_k) - u_0(s - t_{k+1}, \text{sortie}(x_k))) \right]\end{aligned}$$

d'où la relation suivante pour $y \in \Omega_{\text{ext}}$,

$$\bar{u}(t, y) = \mathbb{E} [\bar{u}(t - t_1, \text{sortie}(y)) + u_0(t - t_1, \text{sortie}(y))].$$

Ainsi nous obtenons en remplaçant y par $x + A_x$ que

$$\begin{aligned}\mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \bar{u}(t - t_1, x + A_x)] &= \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [(\bar{u} + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x]].\end{aligned}$$

Finalement, nous pouvons écrire que pour $x \in \Gamma$

$$\begin{aligned}
 & \bar{u}(t, x) - (u - u_0)(t, x) \\
 &= \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} \mathbb{E} [(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} u(t - t_1, x + A_x) \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \bar{u}(t - t_1, x + A_x) \right] \\
 & \quad - u(t, x) \\
 &= \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} \mathbb{E} [(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} u(t - t_1, x + A_x) \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}}(\bar{u} + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad - u(t, x) \\
 &= \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} \mathbb{E} [(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}}(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} u(t - t_1, x + A_x) \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} u(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad - u(t, x).
 \end{aligned}$$

Le lemme 3.3.4 nous permet alors d'écrire que

$$\begin{aligned}
 & \bar{u}(t, x) - (u - u_0)(t, x) \\
 &= \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} \mathbb{E} [(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}}(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} u(t - t_1, x + A_x) \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} u(t - t_1, x + A_x) \right] - u(t, x) + \epsilon \|\nabla u\|_{L^\infty} \\
 &= \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} \mathbb{E} [(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}}(\bar{u} - u + u_0)(t - t_1, \text{sortie}(x_0)) | x_0 = x + A_x] \right] \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x u(t - t_1, x + A_x) \right] - u(t, x) + \epsilon \|\nabla u\|_{L^\infty} \\
 &\leq \sup_{z \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} (\bar{u} - u + u_0)(s, z) \left(\mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}} \right] \right. \\
 & \quad \left. + \mathbb{E} \left[B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} | x_0 = x + A_x] \right] \right) \\
 & \quad + \mathbb{E} \left[B_x u(t - t_1, x + A_x) \right] - u(t, x) + \epsilon \|\nabla u\|_{L^\infty},
 \end{aligned}$$

et ainsi nous obtenons l'inégalité

$$\begin{aligned} & \sup_{z \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} (\bar{u} - u + u_0)(s, z) \\ & \leq \sup_{z \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} (\bar{u} - u + u_0)(s, z) \left(\mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}}] \right. \\ & \quad \left. + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} | x_0 = x + A_x]] \right) \\ & \quad + \mathbb{E} [B_x u(t - t_1, x + A_x)] - u(t, x) + \epsilon \|\nabla u\|_{L^\infty}. \end{aligned}$$

Cette inégalité s'écrit

$$\begin{aligned} & \sup_{z \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} (\bar{u} - u + u_0)(s, z) \\ & \leq \frac{\mathbb{E} [B_x u(t - t_1, x + A_x)] - u(t, x) + \epsilon \|\nabla u\|_{L^\infty}}{1 - \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}}] + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} | x_0 = x + A_x]]} \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned} & \sup_{z \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} (\bar{u} - u + u_0)(s, z) \\ & \leq \sup_{x \in \Gamma, s \in [0, t]} \frac{|\mathbb{E} [B_x u(s, x + A_x)] - u(t, x)| + \epsilon \|\nabla u\|_{L^\infty}}{1 - \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}}] + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} | x_0 = x + A_x]]}. \end{aligned}$$

Ce qui conclut la démonstration □

Démonstration du théorème 3.4.2. Pour tout x sur la surface Γ ,

$$\begin{aligned} u(s, x + A_x) - u(t, x) \\ = \nabla^{\text{int}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}}\}} + \nabla^{\text{ext}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} + O(\|A_x\|^2). \end{aligned}$$

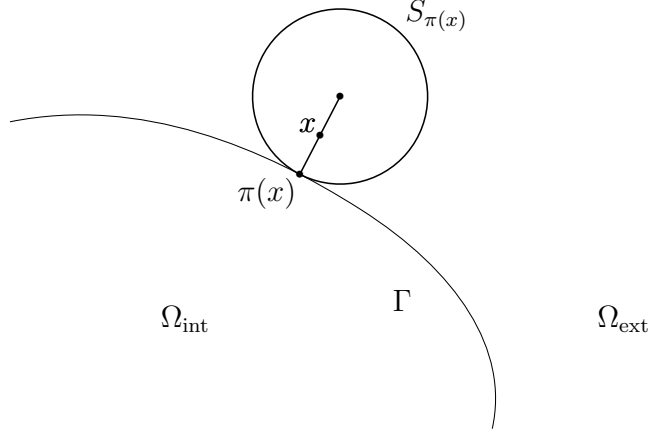
De plus,

$$\begin{aligned} & 1 - \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}} \cup \Gamma\}}] + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} | x_0 = x + A_x]] \\ & = \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}}] + \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{L_1\}} | x_0 = x + A_x]] \\ & = \mathbb{E} [B_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{P} \{L_1^c | x_0 = x + A_x\}] \end{aligned}$$

Finalement, du fait que la norme $\|\nabla u\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)}$ est bornée, et grâce aux hypothèses (3.9) sur les variables aléatoires A et B , nous obtenons alors que

$$\begin{aligned} & \sup_{z \in \Omega_{\text{int}}, s \in [0, t]} (\bar{u} - u + u_0)(s, z) \\ & \leq \sup_{x \in \Gamma, s \in [0, t]} \frac{\mathbb{E} [\nabla^{\text{int}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}}\}} + \nabla^{\text{ext}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}}] + O(h^2 + \epsilon)}{\mathbb{E} [\mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{P} \{L_1^c | x_0 = x + A_x\}] + O(h^2)}. \end{aligned}$$

Minorons maintenant la probabilité conditionnelle $\mathbb{P}\{L_1^c | x_0 = x + A_x\}$. La propriété de sphère extérieure de la surface Γ nous donne l'existence d'un réel r strictement positif tel que, pour tout point x placé sur la surface Γ , la sphère extérieure tangente à Γ au point x et de rayon r n'ait comme unique point d'intersection avec Γ que le point x .



Soit un point x dans le domaine extérieur à une distance $d(x, \Gamma)$ de la surface Γ comprise entre ϵ et r . Rappelons que l'algorithme SWOS fait intervenir un mouvement brownien de dimension 3 que l'on note B . Introduisons le temps de sortie τ_x de ce Brownien B de la boule $S_{\pi(x)}$, défini par

$$\tau_x = \inf \{t \geq 0 | x + B_t \notin S_{\pi(x)}\}.$$

Pour T' positif, la probabilité que l'événement L_1 se produise, c'est-à-dire que la particule brownienne ne soit pas tuée avant l'infimum de T' et de l'instant d'atteinte de la surface Γ est majorée par la probabilité que la particule brownienne sorte de la boule $S_{\pi(x)}$ avant d'être tuée. Ainsi

$$\mathbb{P}\{L_1^c | x_0 = x + A_x\} \geq 1 - \mathbb{P}\{\tau_{x+A_x} \leq \theta\}$$

où θ est une variable aléatoire indépendante de B suivant une loi exponentielle de paramètre $\frac{\bar{\kappa}^2}{2\epsilon_{\text{ext}}}$.

En utilisant la formule 1.1.2 de [BS02] qui donne la probabilité qu'un Bessel de dimension 3 partant de $r - d(x, \Gamma)$, tué selon une loi exponentielle sorte d'une boule de rayon $r - \epsilon$ avant son instant de mort, nous obtenons que

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}\{L_1^c | x_0 = x\} \\ & \geq 1 - \mathbb{P}\{\tau_x \leq \theta\} \\ & = 1 - \frac{(r - \epsilon) \sinh((r - d(x, \Gamma))\bar{\kappa}/\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}})}{(r - d(x, \Gamma)) \sinh((r - \epsilon)\bar{\kappa}/\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}})} \\ & \geq 1 - \frac{r \sinh((r - d(x, \Gamma))\bar{\kappa}/\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}})}{(r - d(x, \Gamma)) \sinh(r\bar{\kappa}/\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}})}. \end{aligned}$$

En utilisant l'hypothèse (3.11) et en reportant dans l'expression de

$$\mathbb{E} \left[\mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{P} \{L_1^c | x_0 = x + A_x\} \right],$$

nous obtenons pour une constante C strictement positive

$$\begin{aligned} & \mathbb{E} \left[\mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{P} \{L_1^c | x_0 = x + A_x\} \right] \\ & \geq \mathbb{E} \left[\mathbf{1}_{\{|\rho(x+A_x)| \in [\eta h, \eta^{-1} h]\}} \mathbb{P} \{L_1^c | x_0 = x + A_x\} \right] \\ & \geq \frac{r\delta}{\sinh(r\bar{\kappa}/\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}})} \left(\frac{\sinh(r\bar{\kappa}/\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}})}{r} - \frac{\sinh((r - \eta^{-1}h)\bar{\kappa}/\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}})}{r - \eta^{-1}h} \right) \\ & \geq Ch. \end{aligned}$$

On déduit alors de l'expression précédente et de l'hypothèse (3.10) que

$$\frac{\mathbb{E} \left[\nabla^{\text{int}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{int}}\}} + \nabla^{\text{ext}} u(x) \cdot A_x \mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \right]}{\mathbb{E} \left[\mathbf{1}_{\{x+A_x \in \Omega_{\text{ext}}\}} \mathbb{P} \{L_1^c | x_0 = x + A_x\} \right] + O(h^2)} = O(h + \epsilon/h)$$

et donc que

$$\mathbb{E} \left[\sup \bar{u}(x_0) - (u - u_0)(x_0) \right] = O(h + \epsilon/h),$$

ce qui conclut la démonstration. □

Chapitre 4.

Interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire elliptique

Nous établissons dans ce chapitre un résultat d'existence, d'unicité et de régularité de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire [BBC06] nous permettant de montrer que cette unique solution admet une représentation probabiliste en terme d'équations différentielles stochastiques rétrogrades [PP92] à temps final aléatoire et à coefficient non strictement monotone.

L'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire est utile en simulation moléculaire. Elle modélise le comportement du potentiel électrostatique d'un système moléculaire composé d'une molécule plongée dans un solvant. Elle fait partie de la catégorie des modèles à solvant implicite, c'est-à-dire que la contribution du solvant au potentiel électrostatique se fait à l'aide d'une contribution générale (section 2.2.1). L'équation de Poisson-Boltzmann (2.8)

$$-\nabla \cdot (\epsilon(x) \nabla u(x)) + \kappa^2(x) \sinh \{u(x)\} = g(x), \quad x \in \mathbb{R}^3 \quad (4.1)$$

regroupe trois points de difficultés mathématiques : la discontinuité des coefficients de l'équation en particulier du terme sous forme divergence, la singularité de son terme source $g = \rho_m$ (cf. (2.6)) s'exprimant sous la forme d'une combinaison linéaire de mesures de Dirac et sa non-linéarité en \sinh .

La difficulté inhérente à la discontinuité des coefficients de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire a en partie été traitée dans [BCMT10]. Les auteurs y fournissent une interprétation probabiliste des opérateurs sous forme divergence à coefficient discontinu (2.11). Les principaux résultats de cet article sont en partie énoncés dans la section 2.3. Rappelons ici que l'interprétation probabiliste proposée de l'opérateur \mathcal{L} se fait à l'aide de la solution faible X^x de la diffusion (2.14) faisant intervenir un terme de temps local.

La singularité du terme source se présentant comme une combinaison linéaire de mesures de Dirac se traite de manière classique dans la section 4.1. Nous exprimons la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann (4.1) comme la somme d'une fonction singulière explicite et de la solution d'une équation de Poisson-Boltzmann à terme source régularisé (4.3). Nous nous attachons dans la suite à donner une interprétation probabiliste sous forme d'équations différentielles stochastiques rétrogrades de cette équation.

La nouvelle interprétation probabiliste que nous proposons nécessite d'élargir des résultats d'unicité portant sur les solutions d'équations différentielles stochastiques rétrogrades [Par99, BDH⁺03]. Aussi, après avoir introduit une équation de Poisson-Boltzmann à terme source régulier (4.3), nous entamons ce chapitre en montrant un résultat d'existence et d'unicité pour les équations différentielles stochastiques rétrogrades de générateur non strictement monotone (section 4.2). Soulignons ici que seule la partie unicité de ce résultat est utile dans la démonstration de notre résultat principal.

Cette interprétation probabiliste pourrait permettre le développement de nouvelles méthodes numériques probabilistes pour la simulation des solutions de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire (4.1). Les méthodes numériques actuelles sont basées sur des méthodes d'éléments finis [CHX07] dont la complexité croît avec la dimension. Les méthodes probabilistes deviennent compétitives face aux méthodes numériques pour les équations aux dérivées partielles à partir de la dimension trois. Il restera cependant à adapter les méthodes numériques de simulation d'équations différentielles stochastiques rétrogrades [Che97, BPP05, DM06, BET09, GL10, BL12] au cas de l'équation de Poisson-Boltzmann (4.1) et vérifier leur réelle efficacité. Notons aussi que l'analyse stochastique des solutions de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire (4.1) peut aussi permettre d'obtenir des estimations *a priori*.

4.1. Traitement de la singularité du terme source

La singularité du terme source se traite en décomposant la solution comme la somme d'une fonction connue singulière et de la solution d'une équation à terme source régulier. La régularisation suivante est proposée dans [BCMT10].

Soient χ une fonction \mathcal{C}^∞ à support compact inclus dans Ω_{int} vérifiant $\chi(x) = 1$ au voisinage des points $\{x_1, \dots, x_N\}$ et la fonction $u_0 = \sum_i G_i$ où les fonctions G_i

$$G_i(x) = \frac{1}{4\pi} \frac{q_i}{\epsilon_{\text{int}}} \frac{1}{|x - x_i|}, \quad x \in \mathbb{R}^3$$

vérifient la relation suivante dans \mathbb{R}^3

$$-\nabla \cdot (\epsilon_{\text{int}} \nabla G_i) = q_i \delta_i.$$

La fonction G_i est la fonction de Green associée à la masse de Dirac positionnée en x_i . Définissons la fonction \mathcal{C}^∞ à support compact inclus dans Ω_{int}

$$\tilde{g}(x) = \epsilon_{\text{int}} (u_0(x) \Delta \chi(x) + \nabla u_0(x) \cdot \nabla \chi(x)), \quad x \in \mathbb{R}^3. \quad (4.2)$$

On étudie alors, pour x dans \mathbb{R}^3 , $v(x) = u(x) - \chi(x)u_0(x)$, solution de l'équation que l'on appellera dans la suite *équation de Poisson-Boltzmann à terme source régularisé*

$$-\nabla \cdot (\epsilon(x) \nabla v(x)) + \kappa^2(x) \sinh(v(x)) = \tilde{g}(x), \quad x \in \mathbb{R}^3. \quad (4.3)$$

4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones

Nous donnons dans la section 4.2.1, un résultat général d'existence et d'unicité de solution d'équations différentielles stochastiques rétrogrades monotones (théorème 4.2.3), que nous appliquons dans la section 4.2.3 pour obtenir une interprétation probabiliste de la solution à l'équation de Poisson-Boltzmann régularisée (4.3).

Tout au long de cette section, considérons un mouvement brownien B de dimension d défini sur un espace de probabilité filtré $(\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}, \mathbb{P})$, où $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ est la filtration naturelle augmentée de B .

4.2.1. ÉDSR monotones

Soient τ un temps d'arrêt mesurable par rapport à $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ (éventuellement infini), ξ une variable aléatoire mesurable par rapport à \mathcal{F}_τ et f une application de $\Omega \times \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{k \times d}$ dans \mathbb{R}^k progressivement mesurable.

Définition 4.2.1. Une solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde de paramètres (τ, ξ, f) est un couple de processus progressivement mesurables (Y, Z) à valeurs dans $\mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{d \times k}$, vérifiant

1. l'appartenance des applications $t \rightarrow \mathbf{1}_{\{t \leq \tau\}} f(t, Y_t, Z_t)$ et $t \rightarrow Z_t$ à $L^1_{\text{loc}}(0, \infty)$ et $L^2_{\text{loc}}(0, \infty)$ respectivement,
2. la relation $Y_{t \wedge \tau} = Y_{T \wedge \tau} + \int_{t \wedge \tau}^{T \wedge \tau} f(s, Y_s, Z_s) ds - \int_{t \wedge \tau}^{T \wedge \tau} Z_s dB_s$ pour tous temps t et T tels que $0 \leq t \leq T$,
3. les égalités $Y_t = \xi$ et $Z_t = 0$ sur l'événement $\{t \geq \tau\}$.

On appelle l'application f le *générateur* de l'équation.

Définition 4.2.2. Pour $\lambda(\cdot)$ processus progressivement mesurable, la solution (Y, Z) est dite dans $L^2_{\lambda(\cdot)}$ si

$$\|(Y, Z)\|_{\lambda(\cdot)}^2 := \mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t \leq \tau} e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 + \int_0^\tau e^{\int_0^t \lambda(s) ds} (\|Y_t\|^2 + \|Z_t\|^2) dt \right] < \infty.$$

Supposons que

(h1) le générateur f vérifie les propriétés suivantes :

- a) **continuité** : l'application $y \in \mathbb{R}^k \rightarrow f(t, y, z)$ est continue presque sûrement pour tout $(t, z) \in [0, T] \times \mathbb{R}^{k \times d}$;
- b) **Lipschitz** : pour tout $(t, z, z') \in [0, T] \times \mathbb{R}^{k \times d} \times \mathbb{R}^{k \times d}$, pour tout $y \in \mathbb{R}^k$ presque sûrement,

$$|f(t, y, z) - f(t, y, z')| \leq K(t) \|z - z'\|$$

avec K processus progressivement mesurable borné, majoré par une constante \bar{K} ;

c) **monotonie** : pour tout $(t, y, y', z) \in [0, T] \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{k \times d}$ presque sûrement,

$$\langle y - y', f(t, y, z) - f(t, y', z) \rangle \leq \mu(t) |y - y'|^2$$

avec μ processus progressivement mesurable borné, majoré par une constante $\bar{\mu}$;

d) **intégrabilité** :

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\tau e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |f(t, 0, 0)|^2 dt \right] < \infty,$$

pour un processus λ progressivement mesurable vérifiant

$$\lambda(t) - 2\mu(t) - K^2(t) > \bar{\lambda} > 0, \quad t > 0;$$

e) pour tout réel $r > 0$ et tout entier $n \in \mathbb{N}^*$,

$$\sup_{|y| \leq r} |f(t, y, 0) - f(t, 0, 0)| \in L^1([0, n] \times \Omega, dt \otimes \mathbb{P});$$

(h2) la condition finale ξ est une variable aléatoire \mathcal{F}_τ -mesurable vérifiant les deux inégalités

$$\mathbb{E} \left[e^{\int_0^\tau \lambda(s) ds} |\xi|^2 \right] < \infty$$

et

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\tau e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |f(t, e^{-1/2 \int_0^t \tilde{\lambda}(s) ds} \bar{\xi}_t, e^{-1/2 \int_0^t \tilde{\lambda}(s) ds} \bar{\eta}_t)|^2 dt \right] < \infty, \quad (4.4)$$

où $\tilde{\lambda}(t) := 2\mu(t) - K^2(t)$, $\bar{\xi} = e^{\int_0^\tau \tilde{\lambda}(s) ds} \xi$, $\bar{\xi}_t = \mathbb{E}[\bar{\xi} | \mathcal{F}_t]$ et $\bar{\eta}$ processus prévisible vérifiant

$$\begin{aligned} \bar{\xi} &= \mathbb{E}[\bar{\xi}] + \int_0^\infty \bar{\eta}_t dB_t, \\ \mathbb{E} \left[\int_0^\infty |\bar{\eta}_t|^2 dt \right] &< \infty. \end{aligned}$$

Remarque. Pour plus de commodité, nous notons dans la suite « \cdot » le produit scalaire « $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ».

Nous nous proposons dans la suite d'établir le résultat suivant :

Théorème 4.2.3. *Sous les hypothèses (h1) et (h2), il existe une unique solution (Y, Z) à l'équation différentielle stochastique rétrograde de paramètres (τ, ξ, f) vérifiant l'inégalité suivante,*

$$\|(Y, Z)\|_{\lambda(\cdot)}^2 \leq C \mathbb{E} \left[e^{\int_0^\tau \lambda(s) ds} |\xi|^2 + \int_0^\tau e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |f(t, 0, 0)|^2 dt \right]. \quad (4.5)$$

4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones

Remarque. Dans [BDH⁺03], P. Briand, B. Delyon, Y. Hu, E. Pardoux et L. Stoica démontrent un résultat d'existence et d'unicité des solutions L^p d'une équation différentielle stochastique rétrograde à temps terminal aléatoire basé sur la démonstration du théorème 4.1 de [Par99]. Ce résultat est vérifié sous des hypothèses de constance des processus μ , K et λ .

Cependant ce résultat ne s'applique pas en l'état dans le cas de l'équation de Poisson-Boltzmann régularisée (4.3), dont l'équation différentielle stochastique rétrograde associée est donnée par

$$Y_t^x = Y_T^x + \int_t^T (\tilde{g}(X_s^x) - \kappa^2(X_s^x) \sinh Y_s^x) ds - \int_t^T Z_s^x dB_s,$$

pour tous temps t, T vérifiant $0 \leq t \leq T$, et pour X^x solution faible de l'équation (2.14), du fait d'une part des discontinuités de ϵ (que nous traitons dans la section 4.2.3) et d'autre part des hypothèses de *monotonie* et d'*intégrabilité* du théorème 4.1 de [Par99] qui demandent essentiellement à la constante μ d'être strictement positive. Or, comme la fonction κ est nulle sur Ω_{int} , le meilleur choix de μ est nul dans le cas de l'équation de Poisson-Boltzmann régularisée (4.3), ce qui ne permet pas de vérifier l'hypothèse d'intégrabilité.

Cependant, le générateur $x, y \rightarrow \tilde{g}(x) - \kappa^2(x) \sinh y$ est monotone (non strictement) puisque la fonction κ est strictement positive hors de l'ouvert borné d'intérieur non vide Ω_{int} . Ainsi, la transience du processus X^x défini en (2.14) (processus «*forward*» de l'équation différentielle stochastique rétrograde) nous a incité à affaiblir les hypothèses en permettant à la constante de monotonie de dépendre du temps, et plus particulièrement dans le cas de Poisson-Boltzmann, à dépendre de la position du processus X^x solution faible de (2.14).

Notre démonstration est proche de celles de Pardoux et Briand *et al.* [Par99, BDH⁺03], la principale différence résidant dans le traitement de la dépendance en temps des constantes.

Nous utilisons à plusieurs reprises le lemme suivant démontré à la fin de cette sous-section.

Lemme 4.2.4. *Soit un couple (Y, Z) tel que le processus $\left(\int_{t \wedge \tau}^{\theta \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \right)_{\theta \geq 0}$ soit une martingale et tel que*

$$\begin{aligned} & e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(s) ds} |Y_{t \wedge \tau}|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (\bar{\lambda} |Y_r|^2 + \bar{\rho} \|Z_r\|^2) dr \\ & \leq e^{\int_0^{\tau} \lambda(s) ds} |\xi|^2 + C \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |f_r|^2 dr - 2 \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \end{aligned} \quad (4.6)$$

avec $(f_s)_s$ un processus progressivement mesurable par rapport à $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$, $\bar{\lambda}$ et $\bar{\rho}$ stricte-

ment positifs. Alors il existe une constante C positive telle que

$$\mathbb{E} \left[\sup_{t \leq r} e^{\int_0^{r \wedge \tau} \lambda(s) ds} |Y_{r \wedge \tau}|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (|Y_r|^2 + \|Z_r\|^2) dr \right] \leq C \mathbb{E} \left[e^{\int_0^{\tau} \lambda(s) ds} |\xi|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |f_r|^2 dr \right].$$

Démonstration de l'unicité dans le Théorème 4.2.3. Prenons deux solutions (Y, Z) et (Y', Z') de l'équation différentielle stochastique rétrograde de paramètres (τ, ξ, f) vérifiant l'inégalité (4.5), et posons $(\Delta Y, \Delta Z) = (Y - Y', Z - Z')$. La formule d'Itô appliquée à $e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |\Delta Y_t|^2$ entre t et T , et l'inégalité

$$\Delta Y_r \cdot (f(r, Y_r, Z_r) - f(r, Y'_r, Z'_r)) \leq \mu(r) |\Delta Y_r|^2 + K(r) |\Delta Y_r| \|\Delta Z_r\|, \quad r > 0$$

permettent de montrer que pour tous réels t et T tels que $0 < t < T$

$$\begin{aligned} e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{t \wedge \tau}|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{T \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (\lambda(r) |\Delta Y_r|^2 + \|\Delta Z_r\|^2) dr \\ \leq e^{\int_0^{T \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{T \wedge \tau}|^2 - 2 \int_{t \wedge \tau}^{T \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \Delta Y_r \cdot \Delta Z_r dB_r \\ + 2 \int_{t \wedge \tau}^{T \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (\mu(r) |\Delta Y_r|^2 + K(r) |\Delta Y_r| \|\Delta Z_r\|) dr. \end{aligned}$$

L'inégalité de Young

$$2K(r) |\Delta Y_r| \|\Delta Z_r\| \leq K^2(r) |\Delta Y_r|^2 + \|\Delta Z_r\|^2,$$

et l'hypothèse $\lambda(\cdot) > 2\mu(\cdot) + K^2(\cdot)$ permettent de déduire que, pour t plus petit que T ,

$$\mathbb{E} \left[e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{t \wedge \tau}|^2 \right] \leq \mathbb{E} \left[e^{\int_0^{T \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{T \wedge \tau}|^2 \right]. \quad (4.7)$$

La même inégalité avec un processus λ' satisfaisant $2\mu(\cdot) + K^2(\cdot) < \lambda'(\cdot)$ et $\lambda'(\cdot) - \lambda(\cdot) < \tilde{\lambda} < 0$ permet d'obtenir

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda'(s) ds} |\Delta Y_{t \wedge \tau}|^2 \right] &\leq \mathbb{E} \left[e^{\int_0^{T \wedge \tau} \lambda'(s) ds} |\Delta Y_{T \wedge \tau}|^2 \right] \\ &\leq e^{T \tilde{\lambda}} \mathbb{E} \left[e^{\int_0^{T \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{T \wedge \tau}|^2 \right]. \end{aligned}$$

L'inégalité (4.5) et l'hypothèse d'intégrabilité (**h1d**) entraînent que l'espérance dans le terme de droite reste bornée lorsque T tend vers l'infini, tandis que l'exponentielle tend vers zéro. Il est ainsi possible de conclure quant à l'unicité. \square

Démonstration de l'existence dans le théorème 4.2.3. Le plan de démonstration est le suivant :

Étape 1 : Construction d'une suite de solutions de problèmes à horizon fini.

4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones

Étape 2 : La suite est uniformément bornée pour la norme $\|\cdot\|_{\lambda(\cdot)}$.

Étape 3 : La suite est de Cauchy pour la norme $\|\cdot\|_{\lambda(\cdot)}$.

Étape 4 : Sa limite est solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde de paramètres (τ, ξ, f) .

Effectuons le changement de variable $\tilde{Y}_t = e^{\int_0^t \tilde{\lambda}(s) ds} Y_t$ afin de se ramener au cas de la condition terminale dans $L^2(\mathbb{P})$. Par souci de simplicité notons

$$\tilde{f}(t, y, z) = f\left(t, e^{-\int_0^t \tilde{\lambda}(s) ds} y, e^{-\int_0^t \tilde{\lambda}(s) ds} z\right).$$

Étape 1 : Construction d'une suite (Y^n, Z^n) .

Pour $n \in \mathbb{N}$, considérons l'équation à horizon fini n

$$Y_t^n = \mathbb{E}[\bar{\xi} | \mathcal{F}_t] + \int_t^n \mathbf{1}_{[0, \tau]}(s) \tilde{f}(s, Y_s^n, Z_s^n) ds - \int_t^n \mathbf{1}_{[0, \tau]}(s) Z_s^n dB_s.$$

Le théorème d'existence et d'unicité à horizon n fini pour les équations différentielles stochastiques rétrogrades monotones de constante $\bar{\mu}$ (théorème 2.4.2) donne l'existence et l'unicité d'une solution (Y^n, Z^n) pour t inférieur à n . Prolongeons cette solution pour t supérieur à n par $Y_t^n = \bar{\xi}_t$, $Z_t^n = \bar{\eta}_t$ définis dans l'hypothèse **(h2)**.

Étape 2 : La suite (Y^n, Z^n) est uniformément bornée pour la norme $\|\cdot\|_{\lambda(\cdot)}$.

Pour ρ et ϵ réels strictement positifs, nous avons l'inégalité :

$$2\langle y, f(t, y, z) \rangle \leq \left(2\mu(t) + \frac{K^2(t)}{\rho} + \epsilon\right) |y|^2 + \rho \|z\|^2 + \frac{1}{\epsilon} |f(t, 0, 0)|^2. \quad (4.8)$$

L'inégalité précédente et la formule d'Itô appliquée à $e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t^n|^2$ donnent

$$\begin{aligned} e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(s) ds} |Y_{t \wedge \tau}^n|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \left(\tilde{\lambda} |Y_r^n|^2 + \bar{\rho} \|Z_r^n\|^2 \right) dr \\ \leq e^{\int_0^{\tau} \lambda(s) ds} |\xi|^2 + \frac{1}{\epsilon} \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |f(r, 0, 0)|^2 dr \\ - 2 \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r^n \cdot Z_r^n dB_r \end{aligned}$$

où nous avons choisi les constantes ρ et ϵ de telle sorte que $\lambda(\cdot) - 2\mu(\cdot) - \rho^{-1}K^2(\cdot) - \epsilon > \tilde{\lambda}$ et $\bar{\rho} = 1 - \rho$ soient strictement positifs.

En appliquant le lemme 4.2.4 avec $f = f(\cdot, 0, 0)$, nous obtenons l'existence d'une constante C positive telle que

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\sup_{t \leq \tau} e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(s) ds} |Y_{t \wedge \tau}^n|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (|Y_r^n|^2 + \|Z_r^n\|^2) dr \right] \\ \leq C \mathbb{E} \left[e^{\int_0^{\tau} \lambda(s) ds} |\bar{\xi}|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |f(r, 0, 0)|^2 dr \right]. \end{aligned}$$

En particulier, nous avons l'inégalité :

$$\|(Y^n, Z^n)\|_{\lambda(\cdot)}^2 \leq C\mathbb{E} \left[e^{\int_0^\tau \lambda(s)ds} |\bar{\xi}|^2 + \int_0^\tau e^{\int_0^r \lambda(s)ds} |\tilde{f}(r, 0, 0)|^2 dr \right].$$

Étape 3 : La suite (Y^n, Z^n) est de Cauchy pour $\|\cdot\|_{\lambda(\cdot)}$.

Choisissons un entier m strictement plus grand que n et posons $\Delta Y_t = Y_t^m - Y_t^n$ et $\Delta Z_t = Z_t^m - Z_t^n$.

Pour t compris entre n et m , nous avons

$$\Delta Y_t = \int_{t \wedge \tau}^{m \wedge \tau} \tilde{f}(s, Y_s^m, Z_s^m) ds - \int_{t \wedge \tau}^{m \wedge \tau} \Delta Z_s dB_s. \quad (4.9)$$

La formule d'Itô pour un tel t donne

$$\begin{aligned} & e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(s)ds} |\Delta Y_{t \wedge \tau}^n|^2 + \int_{t \wedge \tau}^\tau e^{\int_0^r \lambda(s)ds} \left(\tilde{\lambda} |\Delta Y_r^n|^2 + \bar{\rho} \|\Delta Z_r^n\|^2 \right) dr \\ & \leq C \int_{t \wedge \tau}^{m \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s)ds} |\tilde{f}(r, \xi_r, \eta_r)| dr - 2 \int_{t \wedge \tau}^{m \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s)ds} \Delta Y_r \cdot \Delta Z_r dB_r, \end{aligned}$$

où $\lambda(\cdot) - 2\mu(\cdot) - \rho^{-1}K^2(\cdot) - \epsilon > \tilde{\lambda} > 0$ et $\bar{\rho} = 1 - \rho$ strictement positif. L'application du lemme 4.2.4 pour le processus $f = \tilde{f}(\cdot, \xi, \eta)$ et $\xi = 0$ permet d'obtenir :

$$\begin{aligned} & \mathbb{E} \left[\sup_{n \leq t \leq m} e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(\theta) d\theta} |\Delta Y_{t \wedge \tau}|^2 + \int_{n \wedge \tau}^{m \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s)ds} (|\Delta Y_r|^2 + \|\Delta Z_r\|^2) dr \right] \\ & \leq C\mathbb{E} \left[\int_{n \wedge \tau}^\tau e^{\int_0^r \lambda(s)ds} |\tilde{f}(r, \bar{\xi}_r, \bar{\eta}_r)|^2 dr \right]. \quad (4.10) \end{aligned}$$

où le terme de droite tend vers zéro par hypothèse d'intégrabilité.

