



HAL
open science

Théorie spectrale pour des applications de Poincaré aléatoires

Manon Baudel

► **To cite this version:**

Manon Baudel. Théorie spectrale pour des applications de Poincaré aléatoires. Mathématiques générales [math.GM]. Université d'Orléans, 2017. Français. NNT : 2017ORLE2058 . tel-01985139

HAL Id: tel-01985139

<https://theses.hal.science/tel-01985139>

Submitted on 17 Jan 2019

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.

**ÉCOLE DOCTORALE MATHÉMATIQUES,
INFORMATIQUE, PHYSIQUE THÉORIQUE ET
INGÉNIERIE DES SYSTÈMES**

LABORATOIRE : MAPMO

Thèse présentée par :

Manon Baudel

soutenue le : **1er décembre 2017**

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'Université d'Orléans**

Discipline : **Mathématiques**

<p>Théorie spectrale pour des applications de Poincaré aléatoires</p>
--

Thèse dirigée par :

Nils BERGLUND

Professeur, Université d'Orléans

RAPPORTEURS :

Gérard BEN AROUS

Professeur, Courant Institute

Eva LÖCHERBACH

Professeur, Université de Cergy-Pontoise

JURY :

Nils BERGLUND

Professeur, Université d'Orléans

Nicolas CHAMPAGNAT

Chargé de Recherche INRIA, Université de Lorraine

Luc HILLAIRET

Professeur, Université d'Orléans

Tony LELIÈVRE

Professeur, École des Ponts ParisTech

Eva LÖCHERBACH

Professeur, Université de Cergy-Pontoise

Kilian RASCHEL

Chargé de Recherche, Université de Tours

Remerciements

Au cours de ces trois années, les joies et les difficultés du travail de recherche ont été pour moi très similaires à celles d'une course en montagne. Lorsqu'un objectif est fixé, il n'est pas toujours facile de l'atteindre, l'aventure se déroule rarement comme prévu et une fois le sommet atteint, on réalise souvent qu'il était possible d'emprunter un chemin plus rapide ou de faire mieux, mais on découvre également d'autres cimes et d'autres objectifs.

Je tiens à remercier Nils Berglund qui m'a guidée tout au long de cette aventure. Merci de m'avoir proposé un sujet avec un itinéraire si varié et intéressant. Merci également d'avoir partagé vos connaissances, votre expérience et votre passion, toujours avec gentillesse, sans jamais compter sur votre temps. Merci de m'avoir formée tout au long de cette progression.

Je suis sincèrement reconnaissante à Gérard Ben Arous et Eva Löcherbach d'avoir accepté de rapporter cette thèse et de s'être engagés dans mon travail. Les nombreux échanges ont permis d'améliorer le contenu de ce manuscrit, et je vous remercie pour l'intérêt témoigné autour de ce travail.

Je souhaite aussi remercier les membres du jury Nicolas Champagnat, Luc Hillairet, Tony Lelièvre et Killian Raschel, merci d'avoir accepté d'homologuer cette aventure avec enthousiasme.

Je tiens à remercier tout ceux avec qui j'ai pu échanger, apprendre et qui m'ont toujours chaleureusement accueillie. I would like to express my gratitude to Christian Kuehn. Thank you for your welcome and for taking time to discuss with me.

Cette ascension a pu se dérouler dans de bonnes conditions grâce à l'ensemble des membres du laboratoire MAPMO que je remercie pour leur accueil. Je tiens à remercier les personnes de l'ubac : Anne, Marie-France et Marie-Laurence pour leur soutien logistique et leur bonne humeur. Un grand merci à Catarina.

Je tiens aussi à remercier mes compagnons de cordées du MAPMO : Erica, Mathilde, Lynh, Rémi, Tien, Nhat, Julie, Houssam et Maxime. Bien que le chemin le plus court pour partager le casse-croûte ne soit pas toujours le plus judicieux, les paliers de décompression en tout genre étaient de réels moments de plaisir. Merci également à mes compagnons de cordées du CAFO, notamment Perrine et Flora, sans qui le plongeon dans le monde de la recherche n'aurait pas été aussi agréable.

Je remercie également Lise, Cédric, Sophie et Kévin qui m'ont ouvert leur refuge ou leur auberge au détour d'une conférence pour allier travail et retrouvailles. Merci à Manu, Tim, Anne-Lise, Blandine, Nico et Flo de m'avoir sortie des chemins battus et de m'avoir fait jongler entre maths et ripailles.

Sans oublier mes plus fidèles supporters et sponsors, mes parents, qui ont toujours fait en sorte que mes études se déroulent dans les meilleures conditions. Un grand merci à ma sœur pour son soutien et ses conseils notamment lors de la dernière ligne droite.

Merci à Charles pour toutes les cordes montées. Merci de m'assurer, me rassurer, me supporter, être ton second de cordée est un plaisir.

Sommaire

Remerciements	i
1 Introduction	1
1.1 Motivation, les phénomènes périodiques	1
1.2 Métastabilité	3
1.3 Approches utilisées	4
1.3.1 Théorie des grandes déviations	4
1.3.2 Théorie du potentiel	8
1.3.3 Théorie spectrale	10
1.4 Objectif et démarche	10
1.5 Résultats	11
1.6 Plan	11
2 Chaînes de Markov à temps discret et sur un espace d'état quelconque	13
2.1 Propriétés et résultats classiques	14
2.1.1 Définitions pour un noyau de transition à espace quelconque	14
2.1.2 Irréductibilité et récurrence de Harris	15
2.1.3 Propriétés spectrales d'un noyau à densité	16
2.1.4 Processus réversible et non réversible	20
2.2 Théorie du potentiel et problèmes aux bords	21
2.2.1 Équivalence avec un problème aux valeurs propres sur un domaine restreint	22
2.2.2 Calcul des fonctions propres à gauche	23
2.2.3 Problème aux bords de Poisson	24
2.3 Processus trace	25
2.3.1 Définition	25
2.3.2 Propriétés du processus trace	26
2.3.3 Approximation par le processus trace	28
2.4 Processus tué	30
2.4.1 Processus tué et distribution quasi-stationnaire	30
2.4.2 Propriétés spectrales du processus tué	31
2.5 Processus conditionné, transformée harmonique de Doob	36
3 Applications de Poincaré aléatoires	39
3.1 Étude d'un système déterministe admettant des orbites périodiques	39
3.1.1 Généralités sur la théorie de Floquet	40
3.1.2 Système de coordonnées local dans le voisinage d'une orbite périodique	42
3.1.3 Application de Poincaré	43
3.2 Définition des applications de Poincaré aléatoires	44
3.2.1 Propriétés de l'équation différentielle stochastique	44
3.2.2 Définition de l'application de Poincaré aléatoire	47
3.3 Dynamique dans le voisinage des orbites périodiques	48
3.3.1 Généralités sur les estimations des trajectoires	48
3.3.2 Estimation des espérances de temps de retour	51
3.3.3 Argument de couplage	54
3.4 Propriétés des applications de Poincaré aléatoires	54

3.4.1	Réurrence des applications de Poincaré aléatoires	54
3.4.2	Estimations a priori par la théorie des grandes déviations	55
4	Propriétés spectrales des applications de Poincaré aléatoires, cas non dégénéré	57
4.1	Hypothèse de non-dégénérescence	58
4.2	Estimation des valeurs propres et fonctions propres	59
4.2.1	Estimation des valeurs propres	59
4.2.2	Fonctions propres à droite	60
4.2.3	Fonctions propres à gauche	61
4.2.4	Relation entre les valeurs propres et les espérances de temps de retour	63
4.3	Idée générale de la preuve pour l'estimation des éléments propres	63
4.3.1	Réduction de l'ensemble de définition du problème aux valeurs propres	63
4.3.2	Problème aux valeurs propres sur une union d'ensembles métastables	64
4.4	Approximation par un processus de rang fini	66
4.4.1	Propriétés spectrales du processus $K_{B_i}^0$	66
4.4.2	Norme de la différence entre le processus trace et le processus de rang fini	67
4.4.3	Propriétés spectrales du noyau de rang fini K^*	69
4.5	Preuves des théorèmes	75
4.5.1	Preuve du théorème 4.2.1	75
4.5.2	Preuve du théorème 4.2.4	77
4.5.3	Preuve du théorème 4.2.8	78
4.5.4	Preuve du théorème 4.2.10	78
5	Relaxation de l'hypothèse de hiérarchie métastable	81
5.1	Idée générale de la preuve	82
5.2	Définition et propriétés de l'opérateur de rang fini	82
5.2.1	Motivation de la nouvelle définition	82
5.2.2	Complément de Schur dans le cas matriciel	83
5.2.3	Complément de Schur dans le cas des opérateurs intégraux	84
5.3	Couple d'orbites périodiques ayant un quasi-potentiel de même niveau	87
5.3.1	Idée générale du comportement des valeurs propres	87
5.3.2	Rares transitions entre les deux voisinages B_k et B_{k+1}	90
5.3.3	Transitions probables entre les deux voisinages B_k et B_{k+1}	93
5.4	Perspectives	94
5.4.1	Calcul des fonctions propres, et espérance des temps d'atteinte	94
5.4.2	Approximation de la dynamique du processus par un modèle réduit	94
5.4.3	Lien entre les différentes distributions quasi-stationnaires	94
6	Discussion sur les aspects numériques	97
6.1	Généralités pour la simulation d'applications de Poincaré aléatoires	97
6.2	Méthodes de calcul naïves des valeurs propres	97
6.2.1	Méthode directe sur le noyau K	97
6.2.2	Méthode directe sur le noyau K^u	98
6.2.3	Estimations des valeurs propres principales	99
6.3	Estimation par la simulation d'événements rares	99
6.3.1	Généralités sur l'algorithme multi-niveaux adaptatif	100
6.3.2	Algorithme multi-niveaux pour les applications de Poincaré aléatoires	102

Chapitre 1

Introduction

1.1 Motivation, les phénomènes périodiques

Les phénomènes oscillatoires apparaissent naturellement dans les systèmes biologiques. Ils sont présents à tous les niveaux de l'organisation biologique. Les périodes vont de la fraction de seconde pour l'activité neuronale, à l'année pour les dynamiques des populations animales dans les systèmes écologiques. Au sein d'une cellule, les phénomènes périodiques sont dus à un enchaînement de réactions biochimiques et à des mécanismes de régulations. Les oscillations biochimiques découlent par exemple de la régulation d'enzymes ou de récepteurs. En particulier, la glycolyse est un phénomène périodique qui transforme un sucre en de l'éthanol et du gaz carbonique. Elle est constituée d'une douzaine de chaîne de réactions enzymatiques. Dans le cadre de la glycolyse, les phénomènes périodiques s'expliquent par une réaction catalysée par une enzyme appelée phosphofuctokinase.

La dynamique des systèmes biologiques est souvent très complexe et la modélisation mathématique s'avère être un outil indispensable. En effet, elle permet de réduire la complexité des mécanismes moléculaires à l'origine des phénomènes périodiques. Grâce à la modélisation, un phénomène appelé birythmicité a été prédit théoriquement puis observé expérimentalement. La notion de birythmicité a été introduite par Albert Goldbeter et Olivier Decroly dans [38], elle caractérise les systèmes pour lesquels deux orbites périodiques stables coexistent pour les mêmes valeurs de paramètres et donc sous les mêmes conditions.

Une étude détaillée du phénomène de birythmicité a été réalisée pour un modèle biochimique à deux variables. Ce modèle représente une réaction enzymatique autocatalytique [67]. C'est l'exemple de système présentant un phénomène de birythmicité le plus simple à étudier puisque le comportement du système peut être déterminé par une étude de l'espace des phases. Considérons un modèle décrivant une réaction enzymatique dans le cadre de la glycolyse des cellules animales, elle est décrite par la réaction de la Figure 1.1. Si le système n'est pas sujet à des perturbations, l'évolution d'un substrat S et d'un produit P lorsque le produit est recyclé en tant que substrat, est régie par le système d'équations différentielles ordinaires

$$\begin{aligned}\dot{x} &= sr(x, y) - k_s x - \frac{s_i x^n}{\kappa^n + y^n} \\ \dot{y} &= v - sr(x, y) + \frac{s_i x^n}{\kappa^n + y^n}.\end{aligned}$$

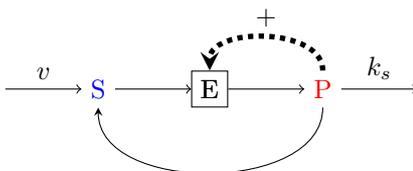


FIGURE 1.1 – Modèle d'une réaction enzymatique catalysée par une enzyme allostérique activée par son produit de réaction en présence d'une source constante de substrat. Ce modèle est un prototype pour étudier le phénomène de birythmicité.

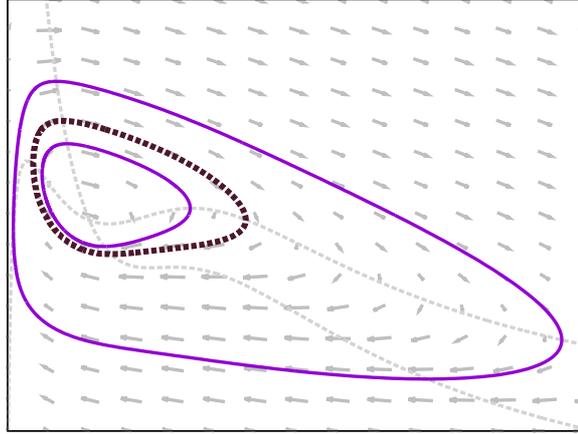


FIGURE 1.2 – Espace des phases pour la réaction biochimique, les deux orbites périodiques stables en ligne continue violet sont séparées par une orbite périodique instable.

Ici, x représente la concentration normalisée du produit P , et y représente la concentration normalisée du substrat S . Les paramètres v , s et k_s sont des paramètres cinétiques renormalisés dont nous ne donnerons pas de définition exacte. Nous nous contenterons de considérer v comme la vitesse d'injection du substrat (nous la prendrons constante) et k_s comme la constante de dégradation du produit. La fonction r est une fonction de taux, que nous prendrons de la forme

$$r(x, y) = \frac{y(1+y)(1+x)^2}{L + (1+y)^2(1+x)^2},$$

où L est la constante cinétique. Le terme non linéaire $(s_i x^n)/(\kappa^n + y^n)$ correspond au processus de recyclage, il s'agit d'une équation de Hill, les constantes κ , s_i sont également des constantes cinétiques, n est le degré de coopérativité entre les sites de fixation de l'enzyme. Le choix de la fonction de taux est justifié dans [67]. Une description détaillée de ce modèle y est faite. L'étude des isoclines nulles du système

$$\begin{aligned} k_s x &= sr(x, y) - \frac{s_i x^n}{\kappa^n + y^n} \\ v &= sr(x, y) - \frac{s_i x^n}{\kappa^n + x^n}, \end{aligned}$$

détermine les différentes dynamiques du système. En particulier, Albert Goldbeter et Federico Morán ont montré dans [67] que pour certaines valeurs des paramètres, le système admet la coexistence de deux orbites périodiques stables séparées par une orbite périodique instable, voir la Figure 1.2.

Ainsi, pour une condition initiale dans le quadrant positif, le système va évoluer vers l'une ou l'autre de ces orbites périodiques stables selon la position de la condition initiale dans le quadrant positif.

Lorsque l'environnement subit des perturbations, ce qui est plus réaliste, la cinétique peut être décrite en prenant en compte les fluctuations liées à l'environnement par addition d'un bruit aléatoire. La réaction enzymatique peut alors être modélisée par le système d'équations différentielles stochastiques (EDS)

$$\begin{aligned} dx_t &= \left(sr(x_t, y_t) - k_s x_t - \frac{s_i x_t^n}{\kappa^n + y_t^n} \right) dt + \sigma_1 dW_t^{(1)} \\ dy_t &= \left(v - s r(x_t, y_t) + \frac{s_i x_t^n}{\kappa^n + x_t^n} \right) dt + \sigma_2 dW_t^{(2)} \end{aligned} \quad (1.1.1)$$

où $W_t^{(1)}, W_t^{(2)}$ sont deux mouvements Browniens standards indépendants et σ_1, σ_2 sont deux petits paramètres qui mesurent l'intensité des fluctuations. Si l'intensité des fluctuations est suffisamment forte, les trajectoires du système peuvent effectuer des transitions entre les deux orbites périodiques stables. Une

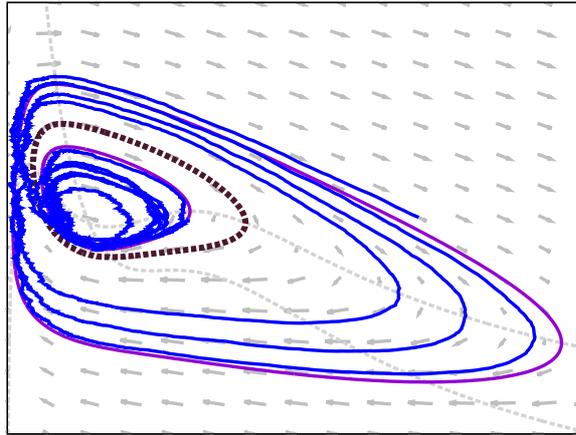


FIGURE 1.3 – Simulation d'une trajectoire de l'EDS (1.1.2) modélisant la réaction enzymatique présentée dans la Figure 1.1.

trajectoire simulée commençant dans le voisinage d'une orbite périodique stable va alors passer un temps relativement long dans le voisinage de cette orbite périodique avant d'effectuer une transition rapide et imprévisible vers l'autre orbite périodique comme le montre la Figure 1.3.

Dans cette thèse, nous étudierons des perturbations d'équations différentielles ordinaires admettant plusieurs orbites périodiques. Sous certaines hypothèses que nous détaillerons, si l'intensité du bruit (des fluctuations) est faible, le système reste pendant une longue période de temps dans le voisinage d'une orbite périodique stable avant d'effectuer une transition vers une autre orbite périodique stable, où il reste à nouveau piégé. Un tel système est alors qualifié de métastable. L'étude mathématique de la métastabilité doit permettre une description statistique du système.

1.2 Métastabilité

Un analogue à la birhythmicité pour des systèmes non périodiques est la bistabilité. Un exemple de système est celui de la diffusion dans un double puits décrit par l'EDS

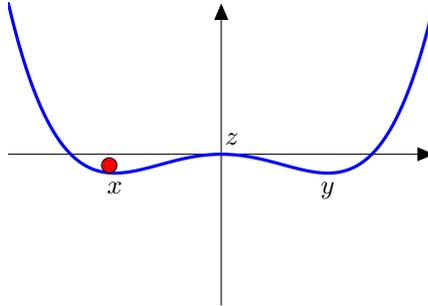
$$dx_t = (x_t - x_t^3) dt + \sigma dW_t, \quad (1.2.1)$$

où W_t est un mouvement Brownien standard. Cette équation se réécrit sous la forme

$$dx_t = -\nabla U(x_t) dt + \sigma dW_t,$$

où le gradient (ici la dérivée) ∇U est généré par la fonction potentielle $U(x) = -(1/2)x^2 + (1/4)x^4$. Nous pouvons visualiser le phénomène par une bille qui glisse le long de la fonction potentielle. En l'absence de bruit, la dynamique du système déterministe emmène la bille dans l'un des puits du potentiel (les minima locaux de la fonction potentielle), lorsque l'intensité des fluctuations, i.e. le paramètre σ , est suffisamment forte, la bille pourra effectuer une transition entre les deux puits de la fonction potentielle, voir la Figure 1.4. Les minima jouant le même rôle que les orbites périodiques stables du système précédent, sous l'effet des perturbations, le système va passer un temps relativement long dans le voisinage de l'un des deux minima avant d'effectuer une transition rapide et imprévisible vers l'autre minimum.

Dans la famille des processus Markoviens (nous ne nous intéresserons qu'à des processus Markoviens), le phénomène de métastabilité ne se limite pas aux diffusions i.e. aux systèmes à temps continu et à espace d'états continu, les chaînes de Markov (temps discret et espace discret ou continu) et les processus de sauts Markoviens (temps continu et espace discret) peuvent également avoir un comportement métastable. La métastabilité est un concept très large. De façon informelle, il est question de métastabilité dès que le système explore des régions différentes de son espace d'états selon les échelles de temps considérées. Sur des échelles de temps relativement courtes, le système est dans un état de pseudo-équilibre, il reste

FIGURE 1.4 – Fonction potentielle U associée à l'EDS (1.2.1)

confiné dans une partie limitée de son espace d'états, on parle alors d'états métastables. Tandis que sur des échelles de temps longues, le système réalise des transitions rapides entre les différents états métastables, explorant ainsi différentes régions de son espace d'états.

Si on note x et y les minima locaux de la fonction potentielle U , une question naturelle, pour le système métastable décrit par la diffusion dans un double puits, est de calculer le temps de transition τ de x vers y . La loi d'Eyring-Kramers quantifie l'espérance du temps de transition lorsque $\sigma \rightarrow 0$ [44, 61]. Comme sur la Figure 1.4, notons z le maximum local (l'unique point selle) entre les deux puits, alors l'espérance du temps de transition de x vers y satisfait

$$\mathbb{E}^x \{\tau\} \approx \frac{2\pi}{\sqrt{U''(x)|U''(z)|}} e^{2(U(z)-U(x))/(\sigma^2)} .$$

Ce résultat peut être étendu pour les diffusions dans des dimensions supérieures. Il a été généralisé au cas où il y aurait plus de deux minima et au cas où plusieurs points selles permettraient des transitions de x vers y . Nils Berglund et Barbara Gentz ont également relâché l'hypothèse de non-dégénérescence des points selles dans [7] en autorisant des points selles non quadratiques.

La loi d'Eyring-Kramers a été proposée dans les années 30, elle n'a été démontrée de façon rigoureuse, que dans les années 2000 avec les travaux d'Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gaynard, et Markus Klein [24, 25], qui donnent une définition précise de l'approximation faite par cette formule.

Dans cette thèse, nous souhaitons quantifier les transitions entre les états métastables pour un système admettant plusieurs orbites stables. Un élément clé dans les démonstrations des formules d'Eyring-Kramers est d'exprimer toutes les quantités probabilistes permettant de quantifier les transitions en termes de capacités et d'utiliser des principes variationnels pour les estimer. Une hypothèse forte dans ces travaux est la réversibilité du processus. Or les systèmes admettant des orbites périodiques sont non-réversibles. Ainsi, nous ne pouvons pas directement adapter l'approche utilisée dans les travaux [24, 25].

Avant d'expliquer la démarche que nous avons effectuée pour quantifier les transitions métastables, nous passons en revue trois approches utilisées pour étudier des systèmes métastables : la théorie des grandes déviations, la théorie du potentiel et la théorie spectrale. Ces trois approches reposent sur des outils différents et permettent d'obtenir des résultats différents pour des processus plus ou moins généraux. Elles sont complémentaires et il n'est pas possible de les dissocier parfaitement.

1.3 Approches utilisées

1.3.1 Théorie des grandes déviations

Grâce à la théorie des grandes déviations, Mark Freidlin et Alexander Wentzell ont montré de manière rigoureuse les asymptotiques des temps de transition pour les diffusions. Les résultats qu'ils ont obtenu se trouvent dans le livre [46]. Ils ont utilisé la méthode des grandes déviations sur un espace de trajectoires pour obtenir une estimation des déviations de l'équation différentielle stochastique par rapport à sa

trajectoire déterministe. L'avantage de cette approche est sa robustesse, elle s'adapte à tous les contextes. En contrepartie, elle ne fournit qu'une équivalence logarithmique, ce qui peut s'avérer être une bonne estimation a priori. Nous rappelons ici quelques résultats généraux sur la théorie des grandes déviations.

1.3.1.1 Généralités sur les grandes déviations

La théorie des grandes déviations s'intéresse aux probabilités d'événements rares. Elle permet d'estimer asymptotiquement ces probabilités sur une échelle exponentielle. Considérons $(\mathbb{P}_n)_n$ une famille de probabilités sur un espace métrique \mathcal{Z} , satisfaisant pour toute fonction continue bornée $f : \mathcal{Z} \rightarrow \mathbb{R}$ $\lim_{n \rightarrow \infty} \int f d\mathbb{P}_n = f(m^*)$. La théorie des grandes déviations permet de déterminer à quelle vitesse $\mathbb{P}_n(A)$ tend vers zero pour un ensemble mesurable A restant à une distance positive de m^* . En particulier, elle cherche à déterminer s'il s'agit d'une décroissance exponentielle, i.e. s'il existe $J(A) \in]0, \infty[$ telle que

$$\mathbb{P}_n\{A\} \approx e^{-nJ(A)}. \quad (1.3.1)$$

où \approx correspond à une équivalence logarithmique i.e. (1.3.1) signifie $n^{-1} \log \mathbb{P}_n\{A\} \rightarrow -J(A)$ lorsque $n \rightarrow \infty$. Remarquons que si la relation ci-dessus est satisfaite pour deux ensembles disjoints A et B alors par additivité de la mesure

$$\mathbb{P}_n\{A \cup B\} \equiv e^{-n \min\{J(A), J(B)\}}, \quad (1.3.2)$$

de telle façon que $J(A)$ puisse satisfaire

$$J(A) = \inf_{z \in A} J(z), \quad (1.3.3)$$

Dans la suite, une telle fonction sera appelée *fonction de taux*. Cependant, une telle expression ne peut être satisfaite pour tout ensemble mesurable A . En effet, si une mesure continue satisfait pour tout $z \in \mathcal{Z}$ l'équation $\mathbb{P}(z) = 0$ alors J serait identiquement égale à l'infini ce qui n'est pas compatible avec les équations (1.3.2) et (1.3.3).

En s'appuyant sur les travaux de Harald Cramér[34], Herman Chernoff a prouvé le résultat suivant

Théorème 1.3.1. *Soient $Z_1, Z_2 \dots$ des variables aléatoires réelles, i.i.d et de même loi μ . Soit \bar{Z}_n la moyenne empirique $\bar{Z}_n = n^{-1} \sum_{i=1}^n Z_i$, et notons $G : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ la fonction génératrice $G(\xi) = \mathbb{E}\{e^{\xi Z_1}\}$ pour ξ et définissons pour tout x*

$$I_\mu(z) = \sup_{\xi \in \mathbb{R}} (\xi z - \log G(\xi)). \quad (1.3.4)$$

— *Borne supérieure. Si Z_1 est intégrable,*

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\bar{Z}_n \geq x\} &\leq e^{-nI_\mu(x)}, \quad \text{pour } x \geq \mathbb{E}\{Z_1\} \\ \mathbb{P}\{\bar{Z}_n \leq x\} &\leq e^{-nI_\mu(x)}, \quad \text{pour } x \leq \mathbb{E}\{Z_1\} \end{aligned}$$

— *Borne inférieure. Pour tout $x \in \mathbb{R}$*

$$\begin{aligned} \liminf_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log \mathbb{P}\{\bar{Z}_n \geq x\} &\geq -I_\mu(x) \\ \liminf_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log \mathbb{P}\{\bar{Z}_n \leq x\} &\geq -I_\mu(x) \end{aligned}$$

La preuve pour la borne supérieure repose sur des inégalités de Markov exponentielles. La preuve pour la borne inférieure repose sur la formule de Stirling et n'utilise pas d'argument que nous réutiliserons par la suite.

Théorème 1.3.2. *Soit μ une mesure de probabilité sur \mathbb{R} et soit μ_N la loi de la moyenne empirique \bar{Z}_n et soit I_μ donné par (1.3.4). Alors*

(a) *pour tout ensemble $F \subset \mathbb{R}$ fermé,*

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log \mu_n(F) \leq - \inf_{z \in F} I_\mu(z),$$

(b) *pour tout ensemble $O \subset \mathbb{R}$ ouvert,*

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \log \mu_n(O) \geq - \inf_{z \in O} I_\mu(z),$$

Ce résultat se généralise au cas multidimensionnel.

Définition 1.3.3 (Principe de grandes déviations)

Une famille de probabilité $(\mu_n)_{n \geq 0}$ satisfait un *principe de grandes déviations* (p.g.d) de vitesse $a_n \nearrow \infty$ et de fonction de taux I si

- (a) la fonction de taux $I : M \rightarrow [0, \infty]$ est semi-continue inférieurement,
- (b) borne inférieure : $\liminf_{n \rightarrow \infty} a_n^{-1} \log \mu_n(O) \geq -J(z)$ pour tout ouvert $O \subset \mathcal{Z}$,
- (c) borne supérieure : $\limsup_{n \rightarrow \infty} a_n^{-1} \log \mu_n(F) \leq -J(z)$ pour tout fermé $F \subset \mathcal{Z}$.

Nous dirons simplement que $(\mu_n)_{n \geq 0}$ satisfait un p.g.d.

Le principe de contraction permet de transférer un principe de grande déviation d'un espace à un autre.

Théorème 1.3.4 (Principe de contraction). *Soit I la fonction de taux du principe de grandes déviations pour la famille de probabilité $(\mathbb{P}^\sigma)_{\sigma > 0}$. Soit $f : \mathcal{Z} \rightarrow \mathcal{X}$ une fonction continue de \mathcal{Z} dans un espace métrique séparable \mathcal{X} . Alors $(\mathbb{P}^\sigma \circ f^{-1})_{\sigma > 0}$ satisfait un principe de grandes déviations avec comme fonction de taux J qui est donnée par*

$$J(x) = \inf_{z: f(z)=x} J(z).$$

1.3.1.2 Théorie de Freidlin et Wentzell pour les grandes déviations

Nous souhaitons étudier les grandes déviations pour des faibles perturbations aléatoires de systèmes dynamiques décrits par des équations différentielles ordinaires. Les résultats sont issus du livre de Mark Freidlin et Alexander Wentzell [46]. Ces résultats ont été repris en partie dans le livre d'Enzo Olivieri et Maria Eulália Vares [69].

Soit une famille de diffusions générale indexée par le petit paramètre $\sigma > 0$ dans \mathbb{R}^d

$$dx_t^\sigma = f(x_t^\sigma) dt + \sigma g(x_t^\sigma) dWt$$

où la matrice de diffusion $D(x) := g(x)g^t(x)$ est définie positive.

Définition 1.3.5 (Principe de grandes déviations)

Une fonctionnelle $J : C([0, T], \mathbb{R}^d) \rightarrow [0, \infty]$ est une fonction de taux si elle est continue semi-inférieurement et si elle a des ensembles de niveaux compacts. Un processus stochastique $(x_t^\sigma)_{t \in [0, T]}$ satisfait un principe de grandes déviations de vitesse σ^2 et de fonction de taux J si pour tout ensemble de trajectoires Γ

$$-\inf_{\Gamma^\circ} J \leq \liminf_{\sigma \rightarrow 0} \sigma^2 \log \mathbb{P}\{x^\sigma \in \Gamma\} \leq \limsup_{\sigma \rightarrow 0} \sigma^2 \log \mathbb{P}\{x^\sigma \in \Gamma\} \leq -\inf_{\bar{\Gamma}} J$$

Dans de nombreux cas, la borne inférieure sur l'intérieur Γ° et la borne inférieure sur la fermeture $\bar{\Gamma}$ sont les mêmes. Ainsi, la limite de $\sigma^2 \log \mathbb{P}\{x^\sigma \in \Gamma\}$ existe et vaut la valeur commune.

Le principe de grandes déviations pour les diffusions est alors le suivant.

Théorème 1.3.6 (Principe de grandes déviations pour les diffusions). *Pour tout $T > 0$, la famille de processus $(x_t^\sigma)_{t \in [0, T]}$, satisfait un principe de grandes déviations dans $C([0, T], \mathbb{R}^d)$, muni de la norme uniforme, uniformément par rapport à la condition initiale $x_0^\sigma = x_0$, de vitesse $\sigma^2/2$, et de fonction de taux $J_T^{x_0}$ définie pour toute fonction $\phi \in C([0, T], \mathbb{R}^d)$, absolument continue et vérifiant $\phi(0) = x$, par*

$$J_T^{x_0}(\phi) = \frac{1}{2} \int_0^T (\dot{\phi}_t - f(\phi_t))^t D(\phi_t)^{-1} (\dot{\phi}_t - f(\phi_t)) dt$$

si l'intégrale est bien définie, et par $J_T^{x_0}(\phi) = +\infty$ sinon.

Remarque 1.3.7. Si la matrice de diffusion n'est que semi-définie positive, alors la famille $\{x_t^\sigma\}_{t \in [0, T]}$ satisfait toujours un principe de grandes déviations avec une fonction de taux $J_T^{x_0}$, mais celle-ci n'est pas donnée par un principe variationnel et il peut être difficile d'avoir une forme explicite. \diamond

Le principe de grandes déviations permet d'estimer les asymptotiques exponentielles de certaines probabilités liées à la diffusion.

Quasi-potentiel La théorie des grandes déviations devient un outil particulièrement puissant lorsque l'on dispose d'une connaissance assez précise du système.

Définition 1.3.8 (Quasi-potentiel)

Soient $x, y \in \mathbb{R}^d$, le quasi-potentiel $V(x, y)$ est définie par

$$V(x, y) = \inf_{T>0} \inf_{\phi(0)=x, \phi(T)=y} J_T^x(\phi).$$

Le quasi-potentiel représente le coût pour que le système partant d'un voisinage de x aille dans le voisinage de y .

Remarque 1.3.9. Remarquons que s'il existe une orbite du système déterministe $\dot{x} = f(x)$ qui conduit de x à y alors $V(x, y) = 0$. \diamond

Mark Freidlin et Alexander Wentzell ont montré que le comportement statistique du processus x^σ est bien décrit par le comportement d'une chaîne de Markov dont les états sont les voisinages des ensembles métastables. Les temps moyens de transitions sont estimés grâce au quasi-potentiel.

Temps moyen de sortie Soit $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ un ensemble ouvert borné ayant une frontière lisse contenu dans le bassin d'attraction d'un point isolé asymptotiquement stable du système déterministe $\dot{x} = f(x)$, et intéressons-nous aux propriétés du temps de première sortie de ce domaine pour une condition initiale $x_0^\sigma = x_0 \in \mathcal{D}$. Notons $\tau^\sigma = \inf\{t > 0, x_t^\sigma \notin \mathcal{D}\}$ le temps de première sortie. La borne inférieure du quasi-potentiel

$$\bar{V} = \inf_{y \in \partial \mathcal{D}} V(x_0, y),$$

permet de quantifier les propriétés du temps τ^σ .

Théorème 1.3.10. *Pour toutes conditions initiales $x_0 \in \mathcal{D}$, pour tout $\eta > 0$,*

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \mathbb{P}^x \{e^{(\bar{V}-\eta)/\sigma^2} < \tau^\sigma < e^{(\bar{V}+\eta)/\sigma^2}\} = 1.$$

De plus l'espérance du temps de sortie satisfait

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \sigma^2 \log \mathbb{E}^x \{\tau^\sigma\} = \bar{V}.$$

Dans le cas d'un système gradient i.e. pour $f(x) = -\nabla U(x)$ et $g(x) = \text{id}$ avec x^* un minimum non dégénéré de la fonction potentielle U suffisamment régulière, et y tel que $U(y) \leq \min_{z \in \partial \mathcal{D}} U(z)$ alors la fonction ϕ qui satisfait $\lim_{t \rightarrow -\infty} \phi_t = x^*$, $\phi_T = y$, et remontant le long du flot déterministe avec une vitesse juste suffisante pour compenser le terme de dérive i.e. $\dot{\phi}_t = \nabla U(\phi_t)$ est l'unique fonction qui minimise la fonction de taux. Ce résultat est une conséquence du fait que dans le cas gradient la fonction de taux satisfait

$$\begin{aligned} J_T^{x_0}(\phi) &= \frac{1}{2} \int_0^T \left| \dot{\phi}_t + \nabla U(\phi_t) \right|^2 dt \\ &= \frac{1}{2} \int_0^T \left| \dot{\phi}_t - \nabla U(\phi_t) \right|^2 dt + 2 \int_0^T \dot{\phi}_t \cdot \nabla U(\phi_t) dt. \end{aligned} \quad (1.3.5)$$

Une preuve complète peut être trouvée dans [46, Chapitre IV, Théorème 3.1]. Nous pouvons alors remarquer que si la trajectoire ϕ satisfait $\dot{\phi}_t = \nabla U(\phi_t)$ alors le premier terme du membre de droite de (1.3.5) s'annule. En intégrant le second terme, puis en le minorant nous obtenons que le quasi-potentiel est donné par deux fois la différence des potentiels

$$V(x^*, y) = 2(U(y) - U(x^*)),$$

d'où le terme quasi-potentiel. Le temps de transition dépend de la barrière du potentiel à franchir, nous retrouvons le comportement asymptotique pour l'espérance du temps de sortie qui est d'ordre $e^{2(U(y)-U(x^*))/\sigma^2}$.

1.3.2 Théorie du potentiel

L'étude du caractère métastable d'un système par la théorie du potentiel repose sur le fait que la plupart des quantités qui nous intéressent, peuvent être exprimées en tant que solutions d'un problème aux bords pour le générateur du système. Ces solutions ont une expression en termes de capacités, et ces dernières satisfont des problèmes variationnels. L'approche de la théorie du potentiel pour étudier les systèmes ayant un comportement métastable est détaillé dans le livre d'Anton Bovier et de Frank den Hollander [22]. Un avantage incontestable de la théorie du potentiel est qu'il permet non seulement d'obtenir les asymptotiques exponentielles des quantités qui nous intéressent mais elle permet également d'obtenir le préfacteur.

Nous donnons ici un bref aperçu de cette approche pour l'étude d'une chaîne de Markov irréductible à temps discret sur un espace d'états dénombrable S , de matrice de transition P et de générateur $L = P - \text{id}$. Soit $\mathcal{M} \subset S$, un ensemble non vide, notons $\tau_{\mathcal{M}} = \inf\{n \in \mathbb{N}, X_n \in \mathcal{M}\}$, le temps de première atteinte de \mathcal{M} . L'unique solution du problème aux bords de Dirichlet

$$\begin{aligned} (-Lf)(x) &= 1 & x \in \mathcal{M}^c \\ f(x) &= 0 & x \in \mathcal{M}, \end{aligned}$$

est donnée par $f(x) = \mathbb{E}^x\{\tau_{\mathcal{M}}\}$.