Pour t inférieur ou égal à n , nous avons

$$\Delta Y_t = \Delta Y_n + \int_{t \wedge \tau}^{n \wedge \tau} \left(\tilde{f}(s, Y_s^m, Z_s^m) - \tilde{f}(s, Y_s^n, Z_s^n) \right) ds - \int_{t \wedge \tau}^{n \wedge \tau} \Delta Z_s dB_s. \quad (4.11)$$

La formule d'Itô permet d'obtenir l'inégalité

$$\begin{aligned} & e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(s)ds} |\Delta Y_{t \wedge \tau}|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{n \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s)ds} (\lambda(r) |\Delta Y_r|^2 + \|\Delta Z_r\|^2) dr \\ & \leq e^{\int_0^{n \wedge \tau} \lambda(s)ds} |\Delta Y_{n \wedge \tau}|^2 - 2 \int_{t \wedge \tau}^{n \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s)ds} \Delta Y_r \cdot \Delta Z_r dB_r \\ & \quad + 2 \int_{t \wedge \tau}^{n \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s)ds} (\mu(r) |\Delta Y_r|^2 + K(r) |\Delta Y_r| \|\Delta Z_r\|) dr. \end{aligned}$$

4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones

Puis l'inégalité de Young pour un réel ρ tel que $0 < \rho < 1$,

$$2K(r)|\Delta Y_r| \|\Delta Z_r\| \leq \frac{K^2(r)}{\rho} |\Delta Y_r|^2 + \rho \|\Delta Z_r\|^2,$$

permet d'obtenir l'inégalité

$$\begin{aligned} e^{\int_0^{t \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{t \wedge \tau}|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{n \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (\tilde{\lambda} |\Delta Y_r|^2 + \bar{\rho} \|\Delta Z_r\|^2) dr \\ \leq e^{\int_0^{n \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{n \wedge \tau}|^2 - 2 \int_{t \wedge \tau}^{n \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \Delta Y_r \cdot \Delta Z_r dB_r, \end{aligned}$$

où les réels $\bar{\rho} = 1 - \rho$ et $\tilde{\lambda}$ sont strictement positifs. Le lemme 4.2.4 avec $f = 0$, $\xi = \Delta Y_{n \wedge \tau}$, et l'inégalité (4.10) entraînent alors que

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\sup_{t \leq r \leq n} e^{\int_0^{r \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{r \wedge \tau}|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{n \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (\tilde{\lambda} |\Delta Y_r|^2 + \bar{\rho} \|\Delta Z_r\|^2) dr \right] \\ \leq \mathbb{E} \left[e^{\int_0^{n \wedge \tau} \lambda(\theta) d\theta} |\Delta Y_{n \wedge \tau}|^2 \right] \\ \leq C \mathbb{E} \left[\int_{n \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^s \lambda(\theta) d\theta} |\tilde{f}(s, \bar{\xi}_s, \bar{\eta}_s)|^2 ds \right]. \end{aligned}$$

et en particulier que, pour $t = 0$

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq r \leq n} e^{\int_0^{r \wedge \tau} \lambda(s) ds} |\Delta Y_{r \wedge \tau}|^2 + \int_0^{n \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (\tilde{\lambda} |\Delta Y_r|^2 + \bar{\rho} \|\Delta Z_r\|^2) dr \right] \\ \leq C \mathbb{E} \left[\int_{n \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |\tilde{f}(r, \bar{\xi}_r, \bar{\eta}_r)|^2 dr \right]. \end{aligned}$$

Conclusion Ainsi, lorsque les entiers n et m tels que $n \leq m$ tendent vers l'infini

$$\|(\Delta Y, \Delta Z)\|_{\lambda(\cdot)} \leq C \mathbb{E} \left[\int_{n \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |\tilde{f}(r, \bar{\xi}_r, \bar{\eta}_r)|^2 dr \right] \rightarrow 0$$

car ξ vérifie la condition d'intégrabilité (4.4). La suite (Y_n, Z_n) est donc de Cauchy pour $\|\cdot\|_{\lambda(\cdot)}$, elle converge donc vers une limite (\tilde{Y}, \tilde{Z}) de norme $\|\cdot\|_{\lambda(\cdot)}$ finie.

Remarque. Notons que la conclusion précédente nous permet d'obtenir une estimation de l'erreur commise en approchant la solution du problème à horizon aléatoire par la solution du problème à horizon fini grand.

Étape 4 : La limite (\tilde{Y}, \tilde{Z}) est solution de l'ÉDSR de paramètres (τ, ξ, f) .

Pour tout entier n dans \mathbb{N} , et tout réels θ et t fixés tels que $\theta \leq t \leq n$, le couple (Y^n, Z^n) vérifie

$$Y_{\theta \wedge \tau}^n = Y_{t \wedge \tau}^n + \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, Y_r^n, Z_r^n) dr - \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} Z_r^n dB_r.$$

En faisant tendre l'entier n vers l'infini dans l'équation, nous souhaitons montrer que le couple limite (\tilde{Y}, \tilde{Z}) vérifie l'équation différentielle stochastique rétrograde

$$\tilde{Y}_{\theta \wedge \tau} = \tilde{Y}_{t \wedge \tau} + \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, \tilde{Y}_r, \tilde{Z}_r) dr - \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{Z}_r dB_r.$$

Les calculs précédents donnent les convergences de

- Y^n vers \tilde{Y} dans $L^2(\mathbb{P})$
- et $\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} Z_r^n dB_r$ vers $\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{Z}_r dB_r$ dans $L^2(\mathbb{P})$.

Il reste donc à vérifier que le terme suivant tend vers zéro lorsque l'entier n tend vers l'infini :

$$\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, Y_r^n, Z_r^n) dr - \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, \tilde{Y}_r, \tilde{Z}_r) dr.$$

Pour cela montrons que :

- a) la suite $\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, Y_r^n, Z_r^n) dr$ est convergente dans $L^1(\mathbb{P})$;
- b) il existe une sous-suite convergeant presque sûrement vers $\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, \tilde{Y}_r, \tilde{Z}_r) dr$.

Étape a : La suite $(\int_{\theta}^{t \wedge \tau} f(s, Y_s^n, Z_s^n) ds)_n$ converge dans $L^1(\mathbb{P})$ pour tous réels θ et t fixés tels que $\theta \leq t$.

Montrons que la suite $(\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, Y_r^n, Z_r^n) dr)_n$ est de Cauchy dans $L^1(\mathbb{P})$. Soient deux entiers n et m vérifiant $n \leq m$, utilisons l'égalité (4.11) :

$$\begin{aligned} \Delta Y_{\theta \wedge \tau} &= \Delta Y_{t \wedge \tau} + \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} (\tilde{f}(r, Y_r^m, Z_r^m) - \tilde{f}(r, Y_r^n, Z_r^n)) ds \\ &\quad - \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \Delta Z_r dB_r \end{aligned}$$

pour obtenir que

$$\begin{aligned} &\mathbb{E} \left[\left| \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, Y_r^n, Z_r^n) - \tilde{f}(r, Y_r^m, Z_r^m) dr \right| \right] \\ &\leq \mathbb{E} [|\Delta Y_{\theta \wedge \tau}|] + \mathbb{E} [|\Delta Y_{t \wedge \tau}|] + \mathbb{E} \left[\left| \int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \Delta Z_r dB_r \right| \right] \\ &\leq \mathbb{E} [|\Delta Y_{\theta \wedge \tau}|] + \mathbb{E} [|\Delta Y_{t \wedge \tau}|] + e^{-\lambda t} \mathbb{E} \left[\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} e^{\lambda t} \|\Delta Z_r\|^2 dr \right] \\ &\leq \mathbb{E} [|\Delta Y_{\theta \wedge \tau}|] + \mathbb{E} [|\Delta Y_{t \wedge \tau}|] + e^{-\lambda t} \mathbb{E} \left[\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} e^{\int_0^t \lambda(s) ds} \|\Delta Z_r\|^2 dr \right] \\ &\rightarrow 0, \text{ lorsque } n \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

La suite $(\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, Y_r^n, Z_r^n) dr)_n$ est donc convergente dans $L^1(\mathbb{P})$.

4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones

Étape b : Il existe une sous-suite de $\left(\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, Y_r^n, Z_r^n) dr \right)_n$ convergeant presque sûrement vers la quantité $\int_{\theta \wedge \tau}^{t \wedge \tau} \tilde{f}(r, \tilde{Y}_r, \tilde{Z}_r) dr$.

Quitte à prendre une sous-suite, la convergence en probabilité de

$$\sup_{0 \leq r \leq \tau} |Y_r^n - \tilde{Y}_r|$$

vers 0 et le fait que les quantités $e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \|Z_r^n\|^2$ et $e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \|Z_r^n\|^2$ soient majorées par un processus dans $L^1(\mathbb{P} \otimes dt)$ permettent d'écrire que, pour une constante C positive et un processus $(C_r)_{r \geq 0}$ dans $L^1(0, +\infty)$, il existe un entier n_0 tel que pour tout entier n supérieur à n_0 , on ait presque sûrement

$$\sup_{0 \leq r \leq t} |Y_r^n| \leq C \quad \text{et} \quad e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \|Z_r^n\|^2 \leq C_r.$$

Ainsi nous pouvons écrire que,

$$\begin{aligned} |f(s, \tilde{Y}_s, \tilde{Z}_s) - f(s, Y_s^n, Z_s^n)| &\leq |f(s, \tilde{Y}_s, \tilde{Z}_s) - f(s, \tilde{Y}_s, 0)| + |f(s, \tilde{Y}_s, 0) - f(s, 0, 0)| \\ &\quad + |f(s, 0, 0) - f(s, Y_s^n, 0)| + |f(s, Y_s^n, 0) - f(s, Y_s^n, Z_s^n)| \\ &\leq \bar{K}(\|\tilde{Z}_s\| + \|\tilde{Z}_s^n\|) + 2 \sup_{|y| \leq C} |f(s, y, 0) - f(s, 0, 0)| \\ &\leq \bar{K}(C_s + e^{-\lambda s}) + 2 \sup_{|y| \leq C} |f(s, y, 0) - f(s, 0, 0)| \end{aligned}$$

Le théorème de convergence dominée par rapport à la mesure de Lebesgue permet alors de conclure que $\int_{\theta}^t f(s, Y_s^n, Z_s^n) ds$ converge presque sûrement vers la quantité $\int_{\theta}^t f(s, \tilde{Y}_s, \tilde{Z}_s) ds$.

Ainsi, la suite $\left(\int_{\theta}^t f(s, Y_s^n, Z_s^n) ds \right)_n$ converge dans $L^1(\mathbb{P})$ vers $\int_{\theta}^t f(s, \tilde{Y}_s, \tilde{Z}_s) ds$ pour tous réels θ et t fixés tels que $\theta \leq t$.

□

Démonstration du lemme 4.2.4. En prenant l'espérance dans l'inégalité (4.6), nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (|Y_s|^2 + \|Z_r\|^2) dr \right] \\ \leq C \left(\mathbb{E} \left[e^{\int_0^{\tau} \lambda(s) ds} |\xi|^2 \right] + \mathbb{E} \left[\int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |f(r, 0, 0)|^2 dr \right] \right). \end{aligned} \quad (4.12)$$

L'inégalité de Burkholder-Davis-Gundy [KS91] appliquée à l'intégrale stochastique

$$2 \int_{t \wedge \tau}^{\theta \wedge \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r$$

donne

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E} \left[\sup_{t \leq \theta \leq \tau} \left| 2 \int_t^{\theta} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \right| \right] \\
 \leq 2C \mathbb{E} \left[\left(\int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{2 \int_0^r \lambda(s) ds} |Y_r|^2 \|Z_r\|^2 dr \right)^{1/2} \right] \\
 \leq 2C \mathbb{E} \left[\sup_{t \leq r \leq \tau} e^{\int_0^r \lambda(s)/2 ds} |Y_r| \left(\int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \|Z_r\|^2 dr \right)^{1/2} \right] \quad (4.13) \\
 \leq \left(\frac{1}{2} \mathbb{E} \left[\sup_{t \leq r \leq \tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |Y_r|^2 \right] + C \mathbb{E} \left[\int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \|Z_r\|^2 dr \right] \right),
 \end{aligned}$$

Ainsi les inégalités (4.6), (4.12) et (4.13) entraînent l'existence d'une constante C positive telle que

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E} \left[\sup_{t \leq r} e^{\int_0^{r \wedge \tau} \lambda(s) ds} |Y_{r \wedge \tau}|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} (|Y_r|^2 + \|Z_r\|^2) dr \right] \\
 \leq C \mathbb{E} \left[e^{\int_0^{\tau} \lambda(s) ds} |\xi|^2 + \int_{t \wedge \tau}^{\tau} e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |f(r, 0, 0)|^2 dr \right].
 \end{aligned}$$

Ce qui conclut la démonstration du lemme 4.2.4. \square

4.2.2. Lien entre ÉDSR et problème elliptique sur \mathbb{R}^d

Rappelons maintenant le lien existant entre équations différentielles stochastiques rétrogrades et problèmes elliptiques semi-linéaires sur \mathbb{R}^d tout entier. Le générateur est ici une fonction dépendante du temps et des aléas par le biais d'un processus X dirigeant l'équation différentielle stochastique rétrograde.

Soit X^x la solution de la diffusion

$$X_t^x = x + \int_0^t b(X_s^x) ds + \int_0^t \sigma(X_s^x) dB_s$$

de générateur infinitésimal

$$L := \frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{ij}(x) \frac{\partial^2}{\partial_i \partial_j} + \sum_i b_i(x) \frac{\partial}{\partial_i}$$

où $a = \sigma \sigma^*$ et b vérifient les conditions usuelles [Par99].

Soit un générateur f de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{k \times d}$ dans \mathbb{R}^k vérifiant les hypothèses suivantes

(H1) mesurabilité : l'application $f(\cdot, y, z)$ est mesurable pour tout $(y, z) \in \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{k \times d}$;

(H2) continuité : l'application $f(x, \cdot, z)$ est continue pour tout $(x, z) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{k \times d}$;

4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones

(H3) **Lipschitz** : $|f(x, y, z) - f(x, y, z')| \leq K(x)\|z - z'\|$ pour tout $(x, z, z') \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{k \times d} \times \mathbb{R}^{k \times d}$, pour tout $y \in \mathbb{R}^k$ avec K fonction mesurable majorée par une constante \bar{K} ,

(H4) **monotonie** : pour tout $(x, y, y', z) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^{k \times d}$

$$\langle y - y', f(x, y, z) - f(x, y', z) \rangle \leq \mu(x)|y - y'|^2$$

avec μ fonction mesurable majorée par une constante $\bar{\mu}$, et

(H5) **intégrabilité** :

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} |f(X_t^x, 0, 0)|^2 dt \right] < \infty$$

où la fonction λ mesurable vérifie $2\mu(x) + K^2(x) < \lambda(x)$ pour tout x dans \mathbb{R}^d ,

(H6) pour tout réel $r > 0$ et tout entier $n \in \mathbb{N}^*$

$$\sup_{|y| \leq r} |f(X_t^x, y, 0) - f(X_t^x, 0, 0)| \in L^1([0, n] \times \Omega, dt \otimes \mathbb{P}).$$

Considérons pour x dans \mathbb{R}^d , l'équation différentielle stochastique rétrograde vérifiant pour tous réels t, T tels que $0 \leq t \leq T$

$$Y_t^x = Y_T^x + \int_t^T f(X_s^x, Y_s^x, Z_s^x) ds - \int_t^T Z_s^x dB_s \quad (4.14)$$

et l'équation aux dérivées partielles elliptique semi-linéaire associée

$$Lu(x) + f(x, u(x), (\nabla u \sigma)(x)) = 0. \quad (4.15)$$

À des fins de simple illustration, nous allons démontrer le résultat de vérification suivant, sans chercher de généralisation aux solutions de viscosité qui demanderaient d'amples développements spécifiques.

Théorème 4.2.5. *Soit u une solution de classe C^2 de l'équation (4.15) vérifiant pour $x \in \mathbb{R}^d$,*

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} \|(\nabla u \sigma)(X_t^x)\|^2 dt \right] < \infty. \quad (4.16)$$

Alors, pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, le couple $(u(X_t^x), (\nabla u \sigma)(X_t^x))_{t \geq 0}$ est une solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde (4.14). En particulier $u(x) = Y_0^x$.

Le lemme suivant que nous prouvons ultérieurement nous est utile dans la démonstration du théorème.

Lemme 4.2.6. *Soit (Y, Z) une solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde (4.14) vérifiant*

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(s) ds} \|Z_t\|^2 dt \right] < \infty,$$

alors

$$\mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t} e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 + \int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 dt \right] < \infty.$$

Démonstration du théorème 4.2.5. Vérifions que le couple

$$(Y_t^x, Z_t^x) := (u(X_t^x), (\nabla u \sigma)(X_t^x))_{t \geq 0}$$

est solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde (4.14). Remarquons tout d'abord que le caractère borné de la solution u et l'hypothèse (4.16) nous permettent de vérifier très facilement que le couple (Y, Z) vérifie la partie (1) de la définition 4.2.1 :

$$t \rightarrow f(X_t^x, u(X_t^x), (\nabla u \sigma)(X_t^x)) \in L_{\text{loc}}^1(0, \infty)$$

et

$$t \rightarrow (\nabla u \sigma)(X_t^x) \in L_{\text{loc}}^2(0, \infty).$$

En effet, pour tout point y tel que $|y| \leq r$,

$$\begin{aligned} |f(x, y, z)| &\leq |f(x, y, z) - f(x, y, 0)| + |f(x, y, 0) - f(x, 0, 0)| + |f(x, 0, 0)| \\ &\leq K \|z\| + \sup_{|y| \leq r} |f(x, y, 0) - f(x, 0, 0)| + |f(x, 0, 0)|. \end{aligned}$$

En choisissant $r = \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |u(x)| < \infty$, on trouve grâce à l'inégalité de Young que, pour tous temps $0 < t_1 < t_2 < \infty$,

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\int_{t_1}^{t_2} |f(X_t^x, Y_t^x, Z_t^x)| dt \right] &\leq K' \mathbb{E} \left[\int_{t_1}^{t_2} e^{-\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} dt \right] \\ &\quad + \mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} \|(\nabla u \sigma)(X_t^x)\|^2 dt \right] \\ &\quad + \mathbb{E} \left[\int_{t_1}^{t_2} \sup_{|y| \leq r} |f(X_t^x, y, 0) - f(X_t^x, 0, 0)| dt \right] \\ &\quad + \mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} |f(X_t^x, 0, 0)|^2 dt \right]. \end{aligned}$$

La première espérance est finie car le processus λ est borné, les trois autres espérances sont bornées par hypothèses sur f et sur $\nabla u \sigma$.

Appliquons au processus $(u(X_t^x))_{t \geq 0}$ la formule d'Itô

$$\begin{aligned} u(X_T^x) - u(X_t^x) &= \int_0^t Lu(X_s^x) ds + \int_0^t (\nabla u \sigma)(X_s^x) dB_s \\ &= - \int_0^t f(X_s^x, u(X_s^x), (\nabla u \sigma)(X_s^x)) ds + \int_0^t (\nabla u \sigma)(X_s^x) dB_s. \end{aligned}$$

ce qui nous permet de vérifier le point (2) de la définition 4.2.1.

Enfin le lemme 4.2.6 nous permet de vérifier que la solution proposée est bien dans $L_{\lambda(\cdot)}^2$, ce qui nous permet d'appliquer la partie unicité du théorème 4.2.3 et de conclure. \square

4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones

Démontrons maintenant le lemme 4.2.6 pour finir la preuve du théorème.

Démonstration du lemme 4.2.6. La formule d'Itô entre t et T donne

$$\begin{aligned}
& e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 + \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Z_r^2 dr + \lambda(t) \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |Y_r|^2 dr \\
& = e^{\int_0^T \lambda(s) ds} |Y_T|^2 + 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot f(r, Y_r, Z_r) dr - 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \\
& \leq e^{\int_0^T \lambda(s) ds} |Y_T|^2 + 2\mu \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |Y_r|^2 dr + 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot f(r, 0, 0) dr \\
& \qquad \qquad \qquad - 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r
\end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned}
& e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 + \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} \|Z_r\|^2 dr + \int_t^T (\lambda(r) - 2\mu(r)) e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |Y_r|^2 dr \\
& = e^{\int_0^T \lambda(s) ds} |Y_T|^2 + 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot f(r, Y_r, Z_r) dr - 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \\
& \leq e^{\int_0^T \lambda(s) ds} |Y_T|^2 + 2 \sup_{0 \leq t \leq T} \left\{ e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t| \right\} \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |f(r, 0, 0)| dr \\
& \qquad - 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \\
& \leq e^{\int_0^T \lambda(s) ds} |Y_T|^2 + 2\delta \sup_{0 \leq t \leq T} \left\{ e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 \right\} + 1/\delta \left(\int_0^T e^{\int_0^r \lambda(s)/2 ds} |f(r, 0, 0)| dr \right)^2 \\
& \qquad - 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \\
& \leq (2\delta + 1) \sup_{0 \leq t \leq T} \left\{ e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 \right\} + 1/\delta \int_0^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} |f(r, 0, 0)|^2 dr \\
& \qquad - 2 \int_t^T e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r
\end{aligned}$$

L'inégalité de Burkholder-Davis-Gundy [KS91] appliquée à la martingale locale $\left(\int_0^t e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \right)_{t \geq 0}$ et l'inégalité de Young permettent d'obtenir

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t \leq T} \left| \int_0^t e^{\int_0^r \lambda(s) ds} Y_r \cdot Z_r dB_r \right| \right] \\
& \leq C \mathbb{E} \left[\left(\int_0^t e^{2 \int_0^r \lambda(s) ds} |Y_r| \|Z_r\| dr \right)^{1/2} \right] \\
& \leq \frac{\delta'}{2} \mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t \leq T} e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 \right] + \frac{C^2}{2\delta'} \mathbb{E} \left[\int_0^T e^{\int_0^t \lambda(s) ds} \|Z_t\|^2 dt \right].
\end{aligned}$$

Ainsi en combinant les deux inégalités et l'hypothèse d'intégrabilité sur Z , nous obtenons

$$\mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t \leq T} e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 + \int_0^T e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 dt \right] < \mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(s) ds} \|Z_t\|^2 dt \right],$$

et ainsi

$$\mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t} e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 + \int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(s) ds} |Y_t|^2 dt \right] < \infty.$$

□

Remarque. Il est aisé de généraliser les résultats précédents au cas d'un problème elliptique avec condition au bord donnée par une fonction g , en introduisant un horizon aléatoire sous forme de temps d'arrêt et une condition terminale aléatoire de la forme $g(X_\tau)$.

4.2.3. ÉDSR monotones associées à l'opérateur \mathcal{L}

Rappelons la définition de l'opérateur \mathcal{L} défini en (2.11) par :

$$\mathcal{L} = \nabla \cdot (\epsilon \nabla),$$

où la fonction ϵ est définie en (2.7). Soit $(\Omega, \mathcal{F}^x, (\mathcal{F}^x)_{t \geq 0}, \mathbb{P}_x, \{B_t; t \geq 0\}, \{X_t^x; t \geq 0\})$ une solution faible de l'équation (2.14)

$$\begin{cases} X_t^x &= x + \int_0^t \sqrt{2\epsilon(X_s^x)} dB_s + \frac{\epsilon_{\text{ext}} - \epsilon_{\text{int}}}{2\epsilon_{\text{ext}}} \int_0^t \vec{n}(X_s^x) dL_s^0(D^x), \\ D_t^x &= \rho(X_t^x). \end{cases}$$

Remarque. Afin d'insister sur la dépendance de la loi de la solution faible X et donc de la solution (Y, Z) de l'équation différentielle stochastique rétrograde en la condition initiale x , nous notons dans cette section X^x la solution faible de l'équation (2.14) et (Y^x, Z^x) la solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde associée.

Traitons maintenant le cas des équations différentielles stochastiques rétrogrades associées à l'opérateur \mathcal{L} . La particularité de ces résultats est que le théorème de base dans la construction des solutions d'équations différentielles stochastiques rétrogrades à horizon fini n'est plus le théorème de représentation des martingales browniennes (*cf.* sous-section 2.4.1) du fait de l'existence d'un terme de temps local dans la diffusion X^x associée à l'opérateur \mathcal{L} .

Considérons l'équation différentielle stochastique rétrograde de paramètres $(\infty, 0, f)$, pour tous temps t, T tels que $0 \leq t \leq T$,

$$Y_t^x = Y_T^x + \int_t^T f(X_s^x, Y_s^x, Z_s^x) ds - \int_t^T Z_s^x dB_s. \quad (4.17)$$

Supposons que le générateur f vérifie les hypothèses (**H1-H6**). Le théorème suivant est un corollaire du théorème 4.2.3 avec $\tau = \infty$ et $\xi = 0$.

4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones

Théorème 4.2.7. *L'équation différentielle stochastique rétrograde (4.17) a une unique solution au sens de la définition 4.2.1, vérifiant*

$$\mathbb{E} \left[\sup_{0 \leq t} e^{\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} |Y_t^x|^2 + \int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} (|Y_t^x|^2 + \|Z_t^x\|^2) dt \right] \leq C \mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} |f(X_t^x, 0, 0)|^2 dt \right].$$

Démonstration. La démonstration repose sur les points clefs suivants :

- l'unicité faible de la solution $(\Omega, (\mathcal{F}^x)_{t \geq 0}, \mathbb{P}_x, \{B_t; t \geq 0\}, \{X_t^x; t \geq 0\})$ de l'équation différentielle stochastique rétrograde (2.14) permet d'invoquer le théorème 4.29 du Chap.III de [JS03]. Celui-ci donne l'existence, pour chaque martingale locale de $(\Omega, \mathcal{F}^x, (\mathcal{F}^x)_{t \geq 0}, \mathbb{P}_x)$, d'un processus $(\tilde{Z}_t^x)_t$ permettant d'écrire cette martingale locale sous la forme d'une intégrale stochastique par rapport à $\int_0^\cdot \sqrt{2\epsilon(X_s^x)} dB_s$. Il est donc possible de reprendre la démonstration constructive donnée dans [Par99] de la solution au problème à horizon fini et de suivre la démonstration donnée dans la section 4.2.1 en se basant sur la construction précédente,
- l'ellipticité uniforme de l'opérateur \mathcal{L} permet ensuite de poser de manière unique $Z_t^x := \tilde{Z}_t^x \sqrt{2\epsilon(X_t^x)}$ et ainsi d'obtenir le second membre de la solution de l'équation différentielle stochastique rétrograde (4.17). □

L'équation (4.17) donne une interprétation probabiliste des équations elliptiques semi-linéaires associées au générateur \mathcal{L} de la forme

$$-\mathcal{L}u(x) + f(x, u(x), \nabla(u\sqrt{2\epsilon})(x)) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^d. \quad (4.18)$$

Le théorème suivant est quant à lui une extension du théorème 4.2.5

Théorème 4.2.8. *Soit u dans $C^2(\mathbb{R}^d \setminus \Gamma)$ une solution de (4.18) vérifiant, pour x dans \mathbb{R}^d ,*

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\infty e^{\int_0^t \lambda(X_s^x) ds} \|\nabla u(X_s^x) \sqrt{2\epsilon(X_s^x)}\|^2 dt \right] < \infty,$$

et telle que \hat{u} appartienne à $C^2(\mathbb{R}^d \setminus \Gamma) \cap W_{loc}^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$, où

$$\hat{u}(x) := u(x) - r(x)[\rho(x)]_+,$$

avec r fonction C^2 , vérifiant au voisinage \mathcal{N} de Γ

$$r(x) = \left(\frac{\epsilon_{int}}{\epsilon_{ext}} - 1 \right) \nabla^{int} u(\pi(x)) \cdot \vec{n}(\pi(x)).$$

Alors, pour tout x dans \mathbb{R}^d , le couple $\left\{ u(X_t^x), \nabla u(X_t^x) \sqrt{2\epsilon(X_t^x)} \right\}$ est solution de l'équation rétrograde (4.17) ; en particulier $u(x) = Y_0^x$.

Démonstration. La démonstration suit les étapes de la démonstration du Théorème 4.2.5 et en utilisant dès que nécessaire la formule généralisée d'Itô énoncée dans le théorème 2.3.4. □

4.3. Existence, unicité, représentation probabiliste de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire elliptique

4.3.1. Résultat d'existence, unicité et régularité d'une solution à l'équation de Poisson-Boltzmann

Introduisons le sous-espace M de l'espace de Hilbert séparable $H^1(\mathbb{R}^3)$,

$$M := \{v \in H^1(\mathbb{R}^3) \mid \cosh^2 v - 1 \in L^1(\mathbb{R}^3)\}.$$

Remarque. Notons tout d'abord que les propriétés trigonométriques des fonctions \cosh et \sinh donnent les inclusions suivantes

$$\begin{aligned} \{v \in H^1(\mathbb{R}^3) \mid \cosh^2(v) - 1 \in L^1(\mathbb{R}^3)\} &= \{v \in H^1(\mathbb{R}^3) \mid \sinh(v) \in L^2(\mathbb{R}^3)\} \\ &\subset \{v \in H^1(\mathbb{R}^3) \mid \sinh(v/2) \in L^2(\mathbb{R}^3)\} = \{v \in H^1(\mathbb{R}^3) \mid \cosh(v) - 1 \in L^1(\mathbb{R}^3)\}. \end{aligned}$$

Rappelons que dans la partie 2.3.2, nous avons défini le voisinage \mathcal{N} de Γ et les applications $\pi(\cdot)$, $\vec{n}(\cdot)$ et $\rho(\cdot)$ (figure 2.1) dont les restrictions à \mathcal{N} sont respectivement les projection, normale et distance signée à Γ .

Définition 4.3.1. Nous appelons *solution faible* de l'équation aux dérivées partielles de Poisson-Boltzmann à terme source régulier (4.3) toute application v dans

$$M := \{v \in H^1(\mathbb{R}^3) \mid \cosh^2 v - 1 \in L^1(\mathbb{R}^3)\}$$

sous-espace de l'espace de Hilbert séparable $H^1(\mathbb{R}^3)$, vérifiant

$$\mathcal{E}_0(v, \phi) + \int \kappa^2(y) \sinh(v(y)) \phi(y) dy - \int \tilde{g}(y) \phi(y) dy = 0, \quad \phi \in H^1(\mathbb{R}^3) \quad (4.19)$$

avec $\mathcal{E}_0(v, \phi) = (\epsilon \nabla v, \nabla \phi) = \int \epsilon(y) \nabla v(y) \nabla \phi(y) dy$ et où \tilde{g} est définie en (4.2).

Avant de donner l'interprétation probabiliste de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann (4.1), nous donnons le théorème suivant d'existence, d'unicité et de régularité de la solution de (4.3) dont la démonstration s'effectue dans les sections 4.3.3 et 4.3.4.

Théorème 4.3.2. *L'équation de Poisson-Boltzmann à terme source régularisé (4.3) admet une unique solution faible v dans $M \subset H^1(\mathbb{R}^3)$. Cette solution appartient à l'intersection $C_b^0(\mathbb{R}^3) \cap C^2(\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma)$, et sa trace $v|_\Gamma$ est dans $C^3(\Gamma)$. Il existe de plus une fonction r dans $C^2(\mathbb{R}^3)$ telle que*

$$r(x) = \left(\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\epsilon_{\text{ext}}} - 1 \right) \nabla^{\text{int}} v(\pi(x)) \cdot \vec{n}(\pi(x)), \quad x \in \mathcal{N}. \quad (*)$$

et vérifiant que l'application

$$\hat{v}(x) := v(x) - r(x)[\rho(x)]_+, \quad x \in \mathbb{R}^3 \quad (**)$$

soit dans $C^2(\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma) \cap W_{\text{loc}}^{2,\infty}(\mathbb{R}^3)$. Enfin, le gradient ∇v est dans $L^\infty(\mathbb{R}^3)$.

Remarque. Ces propriétés, notamment les conditions de raccordement exprimées par (*) et (**), nous permettent d'appliquer la formule d'Itô généralisée rappelée dans le théorème 2.3.4.

4.3.2. Interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann

L'existence, l'unicité et la régularité de la solution énoncées, il est alors possible de donner l'interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann sous forme d'équations différentielles stochastiques rétrogrades.

À l'équation de Poisson-Boltzmann (4.3), pour $d = 3$, nous associons l'équation différentielle stochastique rétrograde de générateur $x, y \rightarrow f(x, y) = \tilde{g}(x) - \kappa^2(x) \sinh y$,

$$Y_t^x = Y_T^x + \int_t^T (\tilde{g}(X_s^x) - \kappa^2(X_s^x) \sinh Y_s^x) ds - \int_t^T Z_s^x dB_s, \quad (4.20)$$

pour tous temps t, T vérifiant $0 \leq t \leq T$ et où X^x est la solution faible de l'équation (2.14).

Théorème 4.3.3. *L'équation de Poisson-Boltzmann (2.8) admet l'interprétation probabiliste suivante*

$$u(x) = \chi(x)u_0(x) + Y_0^x, \quad x \in \mathbb{R}^3$$

où Y_0^x est la solution (Y^x, Z^x) de l'équation (4.20), χ et u_0 sont définis en début de section 4.1.

Remarque. Dans le cas de l'équation de Poisson-Boltzmann, l'hypothèse d'intégrabilité (**H5**) est vérifiée pour la dimension $d = 3$ dans l'appendice 4.4.3 pour un générateur $f(\cdot, 0, 0)$ borné dont le processus liant processus de monotonie et processus de Lipschitz $2\mu + K$ est positif sur un compact et strictement négatif hors de ce compact.

La démonstration du lemme suivant permettant de vérifier l'hypothèse d'intégrabilité (**H5**) est donnée dans la section 4.4.

Lemme 4.3.4. *Soit X solution faible de l'équation (2.14) associée à l'opérateur $\mathcal{L} := \nabla(\epsilon \nabla)$. Il existe un choix de réels $p > 0$ et $\kappa^2 > q > 0$, tel que*

$$\mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty \exp \left\{ \int_0^t \lambda(X_s) ds \right\} |f(X_t, 0)|^2 dt \right] < \infty$$

où $\lambda(X_s) = p \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} - q \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}}$ pour tout temps s positif.

Démonstration du théorème 4.3.3. Nous avons énoncé un théorème d'existence, d'unicité et de régularité de la solution v dans $H^1(\mathbb{R}^3)$ à l'équation de Poisson-Boltzmann régularisée (théorème 4.3.2). Cette solution vérifie les conditions du théorème 4.2.8 liant solutions d'équations aux dérivées partielles elliptiques semi-linéaires et solutions d'équations différentielles stochastiques rétrogrades.

Le générateur $(x, y) \rightarrow -\kappa^2(x) \sinh(y) + \tilde{g}(x)$ vérifiant les hypothèses (**H1-H6**) de ce théorème, il s'applique donc à cette solution v et permet de conclure. La démonstration du lemme 4.3.4 permettant de vérifier l'hypothèse d'intégrabilité (**H5**) est donnée dans la section 4.4. \square

Nous donnons dans la suite de cette section la démonstration du théorème 4.3.2 scindée en plusieurs points.

4.3.3. Début de la démonstration du théorème 4.3.2 : existence et unicité de la solution faible

Théorème 4.3.5. *Il existe un unique v dans le sous-ensemble M de $H^1(\mathbb{R}^3)$ vérifiant l'équation (4.19).*

Pour montrer l'existence et l'unicité de la solution à l'équation (4.3) dans $H^1(\mathbb{R}^3)$, nous utilisons une méthode de minimisation d'un problème d'énergie (cf. [CHX07] pour le cas de Poisson-Boltzmann sur un domaine borné). Définissons l'énergie sur $H^1(\mathbb{R}^3)$ de la manière suivante

$$\mathcal{E}(v) := \begin{cases} \int \left(\frac{\epsilon(y)}{2} |\nabla v(y)|^2 + \kappa^2(y) (\cosh(v(y)) - 1) - \tilde{g}(y)v(y) \right) dy, & v \in M \\ +\infty, & v \notin M. \end{cases}$$

Grâce au lemme suivant, il nous suffit, pour trouver une solution de l'équation de Poisson-Boltzmann à terme source régularisé, de trouver l'argmin de l'énergie \mathcal{E} sur $H^1(\mathbb{R}^3)$.

Lemme 4.3.6. *Si v vérifie*

$$\mathcal{E}(v) = \inf_{w \in H^1(\mathbb{R}^3)} \mathcal{E}(w),$$

alors v est solution de la forme faible de l'équation de Poisson-Boltzmann à terme source régularisé (4.3).

Proposition 4.3.7. *Il existe un unique $v \in M \subset H^1(\mathbb{R}^3)$ tel que*

$$\mathcal{E}(v) = \inf_{w \in H^1(\mathbb{R}^3)} \mathcal{E}(w).$$

Démonstration du théorème 4.3.5. Application des lemme 4.3.6 et proposition 4.3.7 \square

Démonstration de la proposition 4.3.7. Nous montrons la semi-continuité inférieure de l'énergie \mathcal{E} , puis nous en déduisons l'existence d'un point où l'énergie atteint son minimum.

Semi-continuité inférieure de \mathcal{E} Les hypothèses suivantes étant vérifiées :

4.3. Existence, unicité, représentation probabiliste de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire

1. l'énergie \mathcal{E} est différentiable au sens de Gâteaux sur $H^1(\mathbb{R}^3)$ et sa différentielle est donnée par

$$\begin{aligned} \int D\mathcal{E}(v)(w)(y)dy \\ = \mathcal{E}_0(v, w) + \int \kappa^2(y) \sinh(v(y))w(y)dy - \int \tilde{g}(y)w(y)dy, \end{aligned}$$

où $\mathcal{E}_0(v, w) = \int \epsilon(y)(\nabla v \nabla w)(y)dy$.

2. l'ensemble $H^1(\mathbb{R}^3)$ est convexe,
3. l'énergie \mathcal{E} est à valeurs dans $] - \infty, \infty]$, convexe sur $H^1(\mathbb{R}^3)$, strictement convexe et finie sur M ,

nous pouvons conclure que la fonctionnelle \mathcal{E} est semi-continue inférieurement sur l'ensemble $H^1(\mathbb{R}^3)$ par le lemme suivant.

Lemme 4.3.8. [Bre83] Soient un espace de Banach $(E, \|\cdot\|)$, A un sous-ensemble de E et ϕ une application définie sur E . Si ϕ est une application convexe sur un ensemble convexe A et si ϕ est différentiable au sens de Gâteaux, alors ϕ est semi-continue inférieurement sur A .

Existence de l'argmin de l'énergie \mathcal{E} Le lemme suivant permet de donner l'existence d'un argmin de l'énergie.

Lemme 4.3.9. [Bre83] Soit $(E, \|\cdot\|)$ un espace de Banach réflexif. Soient $A \subset E$ un convexe fermé, non vide, et $\phi : A \rightarrow] - \infty, +\infty]$ une fonction convexe, semi-continue inférieurement, $\phi \not\equiv +\infty$ telle que

$$\lim_{x \in A, \|x\| \rightarrow \infty} \phi(x) = +\infty.$$

Alors ϕ atteint son minimum sur A .

Montrons que la limite $\lim_{\|v\|_{H^1} \rightarrow \infty} \mathcal{E}(v) = \infty$ afin d'appliquer le lemme précédent et conclure.

Notons

$$\|v\|_{p, \Omega_{\text{int}}} = \left(\int_{\Omega_{\text{int}}} |v|^p \right)^{1/p}.$$

L'inégalité de Young pour un réel $\delta > 0$ choisi ultérieurement donne,

$$\int \tilde{g}(y)v(y)dy \leq \|\tilde{g}\|_{2, \Omega_{\text{int}}} \|v\|_{2, \Omega_{\text{int}}} \leq \frac{1}{\delta} \|\tilde{g}\|_{2, \Omega_{\text{int}}}^2 + \delta \|v\|_{2, \Omega_{\text{int}}}^2,$$

d'où, pour un réel $\lambda > 0$ suffisamment petit, fixé ultérieurement,

$$\int (\kappa^2(y)(\cosh v(y) - 1) - \tilde{g}(y)v(y)) dy \geq \lambda \|v\|_{2, \Omega_{\text{ext}}}^2 - \delta \|v\|_{2, \Omega_{\text{int}}}^2 - \frac{1}{\delta} \|\tilde{g}\|_{2, \Omega_{\text{int}}}^2,$$

car κ est à support dans Ω_{ext} .

L'inégalité de Sobolev nous donne l'existence d'une constante C_S telle que

$$\|\phi\|_6 \leq C_S \|\nabla \phi\|_2, \quad \phi \in H^1(\mathbb{R}^3)$$

L'inégalité d'Hölder sur le domaine borné Ω_{int} :

$$\|v\|_{2,\Omega_{\text{int}}}^2 \leq |\Omega_{\text{int}}|^{2/3} \|v\|_{6,\Omega_{\text{int}}}^2 \leq |\Omega_{\text{int}}|^{2/3} \|v\|_6^2 \leq C_S^2 |\Omega_{\text{int}}|^{2/3} \|\nabla v\|_2^2.$$

Ainsi, pour un réel $\beta > 0$ choisi tel que $\sup_{x \in \mathbb{R}^3} \epsilon(x) =: C_\epsilon > \beta C_S |\Omega_{\text{int}}|^{2/3}$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(v) &\geq C_\epsilon \|\nabla v\|_2^2 + \lambda \|v\|_{2,\Omega_{\text{ext}}}^2 - \delta \|v\|_{2,\Omega_{\text{int}}}^2 - \frac{1}{\delta} \|\tilde{g}\|_2^2 \\ &\geq \lambda \|v\|_{H^1}^2 + (C_\epsilon - \lambda) \|\nabla v\|_2^2 - (\delta + \lambda) \|v\|_{2,\Omega_{\text{int}}}^2 - \frac{1}{\delta} \|\tilde{g}\|_2^2 \\ &\geq \lambda \|v\|_{H^1}^2 + (C_\epsilon - \lambda - \beta C_S |\Omega_{\text{int}}|^{2/3}) \|\nabla v\|_2^2 \\ &\quad + (\beta - \delta - \lambda) \|v\|_{2,\Omega_{\text{int}}}^2 - \frac{1}{\delta} \|\tilde{g}\|_2^2. \end{aligned}$$

Finalement, en choisissant les réels δ et λ tels que $C_\epsilon - \lambda - \beta C_S |\Omega_{\text{int}}|^{2/3} > 0$ et $\beta - \delta - \lambda > 0$, on obtient

$$\mathcal{E}(v) \geq \lambda \|v\|_{H^1}^2 - \frac{1}{\delta} \|\tilde{g}\|_2^2.$$

Unicité de l'argmin de l'énergie \mathcal{E} Elle s'obtient par stricte convexité de \mathcal{E} sur M . □

4.3.4. Fin de la démonstration du théorème 4.3.2 : régularité de la solution

Régularité de v

En reprenant la démonstration du théorème 2.17 et les notations de [BCMT10], en observant que v et $\sinh v$ sont dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ (en effet la solution v est dans l'ensemble M) et en utilisant les propriétés de \sinh , nous montrons les propriétés de régularité énoncées dans le théorème 4.3.2.

Avant de commencer la démonstration proprement dite du théorème, donnons deux lemmes utiles dont les démonstrations sont reportées en section 4.4.

Lemme 4.3.10. *Soit v une solution de la formulation faible (4.19) dans $H^1(\mathbb{R}^3)$ vérifiant $v|_\Gamma \in L^\infty(\Gamma)$. Alors v est dans $L^\infty(\Omega_{\text{ext}})$.*

Nous avons aussi besoin du lemme suivant à plusieurs reprises.

Lemme 4.3.11 (Type Sobolev). *Soit un réel $p \geq 1$ et un entier $d \geq 2$. Donnons-nous un compact K de \mathbb{R}^d et u dans $\mathcal{W}^{1,p}(K)$ vérifiant pour tout indice i compris entre 1 et d $\partial_i u$ dans $L^{n_i(d-1)}(K)$ avec $n_i(d-1) \geq 1$, alors u est dans $L^m(K)$, où $m = \sum_{i=1}^d n_i$.*

Ce lemme permet de donner des informations sur la régularité d'une fonction dont le gradient a différentes régularités selon les directions. Il est particulièrement utile dans le cas de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann qui a une régularité importante tangentiellement à la surface Γ et a une régularité plus faible normalement à cette surface. Grâce à ce lemme, nous obtenons que la régularité plus importante dans les directions tangentielles compense la régularité moindre dans la direction normale.

Adaptons maintenant la démonstration de l'annexe A de [BCMT10] à la non-linéarité sous forme de \sinh de l'équation de Poisson-Boltzmann (4.3).

Démonstration des résultats de régularité théorème 4.3.2. Afin de montrer la régularité de v jusqu'au bord Γ , nous commençons par montrer que la trace au bord Γ de v est $\mathcal{C}^{2+\alpha}$ avec α compris strictement entre zéro et un, puis nous appliquons des résultats de régularité sur chacun des sous-domaines délimités par Γ .

Redressement local Soient ψ_1, \dots, ψ_M des redressements \mathcal{C}^∞ locaux de Γ définis sur des voisinages ouverts $\mathcal{U}_1, \dots, \mathcal{U}_M$ de Γ (donnés dans le lemme 2.1.1). Supposons fixé un indice i de $\{1, \dots, M\}$, et notons dans la suite $\psi = \psi_i$, $\mathcal{U} = \mathcal{U}_i$ et $\mathcal{V} = \psi(\mathcal{U})$. Posons pour tout y dans \mathcal{V} , $\tilde{v}(y) = v(\psi^{-1}(y))$, $\tilde{\epsilon}(y) = \epsilon(\psi^{-1}(y))$, $\tilde{g}(y) = g(\psi^{-1}(y))$, $\tilde{\kappa}(y) = \kappa(\psi^{-1}(y))$ et $M(y) = J\psi(\psi^{-1}(y))$. Remarquons que les fonctions $\tilde{\epsilon}$ et $\tilde{\kappa}$ sont constantes sur les demi-espaces engendrés par les directions redressées tangentielles à la surface Γ . Comme ψ est un difféomorphisme de classe \mathcal{C}^∞ , \tilde{v} est dans $H_{\text{loc}}^1(\mathcal{V})$ et l'équation vérifiée par \tilde{v} peut s'écrire sous la forme

$$-\nabla \cdot (\tilde{\epsilon}(\psi(x))M(\psi(x))\nabla\tilde{v}(\psi(x))) + \tilde{\kappa}^2(\psi(x))\sinh\tilde{v}(\psi(x)) = \tilde{g}(\psi(x)), \quad x \in \mathcal{U}.$$

Le changement de variable $y = \psi(x)$, permet d'obtenir l'équation suivante sur \mathcal{V}

$$-\sum_{i,j,k=1}^d M_{ik}\partial_k(\tilde{\epsilon}M_{ij}\partial_j\tilde{v}) + \tilde{\kappa}^2\sinh\tilde{v} = \tilde{g}. \quad (4.21)$$

Régularité locale du redressement Montrons que \tilde{v} est dans l'espace $H_{\text{loc}}^{1,4,4}(\mathcal{V})$ avant de conclure en utilisant les deux arguments suivants :

Théorie des traces l'opérateur trace est défini de $H^1(\mathcal{V})$ dans $L^2(\{x_1 = 0\} \cap \mathcal{V})$ (avec $\{x_1 = 0\} \cap \mathcal{V}$ sous-ensemble de \mathbb{R}^2),

Sobolev, Gagliardo, Nirenberg, Morrey pour tout domaine D de \mathbb{R}^2 , on a l'inclusion de l'espace $H^4(D)$ dans $\mathcal{C}^{2+\alpha}(\bar{D})$ avec α compris strictement entre zéro et un (*cf.* partie II du théorème 4.12 de [AF03]).

Il nous faut donc montrer que pour tout indice i dans $\{0, \dots, 4\}$, le gradient $\nabla_{\partial_{k_1, \dots, k_i}} \tilde{v}|_\Gamma$ dérivé à l'ordre i , pour tout indice k_i dans $\{2, 3\}$ est dans l'espace $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$.

Nous montrons successivement que

1. le gradient $\nabla\tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$,

2. le gradient $\nabla \partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ puis, par inégalité de Sobolev dans \mathbb{R}^3 , que la dérivée $\partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^6(\mathcal{V})$,
3. le gradient $\nabla \partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ en utilisant le fait que $\partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$ puis, par inégalité de Sobolev dans \mathbb{R}^3 , que $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^6(\mathcal{V})$ et, par lemme 4.3.11, que $\partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^7(\mathcal{V})$,
4. le gradient $\nabla \partial_{k_1, k_2, k_3} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ en utilisant le fait que les fonctions $\partial_{k_1} \tilde{v}$ et $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ sont respectivement dans $L_{\text{loc}}^6(\mathcal{V})$ et $L_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$ puis, par inégalité de Sobolev dans \mathbb{R}^3 , que $\partial_{k_1, k_2, k_3} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^6(\mathcal{V})$ et, par lemme 4.3.11, que $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ et $\partial_{k_1} \tilde{v}$ sont respectivement dans $L_{\text{loc}}^7(\mathcal{V})$ et $L_{\text{loc}}^8(\mathcal{V})$,
5. le gradient $\nabla \partial_{k_1, k_2, k_3, k_4} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$, en utilisant le fait que $\partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^8(\mathcal{V})$, et $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ et $\partial_{k_1, k_2, k_3} \tilde{v}$ sont dans $L_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$.

Détaillons maintenant ces étapes.

1. **Déduisons de l'appartenance de \tilde{v} à $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ que son gradient $\nabla \tilde{v}$ est lui aussi dans $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$.** Bien que ce point soit déjà connu par le théorème 4.3.5, nous le démontrons à nouveau car il permet de comprendre le mécanisme utilisé par la suite.

Soit une fonction χ dans $\mathcal{C}_c^\infty(\mathcal{V})$ et posons $w = \chi \tilde{v}$. La fonction w vérifie

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{i,j,k=1}^d M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j w) + \sum_{i,j,k=1}^d M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \tilde{v} \partial_j \chi) \\
 & \quad + \tilde{\kappa}^2 \chi \sinh \tilde{v} = \chi \tilde{g} - \sum_{i,j,k=1}^d \tilde{\epsilon} M_{ij} M_{ik} \partial_k \chi \partial_j \tilde{v}. \quad (4.22)
 \end{aligned}$$

En multipliant l'équation précédente par $w \det J\psi^{-1}$, en intégrant sur \mathcal{V} , et en intégrant par parties les termes comprenant des dérivées partielles de $\tilde{\epsilon}$ nous obtenons

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathcal{V}} \tilde{\epsilon}(y) |M(y) \nabla w(y)|^2 \det J\psi^{-1}(y) dy \\
 & - \int_{\mathcal{V}} \tilde{\epsilon}(y) \tilde{v}(y) \det J\psi^{-1}(y) \nabla \chi(y)^T M(y)^T M(y) \nabla w(y) dy \\
 & + \int_{\mathcal{V}} \tilde{\kappa}^2(y) \chi^2(y) \tilde{v}(y) \sinh(\tilde{v}(y)) \det J\psi^{-1}(y) dy \\
 & = \int_{\mathcal{V}} \chi(y) \tilde{g}(y) w(y) \det J^{-1}(y) dy \\
 & \quad - \sum_{i,j,k=1}^d \int_{\mathcal{V}} \left(\tilde{\epsilon} M_{ij} M_{ik} \det J\psi^{-1} \partial_k \chi \tilde{v} (\partial_j w - \tilde{v} \partial_j \chi) \right) (y) dy.
 \end{aligned}$$

Du fait que les fonctions $\tilde{\epsilon}$, $\tilde{\lambda}$, \tilde{g} , M , χ , $\nabla \chi$ soient bornées sur le support de χ et que les fonctions $\tilde{\epsilon}$, $\det J\psi^{-1}$ soient minorées par une constante strictement

positive, nous avons l'existence de deux constantes positives c et C telles que

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} |M(y)\nabla w(y)|^2 dy + c \int_{\text{Supp}(\chi)} \tilde{v}(y) \sinh(\tilde{v}(y)) dy \\ \leq C \int_{\text{Supp}(\chi)} (|\tilde{v}(y)| |\nabla w(y)| + |w(y)| + |\tilde{v}(y)|^2) dy. \end{aligned}$$

De la positivité de $\tilde{v} \sinh \tilde{v}$ nous pouvons alors obtenir l'inégalité suivante

$$\int_{\mathcal{V}} |M\nabla w|^2(y) dy \leq C \int_{\text{Supp}(\chi)} (|\tilde{v}| |\nabla w| + |w| + |\tilde{v}|^2)(y) dy.$$

Soit S^2 la sphère unité de \mathbb{R}^3 . La fonction $(s, y) \rightarrow |M(y)s|^2$ est strictement positive et continue sur le compact $S^{d-1} \times \text{Supp}(\chi)$. Ainsi

$$C' := \inf_{(s,y) \in S^{d-1} \times \text{Supp}(\chi)} |M(y)s|^2 > 0.$$

L'inégalité de Young pour une constante η vérifiant $0 < \eta < 1/(4CC')$, permet alors d'obtenir pour une constante C'' positive

$$\|\nabla w\|_{L^2}^2 \leq C'' \left(\|w\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + \|\tilde{v}\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right) < \infty.$$

Ceci étant vrai pour toute fonction χ dans $\mathcal{C}_c^\infty(\mathcal{V})$, nous pouvons conclure que $\nabla \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$.

2. **Montrons maintenant que $\nabla(\partial_2 \tilde{v})$ est dans $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$.** Calculons la dérivée partielle par rapport à la seconde coordonnée de \tilde{v} dans \mathcal{V} de l'équation (4.21) :

$$\begin{aligned} - \sum_{i,k,j=1}^d M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_{2,j} \tilde{v}) + \tilde{\kappa}^2 \partial_2 \tilde{v} \cosh \tilde{v} + \partial_2 \tilde{\kappa} \sinh \tilde{v} \\ = \partial_2 \tilde{g} + \sum_{i,j,k=1}^d M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} \partial_2 M_{ij} \partial_j \tilde{v}) + \sum_{i,j,k=1}^d \partial_2 M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j \tilde{v}). \quad (4.23) \end{aligned}$$

La fonction $\tilde{\kappa}$ étant constante par morceau avec discontinuité dans la direction x_1 sa dérivée partielle ∂_2 par rapport à la seconde coordonnée s'annule. Fixons une fonction χ dans $\mathcal{C}_c^\infty(\mathcal{V})$ et posons $w = \chi \partial_2 \tilde{v}$. Alors, w vérifie

$$\begin{aligned} - \sum_{i,k,j=1}^d M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j w) + \kappa^2 w \cosh \tilde{v} = \chi \partial_2 \tilde{g} \\ + \sum_{i,j,k=1}^d \chi M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} \partial_2 M_{ij} \partial_j \tilde{v}) + \sum_{i,j,k=1}^d \chi \partial_2 M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j \tilde{v}) \\ - \sum_{i,j,k=1}^d M_{ik} \partial_k (\tilde{\epsilon} M_{ij} \partial_j \chi \partial_2 \tilde{v}) - \sum_{i,j,k=1}^d \tilde{\epsilon} M_{ik} M_{ij} \partial_k \chi \partial_{2,j} \tilde{v}. \end{aligned}$$

En multipliant l'équation précédente par $w \det J\psi^{-1}$, intégrant sur \mathcal{V} , intégrant par partie chaque terme comprenant des dérivées partielles de $\tilde{\epsilon}$ et en utilisant le lemme 2.1.2 dès que nécessaire, nous obtenons

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} |M\nabla w|^2(y) dy + \int_{\text{Supp}(\chi)} (\det J\psi^{-1} \kappa^2 w^2 \cosh \tilde{v})(y) dy \\ \leq C \int_{\text{Supp}(\chi)} \left(|w| + (|w| + |\nabla w|) |\nabla \tilde{v}| + |w \nabla \partial_2 \tilde{v}| \right) (y) dy. \end{aligned}$$

Remarquons que l'intégrale du terme en cosh est positive. De plus, grâce à la relation

$$w \nabla \partial_2 \tilde{v} = \partial_2 \tilde{v} \left(\nabla w - \nabla \chi \partial_2 \tilde{v} \right),$$

et à l'inégalité de Young pour une constante η strictement positive bien choisie afin de majorer le terme $|\nabla w| |\nabla \tilde{v}|$, nous obtenons que

$$\|w\|_{L^2(\mathcal{V})} \leq C \left(\|w\|_{L^2_{\text{loc}}(\text{Supp}(\chi))} + \|\tilde{v}\|_{L^2_{\text{loc}}(\text{Supp}(\chi))} + \|\nabla \tilde{v}\|_{L^2_{\text{loc}}(\text{Supp}(\chi))} \right) < \infty.$$

Nous avons donc montré que $\nabla(\partial_2 \tilde{v})$ est dans $L^2_{\text{loc}}(\mathcal{V})$. De même le gradient $\nabla(\partial_3 \tilde{v})$ est dans $L^2_{\text{loc}}(\mathcal{V})$. Ainsi, $\partial_1 \tilde{v}$ est dans $L^2_{\text{loc}}(\mathcal{V})$ (car \tilde{v} dans $H^1(\mathcal{V})$), $\partial_2 \tilde{v}$ et $\partial_3 \tilde{v}$ sont dans $H^1_{\text{loc}}(\mathcal{V})$, et donc \tilde{v} est dans $H^{1,2,2}(\mathcal{V})$. Par les inégalités de Sobolev nous obtenons que $\partial_2 \tilde{v}$ et $\partial_3 \tilde{v}$ sont dans $L^6_{\text{loc}}(\mathcal{V})$. Enfin, comme \tilde{v} est dans $H^{1,2,2}(\mathcal{V})$, nous avons que la trace $\tilde{v}|_{\{x_1=0\} \cap \mathcal{V}}$ est dans $H^{3/2}(\{x_1=0\} \cap \mathcal{V})$ inclus dans $C^0(\{x_1=0\} \cap \mathcal{V})$ (rappelons que $\{x_1=0\} \cap \mathcal{V}$ est une partie de \mathbb{R}^2). Ainsi $v|_{\Gamma}$ est dans $L^\infty(\Gamma)$ et l'on peut appliquer le lemme 4.3.10 pour obtenir que v est dans $L^\infty(\Omega_{\text{ext}})$.

3. En suivant le même raisonnement, montrons maintenant pour tout entier n de $\{2, 3, 4\}$ que, pour tous indices k_1, \dots, k_n de $\{2, 3\}$, le gradient $\nabla(\partial_{k_1, \dots, k_n} \tilde{v})$ est dans $L^2_{\text{loc}}(\mathcal{V})$. Supposons la propriété vraie au rang $n-1$, fixons des indices k_1, \dots, k_n de $\{2, 3\}$, choisissons une fonction χ dans $C_c^\infty(\mathcal{V})$ et définissons $w = \chi \partial_{k_1, \dots, k_n} \tilde{v}$.

Prenons la dérivée d'ordre n de la relation (4.21), écrivons l'ÉDP vérifiée par w , multiplions le résultat par $w \det J\phi^{-1}$, intégrons sur \mathcal{V} .

En effectuant les intégrations par partie pour chaque terme comprenant une dérivée de $\tilde{\epsilon}$, on obtient comme précédemment

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} |M\nabla w|^2(y) dy + \int_{\mathcal{V}} (\det J\psi^{-1} \tilde{\kappa}^2 w^2 \cosh \tilde{v})(y) dy \\ \leq C \int_{\text{Supp}(\chi)} \left\{ |w|(y) + \left(w \tilde{\kappa}^2 (\chi \partial_{k_1, \dots, k_n} (\sinh \tilde{v}) - w \cosh \tilde{v}) \right) (y) \right. \\ \left. + (|w|(y) + |\nabla w|(y)) \left(\sum_{j=0}^{n-1} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_j \leq n} |\nabla \partial_{k_1, \dots, k_n} \tilde{v}(y)| \right) \right. \\ \left. + |w|(y) |\nabla \partial_{k_1, \dots, k_n} \tilde{v}(y)| \right\} dy. \end{aligned}$$

4.3. Existence, unicité, représentation probabiliste de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire

Nous traitons différemment le terme $w \cosh \tilde{v}$ apparaissant dans la dérivée $\chi \partial_{k_1, \dots, k_n} \sinh(\tilde{v})$ car son produit par $\det J\psi^{-1}w$ est positif.

La relation

$$w \nabla \partial_{k_1, \dots, k_n} \tilde{v} = \partial_{k_1, \dots, k_n} \tilde{v} (\nabla w - \nabla \chi \partial_{k_1, \dots, k_n} \tilde{v})$$

et l'inégalité de Young permettent d'obtenir

$$\begin{aligned} \|\nabla w\|_{L^2(\mathcal{V})} &\leq C \left(\|w\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 + \|\tilde{v}\|_{L^2(\text{Supp}(\chi))}^2 \right. \\ &\quad + \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i_1, \dots, i_j \in \{2, \dots, d\}} \|\nabla \partial_{i_1, \dots, i_j} \tilde{v}\|_{L(\text{Supp}(\chi))}^2 \\ &\quad \left. + C \int_{\text{Supp}(\chi)} w \kappa^2 \left(\chi \partial_{k_1, \dots, k_n} (\sinh \tilde{v}) - w \cosh \tilde{v} \right) (y) dy \right) \\ &< \infty, \end{aligned}$$

Comme dans les étapes précédentes, seules les dérivations du terme $\kappa^2 \sinh \tilde{v}$ diffèrent de la démonstration de [BCMT10]. Ces dérivées sont de la forme suivante :

a) Les dérivées secondes de $\sinh \tilde{v}$ s'écrivent

$$\partial_{k_1, k_2} \sinh \tilde{v} - \partial_{k_1, k_2} \tilde{v} \cosh \tilde{v} = \partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v} \sinh \tilde{v}.$$

Il s'agit donc de contrôler la norme $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ de $\partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v}$ (*i.e.* vérifier que la dérivée partielle $\partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$). De l'étape précédente, nous déduisons que la dérivée $\partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^6(\mathcal{V})$ et donc dans $L_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$.

Cette étape permet *in fine* de montrer que la dérivée partielle $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ est dans $H_{\text{loc}}^1(\mathcal{V})$, et donc par inégalité de Sobolev que $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^6(\mathcal{V})$. L'application du lemme 4.3.11 avec $d = 3$, $n_1 = 1$, $n_2 = 3$ et $n_3 = 3$ permet alors d'obtenir l'appartenance de $\partial_{k_1} \tilde{v}$ à $L_{\text{loc}}^7(\mathcal{V})$.

b) Les dérivées troisièmes de $\sinh \tilde{v}$ s'écrivent

$$\begin{aligned} &\partial_{k_1, k_2, k_3} \sinh \tilde{v} - \partial_{k_1, k_2, k_3} \tilde{v} \cosh \tilde{v} \\ &= (\partial_{k_1, k_2} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v} + \partial_{k_2, k_3} \tilde{v} \partial_{k_1} \tilde{v} + \partial_{k_3, k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v}) \sinh \tilde{v} \\ &\quad + \partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v} \cosh \tilde{v} \end{aligned}$$

Il s'agit ici de contrôler les normes $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ de $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v}$, et $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ de $\partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v}$ (*i.e.* vérifier que les dérivées partielles $\partial_{k_1} \tilde{v}$ et $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ sont respectivement dans $L_{\text{loc}}^6(\mathcal{V})$ et $L_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$). Cette propriété est vérifiée par l'étape précédente.

Ainsi la dérivée partielle $\partial_{k_1, k_2, k_3} \tilde{v}$ est dans $H_{\text{loc}}^1(\mathcal{V})$, et donc dans $L_{\text{loc}}^6(\mathcal{V})$. L'application du lemme 4.3.11 à $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ avec $d = 3$, $n_1 = 1$, $n_2 = 3$ et $n_3 = 3$ permet alors d'obtenir que $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^7(\mathcal{V})$.

L'application du lemme 4.3.11 à $\partial_{k_1} \tilde{v}$ avec $d = 3$, $n_1 = 1$, $n_2 = 3, 5$ et $n_3 = 3, 5$ permet alors d'obtenir que $\partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans $L_{\text{loc}}^8(\mathcal{V})$.

c) Les dérivées quatrièmes de $\sinh \tilde{v}$ s'écrivent

$$\begin{aligned}
 & \partial_{k_1, k_2, k_3, k_4} \sinh \tilde{v} - \partial_{k_1, k_2, k_3, k_4} \tilde{v} \cosh \tilde{v} \\
 &= \sum_{k_{i_1}, k_{i_2}, k_{i_3}, k_{i_4}} (\partial_{k_{i_1}, k_{i_2}, k_{i_3}} \tilde{v} \partial_{k_{i_4}} \tilde{v}) \sinh \tilde{v} \\
 &+ (\partial_{k_1, k_2} \tilde{v} \partial_{k_3, k_4} \tilde{v} + \partial_{k_2, k_3} \tilde{v} \partial_{k_1, k_4} \tilde{v} + \partial_{k_3, k_1} \tilde{v} \partial_{k_2, k_4} \tilde{v}) \sinh \tilde{v} \\
 &+ (\partial_{k_1, k_2} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v} \partial_{k_4} \tilde{v} + \partial_{k_2, k_3} \tilde{v} \partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_4} \tilde{v} \\
 &+ \partial_{k_3, k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v} \partial_{k_4} \tilde{v} + \partial_{k_1, k_4} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v} + \partial_{k_2, k_4} \tilde{v} \partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v} \\
 &+ \partial_{k_3, k_4} \tilde{v} \partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v}) \cosh \tilde{v} \\
 &+ \partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v} \partial_{k_4} \tilde{v} \sinh \tilde{v}.
 \end{aligned}$$

Il s'agit donc ici de contrôler les normes $L_{\text{loc}}^2(\mathcal{V})$ des termes $\partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2, k_3, k_4} \tilde{v}$, $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v} \partial_{k_3, k_4} \tilde{v}$, $\partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v} \partial_{k_3, k_4} \tilde{v}$, $\partial_{k_1} \tilde{v} \partial_{k_2} \tilde{v} \partial_{k_3} \tilde{v} \partial_{k_4} \tilde{v}$ (i.e. vérifier que $\partial_{k_1} \tilde{v}$ est dans l'espace $L_{\text{loc}}^8(\mathcal{V})$, $\partial_{k_1, k_2} \tilde{v}$ dans $L_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$, et $\partial_{k_1, k_2, k_3} \tilde{v}$ dans $L_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$) ce que l'on a fait dans les étapes précédentes.