Soient A, B deux ensembles non-vides disjoints, un autre problème intéressant pour étudier la métastabilité est le problème aux bords de Dirichlet donné par

$$\begin{aligned} (-Lf)(x) &= 0 & x \in (A \cup B)^c \\ f(x) &= 1 & x \in A \\ f(x) &= 0 & x \in B. \end{aligned}$$

Si le problème (1.3.6) admet une solution unique, celle-ci a pour expression pour tout $x \in S$

$$f(x) = \mathbb{E}^x\left\{\mathbb{1}_{\{X_{\tau_{A \cup B}} \in A\}}\right\} = \mathbb{P}^x\{\tau_A < \tau_B\}.$$

La quantité $h_{A,B}(x) := \mathbb{P}^x\{\tau_A < \tau_B\}$ est appelée potentiel d'équilibre, elle joue un rôle important dans la théorie du potentiel. La seconde quantité essentielle pour étudier la métastabilité est la mesure d'équilibre sur A

$$e_{A,B} := (-Lh_{A,B})(x), \quad x \in A.$$

Si la mesure d'équilibre $e_{A,B}$ est connue, alors elle est directement reliée au potentiel d'équilibre puisque nous avons

$$\begin{aligned} (-Lh)(x) &= e_{A,B}(x) & x \in B^c \\ h(x) &= 0 & x \in B. \end{aligned}$$

Ainsi, en notant G_B la fonction de Green, qui est ici la matrice inverse de la matrice L_B , définie à partir du générateur L par

$$\begin{aligned} L_B(x, y) &:= L(x, y) & x, y \in B^c \\ L_B(x, y) &:= 0 & x \in B \text{ ou } y \in B, \end{aligned}$$

nous avons

$$h_{A,B}(x) = \sum_{y \in A} G_B(x, y) e_{A,B}(y), \quad x \in S.$$

Si P est de plus réversible par rapport à la mesure μ , alors

$$h_{A,B}(x) = \sum_{y \in A} \frac{\mu(y)}{\mu(x)} G_B(x, y) e_{A,B}(y), \quad x \in S.$$

Cette expression permet d'exprimer l'espérance des temps d'atteinte puisque si f est une solution du problème de Dirichlet 1.1.1 alors d'après [22, Théorème 7.10],

$$\sum_{y \in A} \nu_{A,B}(y) f(y) = \frac{1}{\text{cap}(A, B)} \sum_{x \in S} \mu(x) h_{A,B}(x),$$

où $\nu_{A,B}(y)$ est une mesure de probabilité sur A par

$$\nu_{A,B}(y) := \frac{\mu(y)e_{A,B}(y)}{\text{cap}(A,B)}$$

ayant pour constante de normalisation

$$\text{cap}(A,B) := \sum_{x \in A} \mu(x)e_{A,B}(x).$$

Ainsi en prenant $A = \{x\}$ nous avons

$$\mathbb{E}^x\{\tau_B\} = \frac{1}{\text{cap}(x,B)} \sum_{y \in S} \mu(y)h_{x,B}(y)$$

Le calcul de la capacité est effectué en remarquant qu'il satisfait un principe variationnel associé à la forme de Dirichlet. Ceci permet d'obtenir des bornes inférieures et supérieures sur les capacités et d'obtenir une estimation précise de $\mathbb{E}^x\{\tau_B\}$. La théorie du potentiel est fortement reliée à l'analyse spectrale. L'étude de systèmes métastables en combinant la théorie du potentiel et la théorie spectrale a d'abord été formalisée pour des modèles discrets [23]. Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayraud, et Markus Klein définissent \mathcal{M} les états métastables d'une chaîne de Markov réversible comme les états pour lesquels la probabilité de quitter un état métastable pour aller vers un autre état métastable est beaucoup plus petite que la probabilité partant d'un état quelconque d'aller vers n'importe quel état métastable avant de revenir à sa position initiale i.e. pour tout état z et pour tout couple d'état distinct x, y dans \mathcal{M}

$$\mathbb{P}^z\{\tau_y^+ < \tau_x^+\} \ll \mathbb{P}^z\{\tau_{\mathcal{M}}^+ < \tau_z^+\}.$$

Une fois que les états métastables sont identifiés, sous une hypothèse de non-dégénérescence (i.e. en supposant que les états métastables peuvent être ordonnés du plus stable au moins stable), ils montrent que chaque état métastable correspond à une valeur propre simple de générateur de la chaîne de Markov et que l'espérance du temps de sortie d'un état métastable correspond à l'inverse d'une valeur propre (à un terme d'erreur près). Ils expriment alors les quantités qui les intéressent en termes de capacités puis utilisent des principes variationnels pour estimer ces capacités. Ce résultat a été étendu au cas des diffusions réversibles dans [24, 25].

Précisons que certains arguments qui permettent d'étudier les propriétés du générateur dans [25], ne s'appuient pas sur des outils issus de la théorie du potentiel. Ainsi, ils montrent également que toutes les petites valeurs propres de la diffusion et les fonctions propres associées à ces valeurs propres peuvent être reliées à la valeur propre principale de certains processus tués. Pour des systèmes ayant un comportement métastable, la connexion entre les éléments propres du processus de diffusion et la valeur propre principale de certains processus tués est également présente dans les travaux d'Alessandra Bianchi et d'Alexandre Gaudillière [19] qui étudient des processus de saut Markoviens réversibles, dans [30] où Nicolas Champagnat et Denis Villemonais s'intéressent à des processus de naissance et de mort et des modèles de population, et dans les travaux de Giacomo Di Gesù, Tony Lelièvre, Dorian Le Peutrec et Boris Nectoux [39] pour les diffusions réversibles.

Jusqu'à présent, la théorie du potentiel ne permet pas d'étendre les formules de type Eyring-Kramers aux systèmes non-réversibles. Il s'agit d'un sujet de recherche actuel encore ouvert. Sous certaines hypothèses et pour quelques modèles non-réversibles, des formules de type Eyring-Kramers ont tout de même pu être établies. En se basant sur la théorie des trajectoires de transition introduite par Weinan E, et Eric Vanden-Eijnden [43], Jianfeng Lu et James Nolen, ont exprimé des temps de transition en termes de fonctions dites committéurs (i.e. en termes de probabilités d'atteindre un ensemble A avant un autre ensemble B). Des formules de type Eyring-Kramers ont été établies pour une classe de systèmes non-réversibles admettant un unique point selle, ces résultats ont été obtenu par Freddy Bouchet et Julien Reygner dans [21]. Leur travail repose sur l'approximation BKW (pour Léon Brillouin, Hendrik Kramers et Gregor Wentzel) de la distribution quasi-stationnaire du processus dans des régions métastables. La méthode BKW est une analyse semi-classique dans la limite $\sigma \rightarrow 0$. Ils utilisent également une étude probabiliste du processus dans le voisinage du point selle du processus. Par ailleurs, Claudio Landim et Insuk Seo ont également obtenu des formules de type Eyring-Kramers pour des marches aléatoires non-réversibles pour lesquelles la mesure invariante est connue explicitement en utilisant des formules

variationnelles pour les capacités. En effet, des représentations variationnelles des capacités peuvent être établies pour des processus non-réversibles voir par exemple la thèse de Martin Slowik [75]. Mais contrairement au cas réversible, les minimiseurs n'ont pas d'interprétation probabiliste, c'est donc un cas plus difficile à traiter. Notons enfin que Claudio Landim, Mauro Mariani, Insuk Seo ont obtenu dans [62], des estimations précises pour les temps de transition entre deux puits pour des classes de processus de diffusion toujours en connaissant la mesure invariante. En dehors de ces résultats prometteurs, une théorie complète pour obtenir des estimations précises pour les processus de diffusions non réversibles n'a pas encore été développée.

1.3.3 Théorie spectrale

Grâce à la théorie des grandes déviations, Mark Freidlin et Alexander Wentzell ont établi une équivalence logarithmique entre le comportement métastable d'un système Markovien et les valeurs propres de son générateur.

Une autre approche spectrale pour étudier la métastabilité remonte aux années 80 avec les travaux de d'Edward Brian Davies [35, 36, 37]. Elle se propose de relier les propriétés spectrales des générateurs de processus de Markov réversibles et la métastabilité. En se basant sur le fait que les systèmes métastables possèdent au moins deux échelles de temps, il remarque que si le processus était vraiment réductible, i.e. si au lieu d'avoir des ensembles d'états pseudo-invariants, ils étaient vraiment invariants, alors la valeur propre 0 du générateur serait dégénérée. Sa multiplicité serait égale au nombre d'ensembles d'états invariants. De plus, les fonctions propres pourraient être choisies comme des fonctions indicatrices des ensembles d'états pseudo-invariants. Ainsi, en utilisant un argument de perturbation sur le processus de Markov, il montre que la métastabilité se caractérise par l'existence de deux ensembles de valeurs propres distincts. Le premier ensemble est constitué uniquement de petites valeurs propres réelles, et les deux ensembles sont bien séparés, on parle alors de trou dans le spectre. Une estimation des petites valeurs propres ainsi que du trou spectral entre les petites valeurs propres et le reste du spectre permet de caractériser la métastabilité dans le système. Une estimation des valeurs propres peut être obtenue en utilisant une représentation variationnelle, et des résultats précis peuvent être obtenus, voir par exemple les travaux de Pierre Mathieu [65].

1.4 Objectif et démarche

Dans cette thèse, nous considérons une perturbation d'une équation différentielle ordinaire admettant la coexistence de plusieurs orbites périodiques stables.

$$dz_t = f(z_t) dt + \sigma g(z_t) dW_t ,$$

et nous souhaitons quantifier les rares transitions entre les différentes orbites périodiques stables.

Une méthode particulièrement utile pour étudier les systèmes dynamiques décrits par une équation différentielle ordinaire admettant une ou plusieurs orbites périodiques consiste à introduire une sous-variété Σ de codimension 1, qui est transverse au flot du système. Les intersections des orbites sur cette variété décrivent une application à temps discret de Σ dans Σ . Cette application est appelée application de Poincaré ou du premier retour. De par sa construction, l'application de Poincaré hérite de nombreuses propriétés du flot de l'équation différentielle ordinaire. De plus, elle a l'avantage de réduire la dimension du système à étudier mais surtout, elle rend l'analyse plus facile puisque nous nous affranchissons de la direction longitudinale neutre.

L'analogue naturel des applications de Poincaré pour les systèmes stochastiques a été introduit par Pawel Hitczenko et Georgi Medvedev dans [53], puis analysée dans [54]. Ils l'ont appelé application de Poincaré d'une perturbation aléatoire d'un mouvement périodique ou plus succinctement application de Poincaré aléatoire. L'utilisation des applications de Poincaré aléatoires a permis d'étudier l'excitabilité dans le modèle stochastique de FitzHugh–Nagumo [16], la position du premier passage au travers d'une orbite périodique instable pour les EDS dans le plan [12], et les oscillations multimodales dans des systèmes admettant un point pseudo-singulier nœud [14].

D'un point de vue mathématique, une application de Poincaré aléatoire est décrite par une chaîne de Markov à temps discret et espace continu. Si l'équation différentielle ordinaire admet $N \geq 2$ orbites périodiques, pour σ petit, la chaîne de Markov héritera du comportement métastable de la diffusion :

elle va passer un temps relativement long dans le voisinage des orbites périodiques et effectuer de rares transitions entre ces voisinages.

1.5 Résultats

Nous montrons que pour une faible intensité des fluctuations, l'application de Poincaré aléatoire d'un système admettant N orbites périodiques stables a exactement N valeurs propres proches de 1 qui sous l'hypothèse de non-dégénérescence sont réelles. Nous montrons également que le reste du spectre est bien séparé de cet ensemble de N valeurs propres. En se basant sur la théorie des perturbations des opérateurs, l'approche théorie spectrale nous permet également de donner une expression pour les fonctions propres à droite et à gauche. Nous obtenons également une relation entre les valeurs propres et les temps d'atteinte des voisinages des orbites périodiques. Toutes ces quantités sont exprimées en termes de fonctions committeurs pour des petits voisinages des orbites périodiques stables. De plus, les valeurs propres et les fonctions propres à gauche sont bien approchées par des valeurs propres principales et des distributions quasi-stationnaires de processus tués quand ils quittent certains voisinages des orbites périodiques stables. Ainsi, les estimations obtenues permettent de faire le lien entre les propriétés spectrales des applications de Poincaré aléatoires et des quantités qui peuvent être estimées par des simulations numériques.

La décomposition spectrale que nous obtenons permet d'approcher la dynamique en temps long de la chaîne de Markov en espace continu, par celle d'une chaîne de Markov à N états. Ces états correspondent aux N orbites périodiques stables et les probabilités de transition en une étape entre ces différents états sont exponentiellement petites. Les résultats que nous obtenons sont consistants avec les résultats obtenus par Mark Freidlin et Alexander Wentzell [46, Théorème 7.3, Chapitre 6], puisqu'ils ont montré que le générateur de la diffusion admettaient N valeurs propres avec des parties réelles exponentiellement petites. L'approche que nous utilisons ne s'intéresse pas aux valeurs propres du générateur du processus de la diffusion mais à celles de la chaîne de Markov à temps discret. Sous une hypothèse de non dégrénescence, nous pouvons montrer que ces N valeurs propres sont réelles. En dehors de cette relation consistante en termes de temps de transition, le lien entre les valeurs propres des générateurs en temps discret et celles des générateurs en temps continu n'est pas complément clair. En effet, en dehors du cas trivial où la dynamique transversale à l'orbite périodique peut être parfaitement découplée de la dynamique de phase de l'orbite périodique, nous n'avons pas de relation explicite entre les valeurs propres du générateur du processus de diffusion et celles de la chaîne de Markov à temps discret.

Pour obtenir ces résultats, nous avons utilisé des idées issues de la théorie des grandes déviations, de la théorie du potentiel et de la théorie spectrale. La théorie de Fredholm pouvant être appliquée aux chaînes de Markov à temps discret et espace continu, les probabilités de transitions peuvent s'exprimer comme une somme de projecteurs sur les sous-espaces invariants multipliés par les valeurs propres associées. Pour étudier les propriétés spectrales du noyau de transition de la chaîne de Markov, nous exprimons les fonctions propres à gauche en termes de transformée de Laplace de temps d'atteinte de certains ensembles. Cette idée est déjà présente dans [25]. Concernant les fonctions propres à droite, nous nous inspirons d'un résultat obtenu par Volker Betz et Stéphane Le Roux dans [18] qui montrent que les fonctions committeurs pour des chaînes de Markov à temps discret et espace discret satisfont une équation de type équilibre détaillé, même si la chaîne n'est pas réversible. Nous utilisons également des éléments de la théorie des perturbations des opérateurs linéaires compacts (voir par exemple [58, 50]), la transformée harmonique de Doob (qui est reliée à la théorie des distributions quasi-stationnaires comme le montrent Raphaël Chetrite et Hugo Touchette dans [31]), ainsi que des estimations sur les trajectoires des EDS qui ont été développées dans [10, 11, 12] par Nils Berglund et Barbara Gentz.

1.6 Plan

Le Chapitre 2 est consacré à l'étude des chaînes de Markov à temps discret et sur des espaces quelconques. Il peut être vu comme une boîte à outil pour étudier des applications de Poincaré aléatoires. Nous y définissons des processus qui permettront d'approcher la dynamique des applications de Poincaré aléatoires, notamment le processus trace et le processus tué. Cependant, les idées proposées peuvent être généralisées pour d'autres types de processus Markoviens. En effet, le processus trace est défini pour les processus de sauts Markoviens dans [5], et apparaît également dans l'article de Panki Kim, Renming Song et Zoran Vondraček [60].

Le Chapitre 3 passe en revue les propriétés des systèmes admettant des orbites périodiques, et les perturbations stochastiques de ces systèmes. En utilisant un système de coordonnées approprié, nous donnons la construction de l'application de Poincaré aléatoire. A partir d'estimations a priori sur le caractère métastable des EDS nous donnons des estimations sur les propriétés de la chaîne de Markov décrivant l'application de Poincaré aléatoire. Grâce au principe de contraction et par la théorie de Freidlin-Wentzell, nous obtenons des bornes a priori sur les probabilités de transitions entre les voisinages des orbites périodiques.

Sous une hypothèse de non-dégénérescence, le Chapitre 4 étudie les propriétés spectrales des applications de Poincaré aléatoires. Après avoir présenté les résultats obtenus : estimations des valeurs propres, fonctions propres à droite et à gauche, et lien entre les espérances et les valeurs propres, nous donnons le schéma général de la preuve. Grâce aux résultats obtenus dans le Chapitre 2 nous montrons que les valeurs propres du noyau de transition de la chaîne de Markov sont proches des valeurs propres d'une matrice de transition d'une chaîne de Markov à espace discret. Après avoir estimé les valeurs propres de la matrice de transition, nous donnons les preuves des différents théorèmes.

Le Chapitre 5 relaxe l'hypothèse de non-dégénérescence et étudie en détail le cas où des paires de quasi-potentiels sont proches ou égaux.

Enfin, le Chapitre 6 montre l'intérêt d'un point de vue numérique des résultats obtenus. En effet, les résultats obtenus donnent une relation explicite entre les valeurs propres et fonctions propres de l'application de Poincaré aléatoire et les committants pour des voisinages des orbites périodiques stables. Les méthodes numériques utilisées pour la simulation d'événements rares, comme l'algorithme multi-niveaux avec branchement (voir par exemple [29, 3, 26]) permettent de calculer ces fonctions. De plus, nos résultats montrent le lien entre les valeurs propres (et les fonctions propres) associées aux états métastables et la valeur propre principale (et les fonctions propres associées) de certains processus tués. Étudier la valeur propre principale et les fonctions propres associées présente un intérêt numérique puisqu'il est plus facile de mettre en place un algorithme pour les estimer que pour n'importe-queltes autres valeurs propres ou fonctions propres.

Chapitre 2

Chaînes de Markov à temps discret et sur un espace d'état quelconque

La théorie des chaînes de Markov sur des espaces quelconques est décrite dans le livre de Joseph Leo Doob [41], puis par Steven Orey [70], Esa Nummelin [68] et Daniel Revuz [72]. Nous présenterons les résultats en suivant le formalisme introduit par Sean Peter Meyn et Richard Lewis Tweedy [66].

Dans la première partie, nous rappelons quelques définitions et propriétés des chaînes de Markov à espace d'états quelconque en développant l'analyse probabiliste et l'analyse par la théorie des opérateurs linéaires. Puis, pour étudier les propriétés spectrales de la chaîne de Markov nous présenterons deux problèmes aux bords qui par une approche liée à la théorie du potentiel ont une interprétation probabiliste en termes d'espérance de temps de retour. Enfin, nous définirons et étudierons les propriétés de trois processus qui peuvent être obtenus à partir du processus initial : le processus trace, le processus tué et le processus conditionné à rester dans un ensemble. Nous étudierons en particulier les propriétés spectrales de ces trois processus.

2.1 Propriétés et résultats classiques	14
2.1.1 Définitions pour un noyau de transition à espace quelconque	14
2.1.2 Irréductibilité et récurrence de Harris	15
2.1.3 Propriétés spectrales d'un noyau à densité	16
2.1.3.1 Généralités et définitions	16
2.1.3.2 Propriétés spectrales d'un opérateur compact	17
2.1.3.3 Généralités sur la théorie des perturbations	18
2.1.4 Processus réversible et non réversible	20
2.2 Théorie du potentiel et problèmes aux bords	21
2.2.1 Équivalence avec un problème aux valeurs propres sur un domaine restreint	22
2.2.2 Calcul des fonctions propres à gauche	23
2.2.3 Problème aux bords de Poisson	24
2.3 Processus trace	25
2.3.1 Définition	25
2.3.2 Propriétés du processus trace	26
2.3.3 Approximation par le processus trace	28
2.4 Processus tué	30
2.4.1 Processus tué et distribution quasi-stationnaire	30
2.4.2 Propriétés spectrales du processus tué	31
2.4.2.1 Estimation du trou spectral du processus tué	32
2.4.2.2 Estimation de l'oscillation de fonction propre principale	33
2.5 Processus conditionné, transformée harmonique de Doob	36

2.1 Propriétés et résultats classiques

2.1.1 Définitions pour un noyau de transition à espace quelconque

Soit Σ un espace d'états de \mathbb{R}^d et soit \mathcal{S} la σ -algèbre Borélienne sur Σ . Un noyau de transition $K : \Sigma \times \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^+$ est un *noyau markovien* de (Σ, \mathcal{S}) dans lui même tel que

- pour tout $x \in \Sigma$, $K(x, \cdot)$ est une mesure sur (Σ, \mathcal{S}) ,
- pour tout $A \in \mathcal{S}$, $K(\cdot, A)$ est une application \mathcal{S} -mesurable.

Le noyau markovien K est dit *stochastique* si pour tout $x \in \Sigma$, $K(x, \Sigma) = 1$. Il est dit *sous-stochastique* s'il existe $x \in \Sigma$, $K(x, \Sigma) < 1$.

Un noyau markovien sous-stochastique peut être rendu stochastique en ajoutant un état cimetière δ à Σ et en imposant

$$K(x, \delta) = 1 - K(x, \Sigma), \quad K(\delta, \Sigma) = 0.$$

Si le noyau admet un trou spectral (voir Section 2.1.3 pour une définition du trou spectral), il est alors possible de conditionner le noyau avec l'état cimetière à rester dans Σ . Ceci consiste à utiliser la transformée harmonique de Doob. Le noyau ainsi obtenu est également stochastique. Les détails de la transformée harmonique de Doob sont donnés dans la Section 2.5.

Le noyau de transition décrit une chaîne de Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ à temps discret sur Σ . Pour tout $x \in \Sigma$ et pour tout borélien $A \subset \Sigma$, les probabilités de transitions sont données par

$$\mathbb{P}\{X_{n+1} \in A \mid X_n = x\} = K(x, A) \quad \forall n \geq 0.$$

En tant qu'opérateur linéaire, le noyau de transition K induit naturellement deux semi-groupes.

- Le noyau markovien K peut être considéré comme un opérateur linéaire borné sur $L^\infty(\Sigma)$ agissant sur des fonctions mesurables bornées $f : \Sigma \rightarrow \mathbb{C}$ par

$$(Kf)(x) = \int_{\Sigma} K(x, dy) f(y) = \mathbb{E}^x\{f(X_1)\}, \quad \forall x \in \Sigma.$$

Cet opérateur est appelé *opérateur progressif*, lorsque le noyau est stochastique, il laisse invariant tout élément constant.

- Pour toute mesure signée μ sur Σ , de densité m par rapport à la mesure de Lebesgue, nous considérons K comme un opérateur linéaire borné sur $L^1(\Sigma)$

$$(\mu K)(B) = \left(\int_{\Sigma} m(x) K(x, B) dx \right) = \mathbb{P}^\mu\{X_1 \in B\}, \quad \forall B \in \mathcal{S}.$$

Cet opérateur est appelé *opérateur rétrograde*, lorsque le noyau est stochastique, il préserve la norme $\|\mu K\|_1 = \|\mu\|_1$.

Ces deux opérateurs sont également positifs i.e. $\mu K \geq 0$ lorsque $\mu \geq 0$ et $Kf \geq 0$ lorsque $f \geq 0$. Ces opérations définies pour les chaînes de Markov à espaces quelconques sont des extensions naturelles des produits matriciels à droite et à gauche des chaînes de Markov à espace d'états dénombrables.

Pour $n \geq 1$, le n -ième itéré du noyau de transition est défini grâce à la relation de Chapman-Kolmogorov

$$K^{n+1}(x, A) = \int_{\Sigma} K^n(x, dz) K(z, A) \quad \forall x \in \Sigma,$$

avec $K^1(x, A) = K(x, A)$. Ainsi, partant de $x \in \Sigma$, la chaîne de Markov satisfait

$$\mathbb{P}^x\{X_n \in A\} = \int_A K^n(x, dy) = K^n(x, A).$$

Pour tout borélien $A \subset \Sigma$ et pour toute condition initiale $x \in \Sigma$ de la chaîne de Markov, nous introduisons le *temps d'atteinte* τ_A et le *temps de retour* τ_A^+

$$\begin{aligned} \tau_A(x) &= \inf \{n \geq 0, X_n \in A\}, \\ \tau_A^+(x) &= \inf \{n \geq 1, X_n \in A\}. \end{aligned}$$

Lorsque le contexte est suffisamment clair, nous omettrons la condition initiale et noterons simplement τ_A, τ_A^+ . Notons que le temps d'atteinte et de retour sont égaux lorsque la condition initiale est dans le complémentaire de A i.e. $\tau_A^+(x) = \tau_A(x)$ pour $x \in A^c = \Sigma \setminus A$, alors que $0 = \tau_A(x) < 1 \leq \tau_A^+(x)$ si $x \in A$. Suivant les propriétés des temps d'atteinte et de retour, et suivant le nombre de visites de la chaîne dans A , le comportement de la chaîne de Markov est différent.

2.1.2 Irréductibilité et récurrence de Harris

Définition 2.1.1 (Irréductibilité)

Une mesure μ σ -finie sur l'espace d'états (Σ, \mathcal{S}) est une *mesure positive* si $\mu(A) \geq 0$ pour tout $A \in \mathcal{S}$ et $\mu(\Sigma) > 0$. Un ensemble A qui vérifie $\mu(A) > 0$ pour une mesure μ positive est dit μ -positif. Un noyau de probabilité K sur (Σ, \mathcal{S}) est dit μ -irréductible si pour tout $x \in \Sigma$, pour tout A μ -positif, il existe un entier positif (qui peut dépendre de A et x) tel que $K^n(x, A) > 0$. Autrement dit, le nombre de visites de la chaîne dans l'ensemble A est positif. Un noyau K est dit irréductible s'il est μ -irréductible pour une certaine mesure μ . Enfin, une chaîne de Markov est dite *irréductible* si son noyau de transition l'est.

Ainsi une chaîne de Markov est μ -irréductible si pour tout $x \in \Sigma$, et pour tout $A \in \mathcal{S}$, μ -positif

$$\mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ < \infty \} > 0 .$$

Définition 2.1.2 (Mesure invariante, fonction harmonique)

Une mesure σ -finie π sur (Σ, \mathcal{S}) qui satisfait

$$\pi(A) = \int_{\Sigma} \pi(dx) K(x, A), \quad \forall A \in \mathcal{S}$$

est dite *invariante* ou *stationnaire*. Une fonction mesurable positive sur (Σ, \mathcal{S}) , $\phi : \Sigma \rightarrow \mathbb{R}$ est dite K -invariante ou K -harmonique par rapport au noyau K si

$$\phi(x) = \int_{\Sigma} K(x, dy) \phi(y), \quad \forall x \in \Sigma .$$

Lorsque le contexte est suffisamment clair, nous dirons simplement *harmonique* ou *invariante*.

Une mesure invariante (respectivement une fonction harmonique) d'un noyau de transition stochastique est une fonction propre à gauche (respectivement à droite) pour la valeur propre 1. Lorsque le noyau est sous-stochastique la mesure associée à la plus grande valeur propre est appelée distribution *quasi-stationnaire* tandis qu'une fonction f mesurable positive satisfaisant $Kf \leq f$ est dite *surharmonique*. Les propriétés spectrales d'un noyau de transition stochastique seront étudiées d'un point de vue analytique dans la Section 2.1.3. L'irréductibilité d'un noyau de transition est une condition très forte puisqu'elle demande que les ensembles A μ -positifs soient toujours atteints quelque soit leur condition initiale. Cette condition d'irréductibilité permet d'obtenir l'unicité de la mesure invariante lorsqu'elle existe. Le résultat qui suit découle de [66, Théorème 10.0.1 et 10.1.2].

Proposition 2.1.3 (Unicité de la mesure invariante). *Si un noyau de transition est irréductible et possède une mesure invariante, alors à une constante multiplicative près cette mesure est unique.*

Définition 2.1.4

La chaîne de Markov associée à un noyau de transition irréductible n'admettant pas de mesure invariante est dite *nulle*. Elle est dite *positive* sinon.

Une notion plus forte que l'irréductibilité est la récurrence.

Définition 2.1.5

Une chaîne de Markov est dite *récurrenente* si elle est irréductible et si pour tout mesure μ , σ -finie sur \mathcal{S} telle que le noyau de transition K soit μ -irréductible, pour tout $A \in \mathcal{S}$ avec A μ -positif, l'espérance du nombre de visites dans A vérifie

$$\mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{1}_{\{X_n \in A\}} \right\} = \infty, \quad \forall x \in \Sigma .$$

Une chaîne de Markov récurrente qui admet une mesure de probabilité invariante est dite *positive récurrente*.

Définition 2.1.6

Une chaîne de Markov est dite *récurrenente au sens de Harris* si elle est irréductible et que pour tout $A \in \mathcal{S}$, A μ -positif pour une mesure irréductible μ , elle satisfait

$$\mathbb{P}^x \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{1}_{\{X_n \in A\}} = \infty \right\} = 1, \quad \forall x \in A .$$

Si en plus, elle admet une mesure de probabilité invariante, alors elle est dite *positive récurrente au sens de Harris*.

Une chaîne de Markov est récurrente au sens de Harris si pour tout $A \in \mathcal{S}$, μ -positif pour une mesure irréductible μ , elle retourne infiniment souvent dans A lorsqu'elle part d'un point de A . Il est en fait possible de montrer que l'on peut étendre ce résultat à tout $x \in \Sigma$. Si la chaîne de Markov est récurrente au sens de Harris, alors pour tout $x \in \Sigma$ et pour tout borélien A , μ -positif pour une mesure irréductible μ ,

$$\mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ < \infty \} = 1 . \quad (2.1.1)$$

D'après [66, Proposition 9.1.1], (2.1.1) est une condition équivalente à la récurrence au sens de Harris.

Le résultat qui suit, est une conséquence de [66, Théorèmes 17.1.4 et 17.1.5] pour les fonctions harmoniques.

Proposition 2.1.7. *Si le noyau de transition K admet une mesure invariante et si les fonctions bornées K -harmonique sont constantes, alors la chaîne de Markov est positive récurrente au sens de Harris.*

Cette propriété permet de caractériser la propriété des chaînes de Markov positives récurrentes au sens de Harris comme une propriété algébrique de l'opérateur linéaire $f \mapsto Kf$ sur l'espace $L^\infty(\Sigma)$ des fonctions mesurables bornées. L'espace propre correspondant à la valeur propre 1 est un sous espace de dimension 1 de $L^\infty(\Sigma)$ engendré par la fonction constante $\phi \equiv 1$.

Dans la suite, il ne sera question d'irréductibilité que par rapport à la mesure de Lebesgue.

2.1.3 Propriétés spectrales d'un noyau à densité

Dans cette section, nous supposons que le noyau K admet une densité k par rapport à la mesure de Lebesgue.

Définition 2.1.8 (Noyau à densité)

Un noyau de transition K admet une *densité* k par rapport à la mesure de Lebesgue s'il existe une fonction positive $k : \Sigma \times \Sigma \rightarrow [0, \infty]$, mesurable par rapport à la σ -algèbre Borélienne $(\mathcal{S}, \mathcal{S})$ telle que pour tout $x \in \Sigma$, et pour tout $A \in \mathcal{S}$,

$$K(x, A) = \int_A k(x, y) dy .$$

La densité k^n de la n -ième transition est définie de manière récursive par

$$k^{n+1}(x, y) = \int_\Sigma k^n(x, z)k(z, y) dz .$$

2.1.3.1 Généralités et définitions

Pour un opérateur K , considérons l'équation de Fredholm du second type

$$\lambda\phi - K\phi = g , \quad (2.1.2)$$

d'inconnues λ et ϕ où λ est un nombre complexe, et ϕ et g sont dans $L^\infty(\Sigma)$. En dimension finie, l'équation précédente correspond à un système fini d'équations linéaires, et il n'y a que deux possibilités, soit l'équation admet une solution unique $\phi = (\lambda \text{id} - K)^{-1}g$ soit l'équation homogène $K\phi = \lambda\phi$ admet des solutions non triviales. Dans ce dernier cas, λ est appelé valeur propre, elle correspond à une racine du déterminant du système. Ainsi, le nombre de valeurs propres est au plus égal à la dimension du système.

Dans un espace de Banach de dimension infinie, d'autres cas peuvent se produire. Nous pouvons définir le *spectre* de l'opérateur K comme l'ensemble des valeurs λ pour lesquelles $(\lambda \text{id} - K)$ n'est pas inversible. Dans un espace de Banach de dimension infinie, le spectre se décompose en deux parties : le spectre ponctuel et le spectre essentiel.

- Le *spectre ponctuel* est composé des valeurs propres de l'opérateur i.e. des nombres complexes λ tels qu'il existe une fonction $\phi \neq 0$ satisfaisant $K\phi = \lambda\phi$. Les valeurs propres sont donc les valeurs pour lesquelles $(\lambda \text{id} - K)$ n'est pas injective.

- Le *spectre essentiel* peut être défini à partir de la notion d'*opérateur de Fredholm*. Un opérateur linéaire est dit de Fredholm si son noyau est de dimension finie, et son image est fermée, de codimension finie. Pour un opérateur de Fredholm, nous pouvons définir son indice par

$$\text{ind } K = \dim \text{Ker } K - \text{codim Im } K .$$

Ainsi, le spectre essentiel est composé des valeurs complexes λ telles que $\lambda \text{id} - K$ n'est pas un opérateur de Fredholm d'indice 0.

Remarquons que la réunion du spectre essentiel et ponctuel recouvre tout le spectre, cette union n'est pas nécessairement disjointe.

En général, en dimension infinie, il n'est pas facile de trouver les valeurs propres d'un opérateur. Cependant, il existe une classe d'opérateurs qui permet de généraliser de nombreuses propriétés des opérateurs en dimension finie : la classe des opérateurs compacts. C'est la classe d'opérateur que nous étudierons dans la Section 2.1.3.2.

L'*ensemble résolvant* $\rho(K)$ de l'opérateur K est défini par

$$\rho(K) = \{z \in \mathbb{C}, (z \text{id} - K) \text{ est inversible} \} .$$

Pour $z \in \rho(K)$, nous noterons $(z \text{id} - K)^{-1}$ l'opérateur inverse de $(z \text{id} - K)$ et la fonction $z \mapsto (z \text{id} - K)^{-1}$ est appelée *résolvante* de K . Remarquons que puisque

$$\begin{aligned} K(z \text{id} - K)^{-1} &= (z \text{id} - (z \text{id} - K))(z \text{id} - K)^{-1} \\ &= (z \text{id})(z \text{id} - K)^{-1} - (z \text{id} - K)(z \text{id} - K)^{-1} \\ &= (z \text{id} - K)^{-1}(z \text{id}) - (z \text{id} - K)^{-1}(z \text{id} - K) \\ &= (z \text{id} - K)^{-1}K , \end{aligned}$$

la résolvante commute avec son opérateur.

2.1.3.2 Propriétés spectrales d'un opérateur compact

Un opérateur linéaire K sur l'espace de Banach $L^\infty(\Sigma)$ est dit *compact* lorsque l'image de tout ensemble borné est relativement compact (i.e. a une fermeture compacte).

Pour un opérateur compact, l'existence et l'unicité des solutions de l'équation (2.1.2) est donnée par l'alternative de Fredholm. Celle-ci dit que soit l'équation homogène (pour $g \equiv 0$) admet une solution non nulle, soit l'équation (2.1.2) admet une solution pour toute fonction g . De plus, pour un opérateur compact, le théorème de Riesz-Schauder [58, Théorème 6.26] garantit que le noyau de transition K a un spectre discret. Toutes ses valeurs propres ont une multiplicité finie exceptée la valeur propre zéro. Les valeurs propres de l'opérateur sont les racines du déterminant de Fredholm

$$\det(z \text{id} - K) = \exp\left(-\sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_{\Sigma} k^m(x, x) dx\right) . \quad (2.1.3)$$

Le nombre de valeurs propres λ hors d'un disque donné $|\lambda| \leq r$ est fini pour $r > 0$. Notons $\sigma(K)$ le spectre de l'opérateur K . Puisque le spectre de K est borné, nous pouvons définir le rayon spectral de l'opérateur

$$r(K) = \sup\{|\lambda|, \lambda \in \sigma(K)\} . \quad (2.1.4)$$

Notons $(\lambda_j)_{j \in \mathbb{N}}$ les valeurs propres du noyau de transition K , ordonnées par module décroissant et notons respectivement π_j et ϕ_j les fonctions propres à gauche et à droite. Plus précisément, nous avons

$$(\pi_j K)(x) = \lambda_j \pi_j(x) \quad \text{et} \quad (K \phi_j)(x) = \lambda_j \phi_j(x)$$

pour tout $j \in \mathbb{N}$. Rappelons que pour tout couple de fonctions propres (π_k, ϕ_l) associées à des valeurs propres distinctes $\lambda_k \neq \lambda_l$,

$$\int_{\Sigma} \pi_k(x) \phi_l(x) dx = 0 .$$

Ainsi, nous pouvons normaliser les fonctions propres de telle façon que

$$\pi_i \phi_j := \int_{\Sigma} \pi_i(x) \phi_j(x) dx = \delta_{ij} . \quad (2.1.5)$$

Les noyaux $\phi_i(x)\pi_i(y)$ sont des projecteurs invariants sur les sous-espaces invariants de K . Ainsi, si l'ensemble de fonctions propres est complet, et si toutes les valeurs propres non nulles sont de multiplicité simple, alors nous avons la décomposition spectrale

$$k(x, y) = \sum_{i \geq 0} \lambda_i \phi_i(x) \pi_i(y) .$$

Remarque 2.1.9. L'intérêt de cette normalisation est que la densité du noyau itéré vérifie pour tout n

$$k^n(x, y) = \sum_{i \geq 0} \lambda_i^n \phi_i(x) \pi_i(y) . \quad (2.1.6)$$

La connaissance des valeurs propres et fonctions propres permet donc de quantifier les probabilités de transitions. \diamond

Comme pour la décomposition d'une matrice en éléments propres, nous pouvons écrire une décomposition si des valeurs propres ont une multiplicité plus grande que 1, la décomposition fait alors apparaître des blocs de Jordan non triviaux.

Nous parlerons de *trou spectral* lorsque les deux plus grandes valeurs propres satisfont $|\lambda_1| < \lambda_0 \leq 1$.

Remarque 2.1.10. Une condition suffisante pour que l'opérateur K soit compact est que Σ soit borné et la densité k soit régulière. Une autre condition suffisante pour qu'un opérateur soit compact est qu'il soit de rang fini. Dans ce cas, les fonctions propres forment une famille complète. \diamond

Dans cette thèse, pour étudier les propriétés spectrales d'un noyau de transition K , nous l'approchons par un noyau de rang fini. Un noyau est de rang fini s'il peut s'écrire comme une somme finie de produits de deux fonctions dont l'une ne dépend que de son premier argument, et l'autre de dépend que de son second.

2.1.3.3 Généralités sur la théorie des perturbations

Soit K^* un opérateur compact, noyau de transition markovien. Nous souhaitons étudier le comportement du spectre de K lorsque K peut être considéré comme une perturbation de l'opérateur K^* . A cette fin, nous introduisons l'opérateur de Riesz.

Un ensemble σ est une *partie isolée* de $\sigma(K^*)$ si σ et $\sigma(K^*) \setminus \sigma$ sont des sous-ensembles fermés du spectre $\sigma(K^*)$. Pour $\sigma \subset \sigma(K^*)$ nous introduisons l'*opérateur de Riesz* de K^* pour la partie isolée σ par

$$\Pi_\sigma(K^*) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} (z \text{id} - K^*)^{-1} dz , \quad (2.1.7)$$

avec $\mathcal{C} \subset \mathbb{C}$ un lacet du plan complexe (dans l'ensemble résolvant) tournant une fois positivement autour de σ . L'intégrale est bien définie puisque la résolvante $z \mapsto (z \text{id} - K^*)^{-1}$ est analytique (en z) sur l'ensemble résolvant $\rho(K^*)$. De plus, l'intégrale est indépendante du choix du lacet \mathcal{C} par la théorie des fonctions complexes. Notons que $\Pi_\sigma(K^*)$ est un projecteur puisque $\Pi_\sigma^2 = \Pi_\sigma$ [50, Lemma 2.1], ainsi l'opérateur de Riesz est également appelé la *projection de Riesz*. Puisque, l'opérateur K^* commute avec sa résolvante, il commute également avec son opérateur de Riesz. Nous rappelons également que

$$\Pi_{\sigma(K^*)}(K^*) = \text{id} . \quad (2.1.8)$$

Soit $\mathcal{C} \subset \mathbb{C}$ un lacet entourant $\sigma(K^*)$. Nous commençons par donner une condition garantissant que \mathcal{C} ne contienne aucune valeur propre de K , Ceci revient à vérifier que $(z \text{id} - K)$ est inversible pour tout $z \in \mathcal{C}$.