Régularité de la trace Nous avons ainsi montré que la fonction \tilde{v} est dans $H_{\text{loc}}^{1,4,4}(\mathcal{V})$, ce qui signifie que \tilde{v} et $\partial_{x_1} \tilde{v}$ sont de régularité $H_{\text{loc}}^4(\mathcal{V})$ par rapport aux variables x_2 et x_3 . Les résultats classiques de trace [Bre83] chapitre IX permettent de déduire que $\tilde{v}|_{\{y_1=0\}}$ admet comme fonction de (y_2, y_3) pris dans $\psi(\mathcal{U} \cap \Gamma)$, des dérivées partielles jusqu'à l'ordre quatre dans $L_{\text{loc}}^2(\psi(\mathcal{U} \cap \Gamma))$. Ainsi la restriction $\tilde{v}|_{\{y_1=0\}}$ est dans l'espace $\mathcal{C}^{2+\alpha}(\psi(\mathcal{U} \cap \Gamma))$ (cf. partie II du théorème 4.12 de [AF03]). Comme ψ et Γ sont \mathcal{C}^∞ , nous obtenons que la trace $v|_\Gamma$ est de classe $\mathcal{C}^{2+\alpha}$ sur Γ pour α compris strictement entre zéro et un.

Remarque. Notons que le raisonnement précédent peut se simplifier pour donner le caractère \mathcal{C}^3 de la restriction de la solution v à toute frontière suffisamment régulière strictement incluse dans Ω_{ext} (par exemple $\partial B(0, R)$ pour R suffisamment grand).

Régularité de la solution Nous étudions deux sous-problèmes en nous restreignant au domaine intérieur et à tout domaine borné du domaine extérieur.

Sur Ω_{int} Soit ϕ_{int} le prolongement $\mathcal{C}^2(\Omega_{\text{int}})$ de $v|_\Gamma$ obtenu à l'aide du Lemme 6.38 de [GT01]. Etudions le problème restreint à Ω_{int} avec valeur au bord Γ égale à la solution ϕ_{int} :

$$\begin{cases} -\epsilon_{\text{int}} \Delta v_{\text{int}}(x) = \tilde{g}(x), & x \in \Omega_{\text{int}}, \\ v_{\text{int}}(x) = \phi_{\text{int}}(x), & x \in \Gamma. \end{cases}$$

Le Théorème 6.13 de [GT01] donne l'existence d'une unique solution au problème précédent. Cette solution est $\mathcal{C}^{2+\alpha}$ sur tout compact de Ω_{int} pour un réel α tel que $0 < \alpha < 1$. Cette solution est de plus dans $\mathcal{C}^2(\bar{\Omega}_{\text{int}})$ par le Lemme 6.18 de [GT01].

Sur Ω_{ext} Définissons un domaine D de Ω_{ext} délimité par le bord Γ et le bord d'une boule de rayon R suffisamment grand pour inclure strictement Γ . Soit ϕ_{ext} le prolongement dans $\mathcal{C}^2(D)$ de $v|_{\Gamma \cup \partial B(0, R)}$ obtenu à l'aide du Lemme 6.38 de [GT01].

4.3. Existence, unicité, représentation probabiliste de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire

Le Théorème 15.12 de [GT01] appliqué au problème

$$\begin{cases} \mathcal{L}v + \kappa^2 \sinh v(x) = 0, & \text{pour } x \in D \\ v(x) = \phi_{\text{ext}}(x), & \text{pour } x \in \partial D \end{cases}$$

donne l'existence d'une solution de classe \mathcal{C}^2 sur \bar{D} . L'unicité de la solution permet de conclure.

En particulier, la solution v de l'équation (4.3) est dans l'intersection $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^3) \cap \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^3 \setminus \Gamma)$. De l'égalité vérifiée pour tout y sur la surface Γ

$$\epsilon_{\text{int}} \nabla v_{\text{int}}(y) \cdot \vec{n}(y) = \epsilon_{\text{ext}} \nabla v_{\text{ext}}(y) \cdot \vec{n}(y),$$

nous pouvons déduire que \hat{v} est dans $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^3)$ (cf. démonstration du théorème 3.1.1). □

Caractère borné de ∇v

Il est maintenant possible de montrer que ∇v est dans $L^\infty(\mathbb{R}^3)$. En effet, nous avons montré ci-dessus que la solution u est dans $C^2(\bar{\Omega}_{\text{int}})$ et dans $C^2(\bar{\Omega}_{\text{ext}})$, et donc en particulier ∇v est $L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$.

De plus, sur Ω_{ext} , la fonction v est solution de

$$\begin{cases} -\epsilon_{\text{ext}} \Delta v(x) + \bar{\kappa}^2 \sinh v(x) = 0, & \forall x \in \Omega_{\text{ext}}, \\ v(x) = v|_\Gamma(x), & \forall x \in \Gamma. \end{cases}$$

Ainsi, pour tout k , $1 \leq k \leq d$, la dérivée partielle $\partial_k v$ vérifie

$$\epsilon \int_{\Omega_{\text{ext}}} \nabla \partial_k v \nabla \phi + \bar{\kappa}^2 \int_{\Omega_{\text{ext}}} \cosh(v) \partial_k v \phi = 0, \quad \phi \in H_0^1(\Omega_{\text{ext}}).$$

Reprenons la méthode que suit H.Brezis [Bre83] dans la démonstration du théorème IX.27, en utilisant le fait que $\bar{\kappa}^2 \cosh \geq \bar{\kappa}^2 > 0$.

Soit une fonction $G \in C^1(\mathbb{R})$ telle que

1. $0 \leq G'(s) \leq C$, pour $s \in \mathbb{R}$,
2. G est strictement croissante sur $]0, \infty[$,
3. $G(s) = 0$, pour $s \leq 0$.

Soit $K = \max \{\sup_\Gamma \partial_k u, 0\}$. Fixons $K' > K$, et posons $w = G(\partial_k v - K')$. La fonction w est dans $H^1(\Omega_{\text{ext}})$ (proposition IX.5 de [Bre83]), dans $C(\bar{\Omega}_{\text{ext}})$, et $w = 0$ sur Γ . Ainsi $w \in H_0^1(\Omega_{\text{ext}})$ et vérifie

$$\epsilon \int_{\Omega_{\text{ext}}} |\nabla \partial_k v|^2 G(\partial_k v - K') + \bar{\kappa}^2 \int_{\Omega_{\text{ext}}} \cosh(v) \partial_k v G(\partial_k v - K') = 0.$$

D'autre part puisque la dérivée de G est croissante et bornée, nous avons

$$0 \leq w \leq C |\partial_k v|$$

et, sur l'ensemble $\{\partial_k v \geq K'\}$, on a

$$K' \int_{\{\partial_k v \geq K'\}} |\partial_k v| \leq \int_{\Omega_{\text{ext}}} |\partial_k v|^2 < \infty$$

ce qui permet de montrer le caractère $L^1(\mathbb{R}^d)$ de w . Ainsi

$$\int_{\Omega_{\text{ext}}} \bar{\kappa}^2 \cosh(v) (\partial_k v - K') G(\partial_k v - K') \leq \int_{\Omega_{\text{ext}}} \bar{\kappa}^2 \cosh(v) (-K') G(\partial_k v - K') \leq 0,$$

et donc $\partial_k v \leq K$ p.p. sur Ω_{ext} .

En raisonnant de la même manière pour $-\partial_k v$, nous obtenons l'inégalité $-\partial_k v \leq \max\{0, \sup_{\Gamma} -\partial_k v|_{\Gamma}\}$, et donc que $\min\{0, \inf_{\Gamma} \partial_k v|_{\Gamma}\} \leq v$.

4.4. Démonstrations de trois lemmes techniques

4.4.1. Démonstration du lemme 4.3.11 de type Sobolev

Démonstration du lemme 4.3.11. La démonstration de ce lemme suit la démonstration des inégalités de Sobolev donnée dans [Bre83] chapitre IX.

Soit u dans $\mathcal{C}_c^1(K)$, notons, pour un indice i dans $\{1, \dots, d\}$, le $(d-1)$ -uplet $\tilde{x}_i := (x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_d)$. Nous avons

$$\begin{aligned} |u(x_1, \dots, x_d)|^{n_i} &= \left| \int_{-\infty}^{x_i} \partial_i u(x_1, \dots, y, \dots, x_d) dy \right|^{n_i} \\ &\leq \left(\int_{\mathbb{R} \cap K} |\partial_i u(x_1, \dots, y, \dots, x_d)| dy \right)^{n_i} =: f_i(\tilde{x}_i). \end{aligned}$$

Ainsi, avec $m = \sum_{i=1}^d n_i$

$$|u(x)|^m \leq \prod_{i=1}^d f_i(\tilde{x}_i)$$

d'où

$$\|u\|_{L^m(K)}^m \leq \left\| \prod_{i=1}^d f_i(\tilde{x}_i) \right\|_{L^1(K)}$$

et l'on peut déduire du lemme IX.4 de [Bre83] que

$$\begin{aligned} \|u\|_{L^m(K)}^m &\leq \prod_{i=1}^d \|f_i(\tilde{x}_i)\|_{L^{d-1}(K \cap \mathbb{R}^{d-1})} \\ &= \prod_{i=1}^d \left(\int_{K \cap \mathbb{R}^{d-1}} \left(\int_{\mathbb{R} \cap K} |\partial_i u(x_1, \dots, y, \dots, x_d)| dy \right)^{(d-1)n_i} \right)^{1/(d-1)} \\ &\leq C(K) \prod_{i=1}^d \|\partial_i u\|_{L^{n_i(d-1)}(K)}^{n_i} \end{aligned}$$

où la constante $C(K)$ ne dépend que du compact K .

Nous avons ainsi montré qu'il existe une constante $C(K)$ ne dépendant que du compact K , telle que pour tout u dans $\mathcal{C}_c^1(K)$,

$$\|u\|_{L^m(K)}^m \leq C(K) \prod_{i=1}^d \|\partial_i u\|_{L^{n_i(d-1)}(K)}^{n_i}.$$

Nous pouvons alors conclure par densité de $\mathcal{C}_c^1(K)$ dans $H^1(K)$. \square

4.4.2. Démonstration du lemme 4.3.10 : caractère borné de la solution v

Démonstration du lemme 4.3.10. Nous utilisons la méthode des troncatures de Stampacchia comme elle est présentée dans la section IX.7 de [Bre83] afin de montrer que u est dans $L^\infty(\Omega_{\text{ext}})$.

Soit G une fonction $\mathcal{C}^1(\mathbb{R})$ vérifiant :

1. $0 \leq G'(s) \leq M$, $s \in \mathbb{R}$,
2. G est strictement croissante sur $]0, +\infty[$,
3. $G(s) = 0 \ \forall s \leq 0$.

Soit v une solution faible de (4.3). Posons $K = \max\{0, \sup_\Gamma v|_\Gamma\} < \infty$ et fixons $K' > K$. Alors la fonction $G(v - K')$ est dans $H_0^1(\Omega_{\text{ext}})$ par proposition IX.5 de [Bre83], et nous pouvons écrire

$$\int_{\Omega_{\text{ext}}} \epsilon |\nabla v|^2 G'(v - K') + \int_{\Omega_{\text{ext}}} \bar{\kappa}^2 \sinh v G(v - K') = 0.$$

Par les hypothèses de caractère borné de la dérivée de G et de croissance de G , nous en déduisons

$$0 \leq G(v - K') - G(-K') = G(v - K') \leq M|v|,$$

et sur l'ensemble $\{v \geq K'\}$ nous avons

$$K' \int_{\{v \geq K'\}} |v| \leq \int v^2,$$

ce qui permet de montrer que $G(v - K')$ est dans $L^1(\mathbb{R}^d)$.

Ainsi, nous pouvons déduire pour tout $K' > K$ que

$$\bar{\kappa}^2 \int_{\Omega_{\text{ext}}} (\sinh v - \sinh K') G(v - K') \leq -\bar{\kappa}^2 \int_{\Omega_{\text{ext}}} \sinh K' G(v - K') \leq 0,$$

donc que $\sinh v - \sinh K' \geq 0$ p.p. sur Ω_{ext} pour tout $K' > K$ et ainsi que $v \leq K$ p.p. sur Ω_{ext} .

En raisonnant de la même manière pour $-v$ nous obtenons l'inégalité suivante $-v \leq \max\{0, \sup_\Gamma -v|_\Gamma\}$, et donc que $\min\{0, \inf_\Gamma v|_\Gamma\} \leq v$. \square

4.4.3. Démonstration du lemme 4.3.4 : hypothèse d'intégrabilité

Nous détaillons dans cette partie la démonstration de l'hypothèse d'intégrabilité (**H5**) énoncée dans le lemme 4.3.4.

Remarque. Du fait que la fonction $f(\cdot, 0)$ est bornée, il nous suffit de vérifier l'existence de p et q strictement positif tels que

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\infty \exp \left\{ \int_0^t \lambda(X_s^x) ds \right\} dt \right] < \infty$$

avec $\lambda(\cdot) = p\mathbf{1}_{\{\Omega_{\text{int}}\}} - q\mathbf{1}_{\{\Omega_{\text{ext}}\}}$ pour démontrer le lemme et l'hypothèse d'intégrabilité.

Nous présentons dans un premier temps des résultats utiles, suivis de la démonstration du lemme dans le cas où le processus X^x est un mouvement brownien de dimension trois et où le domaine intérieur est une sphère. Enfin nous donnons la démonstration du cas général de la diffusion (2.14) de solution X^x associée à $\mathcal{L} := \nabla \cdot (\epsilon \nabla)$.

Résultats utiles dans cette section

Avant d'entamer la démonstration du lemme, nous donnons quelques résultats sur la transformée de Laplace du temps de sortie d'un intervalle pour un mouvement brownien et un processus de Bessel [RY99].

Lemme 4.4.1. *Soient B^x un mouvement brownien unidimensionnel partant de x dans $[0, R]$, τ le temps d'atteinte de $\{-R, R\}$ par ce brownien, et un réel α vérifiant $0 < \alpha < \frac{\pi^2}{8R^2}$, alors*

$$\mathbb{E}_x [e^{\alpha\tau}] = \frac{\cos \sqrt{2\alpha}x}{\cos \sqrt{2\alpha}R}. \quad (4.24)$$

Démonstration. Considérons la martingale locale positive

$$M_t^\tau = \cos \left\{ \sqrt{2\alpha} B_{t \wedge \tau}^x \right\} e^{\alpha t \wedge \tau}.$$

Soit $(\tau_n)_n$ la suite de temps d'arrêt $\tau \wedge n$, le théorème d'arrêt appliqué à la suite M_{τ_n} entraîne que

$$\mathbb{E}_x [M_{\tau_n}] = \cos \sqrt{2\alpha}x,$$

et le lemme de Fatou entraîne que

$$\mathbb{E}_x [M_\tau] \leq \cos \sqrt{2\alpha}x.$$

c'est-à-dire

$$\mathbb{E}_x [e^{\alpha\tau}] \leq \frac{\cos \sqrt{2\alpha}x}{\cos \sqrt{2\alpha}R}. \quad (4.25)$$

Nous pouvons alors conclure en invoquant le théorème de convergence dominée après avoir remarqué que

$$M_t^n \leq e^{\alpha\tau}.$$

□

Lemme 4.4.2. Soient ρ^x un processus de Bessel de dimension 3 partant de $x \in [0, R]$, τ le temps d'atteinte de R par ce processus de Bessel, et un réel α vérifiant $0 < \alpha < \frac{\pi^2}{8R^2}$, alors

$$\mathbb{E}_x [e^{\alpha\tau}] = \frac{\operatorname{sinc} \sqrt{2\alpha}x}{\operatorname{sinc} \sqrt{2\alpha}R}, \quad (4.26)$$

où l'on a défini

$$\operatorname{sinc}(x) := \begin{cases} \frac{\sin x}{x} & \text{pour } x \in \mathbb{R}^*, \\ 0 & \text{pour } x = 0. \end{cases}$$

Démonstration. La démonstration est identique à celle du lemme précédent. \square

Nous avons de plus besoin des transformées de Laplace du temps d'atteinte τ_R d'un intervalle $[0, R]$ par un processus de Bessel de dimension 3 partant de $x \geq R$ (formules 2.0.1 de [BS02])

$$\mathbb{E}_x [e^{-q\tau_R} | \tau_R < \infty] = \frac{R}{x} e^{-(x-R)\sqrt{2q}}. \quad (4.27)$$

et par un processus de Bessel de dimension 3 partant de 0

$$\mathbb{E}_0 [e^{-q\tau_R} | \tau_R < \infty] = \frac{R\sqrt{2q}}{\sinh(R\sqrt{2q})}. \quad (4.28)$$

Cas du mouvement brownien en dimension 3

Nous démontrons le résultat voulu en nous restreignant dans un premier temps au cas d'un mouvement brownien de dimension trois (cas où $\epsilon_{\text{int}} = \epsilon_{\text{ext}}$).

Cas où le domaine Ω_{int} est une boule

Lemme 4.4.3. Soit $|B|$ un processus de Bessel partant de $|x|$ associé à un mouvement brownien B de dimension 3 défini sur un espace de probabilité muni de la filtration associée à B . Il existe p et q strictement positifs tels que

$$\mathbb{E}_{|x|} \left[\int_0^\infty \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \right] < \infty.$$

Démonstration. Soit η un réel strictement positif. Définissons les suites de temps d'arrêt $(\tau_k)_k$ et $(\tau'_k)_k$ comme les temps d'atteinte successifs des boules de rayon r et $r + \eta$ respectivement

$$\tau_k := \inf \{ t > \tau'_{k-1}, \quad |B_t| = r \}, \quad (4.29)$$

$$\tau'_k := \inf \{ t > \tau_k, \quad |B_t| = r + \eta \}, \quad (4.30)$$

en ayant posé $\tau'_0 := 0$. Du fait de la transience du mouvement brownien en dimension 3, il existe presque sûrement un entier k fini tel que $\tau_k = \infty$.

Décomposons l'intégrale à l'aide de ces deux suites de temps d'arrêt :

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \\
 &= \int_0^{\tau_1} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \\
 &+ \sum_{k=1}^{\infty} \left[\mathbf{1}_{\{\tau_k < \infty\}} \int_{\tau_k}^{\tau'_k} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \right. \\
 &\left. + \mathbf{1}_{\{\tau'_k < \infty\}} \int_{\tau'_k}^{\tau_{k+1}} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \right].
 \end{aligned}$$

Plaçons nous sur l'événement $\mathbf{1}_{\{\tau_k < \infty\}}$ ($=\mathbf{1}_{\{\tau'_k < \infty\}}$) pour un entier k dans \mathbb{N}^* et étudions le terme général de la série précédente. En mettant en facteur la quantité

$$C_k := \exp \left\{ p \int_0^{\tau_k} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^{\tau_k} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\}.$$

et en remarquant qu'entre les instants τ'_k et τ_{k+1} le brownien est hors de la boule de rayon r , il reste

$$\begin{aligned}
 & \int_{\tau_k}^{\tau'_k} \exp \left\{ p \int_{\tau_k}^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_{\tau_k}^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \\
 &+ \exp \left\{ p \int_{\tau_k}^{\tau'_k} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_{\tau_k}^{\tau'_k} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \\
 &\quad \times \int_{\tau'_k}^{\tau_{k+1}} \exp \left\{ p \int_{\tau'_k}^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_{\tau'_k}^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \\
 &= \int_{\tau_k}^{\tau'_k} \exp \left\{ p \int_{\tau_k}^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_{\tau_k}^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \\
 &\quad + \exp \left\{ p \int_{\tau_k}^{\tau'_k} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_{\tau_k}^{\tau'_k} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \frac{1 - e^{-q(\tau_{k+1} - \tau'_k)}}{q} \\
 &\leq \int_{\tau_k}^{\tau'_k} e^{p(t - \tau_k)} dt + \exp \left\{ p \int_{\tau_k}^{\tau'_k} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds \right\} \frac{1 - e^{-q(\tau_{k+1} - \tau'_k)}}{q} \\
 &= \frac{e^{p(\tau'_k - \tau_k)} - 1}{p} + e^{p(\tau'_k - \tau_k)} \frac{1 - e^{-q(\tau_{k+1} - \tau'_k)}}{q}.
 \end{aligned}$$

D'après le lemme 4.4.2, pour un réel $p < \frac{\pi^2}{8r^2}$ cette dernière quantité est d'espérance

conditionnelle à \mathcal{F}_{τ_k} égale à

$$\begin{aligned} C_{p,q,\eta} &= \mathbb{E}_{|x|} \left[\left(\frac{e^{p(\tau'_k - \tau_k)} - 1}{p} + e^{p(\tau'_k - \tau_k)} \frac{1 - e^{-q(\tau_{k+1} - \tau'_k)}}{q} \right) \mathbf{1}_{\{\tau_k < \infty\}} \right] \\ &= \frac{\frac{\text{sinc } r\sqrt{2p}}{\text{sinc}(r+\eta)\sqrt{2p}} - 1}{p} + \frac{\text{sinc } r\sqrt{2p}}{\text{sinc}(r+\eta)\sqrt{2p}} \frac{1 - \frac{r}{r+\eta} e^{-\eta\sqrt{2q}}}{q}. \end{aligned}$$

Etudions maintenant de la même manière le terme C_k :

$$\begin{aligned} &\exp \left\{ p \int_0^{\tau_k} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^{\tau_k} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \\ &= \exp \left\{ p \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \\ &\quad \prod_{i=1}^{k-1} \exp \left\{ p \int_{\tau_i}^{\tau'_i} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_{\tau_i}^{\tau'_i} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \\ &\quad \exp \left\{ p \int_{\tau'_i}^{\tau_{i+1}} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_{\tau'_i}^{\tau_{i+1}} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \\ &\leq \exp \left\{ p \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \prod_{i=1}^{k-1} e^{-q(\tau_{i+1} - \tau'_i)} \exp \left\{ p \int_{\tau_i}^{\tau'_i} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds \right\} \\ &\leq \exp \left\{ p \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \prod_{i=1}^{k-1} e^{-q(\tau_{i+1} - \tau'_i)} e^{p(\tau'_i - \tau_i)}. \end{aligned}$$

Soit p réel strictement inférieur à $\frac{\pi^2}{8r^2}$, exprimons l'espérance du terme

$$\exp \left\{ p \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\}$$

selon la position de x :

$$\begin{aligned} C(x) &:= \mathbb{E}_{|x|} \left[\exp \left\{ p \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \mid \tau_1 < \infty \right] \\ &= \begin{cases} \mathbb{E}_{|x|} [e^{p\tau_1}] = \frac{\text{sinc } \sqrt{2p}x}{\text{sinc } \sqrt{2p}r} & \text{si } x \leq r \\ \mathbb{E}_{|x|} [e^{-q\tau_1} \mid \tau_1 < \infty] = \frac{r}{x} e^{-(x-r)\sqrt{2q}} & \text{si } x \geq r \end{cases}. \end{aligned}$$

En prenant l'espérance de chacun de ces termes, par propriété de Markov forte du

mouvement brownien, et par formule (4.27) nous obtenons

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}_x \left[\exp \left\{ p \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^{\tau_1} \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} \prod_{i=1}^{k-1} e^{-q(\tau_{i+1} - \tau'_i)} e^{p(\tau'_i - \tau_i)} \mathbf{1}_{\{\tau_k < \infty\}} \right] \\
 = C(x) \prod_{i=1}^{k-1} \mathbb{E}_{r+\eta} \left[e^{-q(\tau_{i+1} - \tau'_i)} | \tau_{i+1} < \infty \right] \mathbb{E}_r \left[e^{p(\tau'_i - \tau_i)} | \tau'_i < \infty \right] \\
 = C(x) \left(\frac{r}{r+\eta} e^{-\eta\sqrt{2q}} \frac{\text{sinc } r\sqrt{2p}}{\text{sinc } (r+\eta)\sqrt{2p}} \right)^{k-1}
 \end{aligned}$$

De plus comme

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P} \{ \tau_k < \infty \} &= \mathbb{P} \{ \tau_k < \infty | \tau_{k-1} < \infty \} \mathbb{P} \{ \tau_{k-1} < \infty \} \\
 &= \mathbb{P} \{ \tau_1 < \infty \} \mathbb{P} \{ \tau < \infty \}^{k-1} \\
 &= \left(\mathbf{1}_{\{x \leq r\}} + \mathbf{1}_{\{x \geq r\}} \frac{r}{x} \right) \left(\frac{r}{r+\eta} \right)^{k-1},
 \end{aligned}$$

nous obtenons

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| < r} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{|B_s| \geq r} ds \right\} dt \right] \\
 \leq C_x \left(\mathbf{1}_{\{x \leq r\}} + \mathbf{1}_{\{x \geq r\}} \frac{r}{x} \right) \left(1 + C_{p,q,\eta} \sum_{k=1}^\infty \left(\left(\frac{r}{r+\eta} \right)^2 e^{-\eta\sqrt{2q}} \frac{\text{sinc } r\sqrt{2p}}{\text{sinc } (r+\eta)\sqrt{2p}} \right)^{k-1} \right).
 \end{aligned}$$

Il ne reste alors plus qu'à choisir p et q de telle sorte que la quantité

$$\frac{\text{sinc } (r\sqrt{2p})}{\text{sinc } ((r+\eta)\sqrt{2p})} \left(\frac{r}{r+\eta} \right)^2 e^{-\eta\sqrt{2q}} \tag{4.31}$$

soit strictement plus petite que 1 pour conclure. \square

Cas d'un domaine général Il est aisé de généraliser à un domaine borné quelconque Ω_{int} en remarquant que

$$\begin{aligned}
 \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{B_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{B_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} \\
 \leq \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{B_s \in B(0,R)} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{B_s \in B^c(0,R)} ds \right\}
 \end{aligned}$$

où le rayon R est choisi de sorte que la boule $B(0, R)$ contienne Ω_{int} .

Cas de la diffusion (2.14) engendrée par l'opérateur sous forme divergence et à coefficients discontinus (2.11)

Montrons maintenant le résultat dans le cas général. Détaillons les principaux arguments utilisés :

1. le processus X^x vérifie la propriété de Markov forte (ce qui découle du fait que le problème de martingale de la définition 2.3.2 est bien posé),
2. les processus $X_{t/2\epsilon_{\text{int}}}^x$ et $X_{t/2\epsilon_{\text{ext}}}^x$ ont une trajectoire brownienne tant qu'ils restent respectivement dans Ω_{int} et Ω_{ext} ,
3. la distance du processus X^x à la frontière Γ a un comportement de mouvement brownien biaisé («*Skew Brownian Motion*» [Lej06]) sur une bande autour de la frontière Γ à un changement de probabilité près.

Notations Rappelons tout d'abord que Γ est l'interface entre les domaines Ω_{int} et Ω_{ext} et \mathcal{N} est un voisinage de Γ défini dans la section 2.1. Fixons η strictement positif de telle manière que la bande

$$\mathcal{W} := \{x \in \mathbb{R}^d : -\sqrt{2\epsilon_{\text{int}}}\eta < \rho(x) < \sqrt{2\epsilon_{\text{ext}}}\eta\}$$

soit contenue dans \mathcal{N} et notons $\Gamma^{-\eta}$ et $\Gamma^{+\eta}$ les bords intérieur et extérieur respectivement de cette bande. Soient $(\tau_k)_{k \geq 1}$ et $(\theta_k)_{k \geq 0}$ les suites de temps d'atteinte définies de la manière suivante, pour $k \geq 1$

$$\tau_k := \inf \{t > \theta_{k-1}, \quad X_t^x \in \Gamma\}, \quad (4.32)$$

$$\theta_k := \inf \{t > \tau_k, \quad X_t^x \in \Gamma^{-\eta} \cup \Gamma^{+\eta}\}, \quad (4.33)$$

avec la convention $\theta_0 := 0$.

Introduisons les quantités suivantes :

$$\begin{aligned} \nu &:= \sup_{x \in \Gamma} \mathbb{P}_x \{\tau_1 < \infty\}, \\ \nu_{p,\theta} &:= \sup_{x \in \Gamma} \mathbb{E}_x [\exp \{p(\theta_1 - \tau_1)\}], \\ \nu_{p,\tau} &:= \sup_{x \in \Gamma^{-\eta}} \mathbb{E}_x [\exp \{p(\tau_2 - \theta_1)\}], \\ \nu_{q,\tau} &:= \sup_{x \in \Gamma^{+\eta}} \mathbb{E}_x [\exp \{-q(\tau_2 - \theta_1)\}]. \end{aligned}$$

Remarquons tout d'abord que la quantité ν vérifie $0 < \nu < 1$ du fait de la transience de X^x ([BCMT10]).

Loi des temps d'arrêts Les trajectoires de $X_{t/2\epsilon_{\text{int}}}^x$ et $X_{t/2\epsilon_{\text{ext}}}^x$ sont des trajectoires browniennes tant qu'elles restent respectivement dans Ω_{int} et Ω_{ext} . Ainsi, grâce au lemme 4.4.2 et à la formule (4.28), les majorations suivantes sont vérifiées avec un réel R choisi de

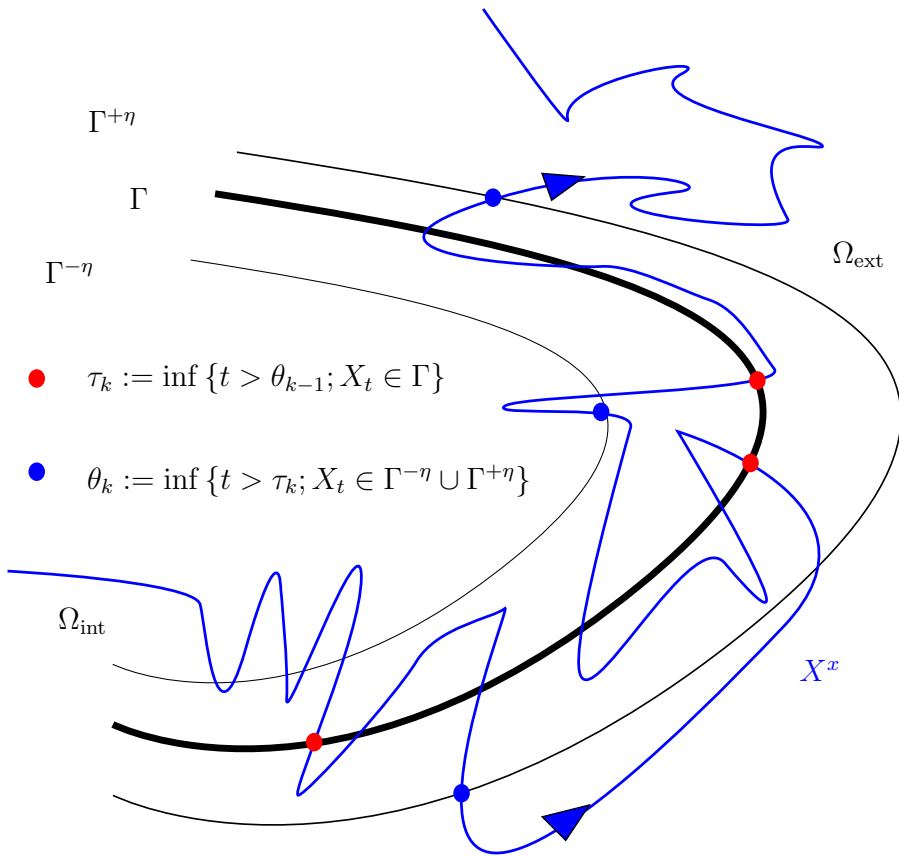


FIGURE 4.1.: Suites des temps d'arrêt pour le processus X

4.4. Démonstrations de trois lemmes techniques

telle manière que pour tout point x dans $\Gamma^{-\eta}$, nous avons le domaine Ω_{int} contenu dans la boule $B(x, R)$ et un réel p suffisamment petit

$$\nu_{p,\tau} \leq \mathbb{E} [\exp \{p\tau_R\}] = \frac{R\sqrt{p/\epsilon_i}}{\sin R\sqrt{p/\epsilon_i}}, \quad (4.34)$$

$$\nu_{q,\tau} \leq \mathbb{E} [\exp \{-q\tau_\eta\}] = \frac{\eta\sqrt{2q}}{\sinh \eta\sqrt{2q}}, \quad (4.35)$$

où τ_R et τ_η sont les temps d'atteinte pour un Bessel partant de 0 des boules de rayons R et $\sqrt{2\epsilon_e\eta}$.

Etudions maintenant le comportement du processus X dans la bande \mathcal{W} . Soit $X_0 = x$ dans la bande \mathcal{W} et $D_t = \rho(X_t)$ pour t dans $[0, \theta_1]$. Pour tout temps t vérifiant $0 \leq t \leq \theta_1$, on a

$$dD_t = \sqrt{2\tilde{\epsilon}(D_t)}dW_t + \frac{\epsilon_{\text{ext}} - \epsilon_{\text{int}}}{2\epsilon_{\text{ext}}}dL_t^0(D) + \tilde{\epsilon}(D_t)\Delta\rho(X_t)dt,$$

où le processus W est défini par

$$W_t := \int_0^t \nabla\rho(X_s)dB_s.$$

Ce processus est un mouvement brownien par théorème de caractérisation de P. Lévy (théorème 3.6 de [RY99]) et relation (2.3). Définissons la probabilité $\hat{\mathbb{P}}$ par

$$\frac{d\hat{\mathbb{P}}}{d\mathbb{P}} = M_t, \quad \forall t \geq 0,$$

où

$$M_t := \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^t \sqrt{2\epsilon(Y_s)}\Delta\rho(X_s)dW_s - \frac{1}{4} \int_0^t \epsilon(Y_s)(\Delta\rho(X_s))^2 ds \right\}. \quad (4.36)$$

Par le corollaire 5.2 du théorème de Girsanov dans [KS91] (le critère de Novikov [KS91] étant satisfait car $\Delta\rho$ et ϵ sont bornés), le processus $\hat{W}_t := W_t + \int_0^t \sqrt{\tilde{\epsilon}(D_s)}/2\Delta\rho(X_s)ds$ pour t dans $[0, \theta_1]$ est un mouvement brownien sous $\hat{\mathbb{P}}$ et nous pouvons écrire

$$dD_t = d\hat{W}_t + \frac{\epsilon_{\text{ext}} - \epsilon_{\text{int}}}{2\epsilon_{\text{ext}}}dL_t^0(D).$$

Introduisons la fonction de normalisation

$$F(x) = \begin{cases} \frac{x}{\sqrt{2\epsilon_{\text{int}}}}, & x \leq 0, \\ \frac{x}{\sqrt{2\epsilon_{\text{ext}}}}, & x > 0, \end{cases}$$

et posons $S_t = F(D_t)$. Notons que les événements $\{S_t = 0\}$ et $\{D_t = 0\}$ sont identiques et que

$$|S_t| = -\frac{D_t^-}{\sqrt{2\epsilon_{\text{int}}}} + \frac{D_t^+}{\sqrt{2\epsilon_{\text{ext}}}},$$

où nous avons noté D^- et D^+ les parties négative et positive de D . Rappelons les formules d'Itô-Tanaka pour une semi-martingale Y

$$\begin{aligned} |Y_t| &= \int_0^t \text{signe}(Y_s) dY_s + L_t^0(Y), \\ |Y_t| &= \int_0^t \mathbf{1}_{\{Y_s > 0\}} dY_s + \frac{1}{2} L_t^0(Y), \\ |Y_t| &= - \int_0^t \mathbf{1}_{\{Y_s \leq 0\}} dY_s + \frac{1}{2} L_t^0(Y). \end{aligned}$$

Appliquons les formules de d'Itô-Tanaka $|S_t|$, $S_t = S_t^+ - S_t^-$ et $|F(D_t)| = F(D_t)^+ + F(D_t)^-$ pour obtenir d'une part que

$$\begin{aligned} dS_t^+ &= \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{ext}}}} dD_t^+ = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{ext}}}} \mathbf{1}_{\{D_t > 0\}} dD_t + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{ext}}}} dL_t^0(D) \\ &= \mathbf{1}_{\{D_t > 0\}} d\hat{W}_t + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{ext}}}} dL_t^0(D), \\ dS_t^- &= \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{int}}}} dD_t^- = -\frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{int}}}} \mathbf{1}_{\{D_t \leq 0\}} dD_t + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{int}}}} dL_t^0(D) \\ &= -\mathbf{1}_{\{D_t \leq 0\}} d\hat{W}_t - \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{int}}}} \frac{\epsilon_{\text{ext}} - \epsilon_{\text{int}}}{2\epsilon_{\text{ext}}} dL_t^0(D) + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\text{int}}}} dL_t^0(D) \\ &= -\mathbf{1}_{\{D_t \leq 0\}} d\hat{W}_t + \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\epsilon_{\text{int}}}}{\epsilon_{\text{ext}}} dL_t^0(D) \end{aligned}$$

et donc que

$$\begin{aligned} dS_t &= d\hat{W}_t + \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}} - \sqrt{\epsilon_{\text{int}}}}{\epsilon_{\text{ext}}} dL_t^0(D) \\ d|S_t| &= (\mathbf{1}_{\{D_t > 0\}} - \mathbf{1}_{\{D_t \leq 0\}}) d\hat{W}_t + \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}} + \sqrt{\epsilon_{\text{int}}}}{\epsilon_{\text{ext}}} dL_t^0(D) \end{aligned}$$

et d'autre part que

$$d|S_t| = \text{signe}(S_t) dS_t + dL_t^0(S).$$

Ainsi, en combinant les expressions, nous obtenons

$$\sqrt{2\epsilon_{\text{ext}}} dL_t^0(S) = dL_t^0(D)$$

et

$$dS_t = d\hat{W}_t + \frac{\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}} - \sqrt{\epsilon_{\text{int}}}}{2\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}}} dL_t^0(S) \quad \hat{\mathbb{P}} - p.s.$$

Ainsi le processus S est un mouvement brownien biaisé («*Skew Brownian Motion*» voir par exemple [MR578, IM74, Lej06]) de paramètre β strictement compris entre 0 et 1 :

$$\beta := \frac{\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}} - \sqrt{\epsilon_{\text{int}}}}{\sqrt{\epsilon_{\text{ext}}} + \sqrt{\epsilon_{\text{int}}}},$$

4.4. Démonstrations de trois lemmes techniques

et θ est exactement le temps d'atteinte de $\{-\eta, \eta\}$ par le processus S . Or la loi du temps de sortie de $[-\eta, \eta]$ par un mouvement brownien biaisé est celle du temps de sortie de $[-\eta, \eta]$ par un mouvement brownien standard [Lej06]. De plus l'événement $\{S_\theta = \eta\}$ est indépendant de θ et a une probabilité $(1 + \beta)/2$,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbb{P}}\{X_\theta \in \Gamma^-\} &= \frac{1 - \beta}{2} \\ \hat{\mathbb{P}}\{X_\theta \in \Gamma^+\} &= \frac{1 + \beta}{2}.\end{aligned}$$

Le terme $\nu_{p,\theta}$ s'exprime en majorant $\hat{\mathbb{E}}[M_\theta^{-1}e^{p\theta}]$ sous la probabilité $\hat{\mathbb{P}}$ où M_\cdot est définie par l'équation (4.36) et où $\theta := (\theta - \tau)$. Or nous pouvons écrire M_\cdot^{-1} comme le produit de la racine carrée d'une martingale exponentielle $N^{1/2}$

$$N^{1/2} := \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^\cdot \sqrt{2\tilde{\epsilon}(Y_s)} \Delta\rho(X_s) dW_s - \frac{1}{2} \int_0^\cdot \tilde{\epsilon}(Y_s) (\Delta\rho(X_s))^2 ds \right\},$$

et du terme

$$\exp \left\{ \frac{3}{4} \int_0^\cdot \tilde{\epsilon}(Y_s) (\Delta\rho(X_s))^2 ds \right\}. \quad (4.37)$$

La loi sous $\hat{\mathbb{P}}$ du temps de sortie de la bande \mathcal{W} par un mouvement brownien biaisé partant du bord Γ est la loi du temps de sortie de l'intervalle $[-\eta, \eta]$ d'un mouvement brownien partant de 0. Il est alors possible de majorer l'espérance sous $\hat{\mathbb{P}}$ de $M_\theta^{-1}e^{p\theta}$ et d'utiliser le lemme 4.4.2 pour obtenir

$$\begin{aligned}\hat{\mathbb{E}}[M_\theta^{-1}e^{p\theta}] &\leq \hat{\mathbb{E}}[N_\theta]^{1/2} \hat{\mathbb{E}} \left[\exp \left\{ \frac{3}{2} \int_0^\theta \tilde{\epsilon}(Y_s) (\Delta\rho(X_s))^2 ds \right\} e^{2p\theta} \right]^{1/2} \\ &\leq \hat{\mathbb{E}}[e^{(C_\eta + 2p)\theta}]^{1/2} = \frac{1}{\cos^{1/2} \eta \sqrt{2(C_\eta + 2p)}}\end{aligned}$$

où la constante C_η est choisie de telle manière que $|\tilde{\epsilon}(y)(\Delta\rho(x))^2| \leq 2C_\eta/3$ pour x dans la bande \mathcal{W} , et $y = \rho(x)$. Le paramètre η doit de plus être choisi de manière à vérifier l'hypothèse du lemme 4.4.1 :

$$C_\eta + 2p < \frac{\pi^2}{8\eta^2}.$$

Démonstration du lemme 4.3.4

Démonstration. Revenons maintenant à la démonstration de l'hypothèse d'intégrabilité. Décomposons l'intégrale suivante à l'aide des suites de temps d'arrêt introduites précé-

demment :

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\
 &= \mathbf{1}_{\tau_1 < \infty} \int_0^{\tau_1} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\
 & \quad \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{1}_{\tau_k < \infty} \int_{\tau_k}^{\theta_k} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\
 & \quad + \mathbf{1}_{\tau_k < \infty} \int_{\theta_k}^{\tau_{k+1}} \exp \left\{ p \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\
 &= \sum_{k=1}^{\infty} C_k (A_k + B_k) \mathbf{1}_{\tau_k < \infty} \tag{4.38}
 \end{aligned}$$

où l'on a posé

$$\begin{aligned}
 A_k &:= \int_{\tau_k}^{\theta_k} \exp \left\{ p \int_{\tau_k}^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_{\tau_k}^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\
 B_k &:= \int_{\theta_k}^{\tau_{k+1}} \exp \left\{ p \int_{\theta_k}^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_{\theta_k}^t \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\} dt \\
 C_k &:= \exp \left\{ p \int_0^{\tau_k} \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{int}}} ds - q \int_0^{\tau_k} \mathbf{1}_{X_s \in \Omega_{\text{ext}}} ds \right\}
 \end{aligned}$$

Plaçons-nous sur l'événement $\{\tau_k < \infty\}$ de probabilité majorée par ν^k pour traiter séparément chacun des trois termes précédents.

1. Le terme A_k correspond à une partie de trajectoire dans la bande \mathcal{W} :

$$A_k = \int_{\tau_k}^{\theta_k} e^{p(t-\tau_k)} dt = \frac{e^{p(\theta_k-\tau_k)} - 1}{p}.$$

Son espérance conditionnelle à l'événement $\{\tau_k < \infty\}$ est majorée par

$$\frac{\nu_{p,\theta} - 1}{p}.$$

2. Le terme B_k correspond à une partie de trajectoire hors de la bande \mathcal{W} . Aussi nous l'explicitons en distinguant le cas où la trajectoire est dans le domaine intérieur Ω_{int}

$$\int_{\theta_k}^{\tau_{k+1}} e^{p(t-\theta_k)} dt = \frac{e^{p(\tau_{k+1}-\theta_k)} - 1}{p},$$

dont l'espérance conditionnelle à l'événement $\{\tau_k < \infty, X_{\theta_k} \in \Omega_{\text{int}}\}$ est à nouveau majorée par

$$\frac{\nu_{p,\theta} - 1}{p},$$

du cas où elle se situe dans le domaine extérieur Ω_{ext} :

$$\int_{\theta_k}^{\tau_{k+1}} e^{-q(t-\theta_k)} dt = \frac{1 - e^{-q(\tau_{k+1}-\theta_k)}}{q},$$

dont l'espérance conditionnelle à l'événement $\{\tau_k < \infty, X_{\theta_k} \in \Omega_{\text{ext}}\}$ est majorée par $\frac{1}{q}$.

La somme $A_k + B_k$ est indépendante de k et finie. Il reste donc à vérifier que $(\mathbb{E}[C_k \mathbf{1}_{\tau_k < \infty}])_{k \geq 1}$ est le terme général d'une série convergente.

3. Allégeons les notations en posant $p(\cdot) := p \mathbf{1}_{X \in \Omega_{\text{int}}}$ et $q(\cdot) := q \mathbf{1}_{X \in \Omega_{\text{ext}}}$. Pour traiter le terme C_k , nous utilisons à nouveau les suites de temps d'arrêt τ . et θ . :

$$\begin{aligned} & \exp \left\{ \int_0^{\tau_k} p(s) ds - \int_0^{\tau_k} q(s) ds \right\} \\ \leq & \exp \left\{ \int_0^{\tau_1} p(s) - q(s) ds \right\} \exp \left\{ \sum_{i=1}^{k-1} \int_{\tau_i}^{\theta_i} p(s) - q(s) ds + \int_{\theta_i}^{\tau_{i+1}} p(s) - q(s) ds \right\} \\ = & \exp \left\{ \int_0^{\tau_1} p(s) - q(s) ds \right\} \prod_{i=1}^{k-1} e^{p(\theta_i - \tau_i)} \exp \left\{ \int_{\theta_i}^{\tau_{i+1}} p(s) - q(s) ds \right\} \\ = & \exp \left\{ \int_0^{\tau_1} p(s) - q(s) ds \right\} \prod_{i=1}^{k-1} e^{p(\theta_i - \tau_i)} \left(e^{p(\tau_{i+1} - \theta_i)} \mathbf{1}_{X_{\theta_i} \in \Omega_{\text{int}}} + e^{-q(\tau_{i+1} - \theta_i)} \mathbf{1}_{X_{\theta_i} \in \Omega_{\text{ext}}} \right). \end{aligned}$$

Le processus X vérifiant la propriété de Markov forte, les produits ci-dessus sont des produits de termes indépendants. Ainsi l'espérance du dernier membre de l'équation conditionnellement à l'événement $\{\tau_k < \infty, X_{\tau_k} = x\}$ est majorée par

$$\begin{aligned} \sup_{x \in \Gamma} \left(\frac{\text{sinc} \sqrt{p/\epsilon_{\text{int}}} x}{\text{sinc} \sqrt{p/\epsilon_{\text{int}}} R} \mathbf{1}_{x \in \Omega_{\text{int}}} + \frac{\rho(x) \sqrt{2q}}{\sinh \rho(x) \sqrt{2q}} \mathbf{1}_{x \in \Omega_{\text{ext}}} \right) \\ \nu_{p,\theta}^{k-1} \left(\nu_{p,\tau} \frac{1-\beta}{2} + \nu_{q,\tau} \frac{1+\beta}{2} \right)^{k-1} \end{aligned}$$

où la constante β est définie par

$$\frac{1-\beta}{2} = \hat{\mathbb{E}} \left[\mathbf{1}_{X_{\theta_i} \in \Omega_{\text{int}}} \right].$$

Choix de η , p et q En utilisant les relations (4.34) et (4.35), nous devons donc choisir η , p et q de sorte que la quantité

$$\frac{\nu}{\cos^{1/2} \eta \sqrt{2(C_\eta + 2p)}} \left(\frac{R \sqrt{p/\epsilon_i}}{\sin R \sqrt{p/\epsilon_i}} \frac{1-\beta}{2} + \frac{\eta \sqrt{2q}}{\sinh \eta \sqrt{2q}} \frac{1+\beta}{2} \right)$$

soit strictement inférieure à 1 afin de rendre la série (4.38) convergente.

Le paramètre η est choisi suffisamment petit de sorte que pour tout point x dans la bande \mathcal{W} de largeur 2η

$$|\epsilon(x)(\Delta\rho(x))^2| < \frac{\pi^2}{12\eta^2},$$

et

$$\frac{\nu}{\cos^{1/2} \eta \sqrt{2(C_\eta + 2p)}} < 1$$

avec C_η tel que $|\epsilon(x)(\Delta\rho(x))^2| \leq 2C_\eta/3$ pour x dans la bande \mathcal{W} .

On choisit q strictement positif, puis p strictement positif suffisamment petit pour que

$$\left(\frac{R\sqrt{p/\epsilon_i}}{\sin R\sqrt{p/\epsilon_i}} \frac{1-\beta}{2} + \frac{\eta\sqrt{2q}}{\sinh \eta\sqrt{2q}} \frac{1+\beta}{2} \right) < 1. \quad \square$$

Deuxième partie .

Détection des variables lentes en
dynamique moléculaire

Chapitre 5.

Estimateur de Malliavin

Cette partie reprend des travaux initiés par Paul Malliavin [Mal06].

5.1. Introduction

5.1.1. Présentation

Dans cette deuxième partie extrêmement prospective, nous nous intéressons à la problématique de la réduction du nombre de variables d'un système dynamique à plusieurs échelles de temps. L'*échelle de temps* d'une composante d'un système dynamique peut être caractérisée par un temps de relaxation à l'équilibre, la période d'un mouvement périodique ou quasi-périodique ou encore le temps de Lyapunov (lié à l'ordre de grandeur du temps auquel un système chaotique devient proche de son attracteur). Un *système dynamique à plusieurs échelles de temps* est un système dont les composantes ont des échelles de temps d'ordres bien séparées. La dynamique moléculaire, l'évolution de l'atmosphère de la Terre soumise à des changements périodiques des radiations solaires ou encore l'évolution d'un portefeuille financier comprenant un très grand nombre de lignes sont des exemples de telles dynamiques.

Dans le cas de la dynamique moléculaire, où le nombre de variables dans le système est très grand et où les différences d'échelles de temps sont très marquées, réduire la dimension du système afin de faciliter sa simulation est un enjeu très important. L'une des manières est de détecter les variables lentes ou les variables significatives (en un sens à déterminer) et construire une dynamique projetée, c'est-à-dire une dynamique autonome vérifiée par ces variables.

La problématique de réduction des variables pour un système dynamique donne lieu à un foisonnement d'articles. Citons en particulier le résumé des questions ouvertes en dynamique moléculaire présenté dans [BHP⁺11] et l'état de l'art des méthodes mathématiques de réduction de variables appliquées à la dynamique moléculaire effectué dans [GKS04].

5.1.2. Plan du chapitre

Dans une première section (section 5.2), nous présentons un estimateur de séparation des variables lentes et rapides. Cet estimateur a été proposé par Paul Malliavin lors

de communications personnelles à Denis Talay et présenté à l'équipe TOSCA lors de séminaires. Tel qu'il a été présenté, l'estimateur n'était associé à aucun modèle de dynamique, et de nombreuses hypothèses restent toujours à déterminer. Le principe est le suivant : étant donné une trajectoire de processus, on estime les matrices de covariance avec retard. Puis en moyennant ces matrices de manière à privilégier les petits retards associés par transformée de Fourier aux fréquences basses de la matrice de densité spectrale, Paul Malliavin pensait qu'il était possible de détecter les composantes lentes du système en étudiant les vecteurs propres associés aux grandes valeurs propres de cette matrice.

Cette méthode pose plusieurs questions : quel est précisément le phénomène mathématique que l'on cherche à détecter, et quelle est la justification mathématique de cette détection ? Autrement dit : qu'entend-on par composantes lentes ? Est-ce les combinaisons linéaires représentées par les vecteurs propres de grandes valeurs propres, ou est-ce les coordonnées significatives de ces vecteurs propres ? Paul Malliavin dans ses différentes notes semble avoir évolué de la première possibilité vers la seconde.

Une deuxième problématique est le choix de l'ordre de temps sur lequel on va effectuer la moyenne le long de la trajectoire observée. Dans le cas de la dynamique moléculaire pour lequel l'estimateur a été imaginé, du fait de la limitation des techniques numériques actuelles et de la complexité des systèmes étudiés, la durée des trajectoires actuellement simulable est petite devant l'échelle de temps de la dynamique. Aussi l'ordre de temps sur lequel effectuer la moyenne doit-il être d'ordre $o(\epsilon)$, $O(\epsilon)$ ou d'ordre $O(1)$ avec ϵ l'ordre de grandeur du temps de relaxation des composantes rapides du système ? Autrement dit en appliquant la méthode pour une trajectoire de taille $2T$ va-t-on détecter des variables rapides d'ordre petit devant $2T$ ou d'ordre $2T$?

Une troisième question est la suivante : doit-on supposer que le système étudié a atteint un mode globalement stationnaire, ou bien peut-on se contenter de supposer que seules les variables rapides ont atteint leur mode stationnaire ?

Dans un premier temps, nous avons étudié l'estimateur dans le cas d'un système dynamique stochastique linéaire à deux échelles de temps ayant atteint son mode stationnaire. Les résultats tant théoriques que numériques semblaient prometteurs. Nous explicitons les calculs et le comportement de la matrice de détection en fonction du paramètre d'échelle dans le cas d'un système linéaire du type processus d'Orstein-Uhlenbeck dans son mode stationnaire (section 5.3).

Puis nous avons cherché à généraliser les résultats au cas non-linéaire en utilisant la théorie de l'homogénéisation. La théorie de l'homogénéisation est basée sur le principe que les variables rapides du système sont suffisamment rapides pour que l'on puisse approcher leur comportement par celui d'un système dans lequel on aurait fixé ou gelé les variables lentes. Les calculs même formels sont mitigés et ne permettent pas de donner avec certitude de résultat sur la validité de l'estimateur de Malliavin. Les modèles d'homogénéisation hors cas particuliers se rapprochant du cas linéaire ne semblent pas adaptés à la méthode de Malliavin, et il faudra certainement se tourner vers d'autres pistes à l'avenir : théorie du signal et processus gaussiens par exemple.

Afin de mieux comprendre ce que nous cherchions à détecter et comment nous devions le détecter, nous avons par la suite travaillé sur la méthode de Mori-Zwanzig

[Mor65, Zwa73]. En effet, Paul Malliavin après avoir séparé les variables lentes des variables rapides propose d'utiliser cette méthode pour construire une dynamique projetée approchant la dynamique des variables lentes. En comprenant la façon dont nous allons utiliser les variables lentes détectées, nous espérons mieux comprendre comment les détecter. La méthode de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73] peut être vue comme une justification formelle (sous réserve de deux hypothèses non mathématiquement justifiées à notre connaissance) de l'équation de Langevin [Lan08].

Notons qu'une utilisation des méthodes de Fourier à l'estimation de matrice de volatilité en finance a été étudiée dans [MM02, MR05, MMR07, MM09, CG11]. Malliavin et Mancino proposent une méthode d'estimation non-paramétrique de la volatilité (c'est-à-dire que l'estimation ne se fait pas par calibration d'un modèle paramétrique supposé suivi par la volatilité) consistant à calculer les coefficients de Fourier du processus de prix S grâce aux données haute-fréquence de la trajectoire.

5.2. Proposition d'estimateur

Nous présentons dans cette partie l'estimateur de détection de variables lentes tel qu'il a été proposé par Paul Malliavin.

5.2.1. Notations et contexte

Supposons donnée une trajectoire de dynamique moléculaire sur un intervalle de temps petit devant l'échelle de temps de la dynamique. Insistons ici sur le fait que selon notre compréhension de la méthode, la trajectoire que nous devons utiliser est une trajectoire réaliste - autrement dit une trajectoire obtenue en simulant de la manière la plus réaliste possible le système moléculaire, et non pas une trajectoire obtenue à l'aide d'un modèle de Langevin par exemple. On souhaite détecter dans cette trajectoire quels sont les atomes contribuant ou participant de manière importante au mouvement lent de la molécule.

La trajectoire de dynamique moléculaire se présente sous la forme d'une suite de positions en trois dimensions des différents atomes composant le système moléculaire (protéine dans un solvant par exemple) prises à chaque pas de temps de la simulation.

Notons \mathcal{A} l'ensemble des atomes impliqués dans la dynamique moléculaire considérée, et N le cardinal de \mathcal{A} . Pour chaque atome d'indice k dans \mathcal{A} , on note $a_k^i(t)$ la position de la i -ième coordonnée de l'atome à l'instant δt où δ est le pas de temps et t est un entier entre 0 et $2T$ (durée de la simulation).

Pour chaque trajectoire de la coordonnée i de l'atome k , on calcule la trajectoire centrée en espace et en temps, notée ϕ_k^i :

$$\phi_k^i(t) := \begin{cases} a_k^i(T+t) - \frac{1}{2T+1} \sum_{s=0}^{2T} a_k^i(s) & t \in [-T, T] \\ 0 & t \notin [-T, T] \end{cases}$$

Il est maintenant possible d'estimer la *covariance croisée avec retard* s dans $] -T, T[$

entre les trajectoires des coordonnées i et j pour des atomes k et l :

$$\hat{R}_{k,l}^{i,j}(s) := \text{cov}_s(\phi_k^i, \phi_l^j) = \frac{1}{T - |s|} \sum_{t=-\infty}^{\infty} \phi_k^j(t+s) \phi_l^i(t).$$

Ainsi pour deux atomes d'indice k et l fixés, on obtient une fonction à valeur matricielle symétrique de dimension 3×3 du retard s . Nous considérons dans la suite des quantités ne dépendant que de la trace de cette matrice carrée de taille 3. Introduisons donc la trace $m_{k,l}(t)$ de la matrice de covariance avec retard pour deux atomes k et l (insistons sur le fait que la trace est prise afin de résumer l'information des trois coordonnées de chaque atome en une seule quantité). Nous notons \hat{R} la matrice carrée de taille N (non symétrique en général), la matrice de coordonnée $m_{k,l}$. À partir de cette matrice, nous définissons, pour un entier τ de l'ordre de $T/2$ (à justifier et à interpréter), l'estimateur de la matrice de réduction \mathcal{S}_τ comme

$$\hat{\mathcal{S}}_\tau = \frac{1}{\tau} \sum_{t=-\tau}^{\tau} \left(1 - \frac{|t|}{\tau}\right)^q \hat{R}(t),$$

pour q pris égal à 1 ou 2 (à choisir numériquement). La matrice de réduction \mathcal{S}_τ est symétrique. Cette matrice est un estimateur de la matrice S_τ

$$\mathcal{S}_\tau = \frac{1}{\tau} \int_{t=-\tau}^{\tau} \left(1 - \frac{|t|}{\tau}\right)^q R(t) dt,$$

si l'on suppose que l'on peut appliquer des résultats d'ergodicité à la trajectoire. Dans la suite nous étudions la matrice \mathcal{S}_τ .

5.2.2. Interprétation de l'estimateur de Malliavin

On constate que la matrice de réduction de Malliavin définie par

$$\mathcal{S}_\tau = \frac{1}{\tau} \int_{- \tau}^{\tau} \left(1 - \frac{|s|}{\tau}\right)^q R(s) ds$$

peut s'interpréter à l'aide de la transformée de Fourier comme

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\tau &= \frac{1}{\tau} \int_{- \tau}^{\tau} \left(1 - \frac{|s|}{\tau}\right)^q R(s) ds \\ &= \frac{1}{\tau} \int_{- \tau}^{\tau} \left(1 - \frac{|s|}{\tau}\right)^q \int_{- \infty}^{\infty} e^{ius} f(u) du ds \\ &= \int_{- \infty}^{\infty} \frac{1}{\tau} \int_{- \tau}^{\tau} \left(1 - \frac{|s|}{\tau}\right)^q e^{ius} ds f(u) du \end{aligned}$$

où f est la densité spectrale associée à R . Or

$$\frac{1}{\tau} \int_{- \tau}^{\tau} \left(1 - \frac{|s|}{\tau}\right)^q e^{ius} ds = \frac{\sin^2(u\tau/2)}{(u\tau/2)^2},$$

5.3. Application au cas linéaire et tentative d'extension par linéarisation

et ainsi la matrice \mathcal{S}_τ s'écrit comme

$$\mathcal{S}_\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(u\tau/2)}{(u\tau/2)^2} f(u) du.$$

La matrice \mathcal{S}_τ s'interprète donc comme une moyenne pondérée (priviliégiant les fréquences basses) de la densité spectrale du processus. Ainsi, on peut penser que les vecteurs propres associés aux grandes valeurs propres de la matrice \mathcal{S}_τ correspondent à des mouvements lents ou que les atomes-coordonnées significatifs de ces vecteurs propres peuvent être considérés comme des atomes à mouvements lents.

5.2.3. Détection des variables lentes

Calculons les valeurs propres de la matrice \mathcal{S}_τ , et sélectionnons les n valeurs propres les plus grandes. En pratique le choix de ce paramètre est délicat et est relié au nombre de composantes lentes du système - difficile à définir et estimer. Soit f_i les vecteurs propres normalisés associés. Chaque coordonnée f_i^a du vecteur f_i représente le poids de l'atome a dans le vecteur propre. On définit alors la *norme lente* pour un atome a , permettant de mesurer la contribution de l'atome aux mouvements lents comme

$$\|a\|^2 = \sum_{i=1}^n (f_i^a)^2.$$

Ainsi une grande norme correspond à un atome participant de manière importante aux mouvements lents de la protéine. Le choix des atomes proposé par Paul Malliavin s'effectue de la manière suivante : n'est conservé qu'un atome ayant une norme lente se situant au dessus d'un seuil à fixer. La détection des variables lentes d'un système moléculaire est ensuite complétée par l'élaboration d'une dynamique réduite ne faisant intervenir que les variables lentes. La méthode proposée par Paul Malliavin est celle de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73] dont nous donnons un aperçu dans l'appendice B.

5.3. Application au cas linéaire et tentative d'extension par linéarisation

Dans cette section, nous étudions à l'aide de l'estimateur de Malliavin un processus vectoriel X de type Ornstein-Uhlenbeck de dimension d dans son mode stationnaire.

5.3.1. Calculs généraux

Processus étudié Soient b et σ des matrices carrées de taille d . Afin de garantir l'existence d'une mesure invariante nous supposons de plus que les valeurs propres de la matrice b sont *strictement positives*. Soit X_0 un vecteur aléatoire de dimension d . Définissons le processus X de type Ornstein-Uhlenbeck associé à un mouvement brownien

standard B de dimension d . Ce processus

$$X_t = e^{-bt} X_0 + \int_0^t e^{-b(t-s)} \sigma dB_s, \quad t \geq 0,$$

est solution de l'équation différentielle stochastique

$$\begin{cases} dX_t = -bX_t dt + \sigma dB_t, & t \geq 0 \\ X_0 = X_0, \end{cases} \quad (5.1)$$

où e^{-bu} est l'exponentielle matricielle définie par $e^{-bu} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-u)^k b^k}{k!}$.

Caractéristiques du processus Rappelons, pour t positif, quelques caractéristiques de la loi de X_t et de la loi stationnaire du processus X . L'espérance de X_t est donnée par

$$\mathbb{E}[X_t] = e^{-bt} \mathbb{E}[X_0], \quad t \geq 0,$$

dont la limite lorsque t tend vers l'infini est nulle. L'espérance du processus stationnaire est donc nulle. La covariance est donnée par

$$\text{Cov}[X_t] = e^{-bt} \text{Cov}[X_0] e^{-b^*t} + \int_0^t e^{-b(t-u)} \sigma \sigma^* e^{-b^*(t-u)} du.$$

Nous notons $\text{Cov}[X]$ et $\text{Cov}[X, Y]$ les matrices de covariance de respectivement un et deux vecteur aléatoire X et Y . Ces matrices vérifient $\text{Cov}[X] = \text{Cov}[X, X]$ et ont pour coordonnées les coefficients $(\text{Cov}[X_i, Y_j])_{i,j} = (\mathbb{E}[X_i Y_j] - \mathbb{E}[X_i] \mathbb{E}[Y_j])_{i,j}$. Notons C la matrice de covariance du processus stationnaire, sa limite lorsque t tend vers l'infini, qui est donc égale à

$$C = \int_0^{\infty} e^{-bu} \sigma \sigma^* e^{-b^*u} du.$$

Covariance avec retard du processus La covariance avec retard vaut quant à elle

$$\begin{aligned} \text{Cov}[X_t, X_{t+s}] &= \mathbb{E}[(X_t - \mathbb{E}[X_t])(X_{t+s} - \mathbb{E}[X_{t+s}])^*] \\ &= \mathbb{E}[e^{-bt} X_0 X_0^* e^{-b^*(t+s)} - e^{-bt} \mathbb{E}[X_0 X_0^*] e^{-b^*(t+s)}] \\ &\quad + \mathbb{E}\left[\left(\int_0^t e^{-b(t-u)} \sigma dB_u\right) \left(\int_0^{t+s} e^{-b(t+s-v)} \sigma dB_v\right)^*\right] \\ &= e^{-bt} \text{Cov}[X_0] e^{-b^*(t+s)} + \int_0^{\min(t, t+s)} e^{-b(t-u)} \sigma \sigma^* e^{-b^*(t-u)} du e^{-b^*s} \\ &= \begin{cases} e^{bs} \text{Cov}[X_{t+s}], & s < 0 \\ \text{Cov}[X_t] e^{-b^*s}, & s \geq 0 \end{cases} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \begin{cases} e^{bs} \int_0^{\infty} e^{-bu} \sigma \sigma^* e^{-b^*u} du, & s < 0 \\ \int_0^{\infty} e^{-bu} \sigma \sigma^* e^{-b^*u} du e^{-b^*s}, & s \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

5.3. Application au cas linéaire et tentative d'extension par linéarisation

Et ainsi la fonction de covariance stationnaire avec retard est égale à

$$R(t) = \begin{cases} e^{bt}C, & t < 0 \\ Ce^{-b^*t}, & t \geq 0. \end{cases}$$

Densité spectrale La covariance avec retard stationnaire calculée, nous pouvons maintenant donner l'expression de la densité spectrale du processus, stationnaire :

Lemme 5.3.1. *La densité spectrale du processus stationnaire associé à l'équation (5.1) est donnée par l'expression suivante*

$$f_X(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \text{Cov}[X_t, X_{t+s}] e^{-i\lambda s} ds = \int_{-\infty}^0 e^{bs-i\lambda s} ds C + C \int_0^{\infty} e^{-b^*s-i\lambda s} ds$$

où l'expression de C est donnée par

$$C = \int_0^{\infty} e^{-bu} \sigma \sigma^* e^{-b^*u} du.$$

Démonstration. La démonstration tient dans le calcul immédiat suivant :

$$\begin{aligned} f_X(\lambda) &= \int_{-\infty}^{\infty} \text{Cov}[X_t, X_{t+s}] e^{-i\lambda s} ds \\ &= \int_{-\infty}^0 e^{bs-i\lambda s} \int_0^{\infty} e^{-bu} \sigma \sigma^* e^{-b^*u} du ds + \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-bu} \sigma \sigma^* e^{-b^*u} du e^{-b^*s-i\lambda s} ds \\ &= \int_{-\infty}^0 e^{bs-i\lambda s} ds C + C \int_0^{\infty} e^{-b^*s-i\lambda s} ds. \end{aligned}$$

□

Densité spectrale lorsque la matrice b est diagonalisable Sous l'hypothèse que b est diagonalisable et en diagonalisant $b = ADA^{-1}$ avec $D = \text{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_d)$ où $(\lambda_j)_{j=1..d}$ sont les valeurs propres de b , la densité spectrale matricielle du processus stationnaire s'écrit

$$\begin{aligned} f_X(\lambda) &= A \int_{-\infty}^0 e^{\lambda_j s - is\lambda} ds A^{-1} C + CA \int_0^{\infty} e^{-\lambda_j s - is\lambda} ds A^{-1} \\ &= A \left(\frac{1}{\lambda_j - i\lambda} \right)_j A^{-1} C + CA^{-1} \left(\frac{1}{\lambda_j + i\lambda} \right)_j A. \end{aligned}$$

Expression de la matrice de réduction dans le cas b diagonalisable et noyau V pair Supposant que le noyau V_τ est pair, on peut obtenir l'expression générale suivante

de la matrice de réduction

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}_\tau &= \int_{\mathbb{R}} \hat{V}_\tau(\lambda) f_X(\lambda) d\lambda \\
 &= A \left(\int_{\mathbb{R}} \hat{V}_\tau(\lambda) \frac{1}{\lambda_j - i\lambda} d\lambda \right)_j A^{-1} C + C A^{-1} \left(\int_{\mathbb{R}} \hat{V}_\tau(\lambda) \frac{1}{\lambda_j + i\lambda} d\lambda \right)_j A \\
 &= \int_{\mathbb{R}} V_\tau(s) \text{Cov}[X_t, X_{t+s}] ds \\
 &= \int_{-\infty}^0 V_\tau(s) e^{bs} ds C + C \int_0^{\infty} V_\tau(s) e^{-b^*s} ds \\
 &= \int_0^{\infty} V_\tau(s) e^{-bs} ds C + C \int_0^{\infty} V_\tau(s) e^{-b^*s} ds \\
 &= \left\{ \int_0^{\infty} V_\tau(s) e^{-bs} ds, C \right\}
 \end{aligned}$$

où l'on a posé pour deux matrices M et N $\{M, N\} = MN^* + MN^*$.