Proposition 2.1.11 ([49, Corollaire 8.2]). *Si $(z \text{id} - K^*)$ est inversible et si la norme de la différence entre les deux opérateurs satisfait $\|K - K^*\| = \|(z \text{id} - K^*) - (z \text{id} - K)\| < \|(z \text{id} - K^*)^{-1}\|^{-1}$, alors $(z \text{id} - K)$ est inversible et*

$$\|(z \text{id} - K^*)^{-1} - (z \text{id} - K)^{-1}\| \leq \frac{\|(z \text{id} - K^*)^{-1}\|^2 \|K - K^*\|}{1 - \|(z \text{id} - K^*)^{-1}\| \|K - K^*\|} . \quad (2.1.9)$$

En effet, sous l'hypothèse que $(z \operatorname{id} - K^*)$ est inversible, puisque

$$(z \operatorname{id} - K) = (\operatorname{id} - (K - K^*)(z \operatorname{id} - K^*)^{-1})(z \operatorname{id} - K^*),$$

il est naturel d'exiger que

$$\|K - K^*\| \leq \frac{1}{2}\gamma := \frac{1}{2} \min\{\|(z \operatorname{id} - K^*)^{-1}\|^{-1} | z \in \mathcal{C}\}. \quad (2.1.10)$$

afin que $(z \operatorname{id} - K)$ soit bien inversible pour tout $z \in \mathcal{C}$. Grâce à (2.1.9), nous obtenons alors

$$\|(z \operatorname{id} - K^*)^{-1} - (z \operatorname{id} - K)^{-1}\| \leq 2\|(z \operatorname{id} - K^*)^{-1}\|^2 \|K - K^*\|. \quad (2.1.11)$$

Ainsi, la projection de Riesz pour la partie $\sigma(K)$ dans \mathcal{C} donnée par

$$\Pi = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} (z \operatorname{id} - K)^{-1} dz,$$

est bien défini.

En utilisant l'équation (2.1.8) et (2.1.11), nous obtenons

$$\begin{aligned} \|\operatorname{id} - \Pi\| &= \left\| \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} (z \operatorname{id} - K^*)^{-1} - (z \operatorname{id} - K)^{-1} dz \right\| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} \|(z \operatorname{id} - K^*)^{-1} - (z \operatorname{id} - K)^{-1}\| dz \\ &\leq \frac{1}{\pi} \int_{\mathcal{C}} \|(z \operatorname{id} - K^*)^{-1}\|^2 dz \|K - K^*\|. \end{aligned}$$

Puisque Π est une projection, si $\|\operatorname{id} - \Pi\| < 1$, il suit que $\operatorname{id} - \Pi = 0$, et donc $\sigma(K)$ est dans \mathcal{C} . Une seconde hypothèse naturelle afin de contrôler le spectre de l'opérateur K est donc

$$C := \frac{1}{\pi} \int_{\mathcal{C}} \|(z \operatorname{id} - K^*)^{-1}\|^2 dz < \frac{1}{\|K^* - K\|}. \quad (2.1.12)$$

Ces remarques nous amènent à la proposition suivante.

Proposition 2.1.12 ([50, Proposition 4.1]). *Soit Ω un voisinage ouvert de $\sigma(K^*)$. Alors il existe un $\epsilon > 0$ tel que $\sigma(K) \subset \Omega$ pour tout opérateur K avec $\|K^* - K\| < \epsilon$.*

Les remarques précédentes nous permettent de quantifier le comportement des valeurs propres d'un opérateur lorsque celui-ci subit de petites perturbations. En effet, si

$$\|K - K^*\| < \min \left\{ \frac{1}{2}\gamma, (C + 1)^{-1} \right\},$$

avec γ and C les quantités données par (2.1.10) et (2.1.12) et \mathcal{C} un lacet qui sépare une valeur propre simple de K^* du reste de son spectre alors le contour \mathcal{C} entoure une seule valeur propre simple de l'opérateur K . Ce résultat reste vrai pour un ensemble de valeurs propres.

Proposition 2.1.13 ([50, Proposition 4.2]). *Soit σ un ensemble fini de valeurs propres de type fini de K^* , et soit \mathcal{C} un lacet entourant σ qui sépare σ de $\sigma(K^*) \setminus \sigma$. Alors il existe un $\epsilon > 0$ tel que pour tout opérateur K satisfaisant $\|K^* - K\| < \epsilon$, nous avons $\sigma(K) \cap \mathcal{C} = \emptyset$, et le spectre de K dans \mathcal{C} est un ensemble fini de valeurs propres de type fini qui satisfait l'égalité des multiplicités*

$$\sum_{\lambda \text{ dans } \mathcal{C}} m(\lambda; K) = \sum_{\lambda \text{ dans } \mathcal{C}} m(\lambda; K^*).$$

Avant d'estimer les quantités γ et C qui permettent de contrôler la norme des différences entre les opérateurs, nous allons étudier les propriétés spectrales de l'opérateur K^* .

2.1.4 Processus réversible et non réversible

Définition 2.1.14 (Chaîne de Markov réversible)

Une chaîne de Markov est dite *réversible* par rapport à une mesure de probabilité π si pour tous boréliens $A, B \subset \mathcal{S}$, la condition dite d'*équilibre détaillé* est satisfaite

$$\int_A \pi(dx)K(x, B) = \int_B \pi(dx)K(x, A) . \quad (2.1.13)$$

Une chaîne qui ne satisfait pas la condition d'équilibre détaillé par rapport à sa mesure stationnaire est dite *non-réversible*.

En prenant pour A l'espace tout entier dans (2.1.13), si une chaîne est réversible par rapport à une mesure de probabilité π alors c'est une distribution stationnaire pour le noyau de transition K . L'inverse est faux.

Soit $L^2(\pi) = \{f : \Sigma \rightarrow \mathbb{C}, \int_{\Sigma} |f|^2 d\pi < \infty\}$ l'espace de Hilbert avec le produit scalaire

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Sigma} f(x)\overline{g(x)}\pi(dx) .$$

Par linéarité et convergence dominée, une chaîne de Markov est dite réversible par rapport à une mesure de probabilité π si pour toutes fonctions $f, g \in L^2(\pi)$, nous avons

$$\int_{\Sigma} \int_{\Sigma} f(x)g(y)\pi(dx)K(x, dy) = \int_{\Sigma} \int_{\Sigma} f(y)g(x)\pi(dx)K(x, dy) . \quad (2.1.14)$$

Nous obtenons alors une définition équivalente de la réversibilité en étudiant les propriétés du noyau de transition comme opérateur linéaire positif sur des espaces de fonctions. Grâce à l'équivalence entre (2.1.14) et (2.1.13), nous obtenons la propriété suivante.

Proposition 2.1.15. *La mesure de probabilité π satisfait une condition d'équilibre détaillé si et seulement si le noyau de transition est un opérateur auto-adjoint de $L^2(\pi)$.*

Les propriétés spectrales d'un processus réversible sont plus faciles à obtenir que pour un processus non-réversible. Les valeurs propres du noyau de transition d'un processus réversible sont réelles (puisque l'opérateur est auto-adjoint). De plus, les fonctions propres à gauche et à droite d'un noyau d'un processus réversible sont liées par la distribution stationnaire.

Proposition 2.1.16. *Pour un noyau de transition K réversible, connaissant la distribution stationnaire et les fonctions propres à droite, la $j^{\text{ième}}$ fonction propre à gauche a pour expression*

$$\pi_j(dx) = \pi_0(dx)\phi_j(x) .$$

Démonstration. Nous pouvons en effet vérifier que la mesure donnée par $\mu(dx) = \pi_0(dx)\phi_j(x)$ satisfait le problème aux valeurs propres pour la valeur propre d'indice j . Pour tout borélien $B \subset \Sigma$, en appliquant la condition d'équilibre détaillé avec la fonction $f = \phi_j$ et $g(x) = \mathbb{1}_{\{x \in B\}}$

$$(\mu K)(B) = \int_{\Sigma} \int_{\Sigma} \pi_0(dx)\phi_j(x)\mathbb{1}_{\{y \in B\}}K(x, dy) = \int_{\Sigma} \int_{\Sigma} \pi_0(dx)K(x, dy)\mathbb{1}_{\{x \in B\}} = \phi_j(y) = \lambda^j \mu(B) .$$

□

Ainsi, pour un noyau de transition réversible la connaissance des fonctions propres à droite permet de déterminer les fonctions propres à gauche. Lorsque le noyau de transition n'est pas réversible, il faut utiliser une autre méthode pour déterminer les fonctions propres à gauche. Nous utiliserons les propriétés d'un opérateur non stochastique défini à partir du problème de Dirichlet : le processus trace (voir Section 2.3).

2.2 Théorie du potentiel et problèmes aux bords

Dans cette section, nous nous inspirerons des travaux initiés par Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gaynard, et Markus Klein dans [24, 25] qui utilisent l'approche probabiliste de la théorie du potentiel pour étudier les propriétés spectrales des systèmes métastables.

Considérons une chaîne de Markov à temps discret $(X_n)_{n \geq 0}$, positive récurrente au sens de Harris sur l'espace d'états continu (Σ, \mathcal{S}) . Notons K le noyau de transition markovien associé.

Soit $A \subset \Sigma$, un borélien, si A a une mesure de Lebesgue positive, alors les temps d'arrêt τ_A et τ_A^+ sont presque sûrement finis puisque que la chaîne est positive récurrente au sens de Harris. Dans la suite, pour alléger l'écriture, nous écrivons

$$\mathbb{E}^A\{\cdot\} = \sup_{x \in A} \mathbb{E}^x\{\cdot\}, \quad \mathbb{P}^A\{\cdot\} = \sup_{x \in A} \mathbb{P}^x\{\cdot\} \quad (2.2.1)$$

Nous introduisons également le $n^{\text{ième}}$ temps de retour définit de manière récursive par

$$\tau_A^{+,n} = \inf\{n > \tau_A^{+,n-1} : X_n \in A\},$$

avec $\tau_A^{+,1} = \tau_A^+$.

Pour un noyau de transition irréductible K , il est pertinent de s'intéresser au taux de croissance des itérés K^n du noyau K . Pour tout $u \in \mathbb{C}$, la *série génératrice* du noyau de transition K est définie pour tout $x \in \Sigma$, pour tout $A \in \mathcal{S}$ par

$$G^u(x, A) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-un} K^n(x, A).$$

Puisque $K^n(x, A) \leq 1$, la fonction génératrice $G^u(x, A)$ existe et elle est finie au moins pour $0 \leq |e^{-u}| < 1$. Pour un noyau de transition K irréductible, d'après [68, Théorème 3.2], il existe un rayon de convergence $0 \leq R < \infty$ tel que la série génératrice diverge pour toutes fonctions positives si $e^u > R$, et converge pour certaines fonctions si $e^u < R$.

Nous avons une condition d'existence de la transformée de Laplace des temps d'arrêt.

Lemme 2.2.1. *Soit $(X_n)_n$ une chaîne de Markov positive récurrente sur (Σ, \mathcal{S}) . La transformée de Laplace de la variable complexe u du temps de première atteinte $\mathbb{E}^x\{e^{u\tau_A}\}$ ainsi que celle du temps de premier retour $\mathbb{E}^x\{e^{u\tau_A^+}\}$ sont analytiques en u pour tout $u \in \mathbb{C}$ qui satisfait*

$$\sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x\{X_1 \in A^c\} < |e^{-u}|. \quad (2.2.2)$$

Si u satisfait cette condition, alors pour tout $x \in A^c$, la transformée de Laplace du temps de premier retour est encadrée par

$$\left| \mathbb{E}^x\{e^{u\tau_A^+}\} \right| \leq \frac{1}{|e^{-u}| - \mathbb{P}^{A^c}\{X_1 \in A^c\}} \quad (2.2.3)$$

Démonstration. Nous montrons le résultat pour le temps de premier retour, le même argument fonctionne pour le temps de première atteinte. Puisque la transformée de Laplace est majorée $\mathbb{E}^x\{e^{u\tau_A^+}\} \leq 1$ pour tout réel $u \leq 0$, il existe une constante $u_0 \geq 0$ tel que $\mathbb{E}^x\{e^{u\tau_A^+}\} < \infty$ pour tout $u < u_0$. Pour tout $u \in \mathbb{C}$, en décomposant l'espérance suivant la valeur de τ_A^+ puis en utilisant la propriété de Markov, nous majorons

$$\left| \mathbb{E}^x\{e^{u\tau_A^+}\} \right| \leq |e^u| \mathbb{P}^x\{X_1 \in A\} + \sum_{n \geq 1} \left| e^{u(n+1)} \right| \mathbb{P}^x\{X_1 \in A^c\} (\mathbb{P}^{A^c}\{X_1 \in A^c\})^{n-1} \mathbb{P}^{A^c}\{X_1 \in A\}.$$

Ainsi pour tout u tel que $\sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x\{X_1 \in A^c\} |e^u| < 1$, la transformée de Laplace est finie, elle est donc analytique sur son domaine de sommabilité. Pour $x \in A^c$, et pour tout complexe u tel que $\sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x\{X_1 \in A^c\} |e^u| < 1$, nous obtenons alors (2.2.3). \square

Les transformées de la Laplace des temps d'atteinte et de retour interviennent dans la résolution de problèmes aux bords.

2.2.1 Équivalence avec un problème aux valeurs propres sur un domaine restreint

Pour résoudre le problème aux valeurs propres, nous introduisons un problème aux bords de Dirichlet. Soit un borélien $A \in \mathcal{S}$, soit $u \in \mathbb{C}$ et soit $\bar{\phi} : A \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction mesurable bornée, nous souhaitons trouver une fonction (bornée) ϕ^u qui satisfait le problème

$$\begin{aligned} (K\phi^u)(x) &= e^{-u} \phi^u(x), & x \in A^c, \\ \phi^u(x) &= \bar{\phi}(x), & x \in A. \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

Les solutions d'un tel problème de Dirichlet admettent une interprétation probabiliste en fonction des transformées de Laplace des temps d'arrêt.

Proposition 2.2.2 (Relation de type Feynman–Kac). *Pour tout $u \in \mathbb{C}$ qui satisfait la condition d'existence de la transformée de Laplace donnée par (2.2.2), l'unique solution du problème aux bords de Dirichlet (2.2.4) est donnée par*

$$\phi^u(x) = \mathbb{E}^x \left\{ e^{u\tau_A} \bar{\phi}(X_{\tau_A}) \right\}.$$

Démonstration. Nous commençons par vérifier que la solution proposée résout le problème aux bords. La fonction $\phi^u(x)$ satisfait le problème aux bords pour $x \in A$, puisque pour une telle condition initiale $\tau_A = 0$, et donc $\mathbb{E}^x \left\{ e^{u\tau_A} \bar{\phi}(X_{\tau_A}) \right\} = \bar{\phi}(x)$. Pour $x \in A^c$, en décomposant l'espérance donnée par $(K\phi^u)(x)$ en fonction de la position de X_1 , nous obtenons

$$\begin{aligned} (K\phi^u)(x) &= \mathbb{E}^x \left\{ \mathbb{E}^{X_1} \left\{ e^{u\tau_A} \bar{\phi}(X_{\tau_A}) \right\} \mathbb{1}_{\{X_1 \in A\}} \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ \mathbb{E}^{X_1} \left\{ e^{u\tau_A} \bar{\phi}(X_{\tau_A}) \right\} \mathbb{1}_{\{X_1 \in A^c\}} \right\} \\ &= \mathbb{E}^x \left\{ \bar{\phi}(X_1) \mathbb{1}_{\{X_1 \in A\}} \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_A - 1)} \bar{\phi}(X_{\tau_A}) \mathbb{1}_{\{X_1 \in A^c\}} \right\} \\ &= e^{-u} \mathbb{E}^x \left\{ e^{u\tau_A} \bar{\phi}(X_{\tau_A}) \right\}. \end{aligned}$$

Ceci montre que $\mathbb{E}^x \left\{ e^{u\tau_A} \bar{\phi}(X_{\tau_A}) \right\}$ est une solution admissible pour tout $x \in \Sigma$. L'unicité est une conséquence de l'alternative de Fredholm. Raisonnons par l'absurde en supposant que deux fonctions $f \neq g$ satisfont le problème aux bords de Dirichlet. Nous obtenons alors

$$\begin{aligned} ((\text{id} - e^u K)(f - g))(x) &= 0, & x \in A^c, \\ (f - g)(x) &= 0, & x \in A. \end{aligned}$$

Pour tout $x \in A^c$, en utilisant le noyau $\mathbb{1}_B$ défini par $\mathbb{1}_B(x, A) := \mathbb{1}_{A \cap B}(x)$, la première ligne peut s'écrire de façon plus compacte sous la forme $(\text{id} - e^u K \mathbb{1}_{A^c})(f - g)(x) = 0$. La contradiction vient du fait que sous la condition donnée par (2.2.2), $\|e^u K \mathbb{1}_{A^c}\| < 1$. Ainsi, l'opérateur $(\text{id} - e^u K \mathbb{1}_{A^c})$ est inversible (en appliquant par exemple [50, Théorème 8.1]), et donc $f \equiv g$. \square

Grâce à la solution (2.2.4) obtenue pour le problème aux bords de Dirichlet nous allons pouvoir définir un noyau de transition non stochastique défini uniquement sur un sous-ensemble $A \subset \Sigma$ satisfaisant la condition d'existence des transformées de Laplace donnée par (2.2.2).

Corollaire 2.2.3. *Soit K^u le noyau de transition défini sur $A \times \mathcal{B}(A)$ pour tout $x \in A$ et pour tout $B \in \mathcal{B}(A)$ par*

$$K^u(x, B) := \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_A^+ - 1)} \mathbb{1}_{\{X_{\tau_A^+} \in B\}} \right\}.$$

Pour u satisfaisant (2.2.2), le problème aux valeurs propres défini sur Σ par

$$(K\phi^u)(x) = e^{-u} \phi^u(x),$$

est équivalent au problème aux valeurs propres sur A défini par

$$(K^u \bar{\phi}^u)(x) = e^{-u} \bar{\phi}^u(x) \quad (2.2.5)$$

avec $\bar{\phi}^u(x) = \phi^u(x)$ pour tout $x \in A$.

Démonstration. Soit (e^{-u}, ϕ^u) un couple de valeur propre et de fonction propre à droite pour le noyau de transition K . En séparant de nouveau l'équation intégrale suivant la position de X_1 , et en insérant la solution trouvée précédemment pour le problème de Dirichlet dans le second terme du membre de droite, nous obtenons

$$\begin{aligned} e^{-u} \phi^u(x) &= (K\phi^u)(x) \\ &= \mathbb{E}^x \{ \phi^u(X_1) \mathbb{1}_{\{X_1 \in A\}} \} + \mathbb{E}^x \{ \phi^u(X_1) \mathbb{1}_{\{X_1 \in A^c\}} \} \\ &= \mathbb{E}^x \{ \phi^u(X_{\tau_A^+}) \mathbb{1}_{\{\tau_A^+ = 1\}} \} + \mathbb{E}^x \{ \mathbb{E}^{X_1} \{ e^{u\tau_A} \phi^u(X_{\tau_A}) \} \mathbb{1}_{\{\tau_A^+ > 1\}} \} \\ &= \mathbb{E}^x \{ e^{u(\tau_A^+ - 1)} \phi^u(X_{\tau_A^+}) \mathbb{1}_{\{\tau_A^+ = 1\}} \} + \mathbb{E}^x \{ e^{u(\tau_A^+ - 1)} \phi^u(X_{\tau_A^+}) \mathbb{1}_{\{\tau_A^+ > 1\}} \} \\ &= \mathbb{E}^x \{ e^{u(\tau_A^+ - 1)} \phi^u(X_{\tau_A^+}) \} = (K^u \phi^u)(x). \end{aligned}$$

Puisque pour $x \in A$, nous avons $\phi^u(x) = \bar{\phi}^u(x)$, l'équation (2.2.5) est satisfaite.

Soit maintenant, $(e^{-u}, \bar{\phi}^u)$ un couple donné de valeur propre et de fonction propre à droite du noyau K^u , nous introduisons la fonction

$$\phi^u(x) = \mathbb{E}^x \left\{ e^{u\tau_A} \bar{\phi}^u(X_{\tau_A}) \right\}.$$

Remarquons que $\phi^u(x) = \bar{\phi}^u(x)$ pour $x \in A$. Par la proposition précédente, ϕ^u satisfait le problème aux valeurs propres pour la valeur propre e^{-u} . \square

Dans la suite, nous oublierons la notation $\bar{\phi}$ puisque $\bar{\phi}^u = \phi^u|_{x \in A}$. Nous appellerons problème aux valeurs propres restreint le problème aux valeurs propres défini par (2.2.5).

D'un point de vue probabiliste, travailler avec un tel opérateur n'est pas aisé. Il est en effet non-Markovien, et puisque l'opérateur K^u définit sur A satisfait $K^u(x, A) = e^{-u} \mathbb{E}^x \left\{ e^{u\tau_A^+} \right\}$, nous avons

$$\|K^u\| \leq \frac{1}{1 - |e^u| \mathbb{P}^{A^c} \{X_1 \in A^c\}}.$$

2.2.2 Calcul des fonctions propres à gauche

La relation de type Feynman-Kac permet d'obtenir une équivalence entre le problème aux valeurs propres sur Σ et le problème aux valeurs propres restreint sur un sous-ensemble $A \subset \Sigma$. L'équivalence est obtenue pour tout couple de valeur propre et de fonction propre à gauche. Nous avons en fait un résultat analogue pour les fonctions propres à droite.

Lemme 2.2.4. *Soit u_k satisfaisant la condition d'existence de la transformée de Laplace donnée par (2.2.2). Pour toute fonction propre à gauche π_k du noyau de transition K associée à la valeur propre e^{-u_k} , et pour tout borélien $B \subset A \subset \Sigma$, nous avons*

$$\int_A \pi_k(dx) K^{u_k}(x, B) := \int_A \pi_k(dx) \mathbb{E}^x \left\{ e^{u_k(\tau_A^+ - 1)} \mathbb{1}_{\{\tau_B^+ < \tau_{A \setminus B}^+\}} \right\} = e^{-u_k} \pi_k(B). \quad (2.2.6)$$

Démonstration. Soit la fonction mesurable bornée $h^u : \Sigma \rightarrow \mathbb{C}$ définie par

$$h^u(x) = \mathbb{E}^x \left\{ e^{u\tau_A} \mathbb{1}_{\{\tau_B < \tau_{A \setminus B}\}} \right\}.$$

Remarquons que pour $x \in A$, $h^u(x) = \mathbb{1}_{\{x \in B\}}$, et qu'un argument similaire à celui de la Proposition 2.2.2 nous donne

$$(Kh^u)(x) = \mathbb{E}^x \{ h^u(X_1) \} = K^u(x, B).$$

Il vient alors que

$$\begin{aligned} \int_A \pi_k(x) K^{u_k}(x, B) dx &= \int_{\Sigma} \pi_k(x) (Kh^{u_k})(x) dx - \int_{\Sigma \setminus A} \pi_k(x) K^{u_k}(x, B) dx \\ &= e^{-u_k} \int_{\Sigma} \pi_k(x) h^{u_k}(x) dx - e^{-u_k} \int_{\Sigma \setminus A} \pi_k(x) h^{u_k}(x) dx \\ &= e^{-u_k} \int_A \pi_k(x) \mathbb{1}_{\{x \in B\}} dx = e^{-u_k} \pi_k(B). \end{aligned}$$

Dans la seconde ligne, nous avons utilisé l'équation aux valeurs propres $\pi_k K = e^{-u_k} \pi_k$, le fait que dans $\Sigma \setminus A$, les temps d'atteinte et de retour sont égaux ($\tau_A = \tau_A^+$ et $\tau_B = \tau_B^+$), ainsi que l'égalité $K^u(x, B) = e^{-u} h^u(x)$. \square

Connaissant l'expression de la fonction propre à droite dans A , la Proposition 2.2.2 permet d'obtenir une expression de la solution du problème pour tout $x \in \Sigma$. Le résultat qui suit est un résultat analogue pour les fonctions propres à gauche.

Proposition 2.2.5 (Fonctions propres à gauche à partir du processus restreint). *Soit μ_k une fonction propre à gauche associée à la valeur propre e^{-u_k} pour le processus K^{u_k} sur A i.e. satisfaisant*

$$\int_A \mu_k(dx) K^{u_k}(x, B) = e^{-u_k} \mu_k(B), \quad B \subset A. \quad (2.2.7)$$

Alors la mesure définie par

$$\pi_k(B) = \int_A \mu_k(dx) \sum_{n=1}^{\infty} e^{u(n-1)} \mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ \geq n, X_n \in B \}, \quad B \in \mathcal{S} \quad (2.2.8)$$

est une fonction propre à gauche associée à la valeur propre e^{-u_k} pour la chaîne de Markov $(X_n)_n$ décrite par le noyau de transition K .

Démonstration. Notons pour tout $x \in \Sigma$ et pour tout $B \in \mathcal{S}$,

$$U_A^u(x, B) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{u(n-1)} \mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ \geq n, X_n \in B \}.$$

Remarquons alors que pour tout $B \subset A$, $B \in \mathcal{S}$, $U_A^u(x, B) = K^u(x, B)$. Ainsi pour tout $B \in \mathcal{S}$, en séparant l'équation intégrale en deux, et en remplaçant par l'expression donnée par (2.2.8)

$$\int_{\Sigma} \pi_k(dx) K(x, B) = \int_A \left[\int_A \mu_k(dx) U_A^{u_k}(x, dy) \right] K(y, B) + \int_{A^c} \left[\int_A \mu_k(dx) U_A^{u_k}(x, dy) \right] K(y, B).$$

Dans le premier terme du membre de droite, nous utilisons l'équation aux valeurs propres (2.2.7) pour le noyau restreint à A . Dans le second terme du membre de droite, nous intervertissons les intégrales pour obtenir

$$\int_{\Sigma} \pi_k(dx) K(x, B) = e^{-u_k} \int_A \mu_k(dy) \left[K(y, B) + \sum_{n=2}^{\infty} e^{u(n-1)} \mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ \geq n, X_n \in B \} \right].$$

Ceci montre que la fonction propre π_k définie par (2.2.8) est bien une valeur propre associée à la propre e^{-u_k} . \square

2.2.3 Problème aux bords de Poisson

Un second problème intéressant que nous utiliserons est le problème aux bords de Poisson.

Lemme 2.2.6. *Soit un ensemble borélien $A \subset \Sigma$ tel que*

$$\sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x \{ X_1 \in A^c \} < 1.$$

L'unique solution du problème aux bords de Poisson

$$\begin{aligned} ((\text{id} - K)r)(x) &= g(x), & x \in A^c, \\ r(x) &= 0, & x \in A, \end{aligned}$$

est donnée par

$$r(x) = \mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=0}^{\tau_A - 1} g(X_n) \right\},$$

avec pour convention que la somme sur un ensemble vide vaut zéro.

Démonstration. Comme pour la preuve du problème aux bords de Dirichlet (cf. Proposition 2.2.2), nous commençons par vérifier que la solution proposée satisfait le problème aux bords. Il n'y a rien à montrer pour $x \in A$, puisque dans ce cas avec la convention choisie pour la somme sur un ensemble nul, $\mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=0}^{\tau_A-1} g(X_n) \right\} = 0$. Pour $x \in A^c$,

$$((\text{id} - K)r)(x) = \mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=0}^{\tau_A-1} g(X_n) - \mathbb{E}^{X_1} \left\{ \sum_{n=0}^{\tau_A-1} g(X_n) \right\} \right\}.$$

Nous pouvons de nouveau séparer les espérances en fonction de la position de X_1 et utiliser la propriété de Markov forte pour obtenir

$$\begin{aligned} ((\text{id} - K)r)(x) &= \mathbb{E}^x \left\{ \mathbb{1}_{\{X_1 \in A\}} g(x) \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ \mathbb{1}_{\{X_1 \in A^c\}} \left(\sum_{n=0}^{\tau_A-1} g(X_n) - \mathbb{E}^{X_1} \left\{ \sum_{n=0}^{\tau_A-1} g(X_n) \right\} \right) \right\} \\ &= \mathbb{E}^x \left\{ \mathbb{1}_{\{X_1 \in A\}} g(x) \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ \mathbb{1}_{\{X_1 \in A^c\}} \left(\sum_{n=0}^{\tau_A-1} g(X_n) - \sum_{n=1}^{\tau_A-1} g(X_n) \right) \right\} \\ &= g(x). \end{aligned}$$

Ceci montre que la solution proposée est une solution admissible pour tout $x \in \Sigma$.

L'unicité de la solution est, comme pour l'unicité du problème aux bords de Dirichlet, une conséquence de l'alternative de Fredholm. En effet, puisque

$$\|K\mathbb{1}_{A^c}\| \leq \sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x \{X_1 \in A^c\} < 1,$$

nous pouvons appliquer [50, Théorème 8.1]. En particulier, l'opérateur $(\text{id} - K\mathbb{1}_{A^c})$ est inversible. \square

Remarque 2.2.7. Si le noyau K est irréductible alors l'hypothèse du Lemme 2.2.6 est satisfaite pour tout borélien $A \subset \Sigma$. \diamond

2.3 Processus trace

En prenant $u = 0$ dans l'opérateur précédemment défini, nous retrouvons un noyau markovien stochastique avec une interprétation probabiliste intéressante : le processus trace. Nous supposons que la chaîne de Markov est récurrente positive au sens de Harris, en particulier pour tout A , nous avons $\sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x \{X_1 \in A^c\} < 1$.

2.3.1 Définition

Le processus trace est défini à partir des temps de retour de la chaîne dans A un sous-ensemble de l'espace d'états, il est obtenu en arrêtant l'horloge de la chaîne lorsque celle-ci quitte l'espace A , et en l'incrémentant lorsque la chaîne retourne dans A .

Définition 2.3.1

Pour tout borélien non vide $A \subset \Sigma$, la trace de la chaîne de Markov (X_n) sur A est le processus obtenu par changement de temps dont le noyau de transition est donné pour tout borélien $B \subset \Sigma$ par

$${}_A K(x, B) = \mathbb{P}^x \{X_{\tau_A^+} \in B\},$$

où nous rappelons que $\tau_A^+ = \inf\{n \geq 1 : X_n \in A\}$ désigne le temps de retour vers A .

Par la propriété de Markov forte, le noyau ${}_A K$ est un noyau markovien. Il est stochastique, comme on peut le vérifier en intégrant sur A .

Pour tout $x \in A$, le noyau du processus trace se réécrit sous la forme

$${}_A K(x, B) = \sum_{n \geq 1} \mathbb{P}^x \{\tau_A^+ = n, X_n \in B\},$$

ou

$${}_A K(x, B) = K(x, B) + \sum_{n \geq 1} \int_{A^c} K(x, dz) [(K \mathbf{1}_{A^c})^{n-1} K](z, B),$$

ou en introduisant $R_{A^c}(1; x, dy) = [\text{id} - K_{A^c}]^{-1}(z, dy)$ la résolvante de l'opérateur $K \mathbf{1}_{A^c}$ au point 1,

$${}_A K(x, B) = K(x, B) + \int_{A^c} \int_{A^c} K(x, dz_1) R_{A^c}(1; z_1, dz_2) K(z_2, y).$$

2.3.2 Propriétés du processus trace

Si le processus (X_n) décrit par le noyau K admet une mesure invariante π_0 , alors le Lemme 2.2.4, avec $u = 0$ montre qu'elle satisfait

$$\pi_0(B) = \int_A \pi_0(dx) \mathbb{P}^x \{X_{\tau_A^+} \in B\}, \quad \forall B \in \mathcal{S}, B \subset A.$$

Cette égalité permet de faire le lien entre la mesure du processus initial et la mesure stationnaire du processus trace.

Corollaire 2.3.2. *Soit π_0 une distribution stationnaire pour le processus (X_n) défini par le noyau K sur (Σ, \mathcal{S}) , alors le processus trace défini sur A admet une distribution stationnaire ${}_A \pi_0$. Elle est obtenue en normalisant la distribution du processus initial*

$${}_A \pi_0(B) = \frac{\pi_0(B)}{\pi_0(A)} \quad \forall B \in \mathcal{S}, B \subset A.$$

Le raisonnement inverse est également possible. Nous pouvons reconstruire la mesure invariante pour le processus défini sur tout l'espace d'états en fonction de la mesure invariante pour le processus trace défini sur l'ensemble A .

Corollaire 2.3.3 (Construction de la mesure invariante pour le processus original). *Soit ${}_A \pi_0$ une mesure de probabilité invariante pour le processus trace défini sur A i.e. satisfaisant*

$${}_A \pi_0(B) = \int_A {}_A \pi_0(dx) {}_A K(x, B), \quad B \in \mathcal{S}, B \subset A.$$

Alors la mesure définie par

$$\pi_0(B) = \int_A {}_A \pi_0(dx) \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}^x \{\tau_A^+ \geq n, X_n \in B\} \quad B \in \mathcal{S}$$

est une mesure de probabilité invariante pour la chaîne de Markov (X_n) décrite par le noyau de transition K sur (Σ, \mathcal{S}) .

Notons que si le processus est réversible alors le processus trace est également réversible. Pour s'en convaincre, il suffit de vérifier que pour tous boréliens $B, C \subset A$

$$\int_B {}_A \pi_0(dx) {}_A K(x, C) = \int_C {}_A \pi_0(dx) {}_A K(x, B).$$

Il est cependant possible de construire un processus trace réversible à partir d'un processus non-réversible. Un exemple non trivial pour une chaîne de Markov à espace d'états discret est le suivant.

Exemple 2.3.4 (CHAÎNE NON-RÉVERSIBLE DONT LA TRACE EST RÉVERSIBLE). *Fixons $0 < a, b < 1/10$, et soit P la matrice de transition définie par*

$$P = \begin{pmatrix} 1 - 4a & 2a & 2a \\ a & 1 - 5a & 4a \\ b & b & 1 - 2b \end{pmatrix}.$$

La matrice a pour distribution stationnaire $\pi_0 = 1/(3a+2b)(b, b, 3a)$, la chaîne n'est donc pas réversible. Notons $\{1, 2, 3\}$, les états de cette matrice de transition. Le processus trace défini sur les états $\{1, 2\}$ a pour matrice de transition

$$\{1,2\}P \begin{pmatrix} 1-3a & 3a \\ 3a & 1-3a \end{pmatrix}.$$

La matrice étant symétrique, le processus trace sur $\{1, 2\}$ est réversible.

Que le processus trace soit ou non réversible, il vérifie une sorte de condition d'équilibre détaillé. En effet, Volker Betz et Stéphane Le Roux ont montré dans [18], que les temps de retours d'une chaîne de Markov à espace discret satisfont la relation suivante $\pi_0(x)\mathbb{P}^x\{\tau_y^+ < \tau_x^+\} = \pi_0(y)\mathbb{P}^y\{\tau_x^+ < \tau_y^+\}$, même si la chaîne n'est pas réversible (le résultat est vrai pour toute chaîne irréductible, positive récurrence sur un espace dénombrable). La preuve repose sur l'égalité entre la mesure stationnaire et le temps de retour $\pi_0(x) = (\mathbb{E}^x\{\tau_x^+\})^{-1}$ pour les chaînes (irréductible et positive récurrente) à espace discret. Nous obtenons un résultat similaire en utilisant les propriétés du processus trace.

Proposition 2.3.5. *Soit K un noyau de transition. Pour tous boréliens disjoints, non vides, $A_1, A_2 \subset \Sigma$, tels que*

$$\sup_{x \in (A_1 \cup A_2)^c} \mathbb{P}\{X_1 \in (A_1 \cup A_2)^c\} < 1;$$

la distribution stationnaire satisfait

$$\int_{A_1} \pi_0(dx) \mathbb{P}^x\{\tau_{A_2}^+ < \tau_{A_1}^+\} = \int_{A_2} \pi_0(dx) \mathbb{P}^x\{\tau_{A_1}^+ < \tau_{A_2}^+\}. \quad (2.3.1)$$

La relation reste vraie en remplaçant $\tau_{A_i}^+$ par le n -ième temps de retour $\tau_{A_i}^{+,n}$ vers A_i .

L'équation (2.3.1) peut encore se réécrire

$$\int_{A_1} \pi_0(dx) {}_{A_1 \cup A_2}K(x, A_2) = \int_{A_2} \pi_0(dx) {}_{A_1 \cup A_2}K(x, A_1).$$

En divisant de part et d'autre de (2.3.1) par la $\pi_0(A_1 \cup A_2)$, il suit que la mesure de probabilité invariante pour le processus trace satisfait la même propriété de type équilibre détaillé.

PREUVE DE LA PROPOSITION 2.3.5. En appliquant (2.2.6) pour la distribution stationnaire π_0 associée à la valeur propre 1 et pour tous ensembles disjoints A_1, A_2 satisfaisant $A_1 \cup A_2 = A$, nous avons

$$\pi_0(A_1) = \int_{A_1 \cup A_2} \pi_0(dx) \mathbb{P}^x\{\tau_{A_1}^+ < \tau_{A_2}^+\}.$$

Nous pouvons alors décomposer l'intégrale en deux parties, A_1 et A_2 , et utiliser dans le membre de gauche l'égalité $\mathbb{P}^x\{\tau_{A_1}^+ < \tau_{A_2}^+\} = 1 - \mathbb{P}^x\{\tau_{A_2}^+ < \tau_{A_1}^+\}$ qui est vraie pour tout x . Nous obtenons

$$\pi_0(A_1) = \int_{A_1} \pi_0(dx) [1 - \mathbb{P}^x\{\tau_{A_2}^+ < \tau_{A_1}^+\}] + \int_{A_2} \pi_0(dx) \mathbb{P}^x\{\tau_{A_1}^+ < \tau_{A_2}^+\},$$

Ceci donne le résultat en soustrayant $\pi_0(A_1)$ de part et d'autre et en arrangeant les termes. \square

Le processus trace décrit par le noyau ${}_A K$ hérite également des propriétés d'irréductibilité, de récurrence et de récurrence au sens de Harris du processus défini par le noyau de transition K . Mais comme pour la réversibilité, la réciproque n'est pas vraie : si un processus trace est irréductible (récurrent ou récurrent au sens Harris) le processus initial ne l'est pas forcément.

Remarque 2.3.6. À partir d'un processus trace sur $A \subset \Sigma$, nous pouvons itérer la transformation et définir un nouveau processus trace sur $B \subset \Sigma$, ce processus est le même que celui qui aurait été construit directement en prenant la trace sur ce même ensemble $B \subset \Sigma$. Nous avons ainsi pour tout borélien $C \subset B$,

$$\begin{aligned} {}_B K(x, C) &= \mathbb{P}^x\{X_{\tau_B^+} \in C\} \\ &= K(x, C) + \sum_{n \geq 2} \int_{B^c} K(x, dz) [(K \text{id}_{B^c})^{n-1} K](z, C) \\ &= {}_A K(x, C) + \sum_{n \geq 2} \int_{A \setminus B} {}_A K(x, dz) [({}_A K \text{id}_{A \setminus B})^{n-1} K](z, C). \end{aligned}$$

\diamond

2.3.3 Approximation par le processus trace

Nous montrons dans cette section que la dynamique du noyau de transition du processus trace peut être une bonne approximation de la dynamique du noyau de transition du processus initial dans le sens où la norme de la différence entre l'opérateur K^u et l'opérateur défini par le processus trace est bornée. L'approximation sera judicieuse si la borne obtenue est petite.