5.3.2. Cas linéaire en dimension deux

Nous donnons dans l'annexe A les calculs menant à une expression approchée de la moyenne pondérée des matrices de covariance avec retard dans le cas d'un système linéaire de dimension deux. Ces calculs tirent parti de l'expression exacte de l'exponentielle d'une matrice carrée de taille deux. Cette expression fait intervenir la matrice, sa comatrice, sa trace et son déterminant. Utilisant cette expression et le logiciel Maple, il nous est possible de donner l'expression de la matrice de covariance stationnaire du système stochastique. De la même manière nous calculons les expressions des matrices de covariance avec retard avant d'effectuer la moyenne contre un noyau d'intégration de la forme $V_\tau(s) = 1/\tau(1 - s/\tau)^+$ pour s réel.

Système étudié Considérons le système linéaire à deux échelles de temps

$$d \begin{pmatrix} X_t \\ Y_t \end{pmatrix} = -M_\epsilon \begin{pmatrix} X_t \\ Y_t \end{pmatrix} dt + \sigma dB_t \quad (5.2)$$

où la matrice de tendance M_ϵ est de la forme

$$M_\epsilon := \begin{pmatrix} a & b \\ c/\epsilon & d/\epsilon \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

et la matrice de diffusion σ est diagonale de la forme

$$\sigma := \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2(\epsilon) \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

avec σ_2 dépendant arbitrairement de ϵ .

Résultat On a alors le résultat suivant. Notons T et D les trace et déterminant de la matrice M_ϵ . Sous l'hypothèse que l'on ait

$$\begin{aligned} T + \sqrt{T^2 - 4D} &> 0, \\ T &> \sqrt{T^2 - 4D}, \end{aligned}$$

les déterminant et trace de la matrice \mathcal{S}_τ admettent les développements suivants :

$$\begin{aligned} \det \{\mathcal{S}_\tau\} &= (1 + \sigma_2^2(\epsilon)) O(\epsilon) \\ \text{Tr} \{\mathcal{S}_\tau\} &= \sigma_2^2(\epsilon) \left(\frac{7}{8} \frac{d^3}{(ad-bc)^3 \tau^2} e^{-\frac{ad-bc}{d}\tau} - \frac{d^3 - d^2 \tau(ad-bc)}{(ad-bc)^3 \tau^2} \right) \\ &\quad + \sigma_1^2 \left(\frac{7}{8} \frac{dc^2}{(ad-bc)^3 \tau^2} e^{-\frac{ad-bc}{d}\tau} - \frac{(d - \tau(ad-bc))c^2}{(ad-bc)^3 \tau^2} \right) + (\sigma_2^2(\epsilon) + \sigma_1^2) O(\epsilon). \end{aligned}$$

Ainsi, l'étude précédente de la trace et du déterminant de la matrice d'estimation de Malliavin $\mathcal{S}(\tau)$ permet d'observer que dans le cas d'un modèle linéaire de dimension deux, les valeurs propres de la matrice $\mathcal{S}(\tau)$ ont effectivement une séparation d'échelle quelle que soit la dépendance en ϵ de σ_2 : l'une des valeurs propres est d'ordre $1 + \sigma_2^2(\epsilon)$ tandis que l'autre est d'ordre $\epsilon(1 + \sigma_2^2(\epsilon))$.

5.3.3. Première tentative de généralisation : linéarisation et semi-homogénéisation

Nous étudions maintenant un système (de dimension deux afin de simplifier les calculs) non strictement linéaire de la forme suivante

$$\begin{cases} dX_t^\epsilon = F(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon) dt + \Sigma dB_t^X, \\ dY_t^\epsilon = \frac{1}{\epsilon} f(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon) dt + \frac{\sigma}{\sqrt{\epsilon}} dB_t^Y. \end{cases} \quad (5.5)$$

On suppose ici la fonction f linéaire $f(x, y) = cx - dy$. Considérons l'équation de la composante rapide sur l'échelle de temps rapide s . On peut alors supposer que la composante lente X ne bouge que très peu sur cette échelle de temps. On considère donc la dynamique rapide à composante lente fixée

$$dY_s^x = f(x, Y_s^x) ds + \sigma dB_s^Y$$

Cette dynamique admet une solution de loi invariante $\mu^x(dy)$ suivant une loi normale $\mathcal{N}(\frac{\epsilon}{d}x, \frac{\sigma^2}{2d})$. On suppose de plus que la fonction F vérifie la propriété d'intégration suivante pour a réel :

$$\int F(x, y) \mu^x(dy) = -ax. \quad (5.6)$$

Nous donnons deux catégories de fonctions vérifiant une telle propriété :

1. $F(x, y) = y + \Phi(y - \frac{\epsilon}{d}x) + \beta x$ où la fonction Φ est impaire ;

2. $F(x, y) = x\Psi(y - \frac{c}{d}x)$ où la fonction Ψ vérifie $\int \Psi(z)e^{-z^2/2}dz = 1$.

Sous l'hypothèse (non vérifiée) que l'on peut approcher le système (5.5) par le système suivant

$$\begin{cases} d\bar{X}_t = -a\bar{X}_t dt + \Sigma dB_t^X, \\ d\bar{Y}_t^\epsilon = \frac{1}{\epsilon} f(\bar{X}_t, \bar{Y}_t^\epsilon) dt + \frac{\sigma}{\sqrt{\epsilon}} dB_t^Y, \end{cases}$$

où l'on a approché X^ϵ par sa version homogénéisée \bar{X} et Y^ϵ par une version semi-homogénéisée \bar{Y}^ϵ alors on peut mener les mêmes calculs que dans le cas linéaire et détecter ainsi une séparation d'échelle.

5.4. Perspectives et calculs formels

Après avoir présenté un exemple linéaire pour lequel la méthode de Malliavin fonctionne et une première tentative de généralisation, nous présentons maintenant quelques perspectives de généralisation. Nous étudions deux catégories modèles à deux échelles de temps et effectuons des calculs formels d'homogénéisation. Ceci afin de nous forger une intuition quant à la possibilité que la méthode de Malliavin soit effectivement en mesure de séparer les variables lentes des variables rapides dans des modèles d'équations différentielles stochastiques à composantes lentes et rapides.

5.4.1. Notations

Introduisons quelques notations pour un système dynamique (x, y) à deux échelles de temps. Notons

- $\mu_t(dx, dy)$ la loi du système dynamique à l'instant t et $\mu(dx, dy)$ la mesure invariante de la dynamique ;
- $\mu^x(dy)$ la mesure invariante de la dynamique rapide y où les composantes lentes x sont fixées ;
- $\bar{\mu}(dx)$ la mesure de la dynamique lente \bar{x} homogénéisée, c'est-à-dire la loi associée à la dynamique où l'on a intégré par rapport à la mesure $\mu^x(dy)$ la partie dérivée de l'équation .

5.4.2. Première perspective

Le système considéré par Kabanov et Pergamenshikov dans (**H5**) est le suivant

$$\begin{cases} dX_t^\epsilon = F(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon, t)dt + \Sigma(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon)dB_t^X, \\ dY_t^\epsilon = \frac{1}{\epsilon} f(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon, t)dt + \frac{\beta(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon}} \sigma(X_t^\epsilon, Y_t^\epsilon)dB_t^Y, \end{cases} \quad (5.7)$$

où X et Y sont à valeurs vectorielles respectivement dans \mathbb{R}^d et \mathbb{R}^k . Nous allons supposer ici $\beta(\epsilon) = O(\epsilon^\gamma)$ avec γ strictement positif et nous étudions dans la sous-section 5.4.3 le cas où $\beta(\epsilon) = O(1)$.

On définit les deux normes suivantes pour un processus X et deux temps positifs T_0 et T tels que $T_0 < T$:

$$\|X\|_T = \sup_{0 \leq t \leq T} |X_t|$$

et

$$\|X\|_{T_0, T} = \sup_{T_0 \leq t \leq T} |X_t|.$$

Hypothèses 5.4.1. 1. Les fonctions F , f et Σ sont localement Lipschitz et localement à croissance linéaire.

2. L'équation $f(x, y, t) = 0$ a une solution $y = \varphi(x, t)$ localement Lipschitz et localement à croissance linéaire.
3. La valeur initiale y pour la composante rapide $(Y_t^\epsilon)_{t \geq 0}$ appartient au domaine d'influence du système associé

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{y}_r}{dr} = f(x, \tilde{y}_r, 0) \\ \tilde{y}_0 = y, \end{cases} \quad (5.8)$$

c'est-à-dire que pour la condition initiale y on a la convergence suivante :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{y}_r = \varphi(x, 0).$$

On pose

$$A(x, t) = \frac{\partial f}{\partial y}(x, \varphi(x, t), t) \quad (5.9)$$

et $\lambda_i(x, t)$ les valeurs propres de la matrice symétrique $A(x, t) + A^*(x, t)$.

4. Pour tout réel M strictement positif, il existe une constante κ_M strictement positive telle que

$$\lambda_i(x, t) \leq -\kappa_M \quad (5.10)$$

pour tout vecteur y tel que $|y| \leq M$ et tout réel t tel que $0 \leq t \leq T$.

5. Il existe une constante γ strictement positive telle que $\beta(\epsilon) = O(\epsilon^\gamma)$.

Sous ces hypothèses, on a la convergence en probabilité de X^ϵ vers \bar{X} solution de

$$d\bar{X}_t = F(\bar{X}_t, \varphi(\bar{X}_t, t), t)dt + \Sigma(\bar{X}_t, \varphi(\bar{X}_t, t), t)dB_t^X \quad (5.11)$$

et de Y^ϵ vers $\varphi(X^\epsilon, t)$.

Théorème 5.4.1 (Kabanov et Pergamenshchikov [KP03]). *Supposons vérifiées les hypothèses 5.4.1 pour le système (5.7). Alors nous avons les convergences en probabilité suivantes pour $T_0 < T$:*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \|X^\epsilon - \bar{X}\|_{T_0, T} = 0,$$

et

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \|Y^\epsilon - \bar{Y}\|_{T_0, T} = 0,$$

où \bar{X} est la solution de l'équation différentielle stochastique

$$d\bar{X}_t = F(\bar{X}_t, \varphi(\bar{X}_t, t), t)dt + \Sigma(\bar{X}_t, \varphi(\bar{X}_t, t), t)dB_t^X$$

et $\bar{Y}_t = \varphi(\bar{X}_t, t)$.

La matrice de covariance avec retard converge donc lorsque le paramètre ϵ de séparation d'échelle tend vers zéro :

$$\begin{pmatrix} \text{Cov} [X_t^\epsilon, X_{t+s}^\epsilon] & \text{Cov} [Y_t^\epsilon, X_{t+s}^\epsilon] \\ \text{Cov} [X_t^\epsilon, Y_{t+s}^\epsilon] & \text{Cov} [Y_t^\epsilon, Y_{t+s}^\epsilon] \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \text{Cov} [\bar{X}_t, \bar{X}_{t+s}] & \text{Cov} [\varphi(\bar{X}_t), \bar{X}_{t+s}] \\ \text{Cov} [\bar{X}_t, \varphi(\bar{X}_{t+s})] & \text{Cov} [\varphi(\bar{X}_t), \varphi(\bar{X}_{t+s})] \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Nous pouvons observer dans un premier temps que la matrice a tous ses coefficients d'ordre $O(1)$ pour ϵ petit. De plus cette matrice et sa moyenne contre le noyau V_τ n'a de valeurs propres nulles que dans le cas où φ est affine. Cette constatation semble indiquer que l'utilisation de la méthode de Malliavin pour la séparation de variables dans un modèle vérifiant les hypothèses (5.4.1) ne peut s'effectuer que dans le cas où la fonction $(x, y) \rightarrow f(x, y)$ s'annule pour y fonction affine de x ou du moins que la condition initiale de la composante rapide se trouve dans le bassin d'attraction d'un tel point d'équilibre.

Cependant, soulignons le fait que la convergence en probabilité de Y^ϵ vers \bar{Y} ne s'effectue que sur un intervalle de temps $[T_0, T]$ pour tous temps strictement positifs T_0 et T . Le résultat ne donne pas d'information quant à la convergence au voisinage de 0. Ce constat laisse une ouverture quant à l'efficacité de la méthode pour des retards petits.

5.4.3. Deuxième perspective

Considérons le système

$$\begin{cases} dX_t = F(X_t, Y_t)dt + \Sigma dB_t^X \\ dY_t = \frac{1}{\epsilon} f(X_t, Y_t)dt + \sigma(\epsilon)dB_t^Y \end{cases} \quad (5.13)$$

Hypothèse 5.4.1. Supposons qu'il existe une fonction φ telle que $f(x, \varphi(x)) = 0$.

Posons $\bar{y}(x, \epsilon)$ la solution stationnaire de l'équation différentielle stochastique

$$d\bar{y}_t = \frac{1}{\epsilon} f(x, \bar{y}_t)dt + \sigma(\epsilon)dB_t^Y \quad (5.14)$$

et définissons $\delta_t^Y = Y_t - \bar{y}(X_t, \epsilon)$.

Hypothèse 5.4.2. Supposons que $\bar{y}(x, \epsilon) = \varphi(x) + O(\epsilon)$.

La formule d'Itô appliquée à δ_t^Y donne

$$\begin{aligned}
 d\delta_t^Y &= dY_t - d\bar{y}(X_t, \epsilon) \\
 &= \frac{1}{\epsilon} f(X_t, Y_t) dt + \sigma(\epsilon) dB_t^Y \\
 &\quad - \partial_x \bar{y}(X_t, \epsilon) dX_t - \frac{1}{2} \partial_x^2 \bar{y}(X_t, \epsilon) d\langle X_t \rangle \\
 &= \frac{1}{\epsilon} \left[f(X_t, Y_t) - \epsilon \varphi'(X_t) F(X_t, Y_t) - F(X_t, Y_t) \epsilon O(\epsilon) - \epsilon/2 \varphi''(X_t) \Sigma^2 \right] dt \\
 &\quad + (\sigma(\epsilon) dB_t^Y - \varphi'(X_t) \Sigma dB_t^X) \\
 &= \frac{1}{\epsilon} \left[f(X_t, \varphi(X_t) + \delta_t^Y + O(\epsilon)) - \epsilon \varphi'(X_t) F(X_t, \varphi(X_t) + \delta_t^Y + O(\epsilon)) \right. \\
 &\quad \left. - F(X_t, \varphi(X_t) + \delta_t^Y + O(\epsilon)) \epsilon O(\epsilon) - \epsilon/2 \varphi''(X_t) \Sigma^2 \right] dt \\
 &\quad + (\sigma(\epsilon) dB_t^Y - \varphi'(X_t) \Sigma dB_t^X)
 \end{aligned}$$

Dans quelle mesure peut-on approcher le processus δ^Y par la solution $\bar{\delta}^Y$ de

$$d\bar{\delta}^Y = \frac{1}{\epsilon} f(X_t, \varphi(X_t) + \bar{\delta}_t^Y) dt + \sigma dB_t^Y? \quad (5.15)$$

Hypothèse 5.4.3. Supposons les relations suivantes

$$z \cdot f(x, z) \leq -\mu_1(x) |z|^2 + C_1(x)$$

et

$$z \cdot f(x, \varphi(x) + z) \leq -\mu_2(x) |z|^2 + C_2(x)$$

garantissant la convergence exponentielle vers leur mesure invariante des solutions des équations (5.14) et (5.15).

Notons m_X et m_Y les moyennes de X et Y respectivement. Étudions maintenant les termes de covariance croisée avec retard

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E} [X_t Y_{t+s} - m_X m_Y] &= \mathbb{E} [X_t (\mathbb{E}_t [Y_s - m_Y])] \\
 &= \mathbb{E} [X_t \mathbb{E}_t [Y_s - \bar{y}_s(X_t, \epsilon)]] + \mathbb{E} [X_t \mathbb{E}_t [\bar{y}_s(X_t, \epsilon) - \bar{y}_0(X_t, \epsilon)]] \\
 &\quad + \mathbb{E} [X_t \mathbb{E}_t [\bar{y}_0(X_t, \epsilon) - m_Y]] \\
 &= \mathbb{E} [X_t \mathbb{E}_t [\delta_s^Y(X_t, \epsilon) - m_{\delta^Y}]] + \mathbb{E} [X_t \mathbb{E}_t [\bar{y}_s(X_t, \epsilon) - \bar{m}_Y(X_t, \epsilon)]] \\
 &= \mathbb{E} [X_t \mathbb{E}_t [\delta_s^Y(X_t, \epsilon) - \bar{\delta}_s^Y(X_t, \epsilon) - m_{\delta^Y} + m_{\bar{\delta}^Y}]] \\
 &\quad + \mathbb{E} [X_t \mathbb{E}_t [\bar{\delta}_s^Y(X_t, \epsilon) - m_{\bar{\delta}^Y}]] + \mathbb{E} [X_t \mathbb{E}_t [\bar{y}_s(X_t, \epsilon) - \bar{m}_Y(X_t, \epsilon)]]
 \end{aligned}$$

Ainsi, grâce aux hypothèses précédentes de convergence exponentielle des processus \bar{y} et $\bar{\delta}^Y$ vers leur mesure invariante, et à la validité (supposée) de l'approximation de δ par $\bar{\delta}^Y$, on obtient que chacun des termes est petit en ϵ . Le raisonnement est identique pour le terme $\mathbb{E} [Y_t Y_{t+s} - m_Y m_Y]$.

Par contre le terme $\mathbb{E}[Y_t X_{t+s} - m_Y m_X]$ pose problème. En effet, il semble que le terme $\mathbb{E}_t[X_s - m_X]$ est d'ordre $O(1)$. Nous pensons cependant qu'il est possible de contourner la difficulté en ajoutant une hypothèse supplémentaire : la réversibilité en temps du système. Si l'on suppose la réversibilité en temps des variables rapides (par exemple dans le cas d'un terme de dérive sous forme de gradient d'un potentiel), alors il est possible de considérer le processus à temps renversé et d'appliquer le calcul précédent pour conclure que le terme $\mathbb{E}[Y_t X_{t+s} - m_Y m_X]$ est petit en ϵ .

Insistons sur le fait que ces remarques ne sont que prospectives et n'ont pas valeur de preuves.

5.4.4. Conclusion

Une méthode en réponse à des enjeux importants

Les enjeux de la séparation des variables lentes et rapides d'un système dynamique et de la construction d'une dynamique autonome projetée sont cruciaux tant en dynamique moléculaire et en biologie, qu'en sciences environnementales ou en finance. Paul Malliavin a proposé lors de communications et séminaires une méthode de séparation des variables lentes et rapides d'une dynamique moléculaire. Nous avons commencé à étudier cette méthode inspirée par des outils de théorie du signal (densité spectrale de puissance, transformée de Fourier, étude de spectre de processus) Si les résultats semblaient prometteurs dans le premier modèle linéaire, les études - formelles - que nous avons effectué dans des cas plus généraux ne permettent pas de conclure dans le cas général de manière définitive quant à l'efficacité de la méthode de séparation des variables de Paul Malliavin.

Des résultats mitigés

La première tentative que nous avons présenté est une tentative de se ramener au cas linéaire en introduisant un concept de semi-homogénéisation. Nous pensons pouvoir approcher le système à deux échelles de temps par un système où les composantes lentes suivraient une dynamique homogénéisée autonome et où les composantes rapides seraient couplées à cette dynamique lente homogénéisée par l'équation initiale. Cette perspective nécessite une hypothèse de linéarité des composantes rapides et certaines hypothèses sur la dynamique lente.

Dans une première catégorie de modèles [KP03], l'étude semble indiquer que la méthode ne peut fonctionner que dans des cas s'approchant du cas linéaire : plus précisément dans des cas où la variable lente peut suivre un modèle non linéaire, mais où la variable rapide doit vérifier un modèle presque linéaire, au sens où la relation d'attraction limite doit s'exprimer linéairement en la composante lente homogénéisée (c'est-à-dire que la fonction φ doit être linéaire).

La deuxième catégorie de modèle [BG06] ne permettrait d'espérer des résultats positifs qu'avec une hypothèse de réversibilité temporelle du processus - en plus d'hypothèses d'ergodicité ou de convergence vers une mesure invariante des processus impliqués.

Des axes de recherche

Résumons ici ce que nous avons compris de la méthode de Malliavin et présentons les axes de recherche que nous conjecturons comme pouvant permettre de répondre aux questions que nous nous sommes posés tout au long de cette partie.

Les systèmes étudiés Dans ce travail, nous avons fait le choix de chercher à appliquer la méthode de Malliavin à des systèmes dynamiques stochastiques. Si ce choix se défend, il est bon de rappeler qu'elle a été conçue pour s'appliquer à d'autres systèmes. En effet, la méthode doit s'appliquer à une trajectoire de dynamique moléculaire réaliste. Hors ces trajectoires sont obtenues à l'aide de la simulation d'équations du mouvement déterministe.

Il serait sans nul doute intéressant de reprendre l'étude de la méthode de Malliavin en adoptant le paradigme suivant : étant donné un système déterministe, la méthode de Malliavin permet-elle de construire un système stochastique sous formes d'équations différentielles stochastiques approchant le système déterministe initial. C'est-à-dire qu'au lieu de se focaliser sur la détection des variables lentes d'un système stochastique à deux échelles de temps, peut-être serait-il intéressant de construire un système dynamique à partir des variables sélectionnées par la méthode de Malliavin, et de déterminer si ce nouveau système approche le système initial.

Dans la fin de cette sous-section, nous reprenons notre paradigme de séparation des variables d'un système stochastique et donnons les axes de recherche que nous avons pu établir lors de ce travail.

Définition des variables lentes ? Au vu de la méthode employée et des outils sur lesquels elle est basée, il nous semble qu'elle doit permettre de séparer les variables lentes des variables rapides où l'on a défini variables rapides comme des variables convergeant rapidement vers une position ou une mesure d'équilibre. *A contrario*, il nous semble qu'il ne devrait pas être nécessaire d'imposer une convergence quelconque des variables lentes (*cf.* remarque suivante sur les échelles de temps).

Définition des échelles de temps ? Quelles sont les échelles de temps impliquées dans la méthode ? Il nous semble qu'il faille les séparer en quatre catégories. L'échelle de temps des variables rapides (en $O(\epsilon)$), l'échelle de temps de l'échantillon utilisé par la méthode ($O(\sqrt{\epsilon})$ par exemple), l'échelle de temps des variables lentes (en $O(1)$) et enfin l'échelle de temps de la dynamique (en $O(1/\epsilon)$).

De cette manière, il doit être possible de supposer que les variables lentes n'ont que très peu bougé pendant le laps de temps qu'a duré la simulation, alors que les variables rapides ont pu atteindre leurs mesures invariantes. Ce qui devrait permettre d'assouplir les hypothèses sur la dynamique des variables lentes et ne conserver des hypothèses fortes que sur l'ensemble des variables rapides.

Hypothèses sur les dynamiques impliquées ? Le travail que nous avons mené semble indiquer qu'il est nécessaire que la dynamique satisfasse la série d'hypothèses suivantes :

Chapitre 5. Estimateur de Malliavin

1. La dynamique rapide à composante lente fixée doit vérifier une hypothèse de réversibilité temporelle.
2. La dynamique rapide à composante lente fixée doit vérifier une hypothèse de convergence vers sa mesure invariante..
3. L'erreur d'approximation de la composante rapide par la composante limite doit aussi vérifier une hypothèse de convergence vers sa mesure invariante.

Annexe A.

Calculs dans le cas linéaire

Cas de la dimension deux

Poussons plus loin les calculs dans le cas d'un processus d'Ornstein-Uhlenbeck de dimension deux en profitant d'une expression explicite de l'exponentielle de matrice carrée de taille deux. Nous cherchons dans cette sous-section à étudier le comportement des valeurs propres de la matrice d'estimation de Malliavin. Pour cela nous allons donner le comportement en ϵ petit de la trace et du déterminant de la matrice.

Système étudié Considérons le système linéaire à deux échelles de temps

$$d \begin{pmatrix} X_t \\ Y_t \end{pmatrix} = -M_\epsilon \begin{pmatrix} X_t \\ Y_t \end{pmatrix} dt + \sigma dB_t \quad (\text{A.1})$$

où la matrice de tendance M_ϵ est de la forme

$$M_\epsilon := \begin{pmatrix} a & b \\ c/\epsilon & d/\epsilon \end{pmatrix}$$

et la matrice de diffusion σ est diagonale de la forme

$$\sigma := \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2(\epsilon) \end{pmatrix}.$$

Nous allons dans un premier temps mener le calcul de la matrice d'estimation de Malliavin jusqu'au bout, avant d'étudier le résultat pour différents comportements en la variable ϵ de σ_2 .

Notations Notons T et D les trace et déterminant de la matrice M_ϵ dont les expressions sont les suivantes

$$T = a + \frac{d}{\epsilon}$$

et

$$D = \frac{ad - bc}{\epsilon}.$$

Calcul de la matrice de covariance stationnaire Afin de calculer le terme de covariance stationnaire du processus (A.1), donnons l'expression de l'exponentielle de matrice $e^{-M_\epsilon u}$ pour u réel :

$$e^{-M_\epsilon u} = e^{-\frac{Ts}{2}} \left(\cosh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{u}{2} \right) \text{Id}_2 + \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{u}{2} \right) N_\epsilon \right) \quad (\text{A.2})$$

où la matrice N_ϵ est donnée par l'expression suivante :

$$N_\epsilon := \frac{1}{\sqrt{T^2 - 4D}} \begin{pmatrix} d/\epsilon - a & -2b \\ -2c/\epsilon & -d/\epsilon + a \end{pmatrix}.$$

Nous pouvons remarquer que la matrice N_ϵ s'exprime en fonction de la matrice M_ϵ et de sa comatrice ainsi

$$N_\epsilon = \frac{1}{\sqrt{T^2 - 4D}} (\text{Com}\{M_\epsilon\}^* - M_\epsilon).$$

Remarquons dès à présent que la matrice N_ϵ est inversible, d'inverse égale à elle même. Ainsi, sous réserve que T et D vérifient les inégalités suivantes

$$\begin{aligned} T + \sqrt{T^2 - 4D} &> 0, \\ T &> \sqrt{T^2 - 4D} \end{aligned}$$

nous obtenons l'expression suivante pour la matrice de covariance stationnaire

$$C = \frac{1}{8DT} \left((T^2 + 4D)\sigma\sigma^* + T\sqrt{T^2 - 4D}(\sigma\sigma^*N_\epsilon^* + N_\epsilon\sigma\sigma^*) + (T^2 - 4D)N_\epsilon\sigma\sigma^*N_\epsilon^* \right) \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{1}{2T}\sigma\sigma^* + \frac{1}{8DT} \left(T \text{Id}_2 + \sqrt{T^2 - 4D}N_\epsilon \right) \sigma\sigma^* \left(T \text{Id}_2 + \sqrt{T^2 - 4D}N_\epsilon^* \right) \quad (\text{A.4})$$

Calcul de l'estimateur de Malliavin du processus À l'aide de l'expression de la matrice de covariance stationnaire, nous pouvons poursuivre le calcul de la matrice d'estimation de Malliavin. Calculons le terme $Ce^{-M_\epsilon^*s} + e^{-M_\epsilon s}C$ à l'aide des expressions (A.2) et (A.3)

$$\begin{aligned} &Ce^{-M_\epsilon^*s} + e^{-M_\epsilon s}C \\ &= \frac{e^{-Ts/2}}{8DT} \left(2(T^2 + 4D) \cosh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) \sigma\sigma^* + (T^2 + 4D) \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) \sigma\sigma^*N_\epsilon^* \right. \\ &\quad + 2T\sqrt{T^2 - 4D} \cosh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) (\sigma\sigma^*N_\epsilon^* + N_\epsilon\sigma\sigma^*) \\ &\quad + T\sqrt{T^2 - 4D} \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) (\sigma\sigma^*N_\epsilon^{*2} + N_\epsilon\sigma\sigma^*N_\epsilon^*) \\ &\quad + 2(T^2 - 4D) \cosh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) N_\epsilon\sigma\sigma^*N_\epsilon^* + (T^2 - 4D) \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) N_\epsilon\sigma\sigma^*N_\epsilon^{*2} \\ &\quad + (T^2 + 4D) \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) N_\epsilon\sigma\sigma^* \\ &\quad + T\sqrt{T^2 - 4D} \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) (N_\epsilon\sigma\sigma^*N_\epsilon^* + N_\epsilon^2\sigma\sigma^*) \\ &\quad \left. + (T^2 - 4D) \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) N_\epsilon^2\sigma\sigma^*N_\epsilon^* \right) \quad (\text{A.5}) \end{aligned}$$

Or la matrice N_ϵ est d'inverse égale à elle-même, ainsi nous avons les relations suivantes :

$$\begin{aligned} N_\epsilon^2 \sigma \sigma^* &= \sigma \sigma^*, & \sigma \sigma^* N_\epsilon^{*2} &= \sigma \sigma^*, \\ N_\epsilon^2 \sigma \sigma^* N_\epsilon^* &= \sigma \sigma^* N_\epsilon^* \text{ et} & N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^{*2} &= N_\epsilon \sigma \sigma^*. \end{aligned}$$

En les reportant dans (A.5), nous obtenons que

$$\begin{aligned} & C e^{-M_\epsilon^* s} + e^{-M_\epsilon s} C \\ &= \frac{e^{-Ts/2}}{4DT} \left[\left((T^2 + 4D) \cosh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) + T \sqrt{T^2 - 4D} \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) \right) \sigma \sigma^* \right. \\ & \quad \left(T \sqrt{T^2 - 4D} \cosh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) + T^2 \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) \right) (\sigma \sigma^* N_\epsilon^* + N_\epsilon \sigma \sigma^*) \\ & \quad \left. \left((T^2 - 4D) \cosh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) + T \sqrt{T^2 - 4D} \sinh \left(\sqrt{T^2 - 4D} \frac{s}{2} \right) \right) N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^* \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

En intégrant entre zéro et τ contre $V_\tau(s) = 1/\tau(1 - s/\tau)^+$ ce dernier terme, il vient

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \left(1 - \frac{s}{\tau} \right) (C e^{-M_\epsilon^* s} + e^{-M_\epsilon s} C) ds \\ &= \frac{1}{32D^3 T \tau^2} \left[\left\{ \left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + (3T^3 + 8DT) \sqrt{T^2 - 4D} \right. \right. \right. \\ & \quad \left. \left. \left. + 4(T^4 - 4D^2 - DT^2) \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)} \right. \right. \\ & + \left(-T(T^2 - 4D)^{3/2} - T(3T^2 - 8D) \sqrt{T^2 - 4D} + 4(T^4 - 4D^2 - DT^2) \right) e^{-\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} + T)} \\ & \quad \left. + 8(\tau DT^3 + DT^2 + 4D^2 - T^4) \right\} \sigma \sigma^* \\ & + \left\{ \left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + 3T^3 \sqrt{T^2 - 4D} + 4T^4 - 12DT^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)} \right. \\ & + \left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + 3T^3 \sqrt{T^2 - 4D} - 4T^4 + 12DT^2 \right) e^{-\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} + T)} \\ & \quad \left. - 8T \sqrt{T^2 - 4D} (T^2 - D - \tau TD) \right\} (\sigma \sigma^* N_\epsilon^* + N_\epsilon \sigma \sigma^*) \\ & + \left\{ \left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + (3T^3 - 8TD) \sqrt{T^2 - 4D} + 4T^4 - 20DT^2 + 16D^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)} \right. \\ & + \left(-T(T^2 - 4D)^{3/2} - (3T^3 + 8TD) \sqrt{T^2 - 4D} + 4T^4 - 20DT^2 + 16D^2 \right) e^{-\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} + T)} \\ & \quad \left. + -8(T^2 - 4D)(T^2 - D - \tau TD) \right\} N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^* \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Le développement en ϵ petit

$$-\frac{\tau}{2}(T + \sqrt{T^2 - 4D}) \sim_{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{d\tau}{\epsilon},$$

et l'hypothèse que d est strictement positif nous permettent de négliger les termes exponentiellement petits $e^{-\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} + T)}$ et d'obtenir que