Pour un système métastable, il sera pertinent de prendre pour ensemble A un ensemble "attractif" i.e. pour lequel le temps de retour dans A est proche de 1, et le temps d'atteinte de A partant de A^c est le plus petit possible.

Remarquons que la différence entre K^u et K^0 est donnée par

$$(K^u - K^0)(x, B) = \mathbb{E}^x \left\{ (e^{u(\tau_A^+ - 1)} - 1) \mathbb{1}_{\{X_{\tau_A^+} \in B\}} \right\}.$$

En résolvant un problème aux bords, la proposition suivante nous permet d'encadrer la norme des différences.

Proposition 2.3.7. *Soit A un ensemble fermé non vide. Pour tout réel u satisfaisant la condition d'existence des transformées de Laplace donnée par (2.2.2) et tel que $(1 - e^{-u})\mathbb{E}^{A^c}\{\tau_A^+\} < 1$, nous avons*

$$\|K^u - K^0\| \leq \frac{(1 - e^{-u})\mathbb{E}^A\{\tau_A^+ - 1\}}{1 - (1 - e^{-u})\mathbb{E}^{A^c}\{\tau_A^+\}}.$$

Remarque 2.3.8. Pour tout réel u , les deux conditions sur u se résument par

$$\max \left\{ \mathbb{P}^{A^c}\{X_1 \in A^c\}, \frac{\mathbb{E}^{A^c}\{\tau_A^+\} - 1}{\mathbb{E}^{A^c}\{\tau_A^+\}} \right\} < e^{-u}.$$

◇

Afin de démontrer cette proposition, nous utiliserons l'expression probabiliste de l'inverse de $(\text{id} - K_{A^c})$ (qui est la résolvante du noyau K_{A^c} en $z = 1$, K_{A^c} est décrit le processus tué quand il quitte A^c) grâce à la solution du problème aux bords de Poisson Lemme 2.2.6.

PREUVE DE LA PROPOSITION 2.3.7. Remarquons que

$$\|K^u - K^0\| \leq \sup_{x \in A} \mathbb{E}^x \{e^{u(\tau_A^+ - 1)} - 1\}.$$

Notons $\bar{x} \in A$ l'argument maximal de la fonction $\mathbb{E}^x \{e^{u(\tau_A^+ - 1)} - 1\}$. Reconnaisant la somme des termes d'une suite géométrique, nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^{\bar{x}} \{e^{u(\tau_A^+ - 1)} - 1\} &= (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{\bar{x}} \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_A^+ - 1} e^{un} \right\} \\ &= (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{\bar{x}} \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_A^+ - 1} e^{u(\tau_A^+ - n)} \right\} \\ &= (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{\bar{x}} \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_A^+ - 1} \mathbb{E}^{X_n} \{e^{u\tau_A}\} \right\}. \end{aligned}$$

Ainsi, nous avons

$$\|K^u - K^0\| \leq (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^A \{\tau_A^+ - 1\} \mathbb{E}^{A^c} \{e^{u\tau_A}\}.$$

Nous pouvons alors majorer cette espérance pour $x \in A^c$. A cette fin, nous introduisons la fonction $r(x) = \mathbb{E}^x \{e^{u\tau_A}\} - 1$ qui résout le problème aux bords

$$\begin{aligned} ((\text{id} - K)r)(x) &= (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^x \{e^{u\tau_A}\} & x \in A^c, \\ r(x) &= 0 & x \in A. \end{aligned}$$

Grâce au Lemme 2.2.6, nous avons

$$r(x) = \mathbb{E}^x \{e^{u\tau_A}\} - 1 = (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=0}^{\tau_A-1} \mathbb{E}^{X_n} \{e^{u\tau_A}\} \right\}. \quad (2.3.2)$$

En introduisant $M = \mathbb{E}^{A^c} \{e^{u\tau_A}\}$, et en prenant le supremum pour $x \in A^c$ dans (2.3.2), nous obtenons

$$M - 1 \leq (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{A^c} \{\tau_A^+\} M.$$

Ainsi, si $(1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{A^c} \{\tau_A^+\} < 1$, nous avons

$$M = \mathbb{E}^{A^c} \{e^{u\tau_A}\} \leq \frac{1}{1 - (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{A^c} \{\tau_A^+\}},$$

Ceci conclut la preuve. \square

Remarque 2.3.9. Dans la preuve, nous avons obtenu le résultat auxiliaire

$$\mathbb{E}^A \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_A^+-1} e^{un} \right\} \leq \frac{\mathbb{E}^A \{\tau_A^+ - 1\}}{1 - (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{A^c} \{\tau_A^+\}}. \quad (2.3.3)$$

\diamond

Puisque $\|K^u\| > 1$, nous ne pouvons utiliser l'égalité

$$\begin{aligned} (K^u)^m - (K^0)^m &= (K^0)^{m-1} ((K^u) - (K^0)) \\ &\quad + (K^0)^{m-2} ((K^u) - (K^0))(K^u) + \dots + (K^0) ((K^u) - (K^0))(K^u)^{m-2} \\ &\quad + ((K^u) - (K^0))(K^u)^{m-1}, \end{aligned}$$

vraie pour tout $m \in \mathbb{N}$, pour obtenir une borne supérieure pour la norme de la différence entre les itérés des deux noyaux de transition. Nous avons néanmoins la proposition suivante.

Proposition 2.3.10. *Pour tout réel u satisfaisant la condition d'existence de la transformée de Laplace donnée par (2.2.2), et tel que $(1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{A^c} \{\tau_A^+\} < 1$, nous avons la borne supérieure suivante*

$$\|(K^u)^m - (K^0)^m\| \leq \left(1 + \frac{(1 - e^{-u}) \mathbb{E}^A \{\tau_A^+ - 1\}}{1 - (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{A^c} \{\tau_A^+\}} \right)^m - 1.$$

Démonstration. Pour alléger les notations, nous notons le m -ième temps de retour dans A par $\tau_m^+ = \tau_A^{+,m}$. Remarquons que le m -ième itéré du noyau de transition K^u est donné par

$$(K^u)^m(x, B) = \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_m^+ - m)} \mathbf{1}_{\{X_{\tau_m^+} \in B\}} \right\}.$$

Ainsi, la norme de la différence entre les noyaux K^u et K^0 satisfait

$$\|(K^u)^m - (K^0)^m\| \leq \sup_{x \in A} \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_m^+ - m)} - 1 \right\}.$$

Comme précédemment, en reconnaissant une somme de terme d'une suite géométrique, nous pouvons borner la norme de la différence par

$$\|(K^u)^m - (K^0)^m\| \leq (1 - e^{-u}) \sup_{x \in A} \mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_m^+ - m} e^{un} \right\}.$$

Nous pouvons alors séparer l'espérance de la somme de la façon suivante

$$\mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_m^+ - m} e^{un} \right\} = \mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_1^+ - 1} e^{un} \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=\tau_1^+}^{\tau_m^+ - m} e^{un} \right\}.$$

En utilisant la propriété de Markov forte pour le second terme du membre de droite, nous obtenons

$$\mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_m^+ - m} e^{un} \right\} = \mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_1^+ - 1} e^{un} \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_1^+ - 1)} \mathbb{E}^{X_{\tau_1^+}} \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_{m-1}^+ - (m-1)} e^{un} \right\} \right\}.$$

En notant pour $m \in \mathbb{N}$

$$t_m = \mathbb{E}^A \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_m^+ - m} e^{un} \right\},$$

nous obtenons la relation de récurrence

$$t_m \leq t_1 + t_{m-1}(1 + (1 - e^{-u})t_1).$$

Ainsi, le terme général t_m peut être borné par

$$t_m \leq \frac{(1 + (1 - e^{-u})t_1)^m - 1}{1 - e^{-u}}.$$

En utilisant la borne obtenue dans (2.3.3) pour t_1 , nous obtenons que

$$\mathbb{E}^A \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_m^+ - m} e^{un} \right\} \leq \frac{\left(1 + (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^A \left\{ \sum_{n=1}^{\tau_1^+ - 1} e^{un} \right\} \right)^m - 1}{1 - e^{-u}},$$

Ceci donne le résultat attendu. □

Pour u proche de zéro, dès que les espérances $\mathbb{E}^A \{ \tau_A^+ \}$ et $\mathbb{E}^{A^c} \{ \tau_A^+ \}$ sont proches de 1, le processus trace est donc une bonne approximation du processus décrit par le noyau K^u . Pour étudier les systèmes métastables, il est donc intéressant de définir le processus trace dans le voisinage des états métastables. Si le processus étudié est une perturbation aléatoire d'un système déterministe, il est pertinent de prendre A comme un voisinage des sous-espaces invariants du système déterministe.

2.4 Processus tué

Un autre processus intéressant est le processus tué quand il quitte un sous-ensemble de l'espace d'états Σ . Soit $A \subset \Sigma$ un sous-ensemble de l'espace d'états constituant les états autorisés, $A^c = \Sigma \setminus A$ désigne les états interdits.

2.4.1 Processus tué et distribution quasi-stationnaire

Suivant les notations introduites par [33], nous nous intéressons uniquement au cas où le processus est presque sûrement tué

$$\mathbb{P}^x \{ \tau_{A^c}^+ < \infty \} = 1, \quad \forall x \in A. \quad (2.4.1)$$

Définition 2.4.1 (Distribution quasi-stationnaire)

Une mesure de probabilité π sur A est une *distribution quasi-stationnaire* (QSD) pour le processus tué quand il quitte A si pour tout ensemble mesurable $B \subset A$

$$\mathbb{P}^\pi \{ X_n \in B | \tau_{A^c} > n \} = \pi(B), \quad n \geq 0.$$

Les distributions quasi-stationnaires ont la propriété d'être invariantes lorsque le processus est conditionné à survivre dans l'espace d'états autorisés. Elles ont été introduites pour étudier le comportement en temps long de processus stochastiques qui semblent stationnaires sur une échelle de temps et sont donc naturellement et fortement reliés aux systèmes métastables, voir par exemple les résultats d'Alleandra Bianchi et Alexandre Gaudillière [19].

Par définition de la QSD et en utilisant les probabilités conditionnelles, si π est une QSD alors

$$\mathbb{P}^\pi\{X_n \in B, \tau_{A^c}^+ > n\} = \mathbb{P}^\pi\{\tau_{A^c}^+ > n\}\pi(B).$$

De plus, comme le processus est tué au temps $\tau_{A^c}^+$, pour tout $B \subset A$, $\mathbb{P}^\pi\{X_n \in B, \tau_{A^c}^+ > n\} = \mathbb{P}^\pi\{X_n \in B\}$. Ainsi, pour toute QSD

$$\mathbb{P}^\pi\{X_n \in B\} = \mathbb{P}^\pi\{\tau_{A^c}^+ > n\}\pi(B).$$

Proposition 2.4.2. *Si π est QSD pour le processus tué quand il quitte A , alors le temps d'absorption $\tau_{A^c}^+$ suit une distribution géométrique de probabilité de succès $\mathbb{P}^\pi\{X_1 \in A\}$.*

Démonstration. Le temps de retour $\tau_{A^c}^+$ satisfait la propriété d'être sans mémoire puisque

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^\pi\{\tau_{A^c}^+ > n + m\} &= \int_A \mathbb{P}^\pi\{\tau_{A^c}^+ > n + m, X_n \in dx\} \\ &= \int_A \mathbb{P}^\pi\{\tau_{A^c}^+ > n + m | X_n \in dx\} \mathbb{P}^\pi\{X_n \in dx\} \\ &= \mathbb{P}^\pi\{\tau_{A^c}^+ > n\} \mathbb{P}^\pi\{\tau_{A^c}^+ > m\}. \end{aligned}$$

Le temps de premier retour $\tau_{A^c}^+$ suit donc une loi géométrique de paramètre $\mathbb{P}^\pi\{\tau_{A^c}^+ > 1\} = \mathbb{P}^\pi\{X_1 \in A\}$. \square

2.4.2 Propriétés spectrales du processus tué

Notons K_A le noyau de transition du processus tué. Il est défini à partir du processus original par

$$K_A(x, B) = \int_B K(x, dy) \mathbb{1}_{\{x \in A, y \in A\}}, \quad \forall B \subset A, \forall x \in A.$$

Si le noyau K admet une densité, alors le noyau de transition K_A admet une densité donnée pour tout $x, y \in A$ par

$$k_A(x, y) = k(x, y) \mathbb{1}_{\{x \in A, y \in A\}}.$$

Nous notons

- λ_i^A ses valeurs propres,
- π_i^A ses fonctions propres à gauche et
- ϕ_i^A ses valeurs propres à droite.

Nous ordonnons les valeurs propres par module décroissant. Sous l'hypothèse d'absorption presque sûre (2.4.1), le noyau de transition du processus tué est un noyau markovien sous-stochastique ($K_A(x, A) < 1$), toutes les valeurs propres satisfont $|\lambda_i^A| < 1$. Remarquons que si le processus décrit par le noyau K est irréductible sur A , le noyau du processus tué l'est également. Dans ce cas, la plus grande valeur propre λ_0^A est simple, réelle et positive. Cette valeur propre est appelée *valeur propre principale*, elle est associée à la distribution π_0^A , qui renormalisée est l'unique distribution quasi-stationnaire du processus tué $(X_n^A)_{n \geq 0}$. En suivant le formalisme introduit dans [25], nous appelons ϕ_0^A la *fonction propre principale* à droite. Remarquons que la fonction propre principale à droite est une fonction surharmonique pour le noyau de transition K_A .

En tout généralité, il n'y a pas de relation d'ordre entre les valeurs propres du processus original et les valeurs propres du processus tué. La seule chose que nous pouvons affirmer est que si une valeur propre λ du processus original satisfait la borne

$$|\lambda| \geq \sup_{x \in A} \mathbb{P}^x\{X_1 \in A\},$$

alors la valeur propre principale du processus tué quand il quitte A satisfait

$$\lambda_0^A \leq |\lambda|,$$

puisque $\lambda_0^A = \int_A \pi_0^A(dx) \mathbb{P}^x\{X_1 \in A\}$.

Dans la suite, nous normalisons également les fonctions propres suivant (2.1.5). Ainsi, lorsque le processus originel est irréductible, nous pouvons écrire

$$K_A(x, B) = \lambda_0^A \Pi_0(x, B) + K_\perp(x, B), \quad (2.4.2)$$

où $\Pi_0(x, y) = \phi_0^A(x) \pi_0^A(B)$ est le projecteur sur le sous-espace caractéristique associé à la valeur propre principale λ_0^A , et le reste K_\perp satisfait $\Pi_0 K_\perp = 0$ ainsi que $K_\perp \Pi_0 = 0$. Notons que le rayon spectral (cf. (2.1.4)) de K_\perp est $|\lambda_1^A|$. Si K_A admet une densité, nous introduisons la fonction $g(x, y)$ telle que

$$k_A(x, y) = \lambda_0^A \left\{ \pi_0(y) \phi_0^A(x) + \frac{\lambda_1^A}{\lambda_0^A} g(x, y) \right\}, \quad (2.4.3)$$

où le rayon spectral de g vaut 1.

L'orthogonalité entre les fonctions propres associées à des valeurs propres distinctes implique que

$$\int_A g(x, y) \phi_0^A(y) dy = 0, \quad \int_A \pi_0^A(x) g(x, y) dx = 0.$$

Nous avons également

$$(k_A^0)^m(x, y) = (\lambda_0^A)^m \left\{ \pi_0^A(y) \phi_0^A(x) + \left(\frac{\lambda_1^A}{\lambda_0^A} \right)^m g^m(x, y) \right\}. \quad (2.4.4)$$

D'un point de vue purement analytique, l'unicité de la valeur propre principale et donc de la distribution quasi-stationnaire est assurée lorsque le noyau de transition est uniformément positif.

Définition 2.4.3 (Condition de positivité uniforme)

L'opérateur linéaire correspondant au noyau de transition K_A est dit *uniformément positif* s'il existe une fonction positive s , une mesure finie ν et une constante L telles que pour tout $x \in A$

$$s(x) \nu(B) \leq K_A(x, B) \leq L s(x) \nu(B)$$

L'unicité de la valeur propre principale est obtenue en appliquant [20, Théorème 3] sur l'espace de Banach réticulé $L^\infty(A)$ (précisons qu'un ensemble est dit réticulé lorsqu'il est partiellement ordonné et lorsque chaque paire d'éléments admet une borne inférieure et supérieure). Nous pouvons également appliquer ce résultat sur l'espace $L^1(A)$, nous obtenons que la distribution quasi-stationnaire est positive.

Lorsque le noyau est uniformément positif, nous pouvons estimer le trou spectral et l'oscillation de la fonction propre principale à droite en fonction de la constante L .

2.4.2.1 Estimation du trou spectral du processus tué

Soit K_A un noyau de transition d'un processus irréductible admettant une densité par rapport à la mesure de Lebesgue. Nous supposons que la densité k_A satisfait une condition de positivité uniforme de constante $L > 1$, ainsi pour tout x, y dans A , nous avons

$$\inf_{x_0 \in A} k_A(x_0, y) \leq k_A(x, y) \leq L \inf_{x_0 \in A} k_A(x_0, y). \quad (2.4.5)$$

Proposition 2.4.4 (Adaptée de [12, Proposition 5.5]). *Si k_A satisfait (2.4.5) alors le rapport entre les deux plus grandes valeurs propres $\theta = |\lambda_1^A / \lambda_0^A|$ satisfait*

$$\theta \leq L - \frac{\inf_{x \in A} \mathbb{P}^x \{X_1 \in A\}}{\lambda_0^A}. \quad (2.4.6)$$

Démonstration. Soit $l \geq 1$, puisque λ_l^A est une valeur propre du noyau de transition et que nous avons pris les fonctions propres orthogonales entre elles pour deux valeurs propres distinctes (cf (2.1.5)), nous avons

$$\begin{aligned} \lambda_l^A \phi_l^A(x) &= \int_A k_A(x, y) \phi_l^A(y) dy, \\ 0 &= \int_A \pi_0^A(y) \phi_l^A(y) dy. \end{aligned}$$

Pour tout réel $\kappa > 0$, nous avons alors

$$\lambda_l^A \phi_l^A(x) = \int_A [k_A(x, y) - \kappa \pi_0^A(y)] \phi_l^A(y) dy .$$

Notons x_0 l'argument maximal de la valeur absolue de la fonction propre ϕ_l^A , $x_0 \in A$. Puisque ϕ_l^A est une fonction propre, $\phi_l^A(x_0) \neq 0$. Ainsi, en évaluant l'équation précédente au point x_0 puis en divisant par $\phi_l^A(x_0)$, nous obtenons

$$|\lambda_l^A| \leq \int_A |\kappa \pi_0^A(y) - k_A(x_0, y)| dy . \quad (2.4.7)$$

Remarquons que pour tout $y \in A$,

$$\lambda_0^A \pi_0^A(y) = \int_A \pi_0^A(x) k_A(x, y) dx \geq \inf_{x \in A} k_A(x, y) .$$

Ainsi, puisque k_A est par hypothèse uniformément positif de constante L ,

$$L \lambda_0^A \pi_0^A(y) \geq L \inf_{x \in A} k_A(x, y) \geq k_A(x_0, y)$$

En prenant $\kappa = \lambda_0^A L$, nous pouvons supprimer les valeurs absolues dans (2.4.7). Nous avons alors

$$\begin{aligned} |\lambda_l^A| &\leq \int_A \left[\lambda_0^A L \pi_0^A(y) - \inf_{x \in A} k_A(x, y) \right] dy \\ &= \lambda_0^A L - \inf_{x \in A} \mathbb{P}^x \{ X_1 \in A \} , \end{aligned}$$

Ceci prouve (2.4.6). □

L'estimation du trou spectral est meilleure lorsque la constante L de positivité uniforme est proche de 1. Si la constante de positivité uniforme est éloignée de 1, il est pertinent d'étudier les propriétés du n -ième itéré $(k_A)^n$.

Proposition 2.4.5. *Si $(k_A)^n$ est uniformément positif de constante $L(n) > 1$ i.e.*

$$\inf_{x_0 \in A} k_A^n(x_0, y) \leq k_A^n(x, y) \leq L(n) \inf_{x_0 \in A} k_A^n(x_0, y) \quad \forall x, y \in A , \quad (2.4.8)$$

alors

$$\theta^n \leq L(n) - \frac{\inf_{x \in A} \mathbb{P}^x \{ \tau_{A^c}^+ > n \}}{(\lambda_0^A)^n} .$$

Nous pouvons vérifier que cette inégalité généralise (2.4.6), la preuve est similaire à celle dans le cas $n = 1$.

2.4.2.2 Estimation de l'oscillation de fonction propre principale

L'oscillation d'une fonction sur un ensemble A correspond à la différence entre sa borne supérieure et inférieure

$$\text{osc} f := \sup_A f(x) - \inf_A f(x) .$$

Pour un processus qui admet une valeur propre principale proche de 1 puis un trou spectral, nous pouvons nous attendre à ce que la fonction propre principale à droite s'éloigne peu de la valeur 1. C'est la raison pour laquelle nous estimons l'oscillation de $1 - \phi_0^A$.

Proposition 2.4.6. *Si le n -ième itéré k_A^n satisfait une condition de positivité uniforme (2.4.8) pour $n \geq 1$, alors il existe une constante $M > 0$, telle que la fonction propre principale de K_A satisfait*

$$\|\phi_0^A - 1\| \leq ML(n)^2 \sup_{x \in A} \left| 1 - \frac{\mathbb{P}^x \{ \tau_{A^c}^+ > n \}}{(\lambda_0^A)^n} \right| . \quad (2.4.9)$$

Démonstration. Grâce à la condition de positivité uniforme, nous pouvons appliquer [20, Théorème 3, Lemme 3], Ceci implique que pour toute fonction mesurable bornée $f : A \rightarrow \mathbb{R}$, il existe une constante $M(f)$ telle que pour tout $m \in \mathbb{N}$,

$$\|(K_A)^{nm} f - (\lambda_0^A)^{nm} (\pi_0^A f) \phi_0^A\| \leq M(f) \varrho^m (\lambda_0^A)^{nm} \|\phi_0^A\| ,$$

où $\varrho < 1$. Les preuves de [20] donnent une borne supérieure pour la constante ϱ . En particulier, ϱ satisfait

$$\varrho \leq 1 - 1/L(n)^2 . \quad (2.4.10)$$

En prenant $f \equiv 1$, nous obtenons alors

$$|(K_A)^{nm}(x, A) - (\lambda_0^A)^{nm} \phi_0^A(x)| \leq M(1) \varrho^m (\lambda_0^A)^{nm} \|\phi_0^A\| .$$

En divisant par $(\lambda_0^A)^{nm}$ et en utilisant la décomposition spectrale du noyau (2.4.4), nous obtenons

$$\left| \int_A \left(\frac{\lambda_1^A}{\lambda_0^A} \right)^{nm} g^{nm}(x, y) dy \right| = \left| \frac{(K_A)^{nm}(x, A)}{(\lambda_0^A)^{nm}} - \phi_0^A(x) \right| \leq M(1) \varrho^m \|\phi_0^A\| . \quad (2.4.11)$$

Puisque $\varrho < 1$, en prenant la limite lorsque $m \rightarrow \infty$, la fonction principale satisfait

$$\phi_0^A(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{(K_A)^{nm}(x, A)}{(\lambda_0^A)^{nm}} = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\mathbb{P}^x \{ \tau_{A^c}^+ > nm \}}{(\lambda_0^A)^{nm}} .$$

Notons alors $(h_m)_{m \geq 0}$ la suite de fonctions mesurables bornées de A définies par récurrence par

$$h_{m+1}(x) = \frac{1}{(\lambda_0^A)^n} \int_A k_A^n(x, y) h_m(y) dy ,$$

avec comme initialisation $h_0 = 1$. Remarquons alors que pour tout m

$$h_m(x) = \frac{(K_A)^{nm}(x, A)}{(\lambda_0^A)^{nm}} .$$

Nous pouvons utiliser une série télescopique pour estimer

$$\begin{aligned} 1 - \phi_0^A(x) &= h_0(x) - \lim_{m \rightarrow \infty} h_m(x) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} [h_m(x) - h_{m+1}(x)] \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \int_A \frac{(k_A)^{nm}(x, y)}{(\lambda_0^A)^{nm}} [h_0 - h_1(y)] dy . \end{aligned}$$

Puisque $\int_A \pi_0^A(x) [h_0 - h_1(x)] dx = 0$, la décomposition spectrale (2.4.4) et (2.4.11) nous amène à

$$\begin{aligned} \|1 - \phi_0^A\| &\leq \sup_{x \in A} \sum_{m=0}^{\infty} \left| \int_A \left(\frac{\lambda_1^A}{\lambda_0^A} \right)^{nm} g^{nm}(x, y) dy \right| \|h_0 - h_1\| \\ &\leq \sum_{m=0}^{\infty} M(1) \varrho^m \|\phi_0^A\| \|h_0 - h_1\| . \end{aligned}$$

Le résultat est obtenu en remarquant que $h_1(x) = (\lambda_0^A)^{-n} k_A^n(x, A)$ et que d'après (2.4.10), nous avons $\sum_m \varrho^m \leq L(n)^2$. \square

Remarque 2.4.7. Si pour tout $x \in A$, on dispose de bornes a priori sur $\mathbb{P}^x \{ X_1 \notin A \} = 1 - K_A(x, A)$, le contrôle du trou spectral (2.4.8) et de l'oscillation de la fonction propre principale à droite (2.4.9) permettent d'estimer toutes les quantités relatives au processus tué. Pour s'en convaincre, il suffit d'utiliser la décomposition spectrale (2.4.4). Les estimations seront meilleures lorsque la constante de positivité uniforme se rapproche de 1. \diamond

En pratique, l'estimation de la constante de positivité uniforme peut être faite soit de manière analytique (en utilisant une inégalité de Harnack par exemple) soit de manière probabiliste (en utilisant un argument de couplage pour montrer une propriété de contraction des trajectoires) soit par une combinaison de ces deux méthodes. C'est ce que nous faisons.

Proposition 2.4.8. *Soit $\mathcal{B}_r(x)$ la boule de rayon r centrée au point $x \in A$. Nous supposons que la densité satisfait une inégalité de type Harnack de constante $1 + \eta$ i.e. pour tout $x_0 \in A$*

$$\sup_{x \in \mathcal{B}_r(x_0)} k(x, y) \leq (1 + \eta) \inf_{x \in \mathcal{B}_r(x_0)} k(x, y). \quad (2.4.12)$$

Pour $x_1, x_2 \in A$, nous définissons le temps d'arrêt correspondant au temps de rencontre des deux chaînes de Markov

$$N = N(x_1, x_2) = \inf \left\{ n \geq 1 : \|\hat{X}_n^{x_2} - \hat{X}_n^{x_1}\| \leq r \right\}, \quad (2.4.13)$$

où $\hat{X}_n^{x_0}$ désigne la chaîne de Markov conditionnée à rester dans A et de condition initiale x_0 , le n -ième itéré de son noyau de transition est donné par $K_A^n(x_0, dy)/K_A^n(x_0, A)$. Soit

$$\rho_n = \sup_{x_1, x_2 \in A} \mathbb{P}\{N(x_1, x_2) > n\}.$$

Alors pour tout $n \geq 2$, le noyau de transition $(K_A)^n(x, dy)$ remplit une condition de positivité uniforme de constante $L(n)$ qui satisfait

$$L(n) \leq \frac{(1 + \eta)^2 + \rho_{n-1} \sup_{\substack{x \in A \\ y \in A}} \frac{k(x, y)}{\inf_{x \in A} k(x, y)}}{\inf_{x \in A} \mathbb{P}^x \{\tau_{A^c}^+ > n\}}. \quad (2.4.14)$$

Démonstration. La preuve est largement inspirée de [12, Proposition 5.9]. Soit $B \subset A$ mesurable, nous pouvons décomposer

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B\} &= \sum_{j=1}^{n-1} \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B | N = j\} \mathbb{P}\{N = j\} \\ &\quad + \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B | N > n - 1\} \mathbb{P}\{N > n - 1\}. \end{aligned} \quad (2.4.15)$$

Notons alors $k_n^{(2)}((x_1, x_2), (z_1, z_2) | N = j)$ la densité conditionnelle jointe pour une transition du couple $(\hat{X}_n^{x_1}, \hat{X}_n^{x_2})$ en n -étapes de (x_1, x_2) vers (z_1, z_2) sachant que le temps d'arrêt $N = j$. Pour tout $1 \leq j < n$, en décomposant selon la position du couple $(\hat{X}_j^{x_1}, \hat{X}_j^{x_2})$ à la j -ième transition, nous obtenons

$$\mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B | N = j\} = \int_A \int_A \mathbb{P}\{\hat{X}_{n-j}^{z_1} \in B\} k_j^{(2)}((x_1, x_2), (z_1, z_2) | N = j) dz_1 dz_2.$$

Puisque la densité du noyau conditionné satisfait (2.4.12) et que la densité $k_n^{(2)}((x_1, x_2), (z_1, z_2) | N = j)$ est concentrée sur l'ensemble $\{\|z_1 - z_2\| < r\}$, nous avons

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B | N = j\} &\leq (1 + \eta)^2 \int_A \int_A \mathbb{P}\{\hat{X}_{n-j}^{z_2} \in B\} k_j^{(2)}((x_1, x_2), (z_1, z_2) | N = j) dz_1 dz_2 \\ &= (1 + \eta)^2 \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_2} \in B | N = j\}. \end{aligned}$$

La somme intervenant dans (2.4.15) est donc majorée par

$$\sum_{j=1}^{n-1} \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B | N = j\} \mathbb{P}\{N = j\} \leq (1 + \eta)^2 \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_2} \in B\}$$

De plus, nous pouvons majorer grossièrement

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B | N > n - 1\} &\leq \sup_{z_1 \in A} \mathbb{P}\{\hat{X}_1^{z_1} \in B\} \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in A | N > n - 1\} \\ &\leq \sup_{z_1 \in A} \mathbb{P}\{\hat{X}_1^{z_1} \in B\}. \end{aligned}$$

Nous pouvons ainsi majorer (2.4.15) par

$$\mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B\} \leq (1 + \eta)^2 \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_2} \in B\} + \rho_{n-1} \sup_{z_1 \in A} \mathbb{P}\{\hat{X}_n^{z_1} \in B\},$$

tandis que nous avons comme borne inférieure

$$\mathbb{P}\{\hat{X}_n^{x_1} \in B\} \geq \mathbb{P}\{\hat{X}_{n-1}^{x_1} \in A\} \inf_{z_1 \in A} \mathbb{P}\{\hat{X}_1^{z_1} \in B\}.$$

Puisque la chaîne est conditionnée à rester dans A , $\mathbb{P}\{\hat{X}_{n-1}^{x_1} \in A\} = 1$ pour tout $x_1 \in A$. Notons $k^A(x, y)$ la densité associée au noyau de la chaîne $(\hat{X}_n)_n$, en combinant la borne inférieure et la borne supérieure, nous obtenons

$$\frac{\sup_{x \in A} k_n^A(x, y)}{\inf_{x \in A} k_n^A(x, y)} \leq (1 + \eta)^2 + \rho_{n-1} \frac{\sup_{x \in A} k^A(x, y)}{\inf_{x \in A} k^A(x, y)}.$$

Le résultat s'obtient en se souvenant que $k^A(x, y) = k_A(x, dy)/K_A(x, A)$. \square

Remarque 2.4.9. L'équation (2.4.12) diffère de la condition de positivité uniforme car les bornes supérieures et inférieures sont prises sur des boules de rayon r . Grâce à ce théorème, si la constante de positivité uniforme est grande pour la densité du noyau mais qu'il est possible de contrôler l'oscillation de la densité du noyau sur un compact (en utilisant des résultats sur les inégalités de Harnack par exemple), nous gagnons en précision pour estimer le trou spectral et l'oscillation de la fonction propre principale à droite en travaillant avec $L(n)$ la constante de positivité uniforme du n -ième itéré du noyau. \diamond

2.5 Processus conditionné, transformée harmonique de Doob

Enfin, nous étudions le processus $(\bar{X}_n^A)_{n \geq 0}$ conditionné à rester dans A pour toujours. Il est défini pour tout $x \in A$, et pour tout $B \in \mathcal{S}$ par

$$\bar{K}_A(x, B) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}^x \{X_1^A \in B \mid X_n^A \in A\} = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}^x \{X_1 \in B \mid \tau_{A^c}^+ > n\}.$$

Ce noyau de transition peut être construit en utilisant la h -transformée de Doob, également appelée transformée harmonique de Doob. Soit $(X_n)_{n \geq 0}$ un processus de Markov d'espace d'états (Σ, \mathcal{S}) et de noyau de transition K . Pour tout $A \subset \Sigma$, le processus conditionné à rester dans A pour toujours peut alors être construit à partir des fonctions

$$h_n(x) = \mathbb{P}^x \{\tau_{A^c} > n\},$$

avec $\tau_{A^c} = \inf\{n > 0 : X_n \in A^c\}$ le premier temps de sortie de A . En effet, sous l'hypothèse que $h_n(x) > 0$, nous avons pour tout $x \in A$, et pour tout $B \in \mathcal{S}$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^x \{X_1 \in B \mid \tau_{A^c} > n\} &= \frac{1}{h_n(x)} \mathbb{E}^x \left\{ \mathbb{1}_{\{X_1 \in B\}} \mathbb{P}^{X_1} \{\tau_{A^c} > n-1\} \right\} \\ &= \int_B \frac{h_{n-1}(y)}{h_n(x)} \mathbb{P}^x \{X_1 \in dy\}. \end{aligned}$$

Ceci montre que le noyau

$$\bar{K}_A(x, B; n) = \int_B \frac{h_{n-1}(y)}{h_n(x)} K(x, B) \mathbb{1}_{\{x \in A, B \subset A\}}$$

décrit le processus conditionné à rester dans A jusqu'au temps n . Ainsi, si la limite

$$\bar{K}_A(x, B) = \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{K}_A(x, B; n)$$

existe, elle décrit le processus conditionné à rester dans A pour toujours.

Suivant les notations introduites dans la Section 2.4, nous notons $K_A(x, B) = K(x, y) \mathbb{1}_{\{x \in A, B \subset A\}}$ le noyau du processus tué quand il quitte l'ensemble A , λ_i^A les valeurs propres ordonnées par ordre décroissant, π_i^A les fonctions propres à gauche et ϕ_i^A les fonctions propres à droite.

Lemme 2.5.1. *Si les valeurs propres du processus tué satisfont $|\lambda_1^A| < \lambda_0^A$, nous avons*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{h_{n-1}(y)}{h_n(x)} = \frac{1}{\lambda_0^A} \frac{\phi_0^A(y)}{\phi_0^A(x)}.$$

Démonstration. Grâce à la décomposition spectrale (2.4.2), nous pouvons écrire

$$K_A(x, B) = \lambda_0^A \Pi_0(x, B) + K_\perp(x, B),$$

où $\Pi_0(x, y) = \phi_0^A(x) \pi_0^A(B)$ est le projecteur sur le sous-espace caractéristique associé à la valeur propre λ_0^A , et le reste K_\perp satisfait $\Pi_0 K_\perp = 0$ ainsi que $K_\perp \Pi_0 = 0$. Notons que le rayon spectral (cf. (2.1.4)) de K_\perp est $|\lambda_1^A|$. Ainsi,

$$K_A^n(x, B) = (\lambda_0^A)^n \Pi_0(x, B) + K_\perp(x, B)^n,$$

et nous obtenons

$$h_n(x) = \int_A K_A^n(x, dy) = (\lambda_0^A)^n \phi_0^A(x) + \mathcal{O}(|\lambda_1^A|^n).$$

Le résultat suit alors par l'hypothèse du trou spectral $|\lambda_1^A| / \lambda_0^A < 1$. \square

Nous obtenons alors une expression explicite du noyau de transition du processus conditionné à rester dans A pour toujours en fonction du noyau du processus tué lorsqu'il quitte A .

Proposition 2.5.2 (Transformée harmonique de Doob). *Sous l'hypothèse d'existence d'un trou spectral i.e. $|\lambda_1^A| < \lambda_0^A$, le noyau de transition \bar{K}_A est donné par*

$$\bar{K}_A(x, B) = \frac{1}{\lambda_0^A} \int_B \frac{\phi_0^A(y)}{\phi_0^A(x)} K_A(x, dy).$$

De plus, les fonctions propres et valeurs propres de \bar{K}_A sont données par

$$\bar{\lambda}_n^A = \frac{\lambda_n^A}{\lambda_0^A}, \quad \bar{\pi}_n^A(B) = \int_B \pi_n^A(dx) \phi_0^A(x) \quad \text{et} \quad \bar{\phi}_n^A(x) = \frac{\phi_n^A(x)}{\phi_0^A(x)}. \quad (2.5.1)$$

Démonstration. Un calcul direct montre que $K_A \phi_n^A = \lambda_n^A \phi_n^A \Leftrightarrow \bar{K}_A \bar{\phi}_n^A = \bar{\lambda}_n^A \bar{\phi}_n^A$. Nous avons un résultat similaire pour les fonctions propres à gauche. \square

Puisque $\bar{K}_A(x, A) = 1$, le noyau de transition \bar{K}_A est un noyau markovien stochastique, sa valeur propre principale $\bar{\lambda}_0^A$ vaut 1, et la fonction propre à droite est identiquement égale à 1. Par la Proposition 2.5.2, la connaissance de la valeur propre principale λ_0^A et de la fonction propre à droite ϕ_0^A permet de déduire les propriétés spectrales de K_A en fonction des propriétés spectrales de \bar{K}_A et inversement.

Notons que si le noyau K_A admet une densité, le noyau du processus conditionné à rester dans A admet une densité qui est donnée par

$$\bar{k}_A(x, y) = \frac{1}{\lambda_0^A} \frac{\phi_0^A(y)}{\phi_0^A(x)} k_A(x, y).$$

Chapitre 3

Applications de Poincaré aléatoires

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à un système d'équations différentielles stochastiques obtenu en perturbant une équation différentielle ordinaire qui admet plusieurs orbites périodiques stables. Comme pour l'étude de tout système dynamique, nous commençons par l'étude du système linéarisé. La linéarisation autour d'une solution périodique d'une EDO non linéaire conduit à l'étude d'une EDO linéaire à coefficients périodiques. Grâce à la théorie de Floquet que nous développerons brièvement, cette étude se ramène (dans une certaine mesure) à celle d'une équation à coefficients constants. La théorie de Floquet nous permet également de définir un système de coordonnées local de type polaire. Ce système de coordonnées permet de définir explicitement les applications de Poincaré.

Nous réalisons ensuite l'étude du système stochastique. Grâce à la formule d'Itô, nous obtenons un système de coordonnées de type polaire également pour le système stochastique. Ce système de coordonnées nous permet de construire les applications de Poincaré aléatoires.

Après avoir étudié la dynamique dans le voisinage des orbites périodiques pour le système stochastique, nous montrons que sous les hypothèses dans lesquelles nous travaillons l'application de Poincaré est récurrente, et nous donnons une estimation a priori sur les probabilités de transition en utilisant la théorie des grandes déviations.