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\tau &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \left(1 - \frac{s}{\tau} \right) (C e^{-M_\epsilon^* s} + e^{-M_\epsilon s} C) ds \\ &= A_1(\epsilon) \sigma \sigma^* + A_2(\epsilon) (\sigma \sigma^* N_\epsilon^* + N_\epsilon \sigma \sigma^*) + A_3(\epsilon) N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^* + O(e^{-d\tau/\epsilon}), \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Annexe A. Calculs dans le cas linéaire

où nous avons posé :

$$\begin{aligned}
 A_1(\epsilon) &= \frac{1}{32D^3T\tau^2} \left[\left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + (3T^3 + 8DT)\sqrt{T^2 - 4D} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 4T^4 - 4DT^2 - 16D^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2-4D}-T)} - 8T^2(T^2 - D - \tau TD) + 32D^2 \right] \\
 &= \frac{1}{32D^3T\tau^2} \left[\left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + 3T^3\sqrt{T^2 - 4D} + 4T^4 - 12DT^2 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 8DT(\sqrt{T^2 - 4D} + T) - 16D^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2-4D}-T)} \right. \\
 &\quad \left. - 8T^2(T^2 - D - \tau TD) + 32D^2 \right], \\
 A_2(\epsilon) &= \frac{1}{32D^3T\tau^2} \left[\left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + 3T^3\sqrt{T^2 - 4D} + 4T^4 - 12DT^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2-4D}-T)} \right. \\
 &\quad \left. - 8T\sqrt{T^2 - 4D}(T^2 - D - \tau TD) \right],
 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 A_3(\epsilon) &= \frac{1}{32D^3T\tau^2} \left[\left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + (3T^3 - 8TD)\sqrt{T^2 - 4D} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 4T^4 - 20DT^2 + 16D^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2-4D}-T)} - 8(T^2 - 4D)(T^2 - D - \tau TD) \right] \\
 &= \frac{1}{32D^3T\tau^2} \left[\left(T(T^2 - 4D)^{3/2} + 3T^3\sqrt{T^2 - 4D} + 4T^4 - 12DT^2 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - 8DT(\sqrt{T^2 - 4D} + T) + 16D^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2-4D}-T)} \right. \\
 &\quad \left. - 8(T^2 - 4D)(T^2 - D - \tau TD) \right].
 \end{aligned}$$

En introduisant

$$A'(\epsilon) := \frac{\sqrt{T^2 - 4D}}{32D^3\tau^2} \left((T^2 - 4D) + 3T^2 + 3T\sqrt{T^2 - 4D} + \frac{T^2}{\sqrt{T^2 - 4D}} \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2-4D}-T)},$$

de développement en ϵ petit

$$\begin{aligned}
 A'(\epsilon) &= \frac{7}{32} \frac{d^3}{(ad - bc)^3\tau^2} e^{-\frac{\tau}{d}(ad-bc)} \\
 &\quad + \frac{1}{32} \frac{7\tau bc(ad - bc) + d(d + 24cb - 3da)}{(ad - bc)^3\tau^2} e^{-\frac{\tau}{d}(ad-bc)} \epsilon + O(\epsilon),
 \end{aligned}$$

nous obtenons les expressions suivantes pour les termes A_1 A_2 et A_3 :

$$\begin{aligned}
 A_1(\epsilon) &= A'(\epsilon) - \frac{(T^2 - D - \tau TD)}{4D^3T\tau^2} T^2 \\
 &\quad + \frac{1}{4D^3T\tau^2} \left(DT(\sqrt{T^2 - 4D} + T) - 2D^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2-4D}-T)} + \frac{1}{DT\tau^2} \\
 A_2(\epsilon) &= A'(\epsilon) - \frac{(T^2 - D - \tau TD)}{4D^3T\tau^2} T\sqrt{T^2 - 4D}
 \end{aligned}$$

et

$$A_3(\epsilon) = A'(\epsilon) - \frac{(T^2 - D - \tau TD)}{4D^3 T \tau^2} (T^2 - 4D) \\ - \frac{1}{4D^3 T \tau^2} \left(DT \left(\sqrt{T^2 - 4D} + T \right) - 2D^2 \right) e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)}.$$

La matrice \mathcal{S}_τ a donc pour développement en ϵ petit

$$\mathcal{S}_\tau = A'(\epsilon) (\text{Id}_2 + N_\epsilon) \sigma \sigma^* (\text{Id}_2 + N_\epsilon^*) \\ - \frac{T^2 - D - TD\tau}{4D^3 T \tau^2} \left(T \text{Id}_2 + \sqrt{T^2 - 4D} N_\epsilon \right) \sigma \sigma^* \left(T \text{Id}_2 + \sqrt{T^2 - 4D} N_\epsilon^* \right) + \frac{1}{DT \tau^2} \sigma \sigma^* \\ + \frac{e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)}}{4D^2 T \tau^2} \left(T + \sqrt{T^2 - 4D} \right)^2 (\sigma \sigma^* - N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^*) + O(\epsilon). \quad (\text{A.9})$$

À partir de cette expression, nous allons donner des développements de la trace et du déterminant de la matrice carrée \mathcal{S}_τ de taille deux. Ces développements nous permettront d'avoir une estimation de la taille des deux valeurs propres de cette matrice.

Étude de la trace de la matrice \mathcal{S}_τ . Afin de donner un équivalent de la trace de la matrice \mathcal{S}_τ commençons par donner les expressions de la trace des matrices $\sigma \sigma^*$, $N_\epsilon \sigma \sigma^* + \sigma \sigma^* N_\epsilon^*$, et $N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^*$:

$$\text{Tr} \{ \sigma \sigma^* \} = \sigma_1^2 + \sigma_2^2(\epsilon), \\ \text{Tr} \{ N_\epsilon \sigma \sigma^* + \sigma \sigma^* N_\epsilon^* \} = 2n_{11}(\epsilon) (\sigma_1^2 - \sigma_2^2(\epsilon)),$$

et

$$\text{Tr} \{ N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^* \} = (n_{11}^2(\epsilon) + n_{21}^2(\epsilon)) \sigma_1^2 + (n_{11}^2(\epsilon) + n_{12}^2(\epsilon)) \sigma_2^2(\epsilon),$$

où, rappelons-le, les coefficients de la matrice N_ϵ sont donnés par :

$$n_{11}(\epsilon) = \frac{-d + a\epsilon}{\sqrt{d^2 + 2\epsilon(2bc - ad) + a^2\epsilon^2}} = \frac{-d/\epsilon + a}{\sqrt{T^2 - 4D}}, \quad (\text{A.10})$$

$$n_{12}(\epsilon) = \frac{-2b\epsilon}{\sqrt{d^2 + 2\epsilon(2bc - ad) + a^2\epsilon^2}} = \frac{-2b}{\sqrt{T^2 - 4D}}, \quad (\text{A.11})$$

et

$$n_{21}(\epsilon) = \frac{-2c}{\sqrt{d^2 + 2\epsilon(2bc - ad) + a^2\epsilon^2}} = \frac{-2c/\epsilon}{\sqrt{T^2 - 4D}}. \quad (\text{A.12})$$

Ainsi, la trace de la matrice \mathcal{S}_τ s'exprime

$$\begin{aligned}
& \text{Tr} \{ \mathcal{S}_\tau \} \\
&= A'(\epsilon) (\text{Tr} \{ \sigma \sigma^* \} + \text{Tr} \{ N_\epsilon \sigma \sigma^* + \sigma \sigma^* N_\epsilon^* \} + \text{Tr} \{ N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^* \}) \\
&\quad - \frac{T^2 - D - TD\tau}{4D^3 T \tau^2} \text{Tr} \left\{ \left(T \text{Id}_2 + \sqrt{T^2 - 4D} N_\epsilon \right) \sigma \sigma^* \left(T \text{Id}_2 + \sqrt{T^2 - 4D} N_\epsilon^* \right) \right\} \\
&\quad + \text{Tr} \left\{ \frac{1}{DT \tau^2} \sigma \sigma^* \right\} + \frac{e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)}}{4D^2 T \tau^2} \text{Tr} \left\{ \left(T + \sqrt{T^2 - 4D} \right)^2 (\sigma \sigma^* - N_\epsilon \sigma \sigma^* N_\epsilon^*) \right\} \\
&= A'(\epsilon) \left[\sigma_1^2 \left((1 + n_{11}(\epsilon))^2 + n_{21}^2(\epsilon) \right) + \sigma_2^2(\epsilon) \left((1 - n_{11}(\epsilon))^2 + n_{12}^2(\epsilon) \right) \right] \\
&\quad - \frac{T^2 - D - TD\tau}{4D^3 T \tau^2} \left[\sigma_1^2 \left((T + \sqrt{T^2 - 4D} n_{11}(\epsilon))^2 + (T^2 - 4D) n_{21}^2(\epsilon) \right) \right. \\
&\quad \left. + \sigma_2^2(\epsilon) \left((T - \sqrt{T^2 - 4D} n_{11}(\epsilon))^2 + (T^2 - 4D) n_{12}^2(\epsilon) \right) \right] \\
&\quad + \frac{1}{DT \tau^2} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2(\epsilon)) \\
&\quad + \frac{e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)}}{D^2 T \tau^2} \left[\sigma_1^2 (1 - n_{11}^2(\epsilon) - n_{21}^2(\epsilon)) + \sigma_2^2(\epsilon) (1 - n_{11}^2(\epsilon) - n_{12}^2(\epsilon)) \right] \tag{A.13}
\end{aligned}$$

À l'aide des expressions (A.10), (A.11) et (A.12) donnons maintenant les développements de chacun des coefficients apparaissant dans l'expression (A.13) de la trace

$$\begin{aligned}
A'(\epsilon) \left((1 + n_{11})^2 + n_{21}^2 \right) &= \frac{7}{8} \frac{dc^2 e^{-\frac{ad-bc}{d}\tau}}{(ad-bc)^3 \tau^2} + O(\epsilon) \\
A'(\epsilon) \left((1 - n_{11})^2 + n_{12}^2 \right) &= \frac{7}{8} \frac{d^3 e^{-\frac{ad-bc}{d}\tau}}{(ad-bc)^3 \tau^2} + O(\epsilon) \\
\frac{1}{\tau^2 DT} &= O(\epsilon^2) \\
\frac{e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)}}{D^2 T \tau^2} (1 - n_{11}^2 - n_{21}^2) &= O(\epsilon^2) \\
\frac{e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2 - 4D} - T)}}{D^2 T \tau^2} (1 - n_{11}^2 - n_{12}^2) &= O(\epsilon^4) \\
\frac{T^2 - D - TD\tau}{4D^3 T \tau^2} \left((T + \sqrt{T^2 - 4D} n_{11})^2 + (T^2 - 4D) n_{21}^2 \right) &= \frac{(d - \tau(ad - bc))c^2}{(ad - bc)^3 \tau^2} + O(\epsilon) \\
\frac{T^2 - D - TD\tau}{4D^3 T \tau^2} \left((T - \sqrt{T^2 - 4D} n_{11})^2 + (T^2 - 4D) n_{12}^2 \right) &= \frac{d^3 - d^2 \tau(ad - bc)}{(ad - bc)^3 \tau^2} + O(\epsilon)
\end{aligned}$$

Ainsi le développement de la trace est de la forme

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \{ \mathcal{S}_\tau \} &= \sigma_2^2(\epsilon) \left(\frac{7}{8} \frac{d^3}{(ad-bc)^3 \tau^2} e^{-\frac{ad-bc}{d}\tau} - \frac{d^3 - d^2 \tau(ad-bc)}{(ad-bc)^3 \tau^2} \right) \\
&\quad + \sigma_1^2 \left(\frac{7}{8} \frac{dc^2}{(ad-bc)^3 \tau^2} e^{-\frac{ad-bc}{d}\tau} - \frac{(d - \tau(ad-bc))c^2}{(ad-bc)^3 \tau^2} \right) + (\sigma_2^2(\epsilon) + \sigma_1^2) O(\epsilon).
\end{aligned}$$

C'est-à-dire que la trace est du même ordre en ϵ que σ_2^2 .

Étude du déterminant de la matrice \mathcal{S}_τ . Donnons un développement limité de chacun des termes apparaissant dans l'expression de \mathcal{S}_τ :

$$\begin{aligned}\frac{1}{DT\tau} &= O(\epsilon^2), \\ \frac{e^{\frac{\tau}{2}(\sqrt{T^2-4D}-T)}}{4D^2T\tau^2} \left(T + \sqrt{T^2-4D}\right)^2 &= O(\epsilon), \\ \frac{T^2 - D - TD\tau}{4D^3T\tau^2} T^2 &= \frac{1}{4} \frac{d^3 - \tau(ad-bc)d^2}{(ad-bc)^3\tau^2} + O(\epsilon), \\ \frac{T^2 - D - TD\tau}{4D^3T\tau^2} T\sqrt{T^2-4D} &= \frac{1}{4} \frac{d^3 - \tau(ad-bc)d^2}{(ad-bc)^3\tau^2} + O(\epsilon), \\ \frac{T^2 - D - TD\tau}{4D^3T\tau^2} (T^2 - 4D) &= \frac{1}{4} \frac{d^3 - \tau(ad-bc)d^2}{(ad-bc)^3\tau^2} + O(\epsilon).\end{aligned}$$

La matrice \mathcal{S}_τ admet donc le développement

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_\tau &= \left(\frac{7}{32} \frac{d^3}{(ad-bc)^3\tau^2} e^{-\frac{\tau}{d}(ad-bc)} - \frac{1}{4} \frac{d^3 - \tau(ad-bc)d^2}{(ad-bc)^3\tau^2} \right) (\text{Id}_2 + N_\epsilon) \sigma \sigma^* (\text{Id}_2 + N_\epsilon^*) \\ &\quad + O(\epsilon) \quad (\text{A.14})\end{aligned}$$

Or nous avons le développement de la matrice N_ϵ

$$N_\epsilon = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -\frac{2c}{d} & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{2bc}{d^2} & -\frac{2b}{d} \\ \frac{2c(2bc-ad)}{d^3} & -\frac{2bc}{d^2} \end{pmatrix} \epsilon + O(\epsilon^2),$$

ce qui nous permet donc d'obtenir le développement suivant de la matrice \mathcal{S}_τ

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_\tau &= \left(\frac{7}{8} \frac{d^3}{(ad-bc)^3\tau^2} e^{-\frac{\tau}{d}(ad-bc)} - \frac{d^3 - \tau(ad-bc)d^2}{(ad-bc)^3\tau^2} \right) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{c}{d} & 1 \end{pmatrix} \sigma \sigma^* \begin{pmatrix} 0 & \frac{c}{d} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &\quad + (1 + \sigma_2^2(\epsilon)) O(\epsilon)\end{aligned}$$

et celui de son déterminant

$$\det \{\mathcal{S}_\tau\} = (1 + \sigma_2^2(\epsilon)) O(\epsilon).$$

Annexe B.

Méthode de Mori-Zwanzig

Nous présentons dans cette annexe, quelques notes bibliographiques sur la méthode de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73].

Une fois les variables lentes du système détectées, Paul Malliavin veut construire la *dynamique réduite* de ces variables [Mal06]. Pour cela il propose d'utiliser la méthode de Mori-Zwanzig présentée initialement dans [Mor65, Zwa73]. Cette méthode doit permettre de justifier le passage de l'équation de Liouville à une équation de Langevin pour les variables lentes. Elle propose notamment une justification heuristique du passage d'une dynamique déterministe à une dynamique stochastique. Elle repose néanmoins essentiellement sur deux hypothèses fortes d'approximation non justifiées rigoureusement à notre connaissance. Il existe une littérature importante traitant de cette méthode et de son utilisation, notamment en dynamique moléculaire.

On peut distinguer deux manières de présenter la méthode de Mori-Zwanzig. Le premier point de vue est celui de l'équation de Chapman-Kolmogorov (voir par exemple les travaux de Chorin, Givon, Hald, Kupferman, Stinis, Stuart [KS04, GKS04, CHK06, CS06, Sti06]) Le deuxième point de vue, qui est celui adopté par Baba, Just, Kantz, Riegert [JKRH01, JGB⁺03, BJKR06, RJBK07], est de considérer la méthode de Mori-Zwanzig par le biais de l'équation de Fokker-Planck.

Notons aussi qu'il est possible de trouver un très bon résumé et état de l'art des différents modèles et algorithmes de systèmes à deux échelles de temps dans [GKS04]. La méthode de Mori-Zwanzig y est notamment introduite. Avant de passer à l'introduction de cette méthode, il convient de souligner que son champ d'application est remis en question dans [NLOK08].

B.1. Présentation de la méthode

Nous présentons dans cette section la méthode de Mori-Zwanzig selon le point de vue de l'équation Fokker-Planck tel qu'il est adopté dans Just *et al.* ([JKRH01, JGB⁺03, BJKR06, RJBK07]).

B.1.1. Présentation du modèle

Considérons un système déterministe à deux échelles de temps dont les variables lentes x sont couplées aux variables rapides y par le biais de deux fonctions F et f :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x, y), \\ \frac{dy}{dt} = \frac{1}{\epsilon} f(x, y), \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

Notons $\rho_t(dx, dy)$ la densité du système à l'instant t positif. le paramètre strictement positif ϵ , petit devant 1, représentant la séparation d'échelle. L'équation de mouvement correspondant au système dynamique (B.1) s'écrit alors :

$$\frac{d\rho_t}{dt} = -\mathcal{L}\rho_t$$

où le générateur infinitésimal \mathcal{L} du système peut se décomposer en la somme de deux générateurs associés aux variables lentes et rapides

$$\mathcal{L} := \frac{1}{\epsilon}\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1 := \frac{1}{\epsilon}\partial_y (f(x, y)\cdot) + \partial_x (F(x, y)\cdot).$$

La méthode de Mori-Zwanzig est une méthode cherchant à obtenir une équation autonome pour la densité réduite :

$$\bar{\rho}_t(x) = \int \rho_t(x, y)dy =: \text{Tr}_y\{\rho_t\}.$$

Dynamique réduite

Notons $\rho_{\text{ad}}(y|x)$ la densité stationnaire des variables rapides y où les variables lentes x sont supposées fixes (ce que nous notions $\mu^x(dy)$ dans la partie précédente). Remarquons que par définition :

$$\mathcal{L}_0\rho_{\text{ad}}(y|x) = 0. \quad (\text{B.2})$$

Introduisons maintenant l'opérateur \mathcal{P} de projection défini par

$$\mathcal{P}\rho_t(x, y) = \rho_{\text{ad}}(y|x)\text{Tr}_y\{\rho_t\} = \rho_{\text{ad}}(y|x)\bar{\rho}_t(x).$$

L'équation (B.2) permet d'écrire la relation suivante vérifiée par l'opérateur \mathcal{P}

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_0 = \mathcal{L}_0\mathcal{P} = 0. \quad (\text{B.3})$$

Pour une fonction h de x et y , nous notons $\langle h \rangle_{\text{ad}}$ la moyenne de cette fonction selon la densité stationnaire des variables rapides à variables lentes fixés

$$\langle h \rangle_{\text{ad}}(x) := \int h(x, y)\rho_{\text{ad}}(y|x)dy = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T h(x, \eta(t/\epsilon, y|x))dt$$

où l'on a noté $\eta(t, y|x)$ la solution de

$$\frac{d\eta(t, y|x)}{dt} = g(x, \eta(t, y|x))$$

de condition initiale $\eta(0, y|x) = y$. La solution η correspond à l'évolution des variables rapides les variables lentes ayant été fixées. Introduisons de plus la notation

$$\delta_{\text{ad}}h(x, y) = h(x, y) - \langle h \rangle_{\text{ad}}(x).$$

L'argument clef de la méthode de Mori-Zwanzig est donné par la formule de Duhamel ou Dyson rappelée dans le lemme suivant.

Lemme B.1.1. (Formule de Duhamel ou de Dyson) *Le semi-groupe engendré par \mathcal{L} vérifie*

$$e^{t\mathcal{L}^*} = e^{t\mathcal{Q}\mathcal{L}^*} + \int_0^t e^{(t-s)\mathcal{L}^*} \mathcal{P}\mathcal{L}^* e^{s\mathcal{Q}\mathcal{L}^*} ds$$

ou en version Fokker-Planck

$$e^{-\mathcal{L}t} = e^{-\mathcal{Q}\mathcal{L}t} + \int_0^t e^{-\mathcal{Q}\mathcal{L}s} \mathcal{P}\mathcal{L} e^{-\mathcal{L}(t-s)} ds,$$

où l'on a défini la projection \mathcal{Q} comme $\mathcal{Q} = \mathcal{I} - \mathcal{P}$.

La théorie classique de Mori-Zwanzig permet alors d'écrire

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{P}\rho_t}{\partial t} = -\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{P}\rho_t + \mathcal{P}\mathcal{L} \int_0^t \exp(-\mathcal{Q}\mathcal{L}s) \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} e^{-\mathcal{L}(t-s)} \rho ds - \mathcal{P}\mathcal{L} e^{-\mathcal{Q}\mathcal{L}t} \mathcal{Q}\rho \\ \rho_{t=0} = \rho. \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Le terme $\mathcal{L}e^{-\mathcal{Q}\mathcal{L}t} \mathcal{Q}\rho$ est de projection \mathcal{P} nulle, et en utilisant l'équation (B.3), nous obtenons

$$\rho_{\text{ad}} \frac{\partial \bar{\rho}_t}{\partial t} = -\rho_{\text{ad}} \text{Tr}_y \{ \mathcal{L}\rho_{\text{ad}}(y|x) \bar{\rho}_t \} + \mathcal{P}\mathcal{L}_1 \int_0^t \exp(-\mathcal{Q}\mathcal{L}s) \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 \rho_{\text{ad}}(y|x) \bar{\rho}_{t-s}(x) ds. \quad (\text{B.5})$$

Première approximation : *L'étape suivante nécessite de justifier de l'approximation*

$$e^{-\mathcal{Q}\mathcal{L}t} \sim e^{\mathcal{Q}\mathcal{L}_0 t/\epsilon}, \quad (\text{B.6})$$

ou du moins de l'approximation suivante

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_1 \int_0^t \exp(-\mathcal{Q}\mathcal{L}s) \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 \rho_{\text{ad}}(y|x) \bar{\rho}_{t-s}(x) ds \sim \mathcal{P}\mathcal{L}_1 \int_0^t e^{\mathcal{Q}\mathcal{L}_0 s/\epsilon} \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 \rho_{\text{ad}}(y|x) \bar{\rho}_{t-s}(x) ds.$$

Remarque. Il n'existe pas à notre connaissance de justification mathématique de cette approximation.

Admettant cette approximation, nous pouvons alors écrire :

$$\partial_t \bar{\rho}_t(x) = -\partial_x(\langle f \rangle_{\text{ad}}(x) \bar{\rho}_t(x)) + \partial_x^2 I_2(t, \epsilon, x) - \partial_x I_1(\epsilon, t, x)$$

avec

$$I_2(\epsilon, t, x) := \int_0^t \text{Tr}_y \{ \delta_{\text{ad}} f(x, \eta((t-s)/\epsilon, y|x)) \delta_{\text{ad}} f(x, y) \rho_{\text{ad}}(y|x) \} \bar{\rho}_s(x) ds$$

et

$$I_1(\epsilon, t, x) := \int_0^t \text{Tr}_y \{ \partial_x(\delta_{\text{ad}} f(x, \eta((t-s)/\epsilon, y|x))) f(x, y) \rho_{\text{ad}}(y|x) \} \bar{\rho}_s(x) ds.$$

Deuxième approximation : *Si l'on suppose que la dynamique rapide a une vitesse exponentielle de mélange, les fonctions de corrélation temporelle décroissent rapidement.*

On peut alors approcher les précédentes intégrales et obtenir

$$\partial_t \bar{\rho}_t(x) = -\partial_x D_1(x) \bar{\rho}_t(x) + \partial_x^2 D_2(x) \bar{\rho}_t(x) \quad (\text{B.7})$$

avec

$$D_2(x) = \int_0^\infty \langle \delta_{\text{ad}} f(x, \eta((t-s)/\epsilon, y|x)) \delta_{\text{ad}} f(x, y) \rangle_{\text{ad}} ds$$

et

$$D_1(x) = \langle f \rangle_{\text{ad}} + \int_0^\infty \langle \partial_x(\delta_{\text{ad}} f(x, \eta((t-s)/\epsilon, y|x))) f(x, y) \rangle_{\text{ad}} ds.$$

Heuristique pour la justification de la première approximation : $e^{-Q\mathcal{L}t} \sim e^{-Q\mathcal{L}_0 t/\epsilon}$

Formule de Trotter-Kato Le terme $e^{-Q\mathcal{L}t}$ peut s'écrire comme la limite lorsque n tend vers l'infini de $(e^{-Q\mathcal{L}_1 t/n} e^{-Q\mathcal{L}_0 t/(\epsilon n)})^n$. De plus, rappelons que $\mathcal{P}\mathcal{L}_0 = 0$ et donc que $Q\mathcal{L}_0 = \mathcal{L}_0$.

Approximation pour un petit incrément de temps Utilisons le développement suivant $e^{-Q\mathcal{L}_1 t/n} = \mathcal{I} - \frac{t}{n} Q\mathcal{L}_1 + \left(\frac{t}{n}\right)^2 (Q\mathcal{L}_1)^2 - \dots$ pour écrire que

$$\begin{aligned} & \int \Phi(x, y) \left(e^{-Q\mathcal{L}_1 t/n} e^{-\mathcal{L}_0 t/(\epsilon n)} \right)^n \Psi(x, y) dy \\ &= \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0 t/\epsilon} \Psi(x, y) dy \\ & - \frac{t}{n} \sum_{k=0}^n \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} Q\mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 k t/\epsilon} \Psi(x, y) dy \\ & + \left(\frac{t}{n}\right)^2 \sum_{i,j=0}^n \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-i-j)t/\epsilon} Q\mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 j t/\epsilon} Q\mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 i t/\epsilon} \Psi(x, y) dy + \dots \end{aligned}$$

Pour un indice k tel que $1 \leq k \leq n$, séparons

$$\int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} Q\mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 k t/\epsilon} \Psi(x, y) dy$$

en deux termes grâce au développement de $\mathcal{Q} = \mathcal{I} - \mathcal{P}$

$$\begin{aligned} & \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \\ &= \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} \mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \\ & - \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} \mathcal{P} \mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \end{aligned}$$

Le premier terme est de la forme :

$$\begin{aligned} & \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} \partial_x f(x, y) e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \\ &= \partial_x \left(\int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} f(x, y) e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \right) \\ & - \int \partial_x (\Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon}) f(x, y) e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \end{aligned}$$

tandis que le second s'écrit :

$$\begin{aligned} & \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} \rho_{\text{ad}}(y|x) \int \mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y') dy' dy \\ &= \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} \rho_{\text{ad}}(y|x) dy \int \mathcal{L}_1 e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \\ &= \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} \rho_{\text{ad}}(y|x) dy \partial_x \left(\int f(x, y) e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \right) \end{aligned}$$

Supposons que la dynamique des variables rapides vérifient des propriétés de mélange de vitesse de mélange ν . Les termes

$$\begin{aligned} & \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} f(x, y) e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \\ & \int \partial_x (\Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon}) f(x, y) e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \\ & \int f(x, y) e^{-\mathcal{L}_0 kt/\epsilon} \Psi(x, y) dy \end{aligned}$$

peuvent alors s'exprimer comme

$$\begin{aligned} & \int \Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon} f(x, y) dy \int \Psi(x, y) dy + \nu \left(k \frac{t}{\epsilon} \right) \\ & \int \partial_x (\Phi(x, y) e^{-\mathcal{L}_0(n-k)t/\epsilon}) f(x, y) dy \int \Psi(x, y) dy + \nu \left(k \frac{t}{\epsilon} \right) \\ & \int f(x, y) dy \int \Psi(x, y) dy + \nu \left(k \frac{t}{\epsilon} \right) \end{aligned}$$

Or rappelons que

$$\begin{aligned}\Psi(x, y) &= (\mathcal{I} - \mathcal{P})\partial_x [f(x, y)\rho_{\text{ad}}(y|x)\bar{\rho}_{t-s}(x)] \\ &= \partial_x [f(x, y)\rho_{\text{ad}}(y|x)\bar{\rho}_{t-s}(x)] - \rho_{\text{ad}}(y|x) \int \partial_x [f(x, y)\rho_{\text{ad}}(y|x)\bar{\rho}_{t-s}(x)] dy \\ &= \partial_x [f(x, y)\rho_{\text{ad}}(y|x)\bar{\rho}_{t-s}(x)] - \rho_{\text{ad}}(y|x)\partial_x \left[\int f(x, y)\rho_{\text{ad}}(y|x)dy\bar{\rho}_{t-s}(x) \right]\end{aligned}$$

et donc, nous obtenons que

$$\begin{aligned}\int \Psi(x, y)dy &= \partial_x \left[\int f(x, y)\rho_{\text{ad}}(y|x)dy\bar{\rho}_{t-s}(x) \right] \\ &\quad - \int \rho_{\text{ad}}(y|x)dy\partial_x \left[\int f(x, y)\rho_{\text{ad}}(y|x)dy\bar{\rho}_{t-s}(x) \right] = 0\end{aligned}$$

Ainsi

$$\begin{aligned}\int \Phi(x, y) (e^{-\mathcal{Q}\mathcal{L}_1 t/n} e^{-\mathcal{L}_0 t/(\epsilon n)})^n \Psi(x, y)dy \\ = \int \Phi(x, y)e^{-\mathcal{L}_0 t/\epsilon} \Psi(x, y)dy \\ + \frac{t}{n} \sum_{k=1}^n \nu \left(k \frac{t}{\epsilon} \right) + \left(\frac{t}{n} \right)^2 \dots\end{aligned}$$

qu'il reste à intégrer en temps entre 0 et t .

Que dire du comportement de la quantité :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \int_0^t s \nu \left(k \frac{s}{\epsilon} \right) ds ?$$

Deuxième approximation

Il s'agit de justifier ici sous quelles conditions sur φ et ψ l'approximation suivante est vérifiée

$$\int_0^t \psi \left(\frac{t-s}{\epsilon} \right) \varphi(s) ds \sim \int_0^\infty \psi \left(\frac{s}{\epsilon} \right) ds \varphi(t).$$

Dans le cas de Mori-Zwanzig $\varphi(s) = \bar{\rho}_x(x)$ et $\psi(s) \sim \nu(s)$ où ν représente la vitesse de convergence des variables rapides vers leur mesure invariante.

B.1.2. Application à une dynamique hamiltonienne à deux échelles de temps

Nous illustrons l'utilisation de la méthode de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73] à l'aide d'un exemple classique de système dynamique hamiltonien [JKRH01, JGB⁺03, BJKR06,

RJBK07]. Considérons donc un système dynamique hamiltonien à deux échelles de temps rapide (p, q) et lente (P, Q) engendré par l'opérateur hamiltonien suivant :

$$H(P, Q, p, q) = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{p^2}{2m^2} + V_f(q) \right) + V_c(Q, q) + \frac{P^2}{2M^2} + V_s(Q), \quad (\text{B.8})$$

Cet opérateur hamiltonien est composé d'un potentiel V_r régissant les composantes rapides, un potentiel V_l régissant les composantes lentes et un potentiel V_c de couplage. La dynamique associée à cet opérateur hamiltonien est donnée par le système dynamique suivant

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = -\partial_Q(V_l(Q) + V_c(Q, q)) & =: f_P(Q, q), \\ \frac{dQ}{dt} = \frac{P}{M} & =: f_Q(P), \\ \frac{dp}{dt} = -\frac{1}{\epsilon} \partial_q(V_r(q) + \epsilon V_c(Q, q)) & =: g_p(Q, q), \\ \frac{dq}{dt} = \frac{1}{\epsilon} \frac{p}{m} & =: g_q(p). \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

Nous pouvons d'ores et déjà donner les expressions de $\delta_{\text{ad}} f_P$

$$\delta_{\text{ad}} f_P(Q, q) = -\partial_Q \delta_{\text{ad}} V_c(Q, q), \quad (\text{B.10})$$

et de $\delta_{\text{ad}} f_Q$

$$\delta_{\text{ad}} f_Q(P) = 0. \quad (\text{B.11})$$

Ainsi la matrice $D_2(P, Q)$ a pour composantes

$$\begin{cases} D_{2,QQ} = 0, \\ D_{2,QP} = 0 = D_{2,PQ}, \\ D_{2,PP} = \int_0^\infty \langle \partial_Q \delta_{\text{ad}} V_c(Q, \eta_q(t/\epsilon, q|Q)) \partial_Q \delta_{\text{ad}} V_c(Q, q) \rangle_{\text{ad}} dt, \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

et la matrice $D_1(P, Q)$

$$\begin{cases} D_{1,Q} = \frac{P}{M}, \\ D_{1,P} = -\partial_Q \langle V_c \rangle_{\text{ad}}(Q) + P \int_0^\infty \langle \delta_{\text{ad}} \partial_Q^2 V_c(Q, \eta_q(t/\epsilon, q|Q)) \rangle_{\text{ad}} dt. \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

Selon la théorie de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73], l'équation réduite de mouvement vérifiée par les variables lentes de la dynamique est donnée par l'équation de Langevin suivante

$$\begin{cases} \partial_t Q = \frac{P}{M} \\ \partial_t P = -(\partial_Q \langle V_c \rangle_{\text{ad}}(Q) + P \int_0^\infty \langle \delta_{\text{ad}} \partial_Q^2 V_c(Q, \eta_q(s/\epsilon, q|Q)) \rangle_{\text{ad}} dt) ds \\ \quad + \int_0^\infty \langle \partial_Q \delta_{\text{ad}} V_c(Q, \eta_q(s/\epsilon, q|Q)) \partial_Q \delta_{\text{ad}} V_c(Q, q) \rangle_{\text{ad}} ds dW_t \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

Sous deux approximations à justifier, la méthode de Mori-Zwanzig permet donc de justifier du modèle de Langevin. Les coefficients de friction et de diffusion peuvent être estimés à partir de la dynamique des variables rapides.