3.1	Étude d'un système déterministe admettant des orbites périodiques . . .	39
3.1.1	Généralités sur la théorie de Floquet	40
3.1.2	Système de coordonnées local dans le voisinage d'une orbite périodique	42
3.1.3	Application de Poincaré	43
3.2	Définition des applications de Poincaré aléatoires	44
3.2.1	Propriétés de l'équation différentielle stochastique	44
3.2.2	Définition de l'application de Poincaré aléatoire	47
3.3	Dynamique dans le voisinage des orbites périodiques	48
3.3.1	Généralités sur les estimations des trajectoires	48
3.3.2	Estimation des espérances de temps de retour	51
3.3.3	Argument de couplage	54
3.4	Propriétés des applications de Poincaré aléatoires	54
3.4.1	Réurrence des applications de Poincaré aléatoires	54
3.4.2	Estimations a priori par la théorie des grandes déviations	55

3.1 Étude d'un système déterministe admettant des orbites périodiques

Soit $\mathcal{D}_0 \subset \mathbb{R}^{d+1}$ un ensemble ouvert et connexe, soit $f \in \mathcal{C}^2(\mathcal{D}_0, \mathbb{R}^{d+1})$, et considérons l'équation différentielle ordinaire de dimension $d + 1$

$$\dot{z} = f(z) . \tag{3.1.1}$$

On suppose que ce système admet une *solution périodique* (non triviale) $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{D}_0$ de période $T > 0$, c'est-à-dire que pour tout réel t , γ satisfait $\gamma(t + T) = \gamma(t)$ et $\dot{\gamma}(t) = f(\gamma(t))$.

Remarque 3.1.1. Notons qu'un système gradient de la forme

$$\dot{z} = -\nabla V(z), \quad (3.1.2)$$

n'admet pas d'orbite périodique non constante. En effet, si nous supposons le contraire et que $\gamma : t \mapsto z(t)$ est une orbite T -périodique du système gradient (3.1.2), alors $V(z(T)) - V(z(0)) = 0$. Cependant nous avons également

$$V(z(T)) - V(z(0)) = \int_0^T \frac{dV}{dt} dt = \int_0^T \nabla V \cdot \dot{z} dt = - \int_0^T \|\dot{z}\|^2 dt < 0,$$

ce qui conduit à une contradiction. \diamond

Pour s'assurer que le flot de l'équation est bien défini pour tout temps positif nous ferons l'hypothèse qu'il existe un domaine positivement invariant.

Hypothèse 3.1.2 (Domaine invariant). Il existe un ensemble borné ouvert et connexe $\mathcal{D} \subset \mathcal{D}_0$ qui est positivement invariant pour le flot de (3.1.1). \clubsuit

Nous ne demandons pas que \mathcal{D} soit simplement connexe.

3.1.1 Généralités sur la théorie de Floquet

La théorie de Floquet permet d'étudier la stabilité des solutions périodiques des équations différentielles. Elle est expliquée dans de nombreux ouvrages tels que [52, Chapitre III et VI]. Nous nous contenterons de rappeler quelques résultats importants et en profiterons pour introduire des notations que nous réutiliserons.

Afin d'avoir une variable de temps constante le long de l'orbite périodique, nous introduisons la variable $\varphi \in \mathbb{R}/\mathbb{Z}$ et posons $\Gamma(\varphi) := \gamma(T\varphi)$. Par cette transformation,

$$\frac{d}{d\varphi}\Gamma(\varphi) = Tf(\Gamma(\varphi)), \quad (3.1.3)$$

de telle façon que $\dot{\varphi} = 1/T$ est bien constante le long de l'orbite périodique.

Une méthode classique pour analyser la dynamique dans le voisinage de l'orbite Γ consiste à linéariser (3.1.3). Notons $A(\varphi) = \partial_z f(\Gamma(\varphi))$ la matrice jacobienne de f en $\Gamma(\varphi)$. Cette matrice est périodique de période 1. La linéarisation autour de l'orbite périodique est donnée par

$$\frac{d}{d\varphi}\zeta = TA(\varphi)\zeta. \quad (3.1.4)$$

Notons $U(\varphi, \varphi_0)$, la *solution principale* de (3.1.4) au temps φ_0 . On rappelle qu'une solution principale de (3.1.4) au temps φ_0 est une matrice de taille $(d+1) \times (d+1)$ satisfaisant l'EDO et telle que $\det U(\varphi, \varphi_0) \neq 0$ et $U(\varphi_0, \varphi_0) = \text{id}$. Étant donnée $U(\varphi, \varphi_0)$ une matrice solution principale de (3.1.4), toute solution ζ de (3.1.4) s'écrit

$$\zeta(\varphi) = U(\varphi, \varphi_0)c \quad (3.1.5)$$

où c est un vecteur de dimension $d+1$.

La matrice constante $M(\varphi_0) = U(1 + \varphi_0, \varphi_0) = \exp(TB(\varphi_0))$ est appelée *matrice de monodromie* en φ_0 , elle satisfait

$$U(\varphi + 1, \varphi_0) = U(\varphi, \varphi_0)M(\varphi_0).$$

Le théorème de Floquet (Gaston Floquet, 1883) permet d'écrire toute matrice solution principale sous une forme canonique.

Théorème 3.1.3 (Théorème de Floquet). Soit $A(\varphi) \in \mathbb{R}^{(d+1) \times (d+1)}$ une matrice continue en φ qui satisfait, pour une constante $T > 0$, $A(\varphi + 1) = A(\varphi)$. Alors toute solution fondamentale $U(\varphi, \varphi_0)$ de $\dot{x} = A(t)x$ s'écrit sous la forme

$$U(\varphi, \varphi_0) = P(\varphi, \varphi_0)e^{T(\varphi - \varphi_0)B(\varphi_0)}, \quad (3.1.6)$$

où $P(\cdot, \varphi_0)$ est périodique de même période que la matrice $A(\cdot)$, i.e. de période 1. La matrice P satisfait $P(\varphi_0, \varphi_0) = \text{id}$, et $B(\varphi_0)$ est une matrice constante.

Remarque 3.1.4. La démonstration du théorème de Floquet repose sur la représentation exponentielle d'une matrice non singulière : pour toute matrice carrée non singulière M il existe une matrice B de même dimension telle que $U = e^B$. Ainsi, la matrice de monodromie $M(\varphi_0)$ s'écrit sous la forme $M(\varphi_0) = e^{B(\varphi_0)}$. En posant $P(\varphi, \varphi_0) = U(\varphi, \varphi_0) e^{-T(\varphi-\varphi_0)B(\varphi_0)}$, nous obtenons le résultat.

On peut également montrer que toute matrice non singulière U admet une matrice réelle telle que $U^2 = e^B$. Ainsi, la matrice B de (3.1.6) peut toujours être prise réelle quitte à prendre $P(\cdot, \varphi_0)$ non plus périodique de période 1 mais de période 2. \diamond

Les valeurs propres de la matrice de monodromie $U(1 + \varphi_0, \varphi_0) = \exp(TB(\varphi_0))$ sont appelées *multiplicateurs caractéristiques*.

Remarque 3.1.5. Les multiplicateurs de Floquet ne dépendent pas de φ_0 . En effet, si $V(\varphi, \varphi_1)$ est une matrice principale alors d'après (3.1.5) il existe une matrice non singulière C telle que $V(\varphi, \varphi_1) = U(\varphi, \varphi_0)C$ et donc $V(\varphi + 1, \varphi_1) = U(\varphi + 1, \varphi_0)C = U(\varphi, \varphi_0)M(\varphi_0)C = V(\varphi, \varphi_1)C^{-1}M(\varphi_0)C$ et donc la matrice de monodromie pour $V(\varphi, \varphi_1)$ est $C^{-1}M(\varphi_0)C$. Puisque les matrices U et V sont similaires, elles ont donc les mêmes valeurs propres. Remarquons par ailleurs qu'il y a exactement $d + 1$ multiplicateurs caractéristiques en prenant en compte la multiplicité des valeurs propres. \diamond

En dérivant (3.1.3) par rapport à φ , nous remarquons que

$$\frac{d}{d\varphi}\Gamma'(\varphi) = T \frac{d}{d\varphi}f(\Gamma(\varphi)) = TA(\varphi)\Gamma'(\varphi) .$$

et puisque $\Gamma'(\varphi) = \Gamma'(\varphi + 1)$, il suit donc que

$$\Gamma'(\varphi_0) = \Gamma'(\varphi_0 + 1) = U(\varphi_0 + 1, \varphi_0)\Gamma'(\varphi_0) ,$$

ce qui montre que 1 est une valeur propre de la matrice de monodromie associée au vecteur propre $\Gamma'(\varphi_0)$. Ce vecteur est tangent à l'orbite en φ_0 .

Ainsi, l'équation différentielle (3.1.4) admet une solution périodique non-triviale si et seulement si 1 est valeur propre de la matrice de monodromie. Les d autres multiplicateurs caractéristiques déterminent la stabilité de l'orbite périodique.

Théorème 3.1.6. *Une condition nécessaire et suffisante pour que le système décrit par (3.1.4) soit uniformément stable est que tous les multiplicateurs caractéristiques soient de module inférieur ou égal à 1 (les exposants de Floquet aient une partie réelle négative) et la valeur propre de module égal à 1 soit de multiplicité un.*

Remarque 3.1.7. Malgré ce résultat sur la stabilité des équations linéaires périodiques, ces dernières ne sont pas aussi simples à traiter que les équations linéaires à coefficients constants. En effet, les multiplicateurs caractéristiques étant définis à partir des solutions de l'équation différentielle. En règle générale, il n'y a pas de lien explicite entre les exposants caractéristiques et la matrice $A(\varphi)$. Déterminer les multiplicateurs caractéristiques d'un système linéaire périodique est un problème particulièrement complexe. \diamond

Soit ρ un multiplicateur caractéristique de (3.1.4), tout complexe μ satisfaisant $\rho = e^\mu$ est appelé *exposant caractéristique* (ou *exposant de Floquet*) de Γ . Contrairement aux multiplicateurs caractéristiques, les exposants caractéristiques ne sont pas déterminés de manière unique, seule leur partie réelle l'est. Les multiplicateurs caractéristiques et les exposants caractéristiques sont liés par les relations suivantes.

$$\prod_{j=1}^{d+1} \rho_j = \exp\left(\int_0^1 \text{Tr } A(\varphi) d\varphi\right) ,$$

$$\sum_{j=1}^{d+1} \mu_j = \int_0^1 \text{Tr } A(\varphi) d\varphi \pmod{2\pi i} .$$

Ce résultat découle de la définition même des exposants et multiplicateurs caractéristiques et de l'égalité satisfaite pour toute matrice fondamentale $\det U(\varphi, \varphi_0) = \exp\left(\int_{\varphi_0}^{\varphi} \text{Tr } A(\psi) d\psi\right)$. Remarquons alors que la matrice P donnée par (3.1.6) satisfait

$$\frac{d}{d\varphi}P(\varphi, \varphi_0) = T[A(\varphi)P(\varphi, \varphi_0) - P(\varphi, \varphi_0)B(\varphi_0)] . \quad (3.1.7)$$

Ceci permet de montrer que le changement de coordonnées $\zeta = P(\varphi, \varphi_0)\xi$ transforme le système (3.1.4) en un système avec des coefficients constants. Nous utiliserons un autre système de coordonnées qui permet d'avoir une dépendance explicite en fonction des exposants caractéristiques.

3.1.2 Système de coordonnées local dans le voisinage d'une orbite périodique

Proposition 3.1.8. *Il existe une constante $L > 0$ et une matrice triangulaire Λ de dimension $d \times d$ tels que le système (3.1.1) soit équivalent pour $\|x\| < L$ à*

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \Lambda x + \mathcal{O}(\|x\|^2) \\ \dot{\varphi} &= \frac{1}{T} + \mathcal{O}(\|x\|^2).\end{aligned}$$

Démonstration. Avant de définir le changement de variable explicitement, nous introduisons quelques notations. Soit $\hat{\Lambda} := S^{-1}BS = \text{diag}(0, \Lambda)$ la forme normale de Jordan de la matrice constante B définie par (3.1.6), où $\Lambda \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Nous définissons également grâce à la matrice de passage S , $P(\varphi, \varphi_0)S =: [u(\varphi), R(\varphi)]$, où u est un vecteur colonne de dimension $d+1$ et R est une matrice de dimension $(d+1) \times d$. D'après (3.1.7), le vecteur u et la matrice R satisfont les équations

$$\begin{aligned}u'(\varphi) &= TA(\varphi)u(\varphi), \\ R'(\varphi) &= T(A(\varphi)R(\varphi) - R(\varphi)\Lambda).\end{aligned}\tag{3.1.8}$$

Nous pouvons choisir la matrice S telle que $u(\varphi) = \Gamma'(\varphi)$. Nous avons maintenant tous les éléments pour définir le changement de variable explicitement par

$$z = h(x, \varphi) = \Gamma(\varphi) + R(\varphi)x.$$

Vérifions que cette transformation est bien définie dans un voisinage de l'orbite Γ . En effet, en notant $F(z, x, \varphi) = \Gamma(\varphi) + R(\varphi)x - z$, les dérivées partielles de F par rapport à x et φ sont

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial \varphi}(z, x, \varphi) &= \Gamma'(\varphi) + R'(\varphi)x, \\ \frac{\partial F}{\partial x}(z, x, \varphi) &= R(\varphi).\end{aligned}$$

Pour $x = 0$, nous avons $\det[\partial_\varphi F, \partial_x F] \neq 0$ pour tout φ , puisque $[\Gamma'(\varphi), R(\varphi)]$ est la matrice $P(\varphi, \varphi_0)S$, qui est inversible. Ainsi, il existe une constante L indépendante de φ telle que $\det[\partial_\varphi F, \partial_x F] \neq 0$ pour tout $\|x\| \leq L$, $0 \leq \varphi \leq 1$. Le théorème des fonctions implicites nous permet alors d'affirmer que la transformation est bien définie dans le voisinage de l'orbite périodique.

Si $z(t) = \Gamma(\varphi(t)) + R(\varphi(t))x(t)$ satisfait $\dot{z} = f(z)$ alors

$$f(\Gamma(\varphi) + R(\varphi)x) = \dot{\varphi}\Gamma'(\varphi) + \dot{\varphi}R'(\varphi)x + R(\varphi)\dot{x}.$$

En réalisant un développement de Taylor sur le terme de gauche, et en utilisant (3.1.8), nous obtenons

$$\mathcal{O}(\|x\|^2) = \left(\dot{\varphi} - \frac{1}{T}\right)[\Gamma'(\varphi) + TA(\varphi)R(\varphi)x] + R(\varphi)(\dot{x} - \dot{\varphi}T\Lambda x).$$

En projetant cette équation sur un vecteur v normal à l'espace généré par les colonnes de la matrice R , nous obtenons l'équation pour la variable φ

$$\mathcal{O}(\|x\|^2) = \dot{\varphi} - \frac{1}{T}.$$

Ceci nous permet d'obtenir pour la variable x

$$\mathcal{O}(\|x\|^2) = R(\varphi)(\dot{x} - \Lambda x).$$

Puisque $R(\varphi)$ est composée de vecteurs linéairement indépendants, la matrice carrée de taille d $R^t(\varphi)R(\varphi)$ est inversible, et nous obtenons l'équation attendue pour la variable x . \square

Notons $f_x^0(x, \varphi) = \Lambda x + \mathcal{O}(\|x\|^2)$ et $f_\varphi^0(x, \varphi) = \frac{1}{T} + \mathcal{O}(\|x\|^2)$, les fonctions du système en coordonnées (x, φ) . Puisque

$$f(h(x, \varphi)) = R(\varphi)f_x^0(x, \varphi) + f_\varphi^0(x, \varphi)(\Gamma'(\varphi) + R'(\varphi)x),$$

nous obtenons une expression explicite des deux fonctions

$$\begin{aligned} f_\varphi^0(x, \varphi) &= \frac{v^t f(h(x, \varphi))}{v^t(\Gamma'(\varphi) + R'(\varphi)x)}, \\ f_x^0(x, \varphi) &= \{R^t(\varphi)R(\varphi)\}^{-1} \{R^t(\varphi)f(x, \varphi) - f_\varphi^0(x, \varphi)(\Gamma'(\varphi) + R'(\varphi)x)\}. \end{aligned}$$

Ces expressions seront utiles pour l'étude du système stochastique.

3.1.3 Application de Poincaré

Pour étudier les systèmes dynamiques admettant une ou plusieurs orbite(s) périodique(s), un outil classique est l'*application de premier retour* également appelée *application de Poincaré*. Elle est définie à partir des intersections des orbites périodiques sur une sous-variété de codimension 1 qui est longitudinale au flot. L'application de Poincaré réduit la dimension de tous les ensembles limites dans l'espace des phases de 1, ce qui rend en général l'analyse du portrait de phase plus facile.

Dans le cas particulier où $d + 1 = 3$, la section de Poincaré de dimension 2 est évidemment plus facile à représenter que la trajectoire dans la totalité de l'espace de phase. Mais surtout, elle simplifie l'étude de la stabilité des orbites périodiques puisqu'elle permet de s'affranchir de la direction longitudinale neutre.

Le flot de l'EDO (3.1.1) sera noté $\Phi_t(z)$. L'image $\{\Phi_t(z) : t \geq 0\}$ est appelée *orbite* (positive) de z . Nous rappelons qu'un ensemble ω -limite de z est l'ensemble des valeurs d'adhérence du flot $\Phi_t(z)$ lorsque $t \rightarrow \infty$. Lorsque le flot est défini pour des valeurs de t négative, l'ensemble α -limite est l'ensemble des valeurs d'adhérence du flot $\Phi_t(z)$ lorsque $t \rightarrow -\infty$. L'ensemble ω -limite (respectivement α -limite) d'un ensemble A est simplement l'union des ensembles ω -limites (respectivement α -limite) des points de A . Une *connexion hétérocline* entre $A, B \subset \mathbb{R}^{d+1}$ deux ensembles invariants pour le flot est une orbite qui admet A comme ensemble α -limite et B comme ensemble ω -limite.

Hypothèse 3.1.9 (Ensembles ω -limites, ensembles α -limites). Il existe un nombre fini d'ensembles ω -limites dans \mathcal{D} . L'ensemble ω -limite est composé de $N \geq 2$ orbites périodiques distinctes qui sont linéairement stables. L'ensemble α -limite dans \mathcal{D} est composé uniquement de points linéairement instables ou d'orbites périodiques linéairement instables. De plus, il existe une variété orientable lisse de dimension d que nous noterons $\Sigma \subset \mathcal{D}$. Le bord de la variété, $\partial\Sigma$, est inclus dans le bord de $\mathcal{D} \subset \partial\mathcal{D}$, et pour tout $z \in \Sigma$, $f(z)$ n'est pas tangent à Σ , ce qui assure que le flot est bien transverse à Σ . Chaque orbite périodique Γ_i coupe Σ en exactement un point x_i^* . De plus, nous faisons l'hypothèse qu'il n'y a pas de connexion hétérocline entre les orbites périodiques instables ou entre les orbites instables et les points fixes instables. ♣

Rappelons que nous ne demandons pas que \mathcal{D} soit simplement connexe, il peut avoir la forme d'un tore solide qui contient les orbites périodiques en son intérieur comme le montre la Figure 3.2.

L'*application déterministe de Poincaré*, associée à la variété Σ , $\Pi : \Sigma \rightarrow \Sigma$ est définie par

$$\Pi(x) = \varphi_\tau(x) \quad \text{où } \tau = \inf\{t > 0 : \varphi_t(x) \in \Sigma\}. \quad (3.1.9)$$

Nous supposons toujours que $\tau < \infty$ pour presque tout $x \in \Sigma$. Ainsi à part peut-être pour un ensemble de conditions initiales de mesure de Lebesgue nulle, les orbites commençant sur Σ retournent toujours sur Σ en un temps fini.

On notera par

$$\mathcal{A}_j = \left\{ x \in \Sigma : \lim_{n \rightarrow \infty} \Pi^n(x) = x_j^* \right\} \quad (3.1.10)$$

le bassin d'attraction de la j -ième orbite périodique Γ_j . Les ensembles \mathcal{A}_j sont des ensembles disjoints et ouverts de Σ , et l'union de leur fermeture est Σ .

Remarque 3.1.10. Avec l'hypothèse 3.1.9 sur les ensembles ω -limites, il ne peut exister d'autres ensembles ω -limite autre que les orbites périodiques et les points instables. Cette hypothèse n'est pas forcément nécessaire, ce dont nous avons besoin c'est que pour tout ensemble ω -limite autre que les

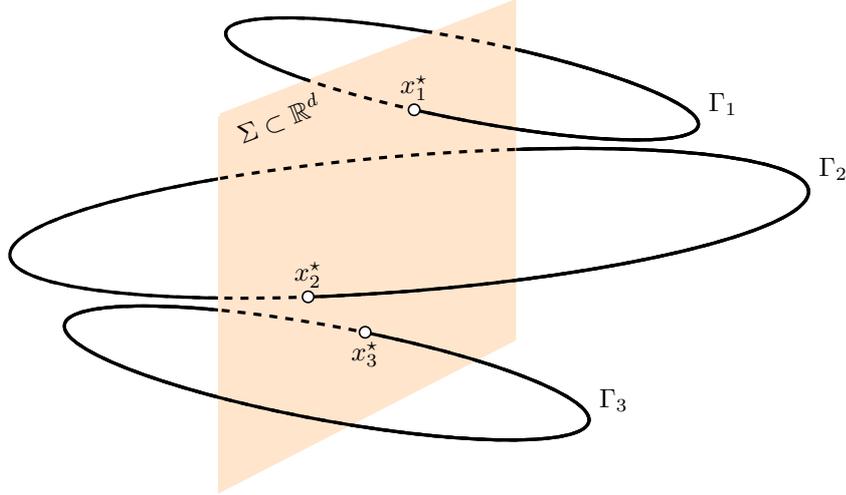


FIGURE 3.1 – Schéma d'une section de Poincaré pour un système déterministe admettant trois orbites périodiques stables.

orbites périodiques stables Γ_i , le bruit ajouté au système permet aux trajectoires stochastiques de quitter ces ensembles en un temps négligeable par rapport aux transitions entre les orbites périodiques stables Γ_i .

De plus, nous pensons que l'hypothèse sur l'absence de connexion hétérocline n'est pas nécessaire, ce dont nous avons vraiment besoin c'est que les trajectoires commençant près d'une orbite périodique instable s'approchent du voisinage d'une orbite périodique stable après un temps négligeable. \diamond

3.2 Définition des applications de Poincaré aléatoires

3.2.1 Propriétés de l'équation différentielle stochastique

Nous souhaitons nous intéresser à des perturbations aléatoires de l'EDO (3.1.1), donnée par l'équation différentielle stochastique d'Itô

$$dz_t = f(z_t) dt + \sigma g(z_t) dW_t, \quad (3.2.1)$$

avec W_t un mouvement brownien de dimension k sur un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ avec $k \geq d + 1$, et $g \in \mathcal{C}^1(\mathcal{D}_0, \mathbb{R}^{(d+1) \times k})$, et $\sigma > 0$ un petit paramètre. Nous notons $Z_t^{z,0}$, ou Z_t^z ou encore Z_t lorsque le contexte est suffisamment clair, la solution de (3.2.1) commençant en z au temps $t = 0$. Les probabilités correspondantes seront notées $\mathbb{P}^z\{\cdot\}$, et les espérances par rapport à $\mathbb{P}^z\{\cdot\}$ seront notées $\mathbb{E}^z\{\cdot\}$. Soit $D(z) = g(z)g(z)^\dagger$ la *matrice de diffusion*. Le *générateur infinitésimal* du processus de diffusion est l'opérateur différentiel linéaire d'ordre 2

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{d+1} f_i(z) \frac{\partial}{\partial z_i} + \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i,j=1}^{d+1} D_{ij}(z) \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j}. \quad (3.2.2)$$

Hypothèse 3.2.1 (Ellipticité). Il existe des constantes $c_+ > c_- > 0$ telles que

$$c_- \|\xi\|^2 \leq \langle \xi, D(z)\xi \rangle \leq c_+ \|\xi\|^2$$

pour tout $z \in \mathcal{D}$ et tout $\xi \in \mathbb{R}^{d+1}$. ♣

En plus de l'hypothèse d'ellipticité, nous avons besoin d'une hypothèse de type récurrence. En effet, jusqu'à présent nous n'avons pas fait d'hypothèse sur les propriétés de la diffusion en dehors du domaine \mathcal{D} . En particulier, les solutions de l'équation différentielle stochastique (3.2.1) pourraient ne pas exister globalement en temps. Nous proposons de nous placer dans deux cadres différents que nous pourrions

traiter de la même manière et qui nous garantissent que l'application de Poincaré aléatoire est récurrente (voir la Proposition 3.4.1).

Pour définir les cadres dans lesquels nous nous plaçons, nous avons besoin d'introduire quelques notations. Suivant le formalisme de la théorie des grandes déviations [46], pour x^* appartenant à une des orbites périodiques Γ_i et $y \in \mathcal{D}$, nous définissons le quasi-potentiel

$$V(x^*, y) = \inf_{T>0} \inf_{\gamma: x^* \rightarrow y} I_{[0,T]}(\gamma),$$

où le second infimum est pris sur toutes les trajectoires continues γ telles que $\gamma_0 = x^*$ et $\gamma_T = y$. Rappelons que si y_1 et y_2 appartiennent à la même orbite périodique, alors les quasi-potentiels vérifient $V(x^*, y_1) = V(x^*, y_2)$. C'est une conséquence de la Remarque 1.3.9 qui nous dit que $V(y_1, y_2) = 0$ et de manière similaire $V(y_2, y_1) = 0$. Ainsi pour tout $1 \leq i \neq j \leq N$, la quantité

$$H(i, j) := V(x_i^*, x_j^*) \quad (3.2.3)$$

mesure le coût pour atteindre l'orbite périodique j partant de l'orbite périodique i en un temps arbitraire. Pour $i \notin A \subset \{1, \dots, N\}$, nous introduisons la quantité

$$H(i, A) := \min_{j \in A} H(i, j) \quad (3.2.4)$$

représentant le coût d'atteindre n'importe-quelle orbite appartenant à $\bigcup_{j \in A} \Gamma_j$.

Pour $i = 1, \dots, N$, nous notons $B_i \subset \Sigma$ la fermeture d'un voisinage de x_i^* , contenue dans un voisinage de x_i^* et de taille $\delta > 0$. Nous prenons δ suffisamment petit pour que

- chaque B_i soit contenu dans le bassin d'attraction \mathcal{A}_i de x_i^* (cf. (3.1.10)),
- l'image par l'application de Poincaré déterministe de la boule B_i est envoyée strictement dans elle-même.

Un tel voisinage B_i existe puisque l'orbite périodique Γ_i est asymptotiquement stable. Pour $1 \leq k \leq N$, nous définissons le voisinage métastable à k composantes

$$\mathcal{M}_k = \bigcup_{i=1}^k B_i.$$

Hypothèse 3.2.2 (Propriété de confinement). Une des deux situations suivantes s'applique.

- A. Soit il existe une *fonction de Lyapunov* $V \in \mathcal{C}^2(\mathcal{D}_0, \mathbb{R}_+)$ telle que $\|V(z)\| \rightarrow \infty$ pour $z \rightarrow \partial\mathcal{D}_0$ (ou pour $\|z\| \rightarrow \infty$ dans le cas où \mathcal{D}_0 n'est pas borné) qui satisfait

$$(\mathcal{L}V)(z) \leq -c + d\mathbf{1}_{\{z \in \mathcal{D}\}} \quad \forall z \in \mathcal{D}_0 \quad (3.2.5)$$

pour des constantes $c > 0$ et $d \geq 0$.

- B. Ou

$$\bar{V}(\partial\mathcal{D}) := \min_{1 \leq i \leq N} \inf_{y \in \partial\mathcal{D}} V(x_i^*, y) \geq \max_{i \neq j} H(i, j) + \theta' \quad (3.2.6)$$

pour une constante $\theta' > 0$. ♣

D'après [66, Théorème 4.2], la variante A implique que le processus $\{Z_t\}_{t \geq 0}$ est positif récurrent au sens de Harris. La notion de récurrence au sens de Harris donnée pour des chaînes de Markov dans la Définition 2.1.6 s'étend au processus à temps continu : un processus est récurrent au sens de Harris s'il existe μ une mesure σ -finie, telle que le temps d'atteinte d'un ensemble A est presque sûrement fini dès que $\mu(A) > 0$. Sous cette variante, le processus que nous étudions admet donc une unique mesure invariante π . L'hypothèse d'ellipticité 3.2.1 implique que la restriction de π à \mathcal{D} est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue. De plus, en appliquant [66, Théorème 4.3] avec $f = 1$, nous avons que le temps d'atteinte $\tau_{\mathcal{D}}$ de \mathcal{D} satisfait

$$\mathbb{E}^z\{\tau_{\mathcal{D}}\} \leq \frac{1}{c}V(z) \quad (3.2.7)$$

pour tout $z \in \mathcal{D}_0$.

Remarque 3.2.3. Si V est une forme quadratique alors nous avons $\mathcal{L}V = \langle f, \nabla V \rangle + \mathcal{O}(\sigma^2)$. Ainsi, une fonction quadratique de Lyapunov déterministe qui satisfait $\langle f, \nabla V \rangle \leq -cV$ en dehors de \mathcal{D} peut satisfaire la Condition (3.2.5) si σ est suffisamment petit. \diamond

La variante B de l'hypothèse 3.2.2 dit qu'il est encore plus difficile d'atteindre le bord $\partial\mathcal{D}$ de \mathcal{D} qu'il est difficile de faire des transitions entre les orbites périodiques stables. Si nous nous plaçons dans ce cadre, nous pourrions étudier le processus qui est conditionné à rester dans \mathcal{D} . La transformée harmonique de Doob (cf. Section 2.5) permet de faire le lien entre les propriétés spectrales du processus conditionné et celles du processus tué quand il quitte \mathcal{D} . Les deux processus (tué et conditionné) n'ont pas d'influence sur ce qui se passe en dehors de \mathcal{D} .

Quelque soit la variante dans laquelle nous nous plaçons, la Proposition 3.4.1 nous montrera que l'application de Poincaré aléatoire est récurrente au sens de Harris. Puisque l'EDO associée à (3.2.1) admet des orbites périodiques, d'après la Remarque 3.1.1 nous ne pouvons pas appliquer directement les résultats obtenus par Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayraud, et Markus Klein dans [24, 25] pour quantifier les transitions entre les orbites périodiques stables. Nous utiliserons des estimations a priori sur les transitions entre les voisinages des orbites périodiques stables en nous servant de la théorie des grandes déviations (cf. Proposition 3.4.2).

Afin de décrire le comportement du système stochastique dans le voisinage d'une orbite périodique, nous réécrivons le système dans un système de coordonnées de type polaire. Nous supposons que le système déterministe (3.1.1) admet N orbites périodiques stables et N^+ orbites périodiques instables, i.e. qu'il existe des fonctions périodiques $\gamma_i^- : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{D}$ de période respectives T_i telles que pour tout $1 \leq i \leq N$

$$\dot{\gamma}_i^-(t) = f(\gamma_i^-(t)) \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

et il existe N^+ fonctions périodiques $\gamma_i^+ : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{D}$ de période respective T_i^+ telles que pour tout $1 \leq i \leq N^+$

$$\dot{\gamma}_i^+(t) = f(\gamma_i^+(t)) \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

Nous pouvons généraliser [12, Proposition 2.1] et [12, Proposition 3.3] au cas multidimensionnel, afin de réécrire (3.2.1) en coordonnées de type polaire.

Proposition 3.2.4. *Il existe un changement de coordonnées tel que dans le voisinage d'une orbite périodique stable (i.e. pour (x, φ) avec $\|x\|$ suffisamment petit), l'EDS s'écrit sous la forme*

$$\begin{aligned} dx_t &= (-\Lambda x_t + b_x(x_t, \varphi_t))dt + \sigma g_x(x_t, \varphi_t)dW_t, \\ d\varphi_t &= \left(\frac{1}{T_i} + b_\varphi(x_t, \varphi_t) \right) dt + \sigma g_\varphi(x_t, \varphi_t)dW_t, \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

où Λ est une matrice triangulaire avec des éléments positifs sur sa diagonale correspondant aux exposants de Lyapunov de l'orbite périodique stable, et où les fonctions $b_x, b_\varphi, g_x, g_\varphi$ sont périodiques en φ de période 1, et où les termes non linéaires de dérive vérifient

$$\|b_x(x, \varphi)\| \leq M\|x\|^2, \quad |b_\varphi(x, \varphi)| \leq M\|x\|^2. \quad (3.2.9)$$

Remarquons que la matrice Λ peut être prise dans sa forme canonique de Jordan et que si le système est écrit dans ce système de coordonnées alors les voisinages B_i peuvent être des boules telles que $\{x : \|x\| \leq \delta\}$.

Dans le voisinage des orbites périodiques instables, nous obtenons un résultat analogue.

Proposition 3.2.5. *Il existe un changement de coordonnées tel que dans le voisinage d'une orbite périodique instable (i.e., pour (x, φ) tel que $\|x\|$ soit suffisamment petite), l'EDS s'écrit sous la forme*

$$\begin{aligned} dx_t &= \left(\begin{pmatrix} -\Lambda^- & 0 \\ 0 & \Lambda^+ \end{pmatrix} x_t + b_x(x_t, \varphi_t) \right) dt + \sigma g_x(x_t, \varphi_t)dW_t, \\ d\varphi_t &= \left(\frac{1}{T_i} + b_\varphi(x_t, \varphi_t) \right) dt + \sigma g_\varphi(x_t, \varphi_t)dW_t, \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

où Λ^- est une matrice triangulaire avec des éléments positifs sur sa diagonale, Λ^+ est une matrice triangulaire avec des éléments positifs ou nuls sur la diagonale et au moins un élément diagonal positif, et où les fonctions $b_x, b_\varphi, g_x, g_\varphi$ sont périodiques en φ de période 1, et où les termes non linéaires de dérivées vérifient $\|b_x(x, \varphi)\|, |b_\varphi(x, \varphi)| = \mathcal{O}(\|x\|^2)$.

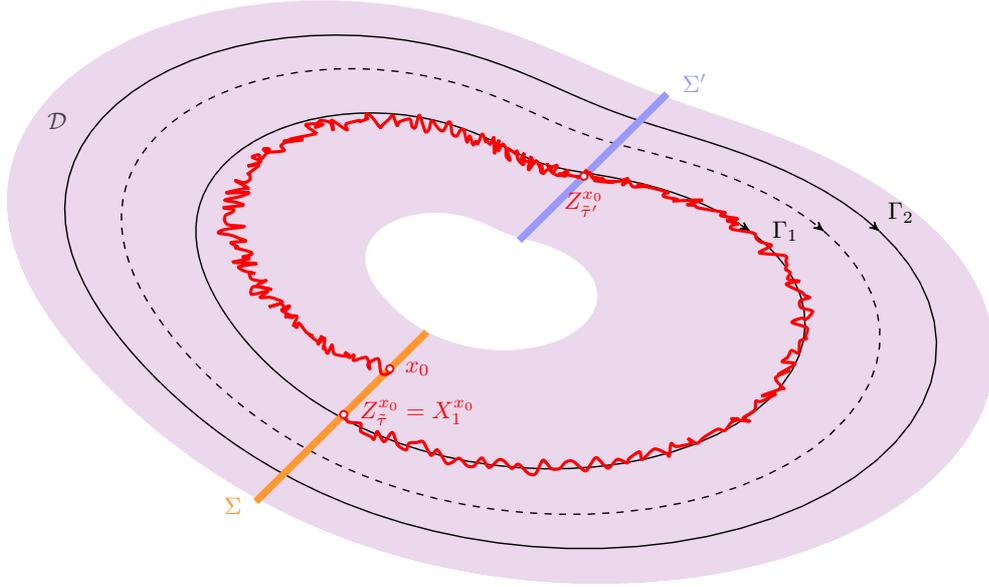


FIGURE 3.2 – Schéma d’une application de Poincaré aléatoire pour un processus commençant dans le bassin d’attraction d’une orbite périodique stable Γ_1 .

PREUVE DES PROPOSITIONS 3.2.4 ET 3.2.5. Par la formule d’Itô, le changement de variable de la Proposition 3.1.8, permet de réécrire l’équation différentielle stochastique sous la forme

$$\begin{aligned} dx_t &= f_x(x_t, \varphi_t, \sigma)dt + \sigma g_x(x_t, \varphi_t)dW_t \\ d\varphi_t &= f_\varphi(x_t, \varphi_t, \sigma)dt + \sigma g_\varphi(x_t, \varphi_t)dW_t. \end{aligned}$$

Comme mentionné dans [12], l’inconvénient avec un système écrit sous cette forme est que le terme de dérive f_x ne s’annule plus en $x = 0$. Nous pouvons utiliser un argument similaire à celui de la preuve de [12, Proposition 3.3] pour obtenir la forme désirée. \square

3.2.2 Définition de l’application de Poincaré aléatoire

Étant donnée une paramétrisation de la section Σ par une variable $x \in \mathbb{R}^d$, par un léger abus de notation, nous notons également le domaine de x par Σ . Pour une condition initiale $X_0 \in \Sigma$, nous souhaitons étudier la suite (X_1, X_2, \dots) représentant les intersections successives des trajectoires $(Z_t^{X_0})_{t \geq 0}$ sur la section Σ . Pour ce faire, nous ne pouvons procéder directement comme dans le cas stochastique. En effet, dans le cas déterministe, à cause des irrégularités du mouvement Brownien, τ défini par l’équation (3.1.9) vaut 0 presque sûrement. Nous pouvons néanmoins résoudre ce problème facilement en introduisant une seconde variété $\Sigma' \subset \mathcal{D}$ n’intersectant pas Σ , telle que $\partial\Sigma' \subset \partial\mathcal{D}$ et telle que le champ de vecteur f soit également transverse à Σ' . Posons $\tilde{\tau}_0 = 0$, et pour tout $n \in \mathbb{N}_0$ définissons les temps d’arrêt

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}'_{n+1} &= \inf\{t > \tilde{\tau}_n : Z_t^{X_0} \in \Sigma'\}, \\ \tilde{\tau}_{n+1} &= \inf\{t > \tilde{\tau}'_{n+1} : Z_t^{X_0} \in \Sigma\}, \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

les intersections successives des trajectoires $(Z_t^{X_0})_{t \geq 0}$ sur la section Σ , étant définies par X_{n+1} comme la coordonnée en x de $Z_{\tilde{\tau}_{n+1}}^{X_0} \in \Sigma$. La Figure 3.2 illustre cette construction.

Par la propriété de Markov forte, la loi de X_{n+1} étant donné X_n est indépendante de n et de X_m pour tout $m < n$, ainsi, $(X_n)_{n \geq 0}$ constitue une chaîne de Markov homogène à temps discret. Le noyau de la chaîne de Markov est donné par

$$K(x, A) = \mathbb{P}\{x_{\tilde{\tau}_1} \in A | \varphi_0 = 0, x_0 = x\} \quad (3.2.12)$$

Nous notons $K(x, dy)$ le noyau défini par (3.2.12). Remarquons que la variable y représente le point de première sortie d’un domaine borné (puisque Σ est borné). En analyse harmonique, $K(x, dy)$ correspond

à la mesure harmonique pour le générateur de la diffusion (3.2.2). Les travaux de Gérard Ben Arous, Shigeo Kusuoka, et Daniel W. Stroock [6] montrent sous des hypothèses plus faibles que le cadre dans lequel nous nous sommes placés (i.e. dans le cas de diffusions hypoelliptiques), la mesure harmonique admet une densité régulière $k(x, y)$ pour la mesure de Lebesgue. Ainsi, la chaîne de Markov $(X_n)_n$ à temps discret et espace continu, définie par le noyau K admet une densité lisse donnée pour tout $x \in \Sigma$ et pour tout borélien $A \subset \Sigma$ par

$$K(x, A) = \mathbb{P}^x \{X_1 \in A\} = \int_A k(x, y) dy \quad (3.2.13)$$

Nous pourrions donc appliquer les résultats du Chapitre 2 pour étudier les propriétés spectrales de ce noyau. Ce sera fait dans les deux prochains chapitres.

De plus, la mesure harmonique $x \mapsto K(x, dy)$ satisfait $\mathcal{L}K = 0$ où \mathcal{L} désigne le générateur infinitésimal de l'EDS (3.2.2). Nous pouvons donc obtenir des propriétés de régularités de ce noyau en utilisant les propriétés de régularités du générateur infinitésimal grâce à la théorie développée pour les opérateurs elliptiques d'ordre deux. En particulier les inégalités de Harnack sont un outil utile pour étudier les fonctions harmoniques. Les deux lemmes qui suivent sont une adaptation de [48, Corollaire 9.25 et 9.24] et ont été repris dans [12, Lemme 5.7 et 5.8].

Lemme 3.2.6 ([12, Lemma 5.7]). *Pour tout ensemble \mathcal{D}_1 dont la fermeture satisfait $\bar{\mathcal{D}}_1 \subset \mathcal{D}$, il existe une constante C , indépendante de σ , telle que*

$$\frac{\sup_{x \in \mathcal{D}_1 \cap \Sigma} k(x, y)}{\inf_{x \in \mathcal{D}_1 \cap \Sigma} k(x, y)} \leq e^{C/\sigma^2}$$

pour tout $y \in \partial D$.

Lemme 3.2.7 ([12, Lemma 5.8]). *Soit $\mathcal{B}_r(x)$ la boule de rayon r centrée en x , et soit \mathcal{D}_1 un ensemble dont la fermeture satisfait $\bar{\mathcal{D}}_1 \subset \mathcal{D}$. Alors pour tout $x_0 \in \mathcal{D}_1, y \in \partial \mathcal{D}$, et $\eta > 0$, nous pouvons trouver une constante $r = r(y, \eta)$, indépendante de σ , telle que*

$$\sup_{x \in \mathcal{B}_{r\sigma^2}(x_0) \cap \Sigma} k(x, y) \leq (1 + \eta) \inf_{x \in \mathcal{B}_{r\sigma^2}(x_0) \cap \Sigma} k(x, y) .$$

3.3 Dynamique dans le voisinage des orbites périodiques

3.3.1 Généralités sur les estimations des trajectoires

Dans cette section, $\|x\|$ correspond à la norme euclidienne de x . Nous considérons le système en temps continu dans le voisinage d'une orbite périodique dans le système de coordonnées de type polaire. Il est décrit soit par (3.2.8) pour une orbite périodique stable, soit par (3.2.10) dans le cas d'une orbite périodique instable.

Nous commençons par montrer que la variable de type angulaire φ_t s'éloigne peu de t/T_i (ou t/T_i^+) même sur des échelles de temps assez longues. Ce résultat est énoncé dans [12, Proposition 6.3] pour un système en dimension deux, et se généralise sans difficulté. Soient T, H deux constantes strictement positives, nous introduisons les temps d'arrêt

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_H &= \inf\{t > 0 : \|x_t\| \geq H\} , \\ \tilde{\tau}_\varphi &= \inf\left\{t > 0 : \left|\varphi_t - \frac{t}{T_i}\right| \geq M\left(H^2 t + \sqrt{H^3 T}\right)\right\} , \end{aligned}$$

où M est un majorant vérifiant les inéquations (3.2.9) sur les termes de dérivées non linéaires.

Proposition 3.3.1 (Contrôle de la diffusion le long de la variable angulaire φ). *Il existe une constante C_1 , ne dépendant que des constantes d'ellipticité des termes de diffusion telle que pour tout $T, \sigma, H > 0$ et pour tout x tel que $\|x\| < H$,*

$$\mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_\varphi < \tilde{\tau}_H \wedge T\} \leq e^{-H/(C_1\sigma^2)} .$$

Grâce au contrôle de la diffusion le long de la variable angulaire, nous pouvons estimer les probabilités de s'échapper du voisinage métastable B_i .

Proposition 3.3.2. *Il existe des constantes $C > 0$ et $\kappa > 0$ telles que pour tout $x \in B_i \subset \mathcal{M}_k$,*

$$\mathbb{P}^x \{X_1 \notin \mathcal{M}_k\} \leq C e^{-\kappa|B_i|/\sigma^2},$$

où $|B_i|$ correspond au rayon de la boule B_i .

Démonstration. Soit $x_0 \in B_i$, alors pour toute condition initiale $(x_0, 0)$,

$$\mathbb{P}^{x_0} \{X_1 \notin \mathcal{M}_k\} \leq \mathbb{P}\{\|x_{\tilde{\tau}_1}^{(x_0,0)}\| > |B_i|\}, \quad (3.3.1)$$

où $\tilde{\tau}_1$ désigne le temps de premier retour de l'application de Poincaré, cf. (3.2.11). Nous introduisons une seconde trajectoire couplée à la première qui a pour condition initiale la i -ème orbite périodique stable i.e. commençant au point $(0, 0)$. Le couplage signifie que les deux trajectoires sont issues du même mouvement Brownien. Nous utilisons une borne supérieure sur la probabilité que ces deux trajectoires ne s'approchent pas l'une de l'autre exponentiellement vite pour obtenir la borne supérieure (3.3.1) et une borne supérieure sur la probabilité que la trajectoire partant du point $(0, 0)$ quitte le voisinage de l'orbite périodique stable. En particulier, par l'inégalité triangulaire, pour tout $\varrho \in]0, 1[$,

$$\mathbb{P}\{\|x_{\tilde{\tau}_1}^{(x_0,0)}\| > |B_i|\} \leq \mathbb{P}\{\|x_{\tilde{\tau}_1}^{(0,0)}\| > (1 - \varrho)|B_i|\} + \mathbb{P}\{\|x_{\tilde{\tau}_1}^{(x_0,0)} - x_{\tilde{\tau}_1}^{(0,0)}\| > \varrho|B_i|\}. \quad (3.3.2)$$

En adaptant [12, Proposition 6.12], nous obtenons l'existence de constantes $c_0 > 0$ et $\varrho < 1$ telles que le second membre du terme de droite, est majoré par

$$\mathbb{P}\{\|x_{\tilde{\tau}_1}^{(x_0,0)} - x_{\tilde{\tau}_1}^{(0,0)}\| > \varrho|B_i|\} \leq e^{-c_0|B_i|/\sigma^2}.$$

Afin de pouvoir utiliser la Proposition 3.3.1 pour majorer le premier terme du membre de droite de (3.3.2), nous décomposons

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\|x_{\tilde{\tau}_1}^{(0,0)}\| > (1 - \varrho)|B_i|\} &\leq \mathbb{P}\{\|x_{\tilde{\tau}_1}^{(0,0)}\| > (1 - \varrho)|B_i|, \tilde{\tau}_\varphi > \tilde{\tau}_H \wedge T\} \\ &\quad + \mathbb{P}^{(0,0)}\{\tilde{\tau}_\varphi < \tilde{\tau}_H \wedge T\}, \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

et nous prenons $T = 2T_i$ et $H = (1 - \varrho)|B_i|$. Remarquons que la solution de (3.2.8) ayant pour condition initiale $(0, 0)$ peut se réécrire sous la forme

$$x_t^{(0,0)} = \int_0^t e^{-\Lambda(t-s)} b_x(x_s^{(0,0)}, \varphi_s^{(0,0)}) ds + \sigma \int_0^t e^{-\Lambda(t-s)} g_x(x_s^{(0,0)}, \varphi_s^{(0,0)}) dW_s.$$

Nous pouvons ainsi majorer le premier terme du membre de droite de (3.3.3). En effet, sur $\{\tilde{\tau}_\varphi > \tilde{\tau}_H \wedge T\}$, nous avons $\tilde{\tau}_1 < 2T_i$ et donc

$$\mathbb{P}\{\|x_{\tilde{\tau}_1}^{(0,0)}\| > (1 - \varrho)|B_i|, \tilde{\tau}_\varphi > \tilde{\tau}_H \wedge T\} \leq \mathbb{P}\left\{\sup_{0 \leq s \leq 2T_i} \|x_s^{(0,0)}\| > (1 - \varrho)|B_i|\right\}.$$

En utilisant une inégalité de type Bernstein et une partition de l'intervalle $[0, 2T_i]$, comme dans [11, Théorème 5.1.18] ou [14, Proposition 3.3], nous pouvons affirmer qu'il existe des constantes $C_0, \kappa_0 > 0$ telles que

$$\mathbb{P}\left\{\sup_{0 \leq s \leq 2T_i} \|x_s^{(0,0)}\| \geq (1 - \varrho)|B_i|\right\} \leq C_0 e^{-\kappa_0|B_i|/\sigma^2}.$$

Grâce à la Proposition 3.3.1 nous pouvons majorer le second terme du membre de droite de (3.3.3), et obtenons ainsi le résultat. \square

Nous nous intéressons maintenant à la probabilité de rester proche d'une orbite périodique instable. Nous introduisons

- $\mathcal{U} \subset \Sigma$ l'union des voisinages de taille δ (pour la norme euclidienne) des orbites périodiques instables, avec δ d'ordre 1,

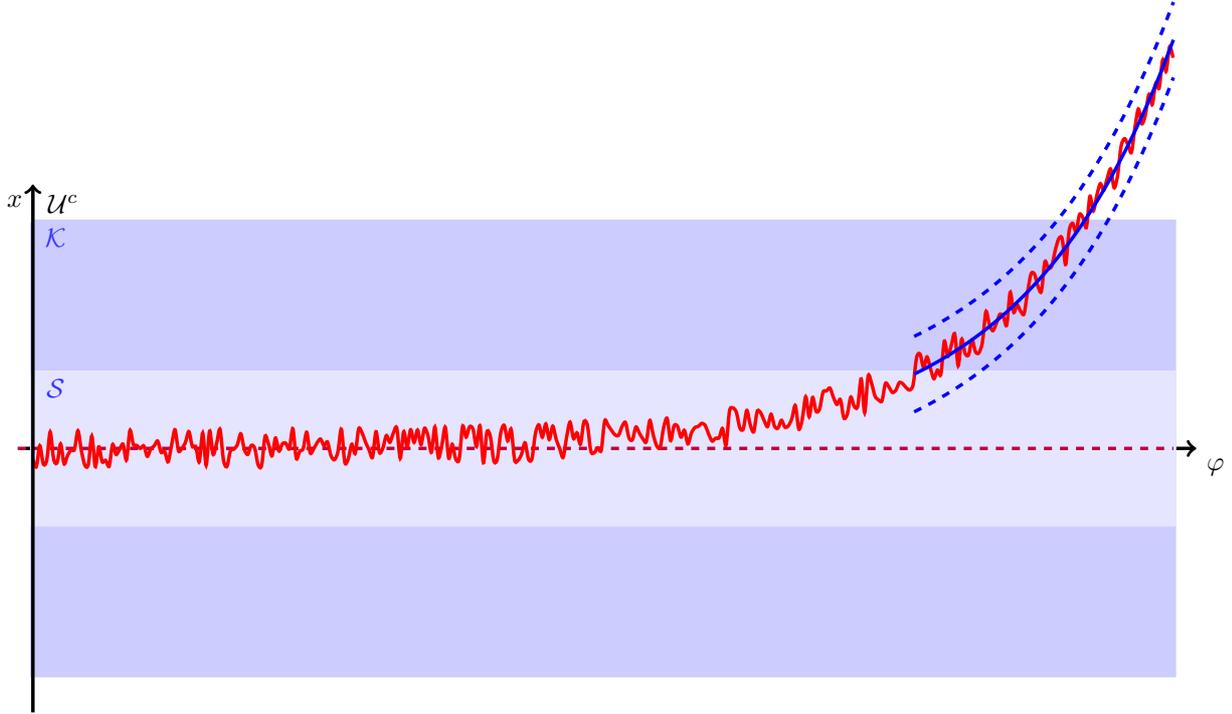


FIGURE 3.3 – Schéma de principe du comportement d'une trajectoire dans le voisinage $\mathcal{U} = \mathcal{K} \cup \mathcal{S}$ d'une orbite périodique instable dans le système de coordonnée (φ, x) . L'orbite périodique instable est représentée par la ligne discontinue.

- et $\mathcal{S} \subset \mathcal{U}$ l'union des voisinages de taille $h := \sigma^{3/4}$ des orbites périodiques instables. La constante $3/4$ est une constante arbitraire, nous aurions pu prendre une autre constante comprise entre $1/2$ et 1 .

Proposition 3.3.3. *Soit le temps d'arrêt*

$$\tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} = \inf\{t > 0 : \|x_t\| = h\}.$$

avec $h = \sigma^{3/4}$. Il existe des constantes c_2 et C_2 telles que pour tout x tel que $\|x\| < h$ et $c_2 \log(\sigma^{-1}) < T \leq 1/h$,

$$\mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} > T, \tilde{\tau}_\varphi > \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T\} \leq C_2 \log(\sigma^{-1}). \quad (3.3.4)$$

Démonstration. Nous regroupons sous le vecteur x^+ , toutes les coordonnées ayant un exposant de Lyapunov positif et nous introduisons le temps d'arrêt

$$\tilde{\tau}_{h^+} = \inf\{t > 0 : \|x_t^+\| = h\}.$$

Nous pouvons majorer grossièrement

$$\mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} > T, \tilde{\tau}_\varphi > \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T\} \leq \mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{h^+} > T, \tilde{\tau}_\varphi > \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T\}.$$

Puisque sur $\{\tilde{\tau}_\varphi > \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T\}$, la variable angulaire φ_t est proche de t/T_i , l'équation pour x_t^+ se réécrit

$$dx_t^+ = (\Lambda^+ x_t^+ + b_{x^+}(x_t, \varphi_t)) dt + \sigma(g_0(t) + g_1(x_t, \varphi_t, t)) dW_t$$

où $g_0(t) = g_{x^+}(0, t/T_i)$ et $g_1 = \mathcal{O}(\|x\| + h)$. La solution a pour expression

$$x_t^+ = e^{\Lambda^+ t} \left\{ \sigma \int_0^t e^{-\Lambda^+ s} g_0(s) dW_s + \sigma \int_0^t e^{-\Lambda^+ s} g_1(x_s, \varphi_s, s) dW_s + \int_0^t e^{-\Lambda^+ s} b_{x^+}(x_s, \varphi_s) ds \right\}.$$

La preuve est alors similaire à celle de [11, Théorème 3.2.2] avec $c_2 = 1/[4 \max(\text{diag } \Lambda^+)]$. \square

Notons l'ensemble $\mathcal{U} \setminus \mathcal{S}$ par \mathcal{K} .

Proposition 3.3.4. *Soit $\tilde{\tau}_{\mathcal{K}^c} = \inf\{t > 0 : x_t \notin \mathcal{K}\}$. Il existe une constante $\kappa_2 > 0$ telle que pour toute condition initiale $(x, 0) \in \mathcal{K}$,*

$$\mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\mathcal{K}^c} > t\} \leq e^{-\kappa_2 t / \log(\sigma^{-1})}. \quad (3.3.5)$$

De plus, si $\tilde{\tau}_{\mathcal{U}^c} := \inf\{t > 0 : x_t \notin \mathcal{U}\}$ et $\tilde{\tau}_{\mathcal{S}} := \inf\{t > 0 : x_t \in \mathcal{S}\}$, alors pour tout $T_0 > 0$ il existe une constante $\kappa_3 > 0$ telle que

$$\mathbb{P}^{(x,0)}\{T_0 \leq \tilde{\tau}_{\mathcal{S}} < \tilde{\tau}_{\mathcal{U}^c}\} \leq e^{-\kappa_3 / \sigma^{1/2}}. \quad (3.3.6)$$

Démonstration. Pour commencer, remarquons que $\{\tilde{\tau}_{\mathcal{K}^c} > t\} \subset \{\|x_T^+\| < \delta\}$. Supposons que l'orbite périodique instable admet m^+ composantes avec des exposants de Lyapunov positifs. Nous introduisons la fonction de Lyapunov

$$U_t = \sum_{i=1}^{m^+} (x_{t,i}^+)^2.$$

Grâce à la formule d'Itô, nous obtenons

$$dU_t = \left\{ \sum_{i=1}^{m^+} \lambda_i^+ (x_{t,i}^+)^2 + \beta(x_t, \varphi_t) \right\} dt + \sigma \sum_{i=1}^{m^+} g_{x,i}(x_t, \varphi_t) dW_t^i$$

où la fonction $\beta(x_t, \varphi_t) \leq M((U_t)^{3/2} + \sigma^2)$. La preuve est alors similaire à la preuve de [13, Proposition D.4]. En effet, le terme de diffusion est minoré par une constante multiplié par U_t , et $\{\|x_T^+\| < \delta\} \subset \{U_T < m^+ \delta^2 / 2\}$. En utilisant la propriété de Markov à des temps multiples de $\log(\sigma^{-1})$, nous obtenons (3.3.5). L'estimation (3.3.6) est obtenue de la même manière que dans la preuve de [13, Proposition D.7] i.e. en majorant la probabilité que U_t quitte un voisinage de taille $\sigma^{3/4}$. \square

Proposition 3.3.5. *Pour tout $x \in (\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c$, il existe des constantes $C_1, \kappa_1 > 0$ telles que*

$$\mathbb{P}^x\{\tau_{\mathcal{U}}^+ < \tau_{\mathcal{M}_N}^+\} \leq C_1 e^{-\kappa_1 / \sigma^2}.$$

Démonstration. Soit $z_t^{\det} = (x_t^{\det}, \varphi_t^{\det})$ une solution de l'équation différentielle ordinaire avec comme condition initiale $z_0 = (x, 0)$. Puisque $\partial\mathcal{U}$ est à une distance d'ordre 1 de toutes les orbites périodiques instables, et puisque les orbites périodiques stables sont les seuls ensembles limites (cf. Hypothèse 3.1.9), z_t^{\det} va atteindre le voisinage d'une orbite périodique stable en un temps T d'ordre 1. En utilisant [11, Théorème 5.1.18], nous obtenons que pour $t \geq 0$,

$$\mathbb{P}^{(x,0)}\left\{ \sup_{0 \leq s \leq t} \|z_s - z_s^{\det}\| > h_0 \right\} \leq C_0(1+t) e^{-\kappa_0 h_0^2 / \sigma^2} \quad (3.3.7)$$

pour des constantes $C_0, \kappa_0 > 0$. Remarquons que l'estimation est vraie pour $h_0 \leq h_1 / \chi(t)$, avec h_1 une autre constante et $\chi(t)$ dépend des exposants de Lyapunov de z_t^{\det} . Puisque la solution déterministe z_t^{\det} est attirée par l'orbite périodique, il existe une constante $M_0 > 0$ telle que $\chi(T) \leq 1 + M_0 T$. En appliquant (3.3.7) pour $h_0 = |B_i|/2$, il vient que toutes trajectoires qui n'atteignent pas \mathcal{U} avant le temps T vont toucher B_i avec une grande probabilité. \square

3.3.2 Estimation des espérances de temps de retour

Les deux lemmes qui suivent sont très généraux. Ils nous seront utiles pour majorer les espérances des temps de retour.

Lemme 3.3.6. *Pour tout borélien non vide $A \subset \Sigma$, pour tout $n_0 \in \mathbb{N}$ et toute condition initiale $x \in \Sigma$, l'espérance du temps de premier retour dans A satisfait*

$$\mathbb{E}^x\{\tau_A^+\} \leq \frac{n_0}{1 - \mathbb{P}^{A^c}\{\tau_A^+ \geq n_0\}}.$$

Démonstration. La propriété de Markov permet de décomposer l'espérance

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^x \{ \tau_A^+ \} &= \sum_{i \geq 0} \sum_{n=1}^{n_0} \mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ \geq in_0 + n \} \\ &\leq n_0 \sum_{i \geq 0} \mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ \geq in_0 \} \\ &\leq n_0 \sum_{i \geq 0} \left(\mathbb{P}^{A^c} \{ \tau_A^+ \geq n_0 \} \right)^i. \end{aligned}$$

Le résultat est obtenu en sommant les termes de la suite géométrique. Nous rappelons que la notation $\mathbb{P}^{A^c} \{ \cdot \}$ désigne la borne supérieure $\sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x \{ \cdot \}$, elle a été introduite par (2.2.1). \square

Le second lemme général est inspiré de résultats issus de [18].

Lemme 3.3.7. *Pour tous boréliens non vides et deux à deux disjoints $A, B, C \subset \Sigma$,*

$$\mathbb{E}^A \{ \tau_B^+ \} \leq \mathbb{E}^A \{ \tau_{B \cup C}^+ \} + \mathbb{P}^A \{ \tau_C^+ < \tau_B^+ \} \mathbb{E}^C \{ \tau_B^+ \}.$$

Démonstration. En décomposant l'espérance en fonction des événements $\{ \tau_B^+ < \tau_C^+ \}$ ou $\{ \tau_C^+ < \tau_B^+ \}$ et en utilisant la propriété de Markov forte, nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^x \{ \tau_B^+ \} &= \mathbb{E}^x \left\{ \tau_B^+ \mathbb{1}_{\{ \tau_B^+ < \tau_C^+ \}} \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ \tau_B^+ \mathbb{1}_{\{ \tau_C^+ < \tau_B^+ \}} \right\} \\ &= \mathbb{E}^x \left\{ \tau_B^+ \mathbb{1}_{\{ \tau_B^+ < \tau_C^+ \}} \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ [(\tau_B^+ - \tau_C^+) + \tau_C^+] \mathbb{1}_{\{ \tau_C^+ < \tau_B^+ \}} \right\} \\ &= \mathbb{E}^x \{ \tau_{B \cup C}^+ \} + \mathbb{E}^x \left\{ (\tau_B^+ - \tau_C^+) \mathbb{1}_{\{ \tau_C^+ < \tau_B^+ \}} \right\} \\ &\leq \mathbb{E}^x \{ \tau_{B \cup C}^+ \} + \mathbb{P}^A \{ \tau_C^+ < \tau_B^+ \} \mathbb{E}^C \{ \tau_B^+ \}, \end{aligned}$$

ce qui nous donne le résultat en prenant la borne supérieure pour $x \in A$. Nous rappelons que la notation $\mathbb{E}^C \{ \cdot \}$ désigne la borne supérieure $\sup_{x \in C} \mathbb{E}^x \{ \cdot \}$, elle a été introduite par (2.2.1). \square

Corollaire 3.3.8. *Soit \mathcal{U} l'union des voisinages des orbites périodiques instables défini dans la Section 3.3.1, alors*

$$\mathbb{E}^{\mathcal{M}_N^c} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \leq \frac{\mathbb{E}^{\mathcal{U}} \{ \tau_{\mathcal{U}^c}^+ \} + \mathbb{E}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N}^+ \}}{1 - \mathbb{P}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{U}}^+ < \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \}}. \quad (3.3.8)$$

Démonstration. Pour tout $x \in \mathcal{M}_N^c$,

$$\mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \leq \max \left\{ \mathbb{E}^{\mathcal{U}} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \}, \mathbb{E}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \right\}.$$

En appliquant le Lemme 3.3.7 avec $A = \mathcal{U}$, $B = \mathcal{M}_N$ et $C = (\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c$, nous obtenons

$$\mathbb{E}^{\mathcal{U}} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \leq \mathbb{E}^{\mathcal{U}} \{ \tau_{\mathcal{U}^c}^+ \} + \mathbb{E}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \},$$

tandis qu'en prenant $A = (\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c$, $B = \mathcal{M}_N$ et $C = \mathcal{U}$, nous obtenons

$$\mathbb{E}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \leq \mathbb{E}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{M}_N \cup \mathcal{U}}^+ \} + \mathbb{P}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{U}}^+ < \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \mathbb{E}^{\mathcal{U}} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \}.$$

Ces deux bornes supérieures permettent de majorer

$$\mathbb{E}^{\mathcal{U}} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \leq \mathbb{E}^{\mathcal{U}} \{ \tau_{\mathcal{U}^c}^+ \} + \mathbb{E}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{M}_N \cup \mathcal{U}}^+ \} + \mathbb{P}^{(\mathcal{U} \cup \mathcal{M}_N)^c} \{ \tau_{\mathcal{U}}^+ < \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \mathbb{E}^{\mathcal{U}} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \},$$

ce qui conduit à (3.3.8). \square

Afin de majorer l'espérance $\mathbb{E}^{\mathcal{U}}\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\}$, nous utilisons de nouveau le Lemme 3.3.7 avec les deux voisinages d'ordre $h = \sigma^{3/4}$ et d'ordre 1 d'une orbite périodique instable. Dans un premier temps, nous montrons que les trajectoires ont tendance à quitter le voisinage \mathcal{S} de l'orbite périodique instable (voisinage de taille $h = \sigma^{3/4}$). Dès que les trajectoires ont quitté ce voisinage, le terme de dérive va contribuer à ce que les trajectoires quittent un voisinage plus grand i.e. d'ordre 1. En utilisant un argument similaire à celui utilisé dans la preuve du Corollaire 3.3.8, nous obtenons une borne supérieure pour l'espérance du temps de sortie de \mathcal{U} .

Lemme 3.3.9. *Soient $\mathcal{S} \subset \mathcal{U}$ et $\mathcal{K} = \mathcal{U} \setminus \mathcal{S}$, définis comme dans la Section 3.3.1.*

Pour tout $x \in \mathcal{U}$,

$$\mathbb{E}^x\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\} \leq \frac{\mathbb{E}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{K}^c}^+\} + \mathbb{E}^{\mathcal{S}}\{\tau_{\mathcal{S}^c}^+\}}{1 - \mathbb{P}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{S}}^+ < \tau_{\mathcal{U}^c}^+\}}. \quad (3.3.9)$$

Démonstration. Comme pour le Corollaire 3.3.8, pour tout $x \in \mathcal{U} = \mathcal{S} \cup \mathcal{K}$, nous majorons

$$\mathbb{E}^x\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\} \leq \max(\mathbb{E}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\}, \mathbb{E}^{\mathcal{S}}\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\}).$$

en appliquant le Lemme 3.3.7, avec $A = \mathcal{K}$, $B = \mathcal{U}^c$, $C = \mathcal{S}$,

$$\mathbb{E}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\} \leq \mathbb{E}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{K}^c}^+\} + \mathbb{P}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{S}}^+ < \tau_{\mathcal{U}^c}^+\} \mathbb{E}^{\mathcal{S}}\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\}.$$

Tandis qu'appliquant le Lemme 3.3.7, avec $A = \mathcal{S}$, $B = \mathcal{U}^c$, $C = \mathcal{K}$, nous majorons grossièrement

$$\mathbb{E}^{\mathcal{S}}\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\} \leq \mathbb{E}^{\mathcal{S}}\{\tau_{\mathcal{S}^c}^+\} + \mathbb{E}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{U}^c}^+\}.$$

Nous obtenons alors le résultat en combinant ces deux bornes, □

Les espérances du membre de droite de (3.3.9) vont être majorées en utilisant le Lemme 3.3.6 et les résultats de la Section 3.3.1.

Proposition 3.3.10. *Il existe des constantes $M_1, \kappa > 0$ telles que*

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^{\mathcal{S}}\{\tau_{\mathcal{S}^c}^+\} &\leq M_1 \log(\sigma^{-1}), \\ \mathbb{E}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{K}^c}^+\} &\leq M_1 \log(\sigma^{-1}), \\ \mathbb{P}^{\mathcal{K}}\{\tau_{\mathcal{S}}^+ < \tau_{\mathcal{U}^c}^+\} &\leq e^{-\kappa/\sigma^{1/2}}. \end{aligned}$$

Démonstration. Rappelons que $\tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} = \{\inf t > 0 : \|x_t\| \geq h\}$, et soit $n_0 > T/T_i + \sigma^{3/4}$, avec $c_2 \log(\sigma^{-1}) < T \leq 1/\sigma^{3/4}$ où c_2 est une constante numérique indépendante de σ , $c_2 = 1/[4 \max(\text{diag } \Lambda^+)]$. Pour tout $x \in \mathcal{S}$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^x\{\tau_{\mathcal{S}^c}^+ > n_0\} &\leq \mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\varphi} < \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T\} + \mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\varphi} > \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T, \tau_{\mathcal{S}^c}^+ > n_0\} \\ &\leq \mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\varphi} < \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T\} + \mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\varphi} > \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T, \tau_{\mathcal{S}^c}^+ > n_0, \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} < T\} \\ &\quad + \mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\varphi} > \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T, \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} > T\}. \end{aligned}$$

Cependant puisque $n_0 > T/T_i + \sigma^{3/4}$,

$$\mathbb{P}^{(x,0)}\{\tilde{\tau}_{\varphi} > \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} \wedge T, \tau_{\mathcal{S}^c}^+ > n_0, \tilde{\tau}_{\mathcal{S}^c} < T\} = 0.$$

Nous obtenons une borne supérieure sur $\mathbb{E}^{\mathcal{S}}\{\tau_{\mathcal{S}^c}^+\}$ en utilisant (3.3.4) et en appliquant le Lemme 3.3.6. Les deux autres majorants s'obtiennent de façon similaire en utilisant la Proposition 3.3.4. □

Nous rassemblons ces trois derniers résultats avec la Proposition 3.3.5 pour obtenir le résultat suivant.

Corollaire 3.3.11. *Il existe une constante $M_3 > 0$ telle que*

$$\mathbb{E}^{\mathcal{M}_N^s}\{\tau_{\mathcal{M}_N}^+\} \leq M_3 \log(\sigma^{-1}). \quad (3.3.10)$$

Nous allons maintenant estimer l'espérance du temps de retour dans \mathcal{M}_k pour tout k . En faisant un raisonnement par récurrence pour des valeurs décroissantes de k ($1 \leq k \leq N$), nous pouvons montrer que pour tout $x \in \mathcal{M}_k$, l'espérance $\mathbb{E}^x\{\tau_{\mathcal{M}_k}^+\}$ est exponentiellement proche de 1.

Nous commençons par montrer l'initialisation i.e. pour $k = N$.

Lemme 3.3.12. *Pour tout $x \in \mathcal{M}_N$, l'espérance du temps de premier retour dans \mathcal{M}_N satisfait*

$$\mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \leq 1 + \mathbb{P}^x \{ X_1 \notin \mathcal{M}_N \} \mathbb{E}^{\mathcal{M}_N^c} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \}.$$

Démonstration. En décomposant l'espérance suivant la position du premier point X_1 , nous avons

$$\mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \} \leq 1 + \mathbb{P}^x \{ X_1 \notin \mathcal{M}_N \} \mathbb{E}^{\mathcal{M}_N^c} \{ \tau_{\mathcal{M}_N}^+ \}.$$

□

Lemme 3.3.13. *Pour tout $k < N$, pour tout $x \in B_i \subset \mathcal{M}_k$,*

$$\mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ \} \leq \mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ \} + \mathbb{P}^x \{ \tau_{B_{k+1}}^+ < \tau_{\mathcal{M}_k}^+ \} \mathbb{E}^{B_{k+1}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ \}.$$

Démonstration. La preuve est une application directe du Lemme 3.3.7 avec $A = B_i$, $B = \mathcal{M}_k$ et $C = B_{k+1}$. □

Grâce à ces deux lemmes et grâce au Corolaire 3.3.11 et à la Proposition 3.3.2 nous obtenons bien que $\mathbb{E}^{\mathcal{M}_k} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ \} = 1 + \mathcal{O}(e^{-\kappa/\sigma^2})$ pour tout k , avec la constante $\kappa > 0$ qui est proportionnelle à taille des voisinages B_i .

3.3.3 Argument de couplage

Comme le montre la Proposition 2.4.8, un argument de couplage nous permet d'estimer la constante de positivité uniforme du noyau de transition d'une chaîne de Markov (tué) quand elle quitte un ensemble. Nous allons montrer que deux trajectoires, commençant dans le voisinage d'une orbite périodique stable avec des conditions initiales différentes, se contractent lorsqu'elles sont issues du même mouvement brownien. Cet argument est inspiré de [12].

Proposition 3.3.14 ([12, Proposition 6.12]). *Il existe des constantes $C, \kappa > 0$ et une constante $\varrho < 1$, indépendante de σ telles que pour $x_1, x_2 \in B_i$,*

$$\mathbb{P} \{ \|X_n^{x_1} - X_n^{x_2}\| > \varrho^n \|x_1 - x_2\| \} \leq C e^{-\kappa/\sigma^2}.$$

La preuve est une généralisation directe de la preuve de la [12, Proposition 6.12] pour des systèmes de dimension $d > 2$. Comme expliqué dans [12, Section 6.3], le temps d'arrêt N introduit dans (2.4.13) satisfait $\mathbb{P}\{N > n_0\} \leq n_0 e^{-\kappa/\sigma^2}$ pour tout n_0 d'ordre $\log(\sigma^{-1})$. En utilisant la propriété de Markov pour des temps multiples de n_0 , il vient

$$\rho_{kn_0} = \mathbb{P}\{N > kn_0\} \leq (M \log(\sigma^{-1}) e^{-\kappa/\sigma^2})^k.$$

Nous pouvons alors choisir la constante k de façon à ce que $k\kappa > C + 1$ dans (2.4.14), nous obtenons ainsi une constante de positivité uniforme $L(n)$ proche de 1 (pour σ proche de 0).

3.4 Propriétés des applications de Poincaré aléatoires

3.4.1 Récurrence des applications de Poincaré aléatoires

Proposition 3.4.1. *Soit $\tau_\Sigma = \inf\{t > 0: Z_t \in \Sigma\}$. Il existe des constantes $\sigma_0, M > 0$ telles que pour $\sigma < \sigma_0$,*

$$\sup_{z \in \mathcal{D}} \mathbb{E}^z \{ \tau_\Sigma \} \leq M \log(\sigma^{-1}).$$

Démonstration. Nous distinguons plusieurs cas selon la position de la condition initiale.

Si la condition initiale z est dans le bassin d'attraction d'une des orbites périodiques stables, un argument analogue à celui de la Proposition 3.3.5 montre que Z_t va atteindre Σ dans un temps d'ordre 1 avec grande probabilité, ainsi $\mathbb{P}^z \{ \tau_\Sigma > 2T \}$ est exponentiellement petite.

Si z est dans le voisinage des orbites périodiques stables, les résultats de la Section 3.3.2 montrent que Z_t va quitter ce voisinage dans un temps moyen d'ordre $\log(\sigma^{-1})$.

L'ordre de grandeur du temps moyen de sortie est le même si z est dans le voisinage d'un point d'équilibre instable, comme montré dans [59, 4, 1].

En combinant ces résultats avec la propriété de Markov forte et (3.2.7) nous obtenons le résultat. □

3.4.2 Estimations a priori par la théorie des grandes déviations

Nous rappelons que $H(i, j)$ mesure le coût pour atteindre l'orbite périodique j partant de l'orbite périodique i en un temps arbitraire (cf. (3.2.3)) et pour $i \notin A \subset \{1, \dots, N\}$, $H(i, A)$ représente le coût d'atteindre n'importe-quelle orbite appartenant à $\bigcup_{j \in A} \Gamma_j$ (cf. (3.2.4)).

Proposition 3.4.2. *Pour tout $\eta > 0$, il existe une constante $\delta_0 > 0$ telle que si $\delta < \delta_0$, alors pour tout $1 \leq i, j \leq N$ avec $i \neq j$, et pour tout ensemble non vide $A \subset \mathcal{A}_j$ et pour tout $x \in B_i$, nous avons*

$$-H(i, j) - \eta \leq \lim_{\sigma \rightarrow 0} \sigma^2 \log \mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ < \tau_{B_i}^+ \} \leq -H(i, j) + \eta.$$

Cet encadrement permet de dire que pour $x \in B_i$ et pour $A \subset \mathcal{A}_j$, le committé $\mathbb{P}^x \{ \tau_A^+ < \tau_{B_i}^+ \}$ est exponentiellement petit d'ordre $e^{-H(i, j)/\sigma^2}$.

PREUVE DE LA PROPOSITION 3.4.2. Soient deux points $x, y \in \Sigma$, le principe de grande déviation en temps continu génère naturellement un principe de grande déviation en temps discret avec la même vitesse et la fonction de taux

$$J(x, y) = \inf_{T > 0} \inf_{\gamma: (x, 0) \rightarrow (y, 1)} I_{[0, T]}(\gamma),$$

avec la notation $\gamma : (x, 0) \rightarrow (y, 1)$ qui signifie que les trajectoires que nous considérons intersectent la section Σ' entre les points x et y . Ce résultat est une application du principe de contraction. Plus généralement, pour toute suite de points (x_0, \dots, x_n) dans Σ , la fonction de taux est donnée par $J(x_0, \dots, x_n) = \sum_{j=0}^{n-1} J(x_j, x_{j+1})$. Puisque $V(x_i^*, x_j^*) = H(i, j)$, pour tout $\eta > 0$, il existe une constante $T > 0$ et une trajectoire en temps continu γ reliant les deux orbites périodiques en un temps T telles que

$$I_{[0, T]}(\gamma) \leq H(i, j) + \frac{\eta}{2}.$$

En prenant si nécessaire une valeur de T plus grande, nous pouvons supposer que γ commence et finit sur la section Σ , puisque le coût le long du flot déterministe est nul. De plus, il existe une constante $\delta > 0$ telle que si les voisinages B_i, B_j ont un rayon δ , ils peuvent être reliés par une trajectoire γ dont la fonction de taux satisfait $I_{[0, T]}(\gamma) \leq H(i, j) + \eta$. Nous pouvons supposer que γ intersecte $B_i \cup B_j$ seulement à ces points extrémaux car sinon il y aurait une manière moins coûteuse de relier les deux voisinages. De plus, il existe une constante $n \geq 1$ et des points $x_0 \in B_i, x_1, \dots, x_{n-1} \notin B_i \cup B_j, x_n \in B_j$, définis par les intersections successives de la trajectoire γ sur la section Σ , tels que

$$J(x_0, \dots, x_n) \leq H(i, j) + \eta.$$

D'un autre côté, pour tout $\eta > 0$, il existe des voisinages de rayon $\delta > 0$ tels que pour tout $x \in B_i$ et $y \in B_j$, $V(x, y) \geq H(i, j) - \eta$. Un argument similaire à celui fait précédemment permet de montrer que toute trajectoire en temps discret reliant ces voisinages doit également avoir un coût supérieur à $H(i, j) - \eta$. \square

Chapitre 4

Propriétés spectrales des applications de Poincaré aléatoires sous l'hypothèse d'une hiérarchie métastable

Pour quantifier les transitions entre les orbites périodiques stables, nous nous intéressons aux propriétés spectrales du noyau de transition K à temps discret et espace continu défini par (3.2.13). Rappelons que le lien entre les propriétés spectrales du noyau et le comportement (métastable) du processus est expliqué dans la Remarque 2.1.9. Puisque nous étudions un noyau de transition Markovien, ses valeurs propres ont un module inférieur à 1, nous souhaitons donc résoudre le problème aux valeurs propres

$$(K\phi)(x) = e^{-u} \phi(x)$$

où $u \in \mathbb{C}$ est le paramètre spectral.