B.2. Équation de Langevin pour les coordonnées généralisées

Nous proposons ici une note bibliographique présentant une application [Akk06] de la méthode de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73] à la dynamique moléculaire.

B.2.1. Introduction

Partant du principe que les variables d'intérêt sont celles du soluté et que les autres contribuent au bain de chaleur, l'auteur utilise le formalisme des travaux de Mori et Zwanzig [Mor65, Zwa73] pour réduire le nombre de variables du système et en déduire les équations vérifiées les variables d'intérêt. Il montre que les variables généralisées obtenues ont le même comportement qu'un système soluté/bain de chaleur modélisée par une équation de Langevin généralisée. Nous présentons rapidement le contenu de [Akk06] afin d'illustrer comment le formalisme de Mori-Zwanzig [Mor65, Zwa73] peut permettre de justifier l'équation de Langevin généralisée.

Dans un premier temps, l'auteur sépare les variables en deux ensembles : les variables du soluté (lettres en grandes capitales) et les variables du solvant (lettres en petites capitales). Il décompose l'opérateur de Liouville associé au système en deux contributions et introduit un opérateur de projection de type Mori-Zwanzig. Sous réserve des approximations classiques de ce formalisme, l'auteur calcule les équations du mouvement que vérifient la dynamique projetée.

B.2.2. Coordonnées généralisées

Considérons un système particulière de positions \tilde{q} , de moments conjugués \tilde{p} , de matrice de masses M se déplaçant dans un champ d'énergie de potentiel $\mathcal{V}(\tilde{q})$. L'opérateur hamiltonien du système est donné par

$$\mathcal{H} = \mathcal{V}(\tilde{q}, \tilde{p}) + \frac{1}{2} \tilde{p}^* M^{-1} \tilde{p},$$

et les équations du mouvement sont modélisées par

$$\begin{cases} \partial_t \tilde{q} = \partial_{\tilde{p}} \mathcal{H} = M^{-1} \tilde{p}, \\ \partial_t \tilde{p} = -\partial_{\tilde{q}} \mathcal{H} = -\partial_{\tilde{q}} \mathcal{V} \end{cases}.$$

L'auteur décompose de l'opérateur de Liouville en deux contributions : la contribution du soluté \mathcal{L}_{QP} et la contribution du bain de chaleur \mathcal{L}_{qp} .

B.2.3. Équation de Langevin généralisée

L'auteur introduit l'opérateur de projection suivant :

$$\mathcal{P}f \equiv \langle f \rangle \equiv \int f e^{\beta(H-\mathcal{H})} d\tilde{q} d\tilde{p}$$

B.2. Équation de Langevin pour les coordonnées généralisées

où $d\tilde{q}d\tilde{p} = dqdp/h^n$, avec h la constante de Planck, n le nombre de variables du bain de chaleur, et β température du bain de chaleur. La fonction H donnée par

$$H = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\int e^{-\beta \mathcal{H}} d\tilde{q}d\tilde{p} \right)$$

agit comme un Hamiltonien sur le soluté, au sens où

$$\begin{cases} \langle \partial_t R \rangle = \partial_P H \\ \langle \partial_t P \rangle = -\partial_Q H \end{cases} .$$

À l'aide de la formule de Duhamel, on écrit l'opérateur d'évolution sous la forme

$$e^{\mathcal{L}t} = e^{\mathcal{L}t} \mathcal{P} + e^{(\mathcal{I}-\mathcal{P})\mathcal{L}t} (\mathcal{I} - \mathcal{P}) + \int_0^t e^{\mathcal{L}(t-\tau)} \mathcal{P} \mathcal{L} e^{(\mathcal{I}-\mathcal{P})\mathcal{L}\tau} (\mathcal{I} - \mathcal{P}) d\tau$$

L'auteur effectue ensuite les approximations suivantes :

1. il suppose que les composantes du terme de dérive peuvent être obtenues par commutation des opérateurs de projection et d'évolution ;
2. il suppose de plus que les dérivées partielles des fonctions de corrélation peuvent être négligées devant les termes restants ;
3. il suppose enfin que les fonctions de corrélation sont stationnaires.

Sous ces hypothèses, il montre alors que les équations de mouvement sont données par l'équation de Langevin généralisée suivante :

$$\begin{cases} \partial_t R = \partial_P H + \partial_t R_f - \beta \int_0^t \langle \partial_t R_f(\tau) \partial_t R_f^* \rangle \partial_R H(t-\tau) + \langle \partial_t R_f(\tau) \partial_t P_f^* \rangle \partial_P H(t-\tau) d\tau, \\ \partial_t P = -\partial_R H + \partial_t P_f + \beta \int_0^t \langle \partial_t P_f(\tau) \partial_t R_f^* \rangle \partial_R H(t-\tau) + \langle \partial_t P_f(\tau) \partial_t P_f^* \rangle \partial_P H(t-\tau) d\tau \end{cases}$$

En ajoutant l'hypothèse que les fonctions de corrélation décroissent sur une échelle de temps sur laquelle $\partial_R H$ et $\partial_P H$ restent stable, on obtient les équations de Langevin (sans effets de mémoire) :

$$\begin{cases} \partial_t Q = \partial_P H + \partial_t Q - \beta \int_0^\infty \langle \partial_t Q(\tau) \partial_t Q^* \rangle d\tau \partial_Q H + \beta \int_0^\infty \langle \partial_t Q(\tau) \partial_t P^* \rangle d\tau \partial_P H, \\ \partial_t P = -\partial_Q H + \partial_t P + \beta \int_0^\infty \langle \partial_t P(\tau) \partial_t Q^* \rangle d\tau \partial_Q H + \beta \int_0^\infty \langle \partial_t P(\tau) \partial_t P^* \rangle d\tau \partial_P H \end{cases}$$

B.2.4. Conclusions

Dans la forme originale de l'équation de Langevin, les effets du bain de chaleur persistent uniquement à travers le coefficient de friction et la force aléatoire. Le formalisme avec opérateur de projection montre qu'en partant d'une structure hamiltonienne il est possible de se ramener à des équations de mouvement pour le soluté de type bain de chaleur. Ceci permet d'expliquer pourquoi l'équation de Langevin ordinaire a une structure asymétrique où positions et moments sont traités différemment : les moments sont soumis à un bruit aléatoire alors que les positions ne le sont pas.

Annexe B. Méthode de Mori-Zwanzig

De plus, il doit être possible d'obtenir des équations de Langevin pour d'autres coordonnées que les coordonnées cartésiennes (par exemple angles diédraux). Pour analyser les vitesses aléatoires, une option peut être d'approcher ces vitesses par leur moyenne en temps sur les simulations de dynamiques contraintes. La corrélation en temps des fluctuations peut alors donner des informations sur la matrice de friction de l'équation de Langevin.

Bibliographie

- [AF03] ADAMS, R. A. AND FOURNIER, J. J. F., *Sobolev Spaces*, second ed., Pure and Applied Mathematics (Amsterdam), vol. 140, Elsevier/Academic Press, Amsterdam, 2003. MR 2424078 (2009e :46025)
- [Akk06] AKKERMANS, R. L. C., *The Langevin equation for generalized Coordinates*, New Algorithms for Macromolecular Simulation, Lect. Notes Comput. Sci. Eng., vol. 49, Springer, Berlin, 2006, pp. 155–165. MR 2744708
- [BBC06] BAKER, N. A. AND BASHFORD, D. AND CASE, D. A., *Implicit Solvent Electrostatics in Biomolecular Simulation*, New Algorithms for Macromolecular Simulation, Lect. Notes Comput. Sci. Eng., vol. 49, Springer, Berlin, 2006, pp. 263–295. MR 2744712
- [BCMT10] BOSSY, M. AND CHAMPAGNAT, N. AND MAIRE, S. AND TALAY, D., *Probabilistic Interpretation and Random Walk on Spheres Algorithms for the Poisson-Boltzmann Equation in Molecular Dynamics*, M2AN Math. Model. Numer. Anal. **44** (2010), no. 5, 997–1048. MR 2731401
- [BDH⁺03] BRIAND, P. AND DELYON, B. AND HU, Y. AND PARDOUX, É. AND STOICA, L., *L^p Solutions of Backward Stochastic Differential Equations*, Stochastic Process. Appl. **108** (2003), no. 1, 109–129. MR 2008603 (2005c :60073)
- [BET09] BOUCHARD, B. AND ELIE, R. AND TOUZI, N., *Discrete-Time Approximation of BSDEs and Probabilistic Schemes for Fully Nonlinear PDEs*, Advanced financial modelling, Radon Ser. Comput. Appl. Math., vol. 8, Walter de Gruyter, Berlin, 2009, pp. 91–124. MR 2648459 (2011j :65012)
- [BG06] BERGLUND, N. AND GENTZ, B., *Noise-Induced Phenomena in Slow-Fast Dynamical Systems*, Probability and its Applications (New York), Springer-Verlag London Ltd., London, 2006, A sample-paths approach. MR 2197663 (2007b :37115)
- [BHP⁺11] BAYER, C. AND HOEL, H. AND PLECHÁČ, P. AND SZEPESSY, A. AND TEMPONE, R., *How Accurate is Molecular Dynamics?*, ArXiv e-prints (2011).
- [Bis73] BISMUT, J., *Conjugate Convex Functions in Optimal Stochastic Control*, J. Math. Anal. Appl. **44** (1973), 384–404. MR 0329726 (48 #8067)
- [BJKR06] BABA, N. AND JUST, W. AND KANTZ, H. AND RIEGERT, A., *Accuracy and Efficiency of Reduced Stochastic Models for Chaotic Hamiltonian Systems with Time-Scale Separation*, Phys. Rev. E (3) **73** (2006), no. 6, 066228, 9. MR 2276303 (2007i :37102)

Bibliographie

- [BL12] BRIAND, P. AND LABART, C., *Simulation of BSDEs by Wiener Chaos Expansion*, April 2012.
- [BO27] BORN, M. AND OPPENHEIMER, R., *Zur Quantentheorie der Molekeln*, *Annalen der Physik* **389** (1927), no. 20, 457–484.
- [BP03] BALLY, V. AND PAGÈS, G., *A Quantization Algorithm for Solving Multi-Dimensional Discrete-Time Optimal Stopping Problems*, *Bernoulli* **9** (2003), no. 6, 1003–1049. MR 2046816 (2005f :60096)
- [BPP05] BALLY, V. AND PAGÈS, G. AND PRINTEMS, J., *A Quantization Tree Method for Pricing and Hedging Multidimensional American Options*, *Math. Finance* **15** (2005), no. 1, 119–168. MR 2116799 (2005k :91142)
- [BPS05] BALLY, V. AND PARDOUX, É. AND STOICA, L., *Backward Stochastic Differential Equations Associated to a Symmetric Markov Process*, *Potential Anal.* **22** (2005), no. 1, 17–60. MR 2127730 (2005k :60173)
- [Bre83] BREZIS, H., *Analyse fonctionnelle*, Collection Mathématiques appliquées pour la maîtrise. [Collection of Applied Mathematics for the Master's Degree], Masson, Paris, 1983, Théorie et applications. [Theory and applications]. MR 697382 (85a :46001)
- [BS02] BORODIN, A. N. AND SALMINEN, P., *Handbook of Brownian Motion—Facts and Formulae*, second ed., Probability and its Applications, Birkhäuser Verlag, Basel, 2002. MR 1912205 (2003g :60001)
- [BT04] BOUCHARD, B. AND TOUZI, N., *Discrete-Time Approximation and Monte-Carlo Simulation of Backward Stochastic Differential Equations*, *Stochastic Process. Appl.* **111** (2004), no. 2, 175–206. MR 2056536 (2005b :65007)
- [CG11] CLÉMENT, E. AND GLOTER, A., *Limit Theorems in the Fourier Transform Method for the Estimation of Multivariate Volatility*, *Stochastic Processes and their Applications* **121** (2011), no. 5, 1097–1124.
- [Che97] CHEVANCE, D., *Numerical Methods for Backward Stochastic Differential Equations*, *Numerical methods in finance*, Publ. Newton Inst., Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997, pp. 232–244. MR 1470517 (98i :60051)
- [CHK06] CHORIN, A. J. AND HALD, O. H. AND KUPFERMAN, R., *Prediction from Partial Data, Renormalization, and Averaging*, *J. Sci. Comput.* **28** (2006), no. 2-3, 245–261. MR 2272631 (2007i :37157)
- [CHX07] CHEN, L. AND HOLST, M. J. AND XU, J., *The Finite Element Approximation of the Nonlinear Poisson-Boltzmann Equation*, *SIAM J. Numer. Anal.* **45** (2007), no. 6, 2298–2320 (electronic). MR 2361891 (2009a :65309)
- [CS06] CHORIN, A. J. AND STINIS, P., *Problem Reduction, Renormalization, and Memory*, *Commun. Appl. Math. Comput. Sci.* **1** (2006), 1–27. MR 2244266 (2007f :82092)
- [DM06] DELARUE, F. AND MENOZZI, S., *A Forward-Backward Stochastic Algorithm for Quasi-Linear PDEs*, *Ann. Appl. Probab.* **16** (2006), no. 1, 140–184. MR 2209339 (2006m :60096)

- [EKPQ97] EL KAROUI, N. AND PENG, S. AND QUENEZ, M. C., *Backward Stochastic Differential Equations in Finance*, Math. Finance **7** (1997), no. 1, 1–71. MR 1434407 (98d :90030)
- [EPQ97] EL KAROUI, N. AND PARDOUX, É. AND QUENEZ, M. C., *Reflected Backward SDEs and American Options*, Numerical methods in finance, Publ. Newton Inst., vol. 13, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997, pp. 215–231. MR 1470516 (99b :60078)
- [Eva10] EVANS, L. C., *Partial Differential Equations*, second ed., Graduate Studies in Mathematics, vol. 19, American Mathematical Society, Providence, RI, 2010. MR 2597943 (2011c :35002)
- [FOT11] FUKUSHIMA, M. AND OSHIMA, Y. AND TAKEDA, M., *Dirichlet Forms and Symmetric Markov Processes*, extended ed., de Gruyter Studies in Mathematics, vol. 19, Walter de Gruyter & Co., Berlin, 2011. MR 2778606
- [FW98] FREIDLIN, M. I. AND WENTZELL, A. D., *Random Perturbations of Dynamical Systems*, second ed., Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], vol. 260, Springer-Verlag, New York, 1998, Translated from the 1979 Russian original by Joseph Szücs. MR 1652127 (99h :60128)
- [GKS04] GIVON, D. AND KUPFERMAN, R. AND STUART, A., *Extracting Macroscopic Dynamics : Model Problems and Algorithms*, Nonlinearity **17** (2004), no. 6, R55–R127. MR 2097022 (2006i :82081)
- [GL10] GOBET, E. AND LABART, C., *Solving BSDE with Adaptive Control Variate*, SIAM J. Numer. Anal. **48** (2010), no. 1, 257–277. MR 2608369 (2011d :65017)
- [GS80] GUIKHMAN, I. AND SKOROKHOD, A., *Introduction à la théorie des processus aléatoires*, Mir, 1980.
- [GT01] GILBARG, D. AND TRUDINGER, N. S., *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*, Classics in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, 2001, Reprint of the 1998 edition. MR 1814364 (2001k :35004)
- [IM74] ITÔ, K. AND MCKEAN, JR., HENRY P., *Diffusion Processes and their Sample Paths*, Springer-Verlag, Berlin, 1974, Second printing, corrected, Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Band 125. MR 0345224 (49 #9963)
- [Jed05] JEDRZEJEWSKI, F., *Introduction aux méthodes numériques*, seconde ed., Springer-Verlag, Paris, 2005, Avec une préface de Paul Reuss. MR 2205765
- [JGB⁺03] JUST, W. AND GELFERT, K. AND BABA, N. AND RIEGERT, A. AND KANTZ, H., *Elimination of Fast Chaotic Degrees of Freedom : on the Accuracy of the Born Approximation*, J. Statist. Phys. **112** (2003), no. 1-2, 277–292. MR 1991599 (2004e :82038)
- [JKRH01] JUST, W. AND KANTZ, H. AND RÖDENBECK, C. AND HELM, M., *Stochastic Modelling : Replacing Fast Degrees of Freedom by Noise*, J. Phys. A **34** (2001), no. 15, 3199–3213. MR 1836464

Bibliographie

- [JS03] JACOD, J. AND SHIRYAEV, A. N., *Limit Theorems for Stochastic Processes*, second ed., Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], vol. 288, Springer-Verlag, Berlin, 2003. MR 1943877 (2003j :60001)
- [KP03] KABANOV, Y. AND PERGAMENSHCHIKOV, S., *Two-Scale Stochastic Systems*, Applications of Mathematics (New York), vol. 49, Springer-Verlag, Berlin, 2003, Asymptotic analysis and control, Stochastic Modelling and Applied Probability. MR 1942740 (2004c :93003)
- [KS91] KARATZAS, I. AND SHREVE, S. E., *Brownian Motion and Stochastic Calculus*, second ed., Graduate Texts in Mathematics, vol. 113, Springer-Verlag, New York, 1991. MR 1121940 (92h :60127)
- [KS04] KUPFERMAN, R. AND STUART, A. M., *Fitting SDE Models to Nonlinear Kac-Zwanzig Heat Bath Models*, Phys. D **199** (2004), no. 3-4, 279–316. MR 2106316 (2005h :82046)
- [Lan08] LANGEVIN, P., *Sur la théorie du mouvement brownien*, CR Acad. Sci. Paris **146** (1908), no. 530-533.
- [Lea01] LEACH, A. R., *Molecular Modelling : Principles and Applications*, 2 ed., Pearson Prentice Hall, April 2001.
- [Lej06] LEJAY, A., *On the Constructions of the Skew Brownian Motion*, Probab. Surv. **3** (2006), 413–466. MR 2280299 (2008h :60333)
- [LL10] LEGOLL, F. AND LELIÈVRE, T., *Effective Dynamics using Conditional Expectations*, Nonlinearity **23** (2010), no. 9, 2131–2163. MR 2672640
- [LM06] LEJAY, ANTOINE AND MARTINEZ, MIGUEL, *A scheme for simulating one-dimensional diffusion processes with discontinuous coefficients*, The Annals of Applied Probability **16** (2006), no. 1, 107–139.
- [LM10] LEJAY, A. AND MAIRE, S., *Simulating Diffusions with Piecewise Constant Coefficients using a Kinetic Approximation*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. **199** (2010), no. 29-32, 2014–2023. MR 2654005 (2011e :65304)
- [LRU66] LADYŽENSKAJA, O. A. AND RIVKIND, V. JA. AND URAL'CEVA, N. N., *Solvability of Diffraction Problems in the Classical Sense*, Trudy Mat. Inst. Steklov. **92** (1966), 116–146. MR 0211050 (35 #1932)
- [LSR10] LELIÈVRE, T. AND STOLTZ, G. AND ROUSSET, M., *Free Energy Computations : A Mathematical Perspective*, Imperial College Press, 2010.
- [LSU67] LADYŽENSKAJA, O. A. AND SOLONNIKOV, V. A. AND URAL'CEVA, N. N., *Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type*, Translated from the Russian by S. Smith. Translations of Mathematical Monographs, Vol. 23, American Mathematical Society, Providence, R.I., 1967. MR 0241822 (39 #3159b)
- [Lun95] LUNARDI, A., *Analytic Semigroups and Optimal Regularity in Parabolic problems*, Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 16, Birkhäuser Verlag, Basel, 1995. MR 1329547 (96e :47039)

- [Mal06] MALLIAVIN, P., *Mathematical Analysis of Molecular Dynamics files*, Communications personnelles, 2006.
- [MM02] MALLIAVIN, P. AND MANCINO, M.E., *Fourier Series Method for Measurement of Multivariate Volatilities*, Finance and Stochastics **6** (2002), no. 1, 49–61.
- [MM09] ———, *A fourier Transform Method for Nonparametric Estimation of Multivariate Volatility*, The Annals of Statistics **37** (2009), no. 4, 1983–2010.
- [MMR07] MALLIAVIN, P. AND MANCINO, M.E. AND RECCHIONI, M.C., *A Non-Parametric Calibration of the hjm Geometry : an Application of itô Calculus to Financial Statistics*, Japanese Journal of Mathematics **2** (2007), no. 1, 55–77.
- [Mor65] MORI, H., *Transport, Collective Motion, and Brownian Motion*, Progress of Theoretical Physics **33** (1965), no. 3, 423–455.
- [MR05] MANCINO, M.E. AND RENÒ, R., *Dynamic Principal Component Analysis of Multivariate Volatility via fourier Analysis*, Applied Mathematical Finance **12** (2005), no. 2, 187–199.
- [MR578] *Temps locaux*, Astérisque, vol. 52, Société Mathématique de France, Paris, 1978, Exposés du séminaire J. Azéma-M. Yor, Held at the Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1976–1977, With an English summary. MR 509476 (81b :60042)
- [MS04] MASCAGNI, M. AND SIMONOV, N. A., *Monte Carlo Methods for Calculating Some Physical Properties of Large Molecules*, SIAM J. Sci. Comput. **26** (2004), no. 1, 339–357 (electronic). MR 2114347 (2005i :65011)
- [MT06] MARTINEZ, MIGUEL AND TALAY, DENIS, *Discrétisation d'équations différentielles stochastiques unidimensionnelles à générateur sous forme divergence avec coefficient discontinu*, Comptes Rendus Mathématique **342** (2006), no. 1, 51–56.
- [MU49] METROPOLIS, N. AND ULAM, S., *The Monte Carlo Method*, J. Amer. Statist. Assoc. **44** (1949), 335–341. MR 0031341 (11,138c)
- [NLOK08] NIEMANN, M. AND LAUBRICH, T. AND OLBRICH, E. AND KANTZ, H., *Usage of the Mori-Zwanzig Method in Time Series Analysis*, Phys. Rev. E **77** (2008), 011117.
- [Par99] PARDOUX, É., *BSDEs, Weak Convergence and Homogenization of Semilinear PDEs*, Nonlinear analysis, differential equations and control (Montreal, QC, 1998), NATO Sci. Ser. C Math. Phys. Sci., vol. 528, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1999, pp. 503–549. MR 1695013 (2000e :60096)
- [Pen93] PENG, S. G., *Backward Stochastic Differential Equations and Applications to Optimal Control*, Appl. Math. Optim. **27** (1993), no. 2, 125–144. MR 1202528 (94c :49035)
- [Per12] PERRIN, N., *Probabilistic Interpretation for the Nonlinear Poisson-Boltzmann Equation in Molecular Dynamics*, ESAIM : Proc. **35** (2012), 174–183.

Bibliographie

- [PP92] PARDOUX, É. AND PENG, S., *Backward Stochastic Differential Equations and Quasilinear Parabolic Partial Differential Equations*, Stochastic partial differential equations and their applications (Charlotte, NC, 1991), Lecture Notes in Control and Inform. Sci., vol. 176, Springer, Berlin, 1992, pp. 200–217. MR 1176785 (93k :60157)
- [RJBK07] RIEGERT, A. AND JUST, W. AND BABA, N. AND KANTZ, H., *Fast Hamiltonian Chaos : Heat Bath without Thermodynamic Limit*, Phys. Rev. E (3) **76** (2007), no. 6, 066211, 7. MR 2495397 (2010b :82036)
- [RY99] REVUZ, D. AND YOR, M., *Continuous Martingales and Brownian Motion*, third ed., Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], vol. 293, Springer-Verlag, Berlin, 1999. MR 1725357 (2000h :60050)
- [Sch26] SCHRÖDINGER, E., *An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules*, Phys. Rev. **28** (1926), 1049–1070.
- [Sim08] SIMONOV, N., *Walk-On-Spheres Algorithm for Solving Boundary-Value Problems with Continuity Flux Conditions*, Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods 2006, Springer, Berlin, 2008, pp. 633–643. MR 2479251 (2010f :65287)
- [ST95] SABELFELD, K. K. AND TALAY, D., *Integral Formulation of the Boundary Value Problems and the Method of Random Walk on Spheres*, Monte Carlo Methods Appl. **1** (1995), no. 1, 1–34. MR 1368797 (97a :65009)
- [Sti06] STINIS, P., *A Comparative Study of Two Stochastic Mode Reduction Methods*, Phys. D **213** (2006), no. 2, 197–213. MR 2201199 (2006i :82063)
- [SV69] STROOCK, DANIEL W. AND VARADHAN, S. R. S., *Diffusion Processes with Continuous Coefficients. I*, Comm. Pure Appl. Math. **22** (1969), 345–400. MR 0253426 (40 #6641)
- [Zwa73] ZWANZIG, R., *Nonlinear Generalized Langevin Equations*, Journal of Statistical Physics **9** (1973), 215–220, 10.1007/BF01008729.

Table des figures

1.1. Molécule de dihydrogène. Crédit et source de l'image : Wikipedia - CC by SA . . .	2
1.2. Portion de molécule de cellulose. Crédit et source de l'image : Wikipedia - CC by SA	2
1.3. Repliement de protéines Crédit et source de l'image : Wikipedia - CC by SA . . .	3
1.4. Petite molécule interagissant avec une protéine. Crédit et source de l'image : Chaos - Wikipedia - CC by SA	3
1.5. Champ électrostatique de deux particules de charges opposées. Crédit et source de l'image : Geek3 - Wikipedia - CC by SA	4
1.6. Champ électrostatique de deux particules de charges de même signe. Crédit et source de l'image : Geek3 - Wikipedia - CC by SA	4
1.7. Modélisation géométrique du système moléculaire	13
1.8. Algorithme de marche sur les sphères	18
1.9. Vase de Tantale Crédits et source des images et légendes : LLM - Wikipedia - CC by SA	30
1.10. Cycles d'hystérésis de l'aimantation d'un matériau ferromagnétique (acier électrique standard à grain orienté). B_R est le champ rémanent (aimantation rémanente) et H_C est le champ coercitif (le champ nécessaire pour désaimanter). Crédits et source des image et légende : Zureks - Wikipedia - CC by SA	31
2.1. Décomposition de \mathbb{R}^d en deux sous-domaines Ω_{int} et Ω_{ext}	40
2.2. Modélisation géométrique de la molécule	42
3.1. Algorithme de marche sur les sphères	65
4.1. Suites des temps d'arrêt pour le processus X	114

Table des matières

1. Introduction	1
1.1. Introduction à la modélisation et à la dynamique moléculaire	1
1.1.1. Modélisation d'un système moléculaire	2
1.1.2. Simulation et dynamique moléculaire	7
1.1.3. Méthodes de simulation moléculaire	9
1.2. Partie I : équation de Poisson-Boltzmann	11
1.2.1. Chapitre 2 : préliminaires	12
1.2.2. Chapitre 3 : erreur faible d'un schéma d'approximation numérique du processus X	16
1.2.3. Chapitre 4 : interprétation probabiliste de l'équation non-linéaire de Poisson-Boltzmann	20
1.3. Partie II : estimateur de Malliavin	27
1.3.1. Objectif	27
1.3.2. Préliminaires	27
1.3.3. Présentation de la méthode	33
1.3.4. Questions que la méthode pose	33
1.3.5. Tentatives de réponses	34
I. Équations de type Poisson-Boltzmann	37
2. Préliminaires	39
2.1. Notations et géométrie sous-jacente aux équations de Poisson-Boltzmann	39
2.2. Équations de Poisson-Boltzmann	41
2.2.1. Introduction à l'équation de Poisson-Boltzmann en dynamique moléculaire	41
2.2.2. Équations parabolique et elliptique de type Poisson-Boltzmann . .	43
2.3. Interprétation probabiliste d'une classe d'opérateurs sous forme divergence	44
2.3.1. Notion de solution faible	44
2.3.2. Problème de martingale associé à l'opérateur sous forme divergence	44
2.3.3. Interprétation probabiliste de solutions régulières aux équations de Poisson-Boltzmann : formule de Feynman-Kac	46
2.4. Théorie des équations différentielles stochastiques rétrogrades	47
2.4.1. Introduction	47
2.4.2. ÉDSR à horizon fini	48
2.4.3. ÉDSR à horizon aléatoire	50

2.4.4. Liens entre ÉDSR et ÉDP	51
3. Analyse et approximation numérique de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire parabolique	53
3.1. Résolution de l'équation de Poisson-Boltzmann linéaire parabolique . . .	53
3.2. Interprétation probabiliste	61
3.3. Différents algorithmes probabilistes de simulation et d'approximation . .	64
3.3.1. Algorithme de marche sur les sphères arrêtée	65
3.3.2. Algorithme de simulation de la solution u	67
3.4. Analyse de l'erreur faible	68
4. Interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire elliptique	77
4.1. Traitement de la singularité du terme source	78
4.2. Existence et unicité des solutions d'ÉDSR à temps final aléatoire monotones	79
4.2.1. ÉDSR monotones	79
4.2.2. Lien entre ÉDSR et problème elliptique sur \mathbb{R}^d	88
4.2.3. ÉDSR monotones associées à l'opérateur \mathcal{L}	92
4.3. Existence, unicité, représentation probabiliste de la solution de l'équation de Poisson-Boltzmann non-linéaire elliptique	94
4.3.1. Résultat d'existence, unicité et régularité d'une solution à l'équation de Poisson-Boltzmann	94
4.3.2. Interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann . .	95
4.3.3. Début de la démonstration du théorème 4.3.2 : existence et unicité de la solution faible	96
4.3.4. Fin de la démonstration du théorème 4.3.2 : régularité de la solution	98
4.4. Démonstrations de trois lemmes techniques	106
4.4.1. Démonstration du lemme 4.3.11 de type Sobolev	106
4.4.2. Démonstration du lemme 4.3.10 : caractère borné de la solution v	107
4.4.3. Démonstration du lemme 4.3.4 : hypothèse d'intégrabilité	108
II. Détection des variables lentes en dynamique moléculaire	121
5. Estimateur de Malliavin	123
5.1. Introduction	123
5.1.1. Présentation	123
5.1.2. Plan du chapitre	123
5.2. Proposition d'estimateur	125
5.2.1. Notations et contexte	125
5.2.2. Interprétation de l'estimateur de Malliavin	126
5.2.3. Détection des variables lentes	127
5.3. Application au cas linéaire et tentative d'extension par linéarisation . . .	127
5.3.1. Calculs généraux	127

5.3.2.	Cas linéaire en dimension deux	130
5.3.3.	Première tentative de généralisation	131
5.4.	Perspectives et calculs formels	132
5.4.1.	Notations	132
5.4.2.	Première perspective	132
5.4.3.	Deuxième perspective	134
5.4.4.	Conclusion	136
A.	Calculs dans le cas linéaire	139
B.	Méthode de Mori-Zwanzig	147
B.1.	Présentation de la méthode	147
B.1.1.	Présentation du modèle	148
B.1.2.	Application à une dynamique hamiltonienne à deux échelles de temps	152
B.2.	Équation de Langevin pour les coordonnées généralisées	154
B.2.1.	Introduction	154
B.2.2.	Coordonnées généralisées	154
B.2.3.	Équation de Langevin généralisée	154
B.2.4.	Conclusions	155
	Bibliographie	157

Résumé

Cette thèse présente deux sujets de recherche indépendants concernant l'application de méthodes stochastiques à des problèmes issus de la dynamique moléculaire. Dans la première partie, nous présentons des travaux liés à l'interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann qui intervient dans la description du potentiel électrostatique d'un système moléculaire. Après avoir introduit l'équation de Poisson-Boltzmann et les principaux outils mathématiques utilisés, nous nous intéressons à l'équation linéaire parabolique de Poisson-Boltzmann. Avant d'énoncer le résultat principal de la thèse, nous étendons des résultats d'existence et unicité des équations différentielles stochastiques rétrogrades. Nous donnons ensuite une interprétation probabiliste de l'équation non-linéaire de Poisson-Boltzmann sous la forme de la solution d'une équation différentielle stochastique rétrograde. Enfin, dans une seconde partie prospective, nous commençons l'étude d'une méthode proposée par Paul Malliavin de détection des variables lentes et rapides d'une dynamique moléculaire.

Abstract

This thesis presents two independent research topics. Both are related to the application of stochastic problems to molecular dynamics. In the first part, we present a work related to the probabilistic interpretation of the Poisson-Boltzmann equation. This equation describes the electrostatic potential of a molecular system. After an introduction to the Poisson-Boltzmann equation, we focus on the parabolic and linear equation. After extending an existence and uniqueness result for backward stochastic differential equations, we establish a probabilistic interpretation of the nonlinear Poisson-Boltzmann equation with backward stochastic differential equations. Finally, in a more prospective second part, we initiate a study of a slow and fast variables detection method due to Paul Malliavin.

Mots-clefs

Dynamique moléculaire - Équation de Poisson-Boltzmann - Equations différentielles stochastiques rétrogrades - Opérateur sous forme divergence.

Key words

Molecular Dynamic - Poisson-Boltzmann equation - Backward Stochastic Differential Equations - Divergence Form Operator.