Pour simplifier l'analyse spectrale des applications de Poincaré aléatoires, nous formulons une hypothèse de non-dégénérescence : l'existence d'une hiérarchie entre les orbites périodiques stables. Nous montrons que sous cette hypothèse, les N premières plus grandes valeurs propres du noyau sont simples et réelles. Nous donnons une expression de ces N premières valeurs propres et des fonctions propres en termes de fonctions committeurs. Les preuves combinent des éléments issus de la théorie des grandes déviations vue dans le chapitre précédent, de la théorie du potentiel en résolvant des problèmes aux bords, et de la théorie spectrale en approchant l'opérateur par un opérateur de rang fini.

4.1	Hypothèse de non-dégénérescence	58
4.2	Estimation des valeurs propres et fonctions propres	59
4.2.1	Estimation des valeurs propres	59
4.2.2	Fonctions propres à droite	60
4.2.3	Fonctions propres à gauche	61
4.2.4	Relation entre les valeurs propres et les espérances de temps de retour	63
4.3	Idée générale de la preuve pour l'estimation des éléments propres	63
4.3.1	Réduction de l'ensemble de définition du problème aux valeurs propres	63
4.3.2	Problème aux valeurs propres sur une union d'ensembles métastables	64
4.4	Approximation par un processus de rang fini	66
4.4.1	Propriétés spectrales du processus $K_{B_i}^0$	66
4.4.2	Norme de la différence entre le processus trace et le processus de rang fini	67
4.4.3	Propriétés spectrales du noyau de rang fini K^*	69
4.4.3.1	Estimation des valeurs propres de l'opérateur K^*	69
4.4.3.2	Estimation de la résolvante de K^*	73
4.5	Preuves des théorèmes	75
4.5.1	Preuve du théorème 4.2.1	75
4.5.2	Preuve du théorème 4.2.4	77
4.5.3	Preuve du théorème 4.2.8	78
4.5.4	Preuve du théorème 4.2.10	78

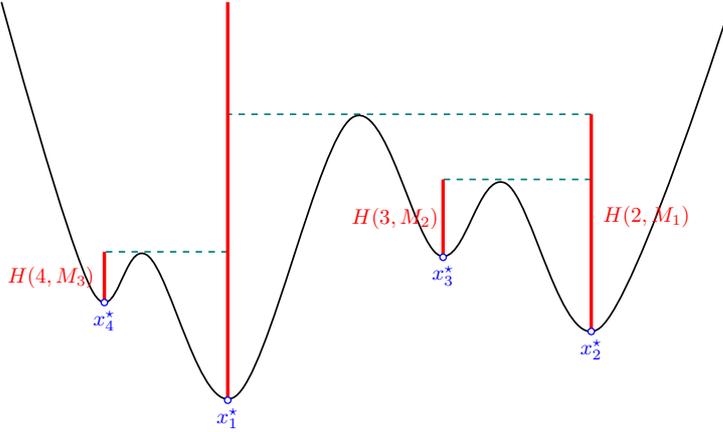


FIGURE 4.1 – Dans le cas où le quasi-potentiel dérive d'un potentiel global U ($V(x_i^*, x_j^*) - V(x_j^*, x_i^*) = U(x_j^*) - U(x_i^*)$ pour tout i, j), la hiérarchie métastable peut être déterminée par une construction graphique. Dans cet exemple, les x_i^* ont déjà été marqués de façon à satisfaire l'ordre métastable (4.1.1) i.e. $\Gamma_1 \prec \Gamma_2 \prec \Gamma_3 \prec \Gamma_4$.

4.1 Hypothèse de non-dégénérescence

L'hypothèse de non-dégénérescence va permettre d'associer chaque état métastable à une valeur propre exponentiellement proche de 1. Cette hypothèse a été utilisée dans les travaux d'Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayraud, et Markus Klein [24, 25]. L'idée grossière est de ramener le problème aux valeurs propres du générateur du processus à un problème aux valeurs sur un espace discret à N états. L'étude des valeurs propres de ce système en dimension finie est simplifiée quand il ne présente aucune symétrie, c'est ce que traduit l'hypothèse de hiérarchie métastable.

Hypothèse 4.1.1 (Hiérarchie métastable). Il existe une constante $\theta > 0$ pour laquelle les orbites périodiques stables $\Gamma_1, \dots, \Gamma_N$ peuvent être ordonnées de telle façon qu'en notant $M_j = \{1, \dots, j\}$, nous avons

$$H(j, M_{j-1}) \leq \min_{i < j} H(i, M_j \setminus \{i\}) - \theta. \quad (4.1.1)$$

Nous dirons alors que les orbites stables satisfont un *ordre métastable*, et nous noterons $\Gamma_1 \prec \Gamma_2 \prec \dots \prec \Gamma_N$. ♣

L'ordre métastable peut être déterminé de la façon suivante.

- Nous commençons par trouver pour tout i le coût minimal partant de Γ_i pour atteindre une autre orbite périodique stable. Ce coût correspond à $H(i, M_N \setminus \{i\})$. S'il y a un unique $\min_{1 \leq i \leq N} H(i, M_N \setminus \{i\})$ atteint pour l'indice j , alors cet indice j sera le dernier dans la hiérarchie métastable, il sera donc renommé N .
- Nous oublions alors l'orbite N que nous venons d'indexer, et nous réitérons la procédure : nous cherchons donc pour tout $1 \leq i \leq N - 1$, le coût minimal pour atteindre une orbite périodique parmi les orbites $\Gamma_1, \Gamma_{i-1}, \Gamma_{i+1}, \Gamma_{N-1}$ partant de l'orbite périodique i .

Dans le cas où le quasi-potentiel dérive d'un potentiel global U (i.e. tel que $V(x_i^*, x_j^*) - V(x_j^*, x_i^*) = U(x_j^*) - U(x_i^*)$ pour tout i, j), l'opération qui consiste à ne pas prendre en compte un état du système peut s'interpréter comme si nous remplissons le puits du potentiel jusqu'à la plus petite hauteur de selle atteignable. La Figure 4.1 illustre la construction de la hiérarchie métastable dans le cas où le quasi-potentiel dérive d'un potentiel global.

L'hypothèse de hiérarchie métastable est liée au concept de W -graphe utilisé par Alexander Wentzell dans [77] pour l'étude des matrices finies, et utilisé dans [46, Théorème 7.3, Chapitre 6] pour déterminer une estimation asymptotique du facteur exponentiel des parties réelles des valeurs propres exponentiellement petites du générateur d'une diffusion. Les W -graphes peuvent également être utilisés pour déterminer les échelles de temps exponentielles. La construction des W -graphes ne s'appuie pas sur une hypothèse de hiérarchie métastable mais si l'hypothèse de hiérarchie métastable est satisfaite alors les W -graphes sont très simples puisqu'une arête du sommet j va vers un unique sommet parmi les sommets

de M_{j-1} . Une méthode pour déterminer efficacement la hiérarchie métastable a été proposée par Maria Cameron et Eric Vanden-Eijnden [28] pour des processus réversibles ainsi que par Maria Cameron et Tingyue Gan dans [27] pour des systèmes réversibles ou non, avec ou sans symétrie.

Suivant les mêmes notations que celles introduites dans le Chapitre 2, pour un ensemble borélien $A \subset \Sigma$, $\tau_A = \inf\{n \geq 0 : X_n \in A\}$ désigne le temps de première atteinte de A , tandis que $\tau_A^+ = \inf\{n \geq 1 : X_n \in A\}$ désigne le temps de premier retour dans A . Pour A et B deux boréliens disjoints, les probabilités

$$\mathbb{P}^x\{\tau_A < \tau_B\} \quad \text{et} \quad \mathbb{P}^x\{\tau_A^+ < \tau_B^+\}$$

d'atteindre A avant B jouent un rôle très important. Ces fonctions sont appelées *potentiels d'équilibre* ou *committeurs*. Le terme anglais pour désigner ces probabilités de transition est *committor*, c'est une version condensée de l'expression *commitment probability*. Par les définitions des temps d'arrêt, ces deux fonctions sont identiquement égales lorsque $x \notin A \cup B$, tandis que $\mathbb{P}^x\{\tau_A < \tau_B\}$ vaut 1 dans A et vaut 0 dans B . Une estimation grossière de ces probabilités peut être obtenue par la théorie des grandes déviations, cf. Proposition 3.4.2. En effet, pour tout $\eta > 0$, il existe un $\delta_0 > 0$ tel que si $\delta < \delta_0$, alors pour tout $1 \leq i, j \leq N$ avec $i \neq j$, pour tout ensemble ouvert non vide $A \subset \mathcal{A}_j$ et pour tout $x \in B_i$,

$$-H(i, j) - \eta \leq \lim_{\sigma \rightarrow 0} \sigma^2 \log \mathbb{P}^x\{\tau_A^+ < \tau_{B_i}^+\} \leq -H(i, j) + \eta.$$

Grâce à cette relation entre les quasi-potentiels et les fonctions committeurs, pour tout $x \in B_i$ et $A \subset \mathcal{A}_j$, le committeur $\mathbb{P}^x\{\tau_A^+ < \tau_{B_i}^+\}$ est exponentiellement petit d'ordre $e^{-H(i,j)/\sigma^2}$. Nous montrerons que certaines fonctions committeurs peuvent être mieux estimées en tant que fonctions propres principales de certains processus tués.

4.2 Estimation des valeurs propres et fonctions propres

4.2.1 Estimation des valeurs propres

Fixons une petite constante $\eta \in]0, \theta[$ et posons $\theta^- := \theta - \eta$ où la constante $\theta > 0$ est donnée par l'hypothèse de hiérarchie métastable 4.1.1. Pour tous les résultats que nous énonçons, il est implicitement dit qu'il existe une valeur $\sigma_0 > 0$, qui ne dépend que de η , telle que pour tout $\sigma < \sigma_0$, les énoncés suivant sont vérifiés.

Théorème 4.2.1 (Estimations des valeurs propres). *Les N plus grandes valeurs propres du noyau de transition K sont réelles et positives. Elles satisfont*

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= 1, \\ \lambda_k &= 1 - \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}}\{\tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+\} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2})] \quad \text{pour } 1 \leq k \leq N-1, \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

où $\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}$ est une mesure de probabilité concentrée sur B_{k+1} et $\theta_k = H(k+1, M_k)/2 - \eta$. De plus, il existe une constante $c > 0$ telle que

$$|\lambda_k| \leq \rho := 1 - \frac{c}{\log(\sigma^{-1})} \quad \text{pour tout } k \geq N. \quad (4.2.2)$$

Enfin, la valeur propre principale du processus tué lorsqu'il quitte \mathcal{M}_k satisfait

$$1 - \lambda_0^{\mathcal{M}_k^c} = (1 - \lambda_k) [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2})] \quad (4.2.3)$$

pour $1 \leq k \leq N-1$.

Remarque 4.2.2. La mesure $\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}$ a une définition explicite, c'est la distribution quasi-stationnaire du processus trace $(\mathcal{M}_{k+1} X)_n^{B_{k+1}}$ (le processus dont l'horloge n'est incrémentée que lorsqu'il visite \mathcal{M}_{k+1}) tué lorsqu'il atteint \mathcal{M}_k (i.e. tué lorsqu'il quitte B_{k+1}). Remarquons que ce processus n'est pas le même que la trace du processus qui est tué quand il quitte B_{k+1} , ce qui signifie que prendre la trace et tuer le processus ne sont pas deux opérations qui commutent. \diamond

Quelque soit la définition précise de la mesure de probabilité $\overset{\circ}{\pi}_0^{B_{k+1}}$, la Proposition 3.4.2 montre que

$$\lambda_k = 1 - \mathcal{O}(e^{-(H(k+1, M_k) - \eta)/\sigma^2}) \quad \text{pour } k = 1, \dots, N-1,$$

où η peut être aussi petit que l'on veut. Grâce à ces estimations, la décomposition spectrale de la densité de l'opérateur (2.1.6) est donnée par

$$k^n(x, y) = \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i^n \phi_i(x) \pi_i(y) + \mathcal{O}(\rho^n),$$

qui est dominée par les N premiers termes dès que $n \gg \log(\rho^{-1})$. Puisque les N premières valeurs propres sont exponentiellement proches de 1, les N premiers termes de la somme décroissent très lentement, ce qui illustre le comportement métastable du système.

La preuve du Théorème 4.2.1 repose sur deux grandes étapes. La première étape consiste à montrer que pour tout $k \leq N-1$, le noyau du processus dont l'horloge n'est incrémentée que lorsqu'il visite \mathcal{M}_{k+1} peut être approché par un opérateur de rang fini. Les valeurs propres non nulles de l'opérateur de rang fini s'identifient à celles d'une matrice stochastique P de taille k de terme général

$$P_{ij} = \mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}} \{X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+} \in B_j\} = \mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}} \{\tau_{B_j}^+ < \tau_{\mathcal{M}_{k+1} \setminus B_j}^+\}.$$

La seconde étape utilise l'hypothèse de hiérarchie métastable pour montrer que la plus grande valeur propre de la matrice $(\text{id} - P)$ est proche de la fonction committeur $\mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_k}} \{\tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ < \tau_{B_k}^+\}$.

Si nous nous plaçons dans le cadre de la variante B de l'hypothèse de confinement (3.2.2), alors la proposition suivante montre que sur le fond, le Théorème 4.2.1 est également vrai pour processus tué quand il quitte \mathcal{D} . Cela peut être vu comme une généralisation au cas $N > 1$ du résultat de Wentzell obtenu dans [78] qui estime la valeur propre principale du générateur d'une diffusion tuée lorsqu'elle quitte un domaine contenant comme seul attracteur un point d'équilibre stable.

Proposition 4.2.3. *La valeur propre principale de la chaîne tuée lorsqu'elle quitte \mathcal{D} satisfait*

$$\lambda_0^{\mathcal{D}} = 1 - \mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_1}} \{\tau_{\partial}^+ < \tau_{B_1}^+\} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_0/\sigma^2})] = 1 - \mathcal{O}(e^{-\bar{V}(\partial\mathcal{D})/\sigma^2}),$$

où ∂ correspond à l'état cimetièr, et $\overset{\circ}{\pi}_0^{B_1}$ est une mesure de probabilité concentrée sur B_1 et $\theta_0 = \inf_{y \in \partial\mathcal{D}} V(x_1^*, y)/2 - \eta$.

Démonstration. La preuve est analogue à celle du Théorème 4.2.1, la seule différence est que nous ajoutons un état métastable fictif avec la boule B_0 qui représente l'état cimetièr. \square

Par la Proposition 2.5.2 nous pouvons déterminer les valeurs propres du processus tué. La Condition (3.2.6) nous assure que les corrections effectuées sur les valeurs propres $\bar{\lambda}_k^{\mathcal{D}}$ sont négligeables pour tout $k = 1, \dots, N-1$.

4.2.2 Fonctions propres à droite

Pour que la décomposition spectrale (2.4.4) soit complètement utile, il est nécessaire d'avoir également un contrôle sur les fonctions propres à droite et à gauche associées aux N premières valeurs propres. Nous commençons par donner un résultat sur les fonctions propres à droite ϕ_k . Ce résultat est l'analogue du résultat obtenue par Anton Bovier, Véronique Gaynard, and Markus Klein pour les fonctions propres à droite associées au générateur d'une diffusion réversible satisfaisant une hypothèse de hiérarchie métastable, cf. [25, Théorème 1.3].

Théorème 4.2.4 (Fonctions propres à droite). *Les fonctions propres à droite associées aux N premières valeurs propres de K peuvent être prises réelles. Elles satisfont $\phi_0(x) = 1$ pour tout $x \in \Sigma$, tandis que pour $k = 1, \dots, N-1$,*

$$\phi_k(x) = \mathbb{P}^x \{\tau_{B_{k+1}} < \tau_{\mathcal{M}_k}\} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})] + \mathcal{O}(e^{-\theta_k^-/\sigma^2}) \quad \forall x \in \Sigma, \quad (4.2.4)$$

où $\theta_k^- := \min\{\theta^-, \theta_k\}$. De plus, la fonction propre principale à droite du processus tué quand il atteint \mathcal{M}_k satisfait

$$\phi_0^{\mathcal{M}_k}(x) = \mathbb{P}^x\{\tau_{B_{k+1}} < \tau_{\mathcal{M}_k}\} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})] + \mathcal{O}(e^{-\theta_k^-/\sigma^2}) \quad \forall x \in \mathcal{M}_k^c \quad (4.2.5)$$

pour $k = 1, \dots, N-1$.

Si x est dans le bassin d'attraction \mathcal{A}_i de B_i , alors la fonction committeur $\mathbb{P}^x\{\tau_{B_i} < \tau_A\}$ est exponentiellement proche de 1 dès que A n'est pas inclus dans \mathcal{A}_i . Ainsi, à l'ordre dominant,

- si $x \in \mathcal{A}_i$ pour $1 \leq i \leq k$, alors $\phi_k(x)$ est exponentiellement petite;
- si $x \in \mathcal{A}_{k+1}$, alors $\phi_k(x)$ est exponentiellement proche de 1;
- si $x \in \mathcal{A}_j$ pour $j > k+1$, alors $\phi_k(x)$ est exponentiellement proche de 1 si partant de B_j il est plus facile d'atteindre B_{k+1} que \mathcal{M}_k , elle est exponentiellement petite sinon.

Si nous nous plaçons dans le cadre de la variante B de l'hypothèse de confinement 3.2.2, de nouveau par la transformée harmonique de Doob (cf. Proposition 2.5.2, les fonctions propres satisfont une expression similaire sauf peut-être au voisinage du bord de Σ .

Remarque 4.2.5. La preuve permet en fait d'avoir une expression plus précise des fonctions propres sous la forme

$$\phi_k(x) = \mathbb{P}^x\{\tau_{B_{k+1}} < \tau_{\mathcal{M}_k}\} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})] + \sum_{i=1}^k \mathbb{P}^x\{\tau_{B_i} < \tau_{\mathcal{M}_{k+1} \setminus B_i}\} \rho_{ki} \quad (4.2.6)$$

pour $1 \leq k \leq N-1$, avec

$$\rho_{ki} := -\frac{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_i}}\{\tau_{B_{k+1}}^+ < \tau_{\mathcal{M}_k}^+\}}{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_{k+1}}}\{\tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+\}} + \mathcal{O}(e^{-2\theta^-/\sigma^2}) = \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2}).$$

Des expressions d'ordres supérieurs peuvent également être obtenues. Elles permettent d'avoir plus d'information que (4.2.4) lorsque le terme dominant de (4.2.4) est exponentiellement petit. Remarquons enfin qu'au moins certains termes parmi les coefficients ρ_{ki} sont négatifs ce qui est consistant avec la relation d'orthogonalité (2.1.5). \diamond

Proposition 4.2.6. La fonction propre principale de la chaîne tuée lorsqu'elle quitte \mathcal{D} satisfait

$$\phi_0^{\mathcal{D}}(x) = \mathbb{P}^x\{\tau_{B_1} < \tau_{\partial}\} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})] \quad \forall x \in \Sigma.$$

Ainsi, $\phi_0^{\mathcal{D}}(x) = 1 - \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})$ dès que x est loin de $\partial\Sigma$.

4.2.3 Fonctions propres à gauche

Comme mentionné dans la Proposition 2.1.16, si le noyau de transition K était réversible, nous pourrions obtenir directement une expression pour les fonctions propres à gauche à partir des fonctions propres à droite et de la distribution stationnaire. En s'inspirant de l'égalité $\pi_0(x)\mathbb{P}^x\{\tau_y^+ < \tau_x^+\} = \pi_0(y)\mathbb{P}^y\{\tau_x^+ < \tau_y^+\}$ obtenue pour un processus non réversible à espace d'états discret dans [18], nous avons montré un résultat analogue pour une chaîne de Markov à espace d'états quelconque par une preuve plus élémentaire 2.3.5.

Proposition 4.2.7 (Proposition 2.3.5). Pour tous boréliens disjoints, non vides, $A_1, A_2 \subset \Sigma$, la distribution stationnaire du processus décrit par le noyau de transition K satisfait

$$\int_{A_1} \pi_0(dx) \mathbb{P}^x\{\tau_{A_2}^+ < \tau_{A_1}^+\} = \int_{A_2} \pi_0(dx) \mathbb{P}^x\{\tau_{A_1}^+ < \tau_{A_2}^+\}.$$

La relation reste vraie en remplaçant $\tau_{A_i}^+$ par le $n^{\text{ième}}$ temps de retour $\tau_{A_i}^{+,n}$ vers A_i .

Cette propriété va nous permettre de déterminer les fonctions propres à gauche. En appliquant ce résultat pour $A_1 = \mathcal{M}_N$, $A_2 = \Sigma \setminus \mathcal{M}_N$, et en utilisant le fait que les orbites périodiques Γ_i sont les seuls

ensembles limites attractifs, il vient que π_0 est concentrée dans \mathcal{M}_N , dans le sens où il existe un $\kappa > 0$, qui ne dépend que de la taille δ de B_i , tel que

$$\frac{\pi_0(\Sigma \setminus \mathcal{M}_N)}{\pi_0(\mathcal{M}_N)} = \mathcal{O}(e^{-\kappa/\sigma^2}). \quad (4.2.7)$$

De plus, pour tout compact D_j tel que $B_j \subset D_j \subset \mathcal{A}_j$, nous avons

$$\frac{\pi_0(D_j \setminus B_j)}{\pi_0(D_j)} = \mathcal{O}(e^{-\kappa/\sigma^2})$$

où $\kappa > 0$ peut dépendre de D_j . Des bornes similaires sont obtenues pour les distributions quasi-stationnaires $\pi_0^{\mathcal{M}_k^c}$ et les autres fonctions propres à gauche. Ainsi, l'information essentielle est concentrée dans les intégrales de ces mesures sur les ensembles B_j .

Théorème 4.2.8 (Fonctions propres à gauche). *La distribution stationnaire satisfait*

$$\pi_0(B_1) = 1 - \mathcal{O}(e^{-\kappa/\sigma^2}), \quad \pi_0(B_j) = \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2}) \quad \text{pour } j = 2, \dots, N. \quad (4.2.8)$$

De la même manière, la distribution quasi-stationnaire $\pi_0^{\mathcal{M}_k^c}$ du processus tué quand il quitte \mathcal{M}_k satisfait

$$\pi_0^{\mathcal{M}_k^c}(B_{k+1}) = 1 - \mathcal{O}(e^{-\kappa/\sigma^2}), \quad \pi_0^{\mathcal{M}_k^c}(B_j) = \mathcal{O}(e^{-\kappa/\sigma^2}) \quad \text{pour } j = k+2, \dots, N. \quad (4.2.9)$$

De plus, les fonctions propres à gauche π_k satisfont

$$\pi_k(B_j) = \begin{cases} -\frac{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_{k+1}}} \{\tau_{B_j}^+ < \tau_{\mathcal{M}_{k+1} \setminus B_j}^+\}}{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_{k+1}}} \{\tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+\}} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})] + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2}) & \text{pour } 1 \leq j \leq k, \\ \pi_0^{\mathcal{M}_k^c}(B_j) [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})] + \mathcal{O}(e^{-\theta_j/\sigma^2}) & \text{pour } j \geq k+1. \end{cases} \quad (4.2.10)$$

Grâce à ce résultat nous remarquons que

- $\pi_k(B_{k+1})$ est exponentiellement proche de 1 ;
- si $k+1 < j \leq N$, alors $\pi_k(B_j)$ est exponentiellement petite ;
- si $1 \leq j \leq k$, alors $\pi_k(B_j)$ est négative, ce qui est consistant avec la relation d'orthogonalité (2.1.5) ; ce terme peut être soit exponentiellement proche de -1 ou exponentiellement petit, cela dépend de si B_j est la boule la plus facile à atteindre parmi les boules de \mathcal{M}_k lorsque l'on part de B_{k+1} ou non.

Dans le cadre de la variante B de l'hypothèse de confinement 3.2.2, grâce aux Propositions 4.2.6 et 2.5.2, nous pouvons étendre les conclusions du Théorème 4.2.8 sans difficulté.

Remarque 4.2.9. En appliquant la Proposition 4.2.7, soit pour les ensembles B_1 et B_{k+1} ou pour les ensembles \mathcal{M}_k et B_{k+1} , nous pouvons obtenir des résultats plus précis pour la distribution stationnaire. En effet, nous avons pour tout $1 \leq k \leq N-1$,

$$\begin{aligned} \pi_0(B_{k+1}) &= \frac{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_1}} \{\tau_{B_{k+1}}^+ < \tau_{B_1}^+\}}{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_{k+1}}} \{\tau_{B_1}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+\}} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})], \\ \pi_0(B_{k+1}) &= \sum_{j=1}^k \pi_0(B_j) \frac{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_j}} \{\tau_{B_{k+1}}^+ < \tau_{\mathcal{M}_k}^+\}}{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_{k+1}}} \{\tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+\}} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})]. \end{aligned}$$

Si la seconde expression est plus compliquée, elle met en évidence que $\pi_0(B_{k+1}) = \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})$. Ceci est une conséquence de l'hypothèse de hiérarchie métastable 4.1.1.

Des expressions similaires peuvent être obtenues pour les transformées harmoniques des distributions stationnaires $\pi_0^{\mathcal{M}_k^c}$, ceci implique les expressions avancées pour les distributions quasi-stationnaires grâce à la Proposition 2.5.2 que nous appliquons au processus conditionné à rester dans \mathcal{M}_k et à l'expression (4.2.5) sur les fonctions principales à droite. \diamond

4.2.4 Relation entre les valeurs propres et les espérances de temps de retour

Lorsque la condition initiale est distribuée selon la distribution quasi-stationnaire $\pi_0^{\mathcal{M}_k^c}$, le temps d'atteinte de $\tau_{\mathcal{M}_k}$ suit une loi géométrique d'espérance

$$\mathbb{E}^{\pi_0^{\mathcal{M}_k^c}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k} \} = \frac{1}{1 - \lambda_0^{\mathcal{M}_k^c}} = \frac{1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2})}{1 - \lambda_k} = \frac{1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2})}{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \}} .$$

En associant ce calcul avec les bornes obtenues pour les distributions quasi-stationnaires, $\pi_0^{\mathcal{M}_k^c}$, nous obtenons une relation entre les valeurs propres et les espérances de temps de retour.

Théorème 4.2.10 (Espérance des temps de retour). *Il existe une constante $\kappa > 0$, qui ne dépend que de la taille δ des boules B_j , tels que pour tout $k \in \{1, \dots, N-1\}$, nous avons pour tout $x \in B_{k+1}$,*

$$\mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_k} \} = \frac{1 + \mathcal{O}(e^{-\kappa/\sigma^2})}{1 - \lambda_k} = \frac{1 + \mathcal{O}(e^{-\kappa/\sigma^2})}{\mathbb{P}^{\pi_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \}} . \quad (4.2.11)$$

4.3 Idée générale de la preuve pour l'estimation des éléments propres

4.3.1 Réduction de l'ensemble de définition du problème aux valeurs propres

Nous souhaitons résoudre le problème aux valeurs propres

$$\int_{\Sigma} K(x, dy) \phi(y) = e^{-u} \phi(x) . \quad (4.3.1)$$

En appliquant le Corollaire 2.2.3, pour tout $u \in \mathbb{C}$ satisfaisant la condition d'existence de transformée de Laplace (2.2.2) donnée par

$$\sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x \{ X_1 \in A^c \} < |e^{-u}| ,$$

et en introduisant l'opérateur

$$K^u(x, B) := \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_A^+ - 1)} \mathbb{1}_{\{X_{\tau_A^+} \in B\}} \right\} .$$

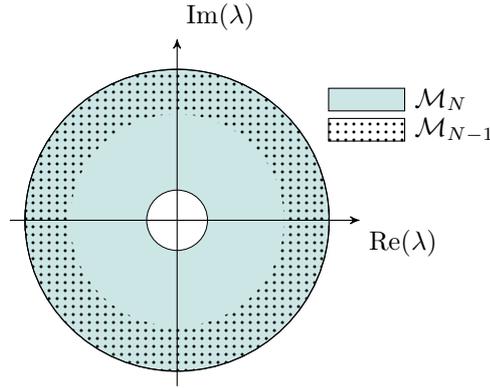
nous pouvons réduire le problème aux valeurs propres sur Σ à un problème aux valeurs propres sur le sous-ensemble $A \subset \Sigma$. Les valeurs propres λ de l'opérateur K qui satisfont la condition d'existence des transformées de Laplace donnée par

$$\sup_{x \in A^c} \mathbb{P}^x \{ X_1 \in A^c \} < |\lambda| ,$$

sont les valeurs propres de l'opérateur K . Classant les valeurs propres par ordre décroissant, sous l'hypothèse de hiérarchie métastable, nous nous attendons à ce que l'opérateur K ait N valeurs propres exponentiellement proches de 1, puis qu'il y ait un trou entre la N -ième valeur propre et le reste du spectre.

L'idée générale de la preuve consiste à choisir un ensemble $A := A(N)$ qui permet d'estimer λ_{N-1} , la N -ième plus grande valeur propre du noyau de transition et d'obtenir une borne inférieure sur le module des $N-1$ plus grandes valeurs propres restantes. En prenant un autre ensemble $A := A(N-1)$, nous estimerons λ_{N-2} , et obtiendrons une borne pour les $N-2$ plus grandes valeurs propres et ainsi de suite jusqu'à λ_1 . Pour estimer la valeur propre λ_k ($1 \leq k \leq N-1$), nous approcherons le noyau K^u par des opérateurs pour lesquels nous pouvons estimer les valeurs propres et fonctions propres. Ce sera fait dans la section suivante.

Pour estimer la N -ième valeur propre, nous prenons $A := \mathcal{M}_N$. Intuitivement, un tel choix d'ensemble n'est pas trop restrictif pour la condition d'existence des transformées de Laplace du temps d'atteinte donné par (2.2.2). En effet, pour une condition initiale prise en dehors du voisinage des orbites périodiques


 FIGURE 4.2 – Ensemble de définition des valeurs propres λ pour les problèmes définis sur \mathcal{M}_N et \mathcal{M}_{N-1} .

stables, la probabilité que la position du premier retour sur la section de Poincaré Σ soit toujours en dehors du voisinage des orbites périodiques stables est très petite (quitte à remplacer K par son itéré K^m). Ceci va donc permettre d'estimer la N -ième valeur propre du noyau K^u .

Pour estimer λ_{N-2} , la $(N-1)$ -ième plus grande valeur propre, nous définissons le problème aux valeurs propres sur $A := \mathcal{M}_{N-1}$. Ainsi, pour tout complexe u vérifiant

$$\sup_{x \in \mathcal{M}_{N-1}^c} \mathbb{P}^x \{X_1 \in \mathcal{M}_{N-1}^c\} < |e^{-u}|,$$

le problème aux valeurs propres (4.3.1) est équivalent à un problème aux valeurs propres sur \mathcal{M}_{N-1} . Remarquons que les conditions d'existence des transformées de Laplace (2.2.2) satisfont

$$\sup_{x \in \mathcal{M}_N^c} \mathbb{P}^x \{X_1 \in \mathcal{M}_N^c\} < \sup_{x \in \mathcal{M}_{N-1}^c} \mathbb{P}^x \{X_1 \in \mathcal{M}_{N-1}^c\}.$$

Ainsi, en résolvant l'équation aux valeurs propres définies sur \mathcal{M}_{N-1} avec le noyau $K^{u, (N-1)}$, nous nous intéressons à des valeurs propres qui sont plus grandes en module que celles du noyau $K^{u, (N)}$ défini sur \mathcal{M}_N , comme le montre la Figure 4.2. De manière générale, pour estimer la k -ième plus grande valeur propre, nous prendrons $A = \mathcal{M}_{k+1}$. Nous devons donc étudier les propriétés spectrales du noyau $K^{u, (k+1)}$ défini sur \mathcal{M}_{k+1} par

$$K^{u, (k+1)}(x, dy) = \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ - 1)} \mathbb{1}_{\{X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+} \in dy\}} \right\}.$$

Pour alléger les notations, nous omettrons l'indice $k+1$ et noterons simplement K^u tout en gardant en mémoire que le noyau dépend de l'indice k par son ensemble de définition.

4.3.2 Problème aux valeurs propres sur une union d'ensembles métastables

En réduisant le problème aux valeurs propres sur \mathcal{M}_k , nous définissons un opérateur sur un ensemble où nous avons le maximum d'informations pour le système déterministe grâce à l'attraction des orbites périodiques stables. Cependant, puisque le noyau introduit dépend du paramètre spectral u , il n'a pas d'interprétation probabiliste flagrante. Pour contourner ce désagrément, nous introduisons un nouveau paramètre v et résolvons le système à deux inconnues

$$\begin{aligned} (K^u \phi^u)(x) &= v \phi^u(x) \\ v &= e^{-u}. \end{aligned} \tag{4.3.2}$$

Au lieu d'étudier directement les propriétés spectrales du noyau K^u (ou de ses itérés $(K^u)^m$), nous approchons le noyau par un noyau qui a une bonne interprétation probabiliste et pour lequel nous pouvons obtenir ses propriétés spectrales. Une telle approximation est possible par continuité des valeurs propres des opérateurs compacts [50, Partie II.4], nous renvoyons également à la Section 2.1.3.3 pour plus de détails.

L'approximation du noyau K^u va se faire en deux étapes. Tout d'abord, puisque nous nous intéressons à des valeurs propres de K^u proches de 1, i.e. pour u proche de zéro, nous pouvons comparer les noyaux K^u et K^0 . Le noyau K^0 est un noyau de Markov stochastique correspondant au processus trace $\mathcal{M}_k X$ défini sur $\mathcal{M}_k \times \mathcal{B}(\mathcal{M}_k)$, par

$$K^0(x, dy) := \mathbb{P}^x \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dy \right\}.$$

Le processus trace a été introduit dans la Section 2.3. La seconde approximation sera faite en introduisant le noyau K^* donnée par

$$K^*(x, dy) = \sum_{i=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} \int_{B_i} \overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}(z) K^0(z, dy) dz$$

où $\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}$ est la distribution quasi-stationnaire du processus décrit par le noyau $K_{B_i}^0$ i.e. le processus trace qui est tué quand il quitte B_i (voir Section 2.4.2). Puisque le noyau K^* est une somme finie de produits de deux fonctions dont l'une ne dépend que du premier argument, et l'autre ne dépend que du second, le noyau K^* est un opérateur de rang fini.

Pour obtenir des estimations plus précises, au lieu d'étudier le noyau de transition à son temps de premier retour sur l'ensemble \mathcal{M}_k sur la section de Poincaré, nous pouvons étudier la chaîne diluée en considérant le m -ième itéré du noyau. La valeur de m pourra dépendre de σ , l'intensité devant le coefficient de diffusion de l'EDS (3.2.1). Le lien entre les valeurs propres du m -ième itéré et celle du noyau de départ est explicite : e^{-u} est une valeur propre du noyau K^u si et seulement si e^{-um} est une valeur propre du noyau $(K^u)^m$. Nous introduisons de la même manière les m -ième itéré des noyaux K^0 et K^* , $(K^0)^m$ et $(K^*)^m$.

Grâce à la Proposition 2.3.10, nous pouvons majorer la norme de la différence entre $(K^u)^m$ et $(K^0)^m$.

Proposition 4.3.1 (Application de la Proposition 2.3.10). *Pour tout réel u satisfaisant la condition d'existence des transformées de Laplace donnée par*

$$\sup_{x \in \mathcal{M}_k^c} \mathbb{P}^x \{X_1 \in \mathcal{M}_k^c\} < |e^{-u}|,$$

et tel que $(1 - e^{-u})\mathbb{E}^{\mathcal{M}_k^c} \{\tau_{\mathcal{M}_k}^+\} < 1$, nous avons

$$\|(K^u)^m - (K^0)^m\| \leq \left(1 + \frac{(1 - e^{-u})\mathbb{E}^{\mathcal{M}_k} \{\tau_{\mathcal{M}_k}^+ - 1\}}{1 - (1 - e^{-u})\mathbb{E}^{\mathcal{M}_k^c} \{\tau_{\mathcal{M}_k}^+\}} \right)^m - 1.$$

Les espérances qui apparaissent dans cette borne ont été estimées dans la Section 3.3. Grâce à la décomposition spectrale des noyaux $K_{B_i}^0$, nous pouvons également obtenir une borne pour la norme de la différence entre $(K^0)^m$ et $(K^*)^m$.

Proposition 4.3.2. *Pour tout $m \in \mathbb{N}$, la norme de la différence entre les itérés K^0 et K^* satisfait la borne*

$$\|(K^0)^m - (K^*)^m\| \leq \sup_{1 \leq i \leq k} R_i,$$

où

$$\begin{aligned} R_i = & \|\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i} - 1\| + 2(\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i})^m + 2 \frac{1 - (\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i})^m}{1 - \overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i}} \mathbb{P}^{B_i} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_i}^+ < \tau_{B_i}^+ \right\} \\ & + m(m-1) \mathbb{P}^{B_i} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_i}^+ < \tau_{B_i}^+ \right\} \mathbb{P}^{\mathcal{M}_k \setminus B_i} \left\{ \tau_{B_i}^+ < \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_i}^+ \right\}. \end{aligned}$$

Les quantités $\overset{\circ}{\lambda}_k^{B_i}$ et $\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i}$ qui apparaissent dans cette borne sont reliées au processus trace $K_{B_i}^0$ tué quand il quitte B_i . Grâce au contrôle de l'oscillation de la fonction propre principale $\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i}$ et du trou spectral $|\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i}|/|\overset{\circ}{\lambda}_0^{B_i}|$. Sous l'hypothèse de hiérarchie métastable, la norme de la différence $\|(K^0)^m - (K^*)^m\|$ est petite pour tout m satisfaisant

$$m \mathbb{P}^{B_k} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ < \tau_{B_k}^+ \right\} \ll 1.$$

Par l'inégalité triangulaire, $\|(K^u)^m - (K^0)^m\|$ est donc également petite sous cette hypothèse.

Ces deux approximations permettent de se ramener à un problème aux valeurs propres beaucoup plus simple. En effet, puisque le noyau $(K^*)^m$ est de rang fini, il admet au plus N valeurs propres non nulles. Résoudre le problème aux valeurs propres du noyau $(K^*)^m$ est équivalent à résoudre un système d'équations linéaires.

Proposition 4.3.3. *Pour $0 \leq i \leq k-1$, notons λ_i^* les valeurs propres de K^* ordonnées de façon décroissante. La plus petite valeur propre non nulle en module λ_{k-1}^* de K^* est simple et réelle. Elle satisfait*

$$\left| \lambda_{k-1}^* - \left(1 - \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_k}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_k \right\} \right) \right| \leq 2 \sup_{1 \leq j \leq k-1} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_j}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_j \right\}.$$

De plus, pour $0 \leq i \leq k-2$, les autres valeurs propres non nulles de K^* satisfont

$$|1 - \lambda_i^*| \leq 4 \|\hat{P}_{12}\| \leq 4 \sup_{1 \leq j \leq k-1} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_j}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_j \right\}.$$

En choisissant correctement la valeur de m , le Théorème 4.2.1 est obtenu en combinant les estimées (4.4.12) avec les bornes obtenues pour $\|(K^u)^m - (K^*)^m\|$. Les détails sont donnés dans la Section 4.5.1. Les théorèmes sur les fonctions propres (Théorème 4.2.4 et Théorème 4.2.8) sont obtenus à partir du théorème sur les valeurs (Théorème 4.2.1).

4.4 Approximation par un processus de rang fini

Rappelons que le processus défini par le noyau K^u à partir du problème aux bords de Dirichlet sur \mathcal{M}_k est donné par

$$K^u(x, B) := \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_{\mathcal{M}_k}^+ - 1)} \mathbb{1}_{\{X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in B\}} \right\}, \quad (4.4.1)$$

ce processus n'a pas une interprétation probabiliste sympathique. En prenant $u = 0$, le processus défini par le noyau

$$K^0(x, B) := \mathbb{P}^x \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in B \right\},$$

correspond au processus trace introduit dans la Section 2.3. Enfin le processus K^* est défini par

$$K^*(x, B) := \sum_{i=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in B \right\},$$

où $\hat{\pi}_0^{B_i}$ est la distribution quasi-stationnaire du processus décrit par le noyau $K_{B_i}^0$ i.e. le noyau associé au processus trace sur \mathcal{M}_k tué quand il quitte B_i , voir Section 2.4. C'est un noyau de rang fini. D'un point de vue probabiliste, les transitions de ce processus s'identifient à ceux d'une chaîne de Markov à k états.

4.4.1 Propriétés spectrales du processus $K_{B_i}^0$

Le noyau K^* fait intervenir les noyaux $K_{B_i}^0$. Pour déterminer les propriétés spectrales de K^* nous avons donc besoin d'étudier les propriétés spectrales des noyaux $K_{B_i}^0$. Nous pouvons appliquer les résultats obtenus dans la Section 2.4 Notons $\check{\lambda}_j^{B_i}$ ses valeurs propres, et $\check{\pi}_j^{B_i}(x)$ et $\check{\phi}_j^{B_i}(x)$ ses fonctions propres à gauche et à droite. Remarquons que la valeur propre principale $\check{\lambda}_0^{B_i}$ de ce noyau a pour expression probabiliste

$$\check{\lambda}_0^{B_i} = \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_i}} \left\{ \tau_{B_i}^+ < \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_i}^+ \right\}. \quad (4.4.2)$$

Si le symbole $\check{}$ peut rendre les notations un peu lourdes, il est utilisé pour se souvenir que nous ne travaillons pas avec un noyau défini sur Σ mais au processus

$$(\mathcal{M}_k X_n)_{n \geq 0} = \left(X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+, n} \right)_{n \geq 0},$$

i.e. la trace du processus sur $\mathcal{M}_k = \bigcup_{i=1}^k B_i$. Nous pouvons utiliser les propriétés du processus tué obtenues dans la Section 2.4, en particulier nous avons la décomposition spectrale

$$k_{B_i}^0(x, y) = \overset{\circ}{\lambda}_0^{B_i} \left\{ \overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}(y) \overset{\circ}{\phi}_0^{B_i}(x) + \frac{\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i}}{\overset{\circ}{\lambda}_0^{B_i}} g(x, y) \right\}. \quad (4.4.3)$$

Pour estimer la constante de positivité uniforme nous utilisons l'argument de couplage (cf. 2.4.8) et des inégalités de Harnack pour la densité $k_0^{B_i}$.

Lemme 4.4.1 ([12, Lemme 5.7]). *Pour tout ensemble \mathcal{D}_1 dont la fermeture satisfait $\bar{\mathcal{D}}_1 \subset \mathcal{D}$, il existe une constante C , indépendante de l'intensité σ , telle que*

$$\frac{\sup_{x \in \mathcal{D}_1} k_{B_i}^0(x, y)}{\inf_{x \in \mathcal{D}_1} k_{B_i}^0(x, y)} \leq e^{C/\sigma^2}$$

pour tout $y \in \partial D$.

Lemme 4.4.2 ([12, Lemme 5.8]). *Soit $\mathcal{B}_r(x)$ la boule de rayon r centrée en x , et soit \mathcal{D}_1 un ensemble dont la fermeture satisfait $\bar{\mathcal{D}}_1 \subset \mathcal{D}$. Alors pour tout $x_0 \in \mathcal{D}_1, y \in \partial \mathcal{D}$, et $\eta > 0$, nous pouvons trouver une constante $r = r(y, \eta)$, indépendante de σ , telle que*

$$\sup_{x \in \mathcal{B}_{r\sigma^2}(x_0)} k_{B_i}^0(x, y) \leq (1 + \eta) \inf_{x \in \mathcal{B}_{r\sigma^2}(x_0)} k_{B_i}^0(x, y).$$

Lemme 4.4.3. *Il existe une constante $c_0 > 0$ telle que la deuxième valeur propre du noyau $K_{B_i}^0$ satisfait*

$$\left| \overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i} \right| \leq e^{-c_0/\log(\sigma^{-1})}. \quad (4.4.4)$$

De plus, l'oscillation de la fonction propre principale de $K_{B_i}^0$ satisfait

$$\|\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i} - 1\| \leq M_0 \log(\sigma^{-1}) e^{-[H(i, \mathcal{M}_k \setminus \{i\}) - \eta]/\sigma^2}. \quad (4.4.5)$$

Démonstration. Comme discuté dans la Section 3.3.3, pour une valeur n d'ordre $\log(\sigma^{-1})$ le noyau $K_{B_i}^0$ satisfait une condition de positivité uniforme (2.4.8), avec $L(n) - 1$ une constante positive d'ordre 1. D'après la Proposition 2.4.5 appliquée au processus $K_{B_i}^0$, il existe donc une constante $c_0 > 0$ telle que

$$\left| \overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i} \right| \leq e^{-c_0/\log(\sigma^{-1})}.$$

Grâce à la Proposition 2.4.6 sur l'oscillation de la fonction propre principale appliquée au processus $K_{B_i}^0$, nous avons

$$\|\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i} - 1\| \leq ML(n)^2 \sup_{x \in B_i} \left| 1 - \frac{\mathbb{P}^x \left\{ \tau_{B_i}^{+,n} < \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_i}^+ \right\}}{(\overset{\circ}{\lambda}_0^{B_i})^n} \right|.$$

où $L(n)$ est la constante de positivité uniforme et M est une constante positive. Pour un n d'ordre $\log(\sigma^{-1})$, grâce à l'expression de la valeur propre principale comme une fonction committeur (4.4.2) et l'estimation des committeurs par les grandes déviations dans la Proposition 3.4.2, nous obtenons l'estimation proposée. \square

4.4.2 Norme de la différence entre le processus trace et le processus de rang fini

La Proposition 4.3.1 nous permet de majorer la norme de la différence entre les itérés de K^u et K^0 . Le Lemme 3.3.13 permet le calcul des espérances des temps d'atteinte des états métastables qui sont impliquées dans la Proposition 4.3.1.

Pour avoir une majoration de la norme de différence entre les opérateur K^u et K^* par l'inégalité triangulaire, nous avons besoin de majorer la norme de la différence entre les itérés des opérateurs K^0 et le processus de rang fini K^* .

Preuve de la Proposition 4.3.2. Pour estimer la norme de la différence entre le noyau du processus trace K^0 et le noyau de rang fini K^* , nous introduisons le noyau $(\check{K})^m$ qui a pour densité

$$(\check{k})^m(x, y) = \sum_{i=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} (\check{k}_i)^m(x, y)$$

où pour tout $x \in B_i$

$$(\check{k}_i)^m(x, y) = (k_{B_i}^0)^m(x, y) + \sum_{j=0}^{m-1} \int_{z_2 \in \mathcal{M}_k \setminus B_i} \int_{z_1 \in B_i} (k_{B_i}^0)^l(x, z_1) k^0(z_1, z_2) (k_{\mathcal{M}_k \setminus B_i}^0)^{m-l-1}(z_2, y) dz_1 dz_2 .$$

Ce noyau décrit le processus qui vit sur \mathcal{M}_k et qui ne peut réaliser qu'une seule transition entre les voisinages métastables : partant de B_i la chaîne va soit rester dans B_i , soit faire une transition vers $\mathcal{M}_k \setminus B_i$ et y rester pour toujours. Pour alléger les notations, nous introduisons

$$\Delta_m := \int_{\mathcal{M}_k} \left[(k^0)^m(x, y) - (\check{k})^m(x, y) \right] dy .$$

Nous affirmons que pour tout $x \in B_i$, et pour tout $m \geq 1$

$$\Delta_m \leq \frac{1}{2} m(m-1) \mathbb{P}^{B_i} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_i \right\} \mathbb{P}^{\mathcal{M}_k \setminus B_i} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in B_i \right\} . \quad (4.4.6)$$

Montrons cette affirmation par récurrence. Puisque $k^0(x, y) = \check{k}(x, y)$ l'initialisation est vérifiée. L'étape de récurrence repose sur le dénombrement des façons de réaliser plus d'une transition pour le $(m+1)$ -ième itéré. Au temps m , soit le processus a déjà réalisé plus de deux transitions, soit le processus a effectué une unique transition de B_i vers $\mathcal{M}_k \setminus B_i$ avant le temps m et réalise une excursion de $\mathcal{M}_k \setminus B_i$ vers B_i au temps m . Dans ce dernier cas, il y a exactement m façons différentes de réaliser une telle transition (selon le temps où la première transition a été réalisée). Grâce à ce raisonnement, nous avons

$$\Delta_{m+1} \leq \Delta_m + m \mathbb{P}^{B_i} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_i \right\} \mathbb{P}^{\mathcal{M}_k \setminus B_i} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in B_i \right\} ,$$

et donc le terme général satisfait la borne (4.4.6).

Pour tout m , nous utilisons ce processus "gelé" pour borner la norme de la différence entre les itérés de K^0 et de K^*

$$\| (K^0)^m - (K^*)^m \| \leq \max_{1 \leq i \leq k} \sup_{x \in B_i} \int_{\mathcal{M}_k} \left| (k^0)^m(x, y) - (k^*)^m(x, y) \right| dy .$$

L'inégalité triangulaire donne

$$\begin{aligned} \left| (k^0)^m(x, y) - (k^*)^m(x, y) \right| &\leq \left| (k^0)^m(x, y) - \check{k}^m(x, y) \right| \\ &\quad + \left| \check{k}^m(x, y) - \int_{B_i} \overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}(z) \check{k}^m(z, y) dz \right| \\ &\quad + \left| \int_{B_i} \overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}(z) \left(\check{k}^m(z, y) - (k^0)^m(z, y) \right) dz \right| . \end{aligned}$$

En intégrant sur \mathcal{M}_k , le premier et le dernier terme dans le membre de droite sont majorés grâce à (4.4.6). De plus, la décomposition spectrale (4.4.3) de la densité $k_{B_i}^0$ permet d'écrire

$$\int_{B_i} \left| \check{k}^m(x, y) - \int_{B_i} \overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}(z) \check{k}^m(z, y) dz \right| dy \leq (\overset{\circ}{\lambda}_0^{B_i})^m \left| \overset{\circ}{\phi}_0^{B_i}(x) - 1 \right| + 2 \left| \overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i} \right|^m \sup_{z \in B_i} \left| \int_{B_i} g^m(z, y) \right| dy ,$$

(puisque $\check{k}^m(x, y) = (k_{B_i}^0)^m(x, y)$ lorsque $x, y \in B_i$) et

$$\begin{aligned} &\int_{\mathcal{M}_k \setminus B_i} \left| \check{k}^m(x, y) - \int_{B_i} \overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}(z) \check{k}^m(z, y) dz \right| dy \\ &\leq \sum_{l=0}^{m-1} (\overset{\circ}{\lambda}_0^{B_i})^l \left| \overset{\circ}{\phi}_0^{B_i}(x) - 1 \right| \left(1 - \overset{\circ}{\lambda}_0^{B_i} \right) + 2 \mathbb{P}^{B_i} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_i \right\} \left| \overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i} \right|^l \sup_{z \in B_i} \left| \int_{B_i} g^l(z, y) dy \right| . \end{aligned}$$

En regroupant les différents termes, nous obtenons le résultat avancé. \square

4.4.3 Propriétés spectrales du noyau de rang fini K^*

4.4.3.1 Estimation des valeurs propres de l'opérateur K^*

Nous souhaitons estimer les valeurs propres de l'opérateur K^* défini sur \mathcal{M}_k par

$$K^*(x, B) = \sum_{i=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} \int_{B_i} \overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}(x_0) K^0(x_0, B) dx_0 \quad \forall x \in \mathcal{M}_k, B \subset \mathcal{M}_k, \text{ borélien.}$$

Nous rappelons que l'image d'un opérateur K^* noté $\mathfrak{S}(K^*)$ est le sous-espace $\{K^*\phi, \phi \in L^\infty(\Sigma)\}$. Si l'image de K^* est de dimension finie, l'opérateur est dit de *rang fini* et la dimension de son image est appelée le *rang* de l'opérateur.

Puisqu'un noyau de rang fini peut s'écrire comme une somme finie de produit de deux fonctions dont l'une ne dépend que de son premier argument, et l'autre de dépend que de son second, il est clair que notre opérateur K^* est de rang fini, et son rang est au plus k . À un opérateur de rang fini, on peut lui associer une matrice de taille $k \times k$ dont les valeurs propres non nulles correspondent aux valeurs propres non nulles de l'opérateur K^* . Pour s'en convaincre, remarquons que les valeurs propres non nulles de K^* sont les solutions de l'équation homogène de Fredholm du second type

$$\lambda \phi(x) = \int_{\mathcal{M}_k} K^*(x, dy) \phi(y). \quad (4.4.7)$$

En introduisant les constantes

$$c_i = \int_{\mathcal{M}_k} \mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dx \right\} \phi(x)$$

qui dépendent des fonctions propres à droite $\phi(x)$, nous obtenons

$$\lambda \phi(x) = \sum_{i=1}^k c_i \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}}.$$

Pour toute valeur propre $\lambda \neq 0$, en insérant cette expression dans (4.4.7), il vient

$$\sum_{i=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} \left[c_i - \frac{1}{\lambda} \int_{\mathcal{M}_k} \mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dy \right\} \sum_{j=1}^k c_j \mathbb{1}_{\{y \in B_j\}} \right] = 0.$$

Nous notons alors

$$P_{ij} = \mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in B_j \right\}$$

et puisque $(\mathbb{1}_{\{x \in B_i\}})_{1 \leq i \leq k}$ constitue une famille de fonctions linéairement indépendantes, nous obtenons le système d'équations linéaires

$$\lambda c_i = \sum_{j=1}^k P_{ij} c_j, \quad 1 \leq i \leq k.$$

Ainsi, les valeurs propres non nulles de K^* correspondent aux valeurs propres non nulles de la matrice P . Pour $0 \leq i \leq k-1$, nous noterons λ_i^* ces valeurs propres. Nous les ordonnerons par module décroissant.

Notons que la matrice P est une matrice stochastique. Puisque K est un noyau de transition récurrent au sens de Harris, la matrice P est irréductible. Par le théorème de Perron-Frobenius, la plus grande valeur propre de P est 1, cette valeur propre est simple. Les autres valeurs sont plus petites que 1 en module. De plus, d'après la condition d'existence de la transformée de Laplace (2.2.2), ses valeurs propres sont situées dans l'anneau

$$\sup_{x \in \mathcal{M}_k^c} \mathbb{P}^x \{X_1 \in \mathcal{M}_k^c\} < |\lambda_i^*| \leq 1$$

pour tout $0 \leq i \leq k-1$.

Étudions maintenant la structure de la matrice P . Grâce aux estimations de la Proposition 3.4.2 obtenues par la théorie des grandes déviations, les termes diagonaux de P sont proches de 1, tandis que tous les termes hors diagonaux sont proches de zéro. Nous savons donc par le théorème des disques de Gershgorin que la partie réelle de nos valeurs propres est positive.

Afin d'étudier une matrice dont tous les éléments sont petits, nous introduisons la matrice $\hat{P} = \text{id} - P$. Les éléments diagonaux sont donnés par

$$\hat{P}_{ii} = \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_i \right\} = \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in \mathcal{M}_k \setminus B_i \right\}.$$

L'hypothèse de hiérarchie métastable 4.1.1 signifie que dans la partie triangulaire inférieure de la matrice P , le minimum de chaque ligne est plus grand, d'au moins un facteur e^{θ/σ^2} que le minimum des lignes au-dessus. Le but est alors de déterminer les propriétés spectrales de la matrice \hat{P} . Ceci a été réalisé par Wentzell [77] en utilisant les W -graphes. Nous utiliserons une approche différente qui permet d'avoir un accès direct aux fonctions propres. Cette approche repose sur une décomposition par blocs qui a déjà été proposée dans [9, Section 6.1]. Décomposons la matrice \hat{P} sous la forme

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} \hat{P}_{11} & \hat{P}_{12} \\ \hat{P}_{21} & \hat{a} \end{pmatrix}$$

avec $\hat{P}_{11} \in \mathbb{R}^{(k-1) \times (k-1)}$, $\hat{P}_{12} \in \mathbb{R}^{k-1}$, $\hat{P}_{21}^\top \in \mathbb{R}^{k-1}$ et $\hat{a} \in \mathbb{R}$. Nous souhaitons montrer qu'il existe des matrices S, T dans $\mathbb{R}^{k \times k}$ de la forme

$$S = \begin{pmatrix} \text{id} & S_{12} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} T_{11} & 0 \\ T_{21} & \alpha \end{pmatrix}$$

avec les sous-matrices qui ont les mêmes dimensions que celles des sous-matrices de \hat{P} et qui vérifient

$$\hat{P}S = ST. \quad (4.4.8)$$

La démonstration repose l'existence d'un point fixe. En effet, si nous montrons que l'équation

$$\hat{P}_{11}S_{12} - S_{12}\hat{a} - S_{12}\hat{P}_{21}S_{12} + \hat{P}_{12} = 0 \quad (4.4.9)$$

admet une solution unique, il en découlera que \hat{P} est similaire à la matrice T , et que les valeurs propres de \hat{P} sont α et les valeurs propres T_{11} . Remarquons que si une telle décomposition existe alors T_{11}, T_{21} et α sont donnés par

$$T_{11} = \hat{P}_{11} - S_{12}\hat{P}_{21}, \quad T_{21} = \hat{P}_{21}, \quad \alpha = \hat{a} + \hat{P}_{21}S_{12}.$$

Pour montrer que (4.4.9) admet une solution unique nous utilisons le théorème du point fixe de Banach.

Proposition 4.4.4. *Introduisons les constantes*

$$b := \max_{1 \leq l \leq k-1} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_l}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_l \right\},$$

$$\hat{a} := \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_k}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_k \right\} \neq 0.$$

Pour des blocs fixés $\hat{P}_{11}, \hat{P}_{12}, \hat{P}_{21}$ et \hat{a} , si

$$\frac{b}{\hat{a}} < \frac{1}{8} \quad (4.4.10)$$

alors (4.4.9) admet une solution unique. Cette solution satisfait

$$\|S_{12}^*\| \leq 2 \frac{\|\hat{P}_{12}\|}{\hat{a}}. \quad (4.4.11)$$

Démonstration. Soit \mathcal{B} la boule $\mathcal{B} = \{\Xi \in \mathbb{R}^{k-1}, \|\Xi\| \leq 2 \frac{\|\hat{P}_{12}\|}{\hat{a}}\} \subset \mathbb{R}^{k-1}$. Nous munissons l'espace de Banach \mathbb{R}^{k-1} de la norme du supremum et nous définissons l'application $\Phi : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ par

$$\Phi(\Xi) = \frac{1}{\hat{a}} (\hat{P}_{12} + \hat{P}_{11}\Xi - \Xi\hat{P}_{21}\Xi).$$

Remarquons alors que

$$\|\hat{P}_{11}\| \leq 2b, \quad \|\hat{P}_{12}\| \leq b, \quad \|\hat{P}_{21}\| = \hat{a}.$$

Nous avons donc

$$\|\Phi(\Xi)\| \leq \hat{a}^{-1} \left\{ \|\hat{P}_{12}\| + \|\hat{P}_{11}\| \|\Xi\| + \|\hat{P}_{21}\| \|\Xi\|^2 \right\},$$

et donc pour $\Xi \in \mathcal{B}$, nous avons

$$\|\Phi(\Xi)\| \leq \hat{a}^{-1} \|\hat{P}_{12}\| \left\{ 1 + 6\|\hat{P}_{11}\| \right\}.$$

Ainsi $\|\Phi(\Xi)\| \leq \|\Xi\|$. Nous avons également pour $\Xi, \Xi' \in \mathcal{B}$

$$\begin{aligned} \|\Phi(\Xi) - \Phi(\Xi')\| &\leq \hat{a}^{-1} \left\{ \|\hat{P}_{11}\| + 2\|\hat{P}_{21}\| \|\Xi\| \right\} \|\Xi - \Xi'\| \\ &\leq \hat{a}^{-1} \left\{ \|\hat{P}_{11}\| + 4\|\hat{P}_{12}\| \right\}. \end{aligned}$$

Et donc $\|\Phi(\Xi) - \Phi(\Xi')\| \leq 6b/\hat{a}$. Sous la condition de hiérarchie entre les différentes orbites périodiques donnée par (4.4.10), Φ est bien une contraction sur \mathcal{B} . Elle admet donc un unique point fixe par le théorème du point fixe de Banach. \square

Remarque 4.4.5. Il vient de (4.4.9) que la solution S_{12}^* satisfait

$$\begin{aligned} S_{12}^* &= \left(\text{id} - \frac{\hat{P}_{11}}{\hat{a}} + \frac{\hat{P}_{21} S_{12}^*}{\hat{a}} \text{id} \right)^{-1} \frac{\hat{P}_{12}}{\hat{a}} \\ &= \sum_{k \geq 0} \left(\frac{\hat{P}_{11}}{\hat{a}} - \frac{\hat{P}_{21} S_{12}^*}{\hat{a}} \text{id} \right)^k \frac{\hat{P}_{12}}{\hat{a}}. \end{aligned}$$

Nous pouvons donc avoir une estimation plus précise de S_{12}^* que l'estimation a priori imposée par (4.4.11). Au premier ordre par exemple, nous avons

$$\left\| S_{12}^* - \frac{\hat{P}_{12}}{\hat{a}} \right\| \leq \frac{4b/\hat{a}}{1 - 4b/\hat{a}} \frac{\|\hat{P}_{12}\|}{\hat{a}}.$$

\diamond

Corollaire 4.4.6. Pour $0 \leq i \leq k-1$, notons λ_i^* les valeurs propres de K^* ordonnées de façon décroissante. La plus petite valeur propre non nulle en module λ_{k-1}^* de K^* est simple et réelle. Elle satisfait

$$\left| \lambda_{k-1}^* - \left(1 - \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_k}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_k \right\} \right) \right| \leq 2 \max_{1 \leq l \leq k-1} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_l}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_l \right\}. \quad (4.4.12)$$

De plus, pour $0 \leq i \leq k-2$, les autres valeurs propres non nulles de K^* satisfont

$$|1 - \lambda_i^*| \leq 4 \max_{1 \leq l \leq k-1} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_l}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \notin B_l \right\}.$$

Démonstration. A chaque valeur propre non nulle de P correspond une valeur propre non nulle de K^* . Par la Proposition 4.4.4, la plus grande valeur propre non nulle de $(\text{id} - P)$, et donc la plus petite de K^* , est réelle et positive. Elle satisfait

$$\left| (1 - \lambda_{k-1}^*) - \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_k}} \left\{ X_{\tau_{B_k}^+} \notin B_k \right\} \right| \leq 2\|\hat{P}_{12}\| \leq 2b.$$

\square

Remarque 4.4.7. Remarquons que $1 - \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_k}} \left\{ X_{\tau_{B_k}^+} \notin B_k \right\}$ est la valeur propre principale du noyau de transition $K_{B_k}^*$ qui correspond au processus décrit par le noyau de transition K^* tué quand il quitte B_k . Malgré l'hypothèse de hiérarchie métastable, pour un processus non réversible, il n'y a pas d'ordre entre la valeur propre du processus tué et la plus petite valeur propre du processus initial. Pour s'en convaincre considérons une matrice stochastique P à trois états

$$P = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \quad \text{avec } P_{11} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}, P_{12} \in \mathbb{R}^2, P_{21}^T \in \mathbb{R}^2, P_{22} \in \mathbb{R}.$$

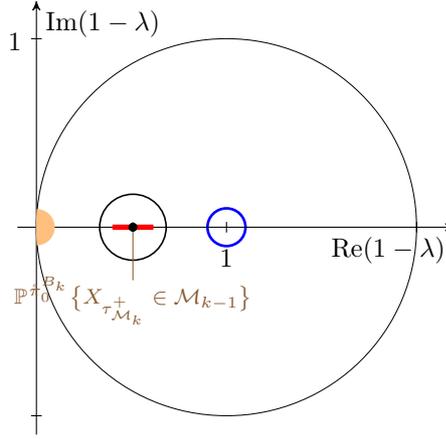


FIGURE 4.3 – Schéma de principe sur la position des valeurs propres de la matrice $\hat{P} = (\text{id} - P)$. Puisque P est une matrice stochastique, les valeurs propres de $(\text{id} - P)$ sont toutes dans un cercle centré en $(1, 0)$ et de rayon a . Le cercle bleu représente l'encadrement imposé par la condition d'existence des transformées de Laplace. La portion circulaire représentée en orange représente la borne sur les $(k - 1)$ -ièmes valeurs propres plus petites de $(\text{id} - P)$.

Le scalaire P_{22} est la valeur propre du processus tué lorsque qu'il quitte l'état 3. Notons λ la plus petite valeur propre de P , et $v = (v_1, v_2)$ le vecteur propre associé avec $v_1 \in \mathbb{R}^2$ et $v_2 \in \mathbb{R}$, ainsi

$$\begin{aligned} P_{11}v_1 + P_{12}v_2 &= \lambda v_1 \\ P_{21}v_1 + P_{22}v_2 &= \lambda v_2 . \end{aligned}$$

Si $(\lambda \text{id} - P_{11})$ est inversible, alors $v_1 = (\lambda \text{id} - P_{11})^{-1} P_{12} v_2$. En injectant cette expression de v_1 dans la seconde équation du système précédent, nous obtenons pour $v_2 \neq 0$

$$\lambda = P_{22} + P_{21}(\lambda \text{id} - P_{11})^{-1} P_{12} .$$

Les éléments de la matrice $(\lambda \text{id} - P_{11})^{-1}$ ne sont pas tous du même signe. Ainsi, suivant le signe de $P_{21}(\lambda \text{id} - P_{11})^{-1} P_{12}$, le scalaire $(\lambda - P_{22})$ peut être négatif ou positif. Pour $0 < a < 1/10$, considérons la matrice

$$\begin{pmatrix} 1 - a^3 - a^4 & a^3 & a^4 \\ a^2 & 1 - a^2 - a^4 & a^4 \\ a^4 & a & 1 - a - a^4 \end{pmatrix}$$

dont la plus petite valeur propre est $1 - a - 2a^4 < 1 - a - a^4 = P_{22}$. Tandis que la matrice

$$\begin{pmatrix} 1 - a^3 - a^4 & a^3 & a^4 \\ a^3 & 1 - a^2 - a^3 & a^2 \\ a & a^4 & 1 - a - a^4 \end{pmatrix}$$

a pour plus petite valeur propre $1/2(2 - a - a^2 - 2a^3 - 2a^4 - a(1 - a)^2 \sqrt{1 - 4a^2 - 4a^3}) > 1 - a - a^4 = P_{22}$. \diamond

La décomposition par blocs permet d'obtenir une expression explicite pour la fonction propre associée à la plus petite valeur propre non nulle de l'opérateur K^* .

Lemme 4.4.8. *À une constante multiplicative près, la fonction propre de l'opérateur K^* associée à la valeur propre λ_{k-1}^* est donnée par*

$$\phi_{k-1}^*(x) = \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{1}_{\{x \in B_i\}} (S_{12}^*)_i + \mathbf{1}_{\{x \in B_k\}}$$

où S_{12}^* est l'unique solution de (4.4.9).

Démonstration. La preuve découle du fait que

$$\hat{P} \begin{pmatrix} S_{12}^* \\ 1 \end{pmatrix} = (1 - \lambda_{k-1}^*) \begin{pmatrix} S_{12}^* \\ 1 \end{pmatrix}.$$

□

4.4.3.2 Estimation de la résolvante de K^*

Après avoir étudié le spectre de l'opérateur K^* , nous souhaitons maintenant estimer les quantités C et γ associées à la valeur propre simple λ_{k-1}^* de K^* , cf. (2.1.12) et (2.1.10). Nous avons donc besoin d'une borne supérieure sur la norme de la résolvante $\|(z \text{id} - K^*)^{-1}\|$ lorsque le complexe z est proche de λ_{k-1}^* . Remarquons d'abord que pour $z \neq 0$, la résolvante de l'opérateur K^* satisfait l'équation

$$(z \text{id} - K^*)^{-1} = \frac{1}{z} (\text{id} + K^* (z \text{id} - K^*)^{-1}). \quad (4.4.13)$$

La résolvante de l'opérateur K^* peut être estimée en fonction de la résolvante de la matrice P . En effet, en résolvant l'équation intégrale de Fredholm du second type,

$$\begin{aligned} z\phi(x) &= \varphi(x) + (K^*\phi)(x) \\ &= \varphi(x) + \int_{\mathcal{M}_k} \sum_{i=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dy \right\} \phi(y) \\ &= \varphi(x) + \sum_{i=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} c_i \end{aligned} \quad (4.4.14)$$

et par analogie aux calculs effectués pour l'équation homogène (4.4.7), nous obtenons le système d'équations linéaires donné par

$$z c_i - \sum_{j=1}^k P_{ij} c_j = \varphi_i \quad := \int_{\mathcal{M}_k} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dy \right\} \varphi(y) \quad \text{pour } 1 \leq i \leq k,$$

Si z n'est pas une racine du déterminant de Fredholm (cf. (2.1.3)), i.e. si z n'est pas une valeur propre de K^* , le système admet une unique solution donnée par

$$c_i = \sum_{j=1}^k (z \text{id} - P)_{ij}^{-1} \varphi_j, \quad 1 \leq i \leq k.$$

En insérant l'expression ci-dessus dans (4.4.14), il suit que

$$z\phi(x) = \varphi(x) + \int_{\mathcal{M}_k} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} (z \text{id} - P)_{ij}^{-1} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_j}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dy \right\} \varphi(y).$$

Ainsi, l'opérateur de la résolvante $(z \text{id} - K^*)^{-1}$ admet un noyau $R(z; x, dy)$ donné par

$$R(z; x, dy) = \frac{1}{z} \left[\text{id} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} (z \text{id} - P)_{ij}^{-1} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_j}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dy \right\} \right].$$

Puisque $R = \frac{1}{z} \{\text{id} + (RK^*)\}$ et grâce à l'équation (4.4.13), le noyau de l'opérateur de la résolvante $(z \text{id} - K^*)^{-1}$ est également donné par

$$R(z; x, dy) = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} (z \text{id} - P)_{ij}^{-1} \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_j}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dy \right\}.$$

Nous pouvons alors obtenir une borne supérieure sur la norme de la résolvante de l'opérateur K^* . Soit \mathcal{C} le lacet défini par

$$\{z \in \mathbb{C} : |z - \lambda_k| = r\},$$

avec r qui est supposé satisfaire

$$r < \frac{\hat{a}}{4} < \frac{\hat{a} - 6b}{2}.$$

Nous obtenons alors l'estimation de la norme de la résolvante.

Proposition 4.4.9. *Comme précédemment, λ_{k-1}^* désigne la plus petite valeur propre non nulle de l'opérateur K^* . Il existe une constante numérique $c_1 > 0$, indépendante de σ , telle que pour tout $z \in \mathcal{C}$*

$$\|(z \text{id} - K^*)^{-1}\| < c_1 (z - \lambda_{k-1}^*)^{-1}.$$

Démonstration. Remarquons d'abord que les résolvantes de K^* et P ont la même norme

$$\|(z \text{id} - K^*)^{-1}\| = \|(z \text{id} - P)^{-1}\|.$$

Grâce à la décomposition par blocs (4.4.8), nous pouvons obtenir un majorant de la norme de $\|(z \text{id} - P)^{-1}\|$ pour $z \in \mathcal{C}$. En effet, nous avons

$$\begin{aligned} \|(z \text{id} - P)^{-1}\| &= \left\| \left((1-z) \text{id} - \hat{P} \right)^{-1} \right\| \\ &\leq \|S\| \|S^{-1}\| \left\| \left((1-z) \text{id} - T \right)^{-1} \right\|. \end{aligned}$$

Puisque $\|S\| = \|S^{-1}\| = 1 + \|S_{12}\|$, nous majorons $\|S\| \|S^{-1}\|$ grâce à (4.4.11). Nous avons également une expression explicite pour $\left((1-z) \text{id} - T \right)^{-1}$, puisque

$$\left[\begin{pmatrix} (1-z) \text{id} - T_{11} & 0 \\ (z - \lambda_{k-1}^*)^{-1} T_{21} & (1-z) \text{id} - T_{11} \end{pmatrix} \right]^{-1} = \begin{pmatrix} \left[(1-z) \text{id} - T_{11} \right]^{-1} & 0 \\ 0 & \left[(1-z) \text{id} - T_{11} \right]^{-1} \end{pmatrix}.$$

Comme nous avons $|1-z| > \|T_{11}\|$ pour tout $z \in \mathcal{C}$, nous pouvons utiliser la borne classique de la série de Neumann pour majorer

$$\left\| \left((1-z) \text{id} - T_{11} \right)^{-1} \right\| \leq \frac{1}{|1-z| - \|T_{11}\|}.$$

Pour tout $r < \frac{\hat{a}-6b}{2}$, nous obtenons finalement

$$\|(z \text{id} - P)^{-1}\| \leq \frac{1}{|z - \lambda_{k-1}^*|} \left(1 + 2\frac{b}{\hat{a}} \right)^2 \left(1 + \frac{\hat{a}}{\hat{a} - 6b - r} \right).$$

Le résultat découle du fait que

$$\|(z \text{id} - P)^{-1}\| \leq 9 \left(1 + \frac{1}{4} \right)^2 |z - \lambda_{k-1}^*|^{-1}.$$

□

Nous avons alors tous les éléments pour estimer la constante C . Puisque le noyau de la résolvante est borné, le lemme d'estimation standard de l'intégrale curviligne implique que

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathcal{C}} \|(z \text{id} - K^*)^{-1}\|^2 dz \\ &\leq \frac{1}{\pi} \text{longueur}(\mathcal{C}) \max_{z \in \mathcal{C}} \|(z \text{id} - K^*)^{-1}\|^2 \\ &= 2r \max_{z \in \mathcal{C}} \|(z \text{id} - K^*)^{-1}\|^2. \end{aligned}$$

Nous avons alors

$$\epsilon = \min \left\{ \frac{1}{2} \gamma, (C+1)^{-1} \right\} \geq \frac{r}{396}.$$

Ainsi, si

$$\|K^u - K^*\| < \frac{r}{396},$$

nous obtenons le résultat souhaité pour caractériser le comportement des valeurs propres de l'opérateur K^u en fonction des valeurs propres de K^* .

4.5 Preuves des théorèmes

4.5.1 Preuve du théorème 4.2.1

Fixons $\eta > 0$ une petite constante. Nous commençons par estimer λ_{k-1} , la k -ième valeur propre du noyau K , en montrant qu'elle est proche de la k -ième valeur propre λ_{k-1}^* du noyau de rang fini K^* , que nous avons estimé grâce au Corolaire 4.4.6.

D'après (4.4.4) et (4.4.5), les éléments propres du noyau $K_{B_i}^0$ satisfont

$$\left| \overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i} \right| \leq e^{-c_0/\log(\sigma^{-1})}, \quad \left\| \overset{\circ}{\phi}_0^{B_i} - 1 \right\| \leq M_0 \log(\sigma^{-1}) e^{-[H(i, M_k \setminus \{i\}) - \eta]/\sigma^2}.$$

En insérant les expressions ci-dessus dans la Proposition 4.3.2 et grâce à l'hypothèse de la hiérarchie métastable 4.1.1 qui nous permet de comparer les quasi-potentiels $H(i, j)$, nous obtenons

$$\|(K^0)^m - (K^*)^m\| \leq 2e^{-mc_0/\log(\sigma^{-1})} + [M_0 \log(\sigma^{-1}) + m^2 e^{-H'_k/\sigma^2}] e^{-H'_k/\sigma^2}$$

où $H'_k = H(k, M_{k-1}) - \eta$. En utilisant la Proposition 4.3.1 et grâce à l'estimation des espérances du temps de retour dans \mathcal{M}_k et du temps d'atteinte de \mathcal{M}_k partant de \mathcal{M}_k^c obtenues dans la Section 3.3.2 nous pouvons montrer que $\|(K^u)^m - (K^*)^m\|$ est bornée par

$$\begin{aligned} \Delta_m &= 2e^{-mc_0/\log(\sigma^{-1})} + [M_0 \log(\sigma^{-1}) + m^2 e^{-H'_k/\sigma^2}] e^{-H'_k/\sigma^2} \\ &\quad + (1 + 2(1 - e^{-u}) e^{-\theta'/\sigma^2})^m - 1, \end{aligned}$$

dès que $(1 - e^{-u}) e^{[H(k+1, M_k) + \eta]/\sigma^2} \leq 1/2$. L'argument donné dans la Section 4.4 nous permet d'affirmer que $(K^u)^m$ admet une unique valeur propre λ_{k-1}^m dans le contour défini par le cercle \mathcal{C} de rayon $c_2 \Delta_m$ centré en $(\lambda_{k-1}^*)^m$ (pour une constante c_2 d'ordre 1). De plus, la valeur propre λ_{k-1} satisfait

$$\frac{1 - \lambda_{k-1}^m}{1 - (\lambda_{k-1}^*)^m} = 1 + \mathcal{O}\left(\frac{\Delta_m}{1 - (\lambda_{k-1}^*)^m}\right).$$

Ainsi, cette valeur propre est nécessairement réelle puisque le noyau $(K^u)^m$ est réel et qu'il a exactement une valeur propre dans le contour \mathcal{C} . En utilisant le fait que pour tout $x \in (0, 1)$ tel que $m(1 - x) < 2$, nous avons

$$(1 - x) \left[1 - \frac{1}{2} m(1 - x) \right] \leq \frac{1 - x^m}{m} \leq 1 - x,$$

nous obtenons

$$\frac{1 - \lambda_{k-1}}{1 - \lambda_{k-1}^*} = 1 + \mathcal{O}(m(1 - \lambda_{k-1}^*)) + \mathcal{O}\left(\frac{\Delta_m}{1 - (\lambda_{k-1}^*)^m}\right).$$

L'erreur est minimale pour $m = \log(\sigma^{-1}) e^{(2\eta + \delta)/\sigma^2}$, avec $\delta = H(k, M_{k-1})/2$. Grâce au Corolaire 4.4.6, nous avons donc montré que λ_{k-1} satisfait (4.2.1).

Comme discuté dans la section 4.3.1, en appliquant cet argument pour les noyaux $K^{u, (k)}$ avec $k = 1, \dots, N$, nous pouvons montrer que $K^{u, (N)}$ a exactement N valeurs propres en dehors d'un disque centré en l'origine. Le système d'équations (4.3.2) permet de se ramener aux valeurs propres du noyau K et de montrer qu'il a également N valeurs propres en dehors de ce disque. Les valeurs propres satisfont la même asymptotique.

Remarque 4.5.1. Pour justifier cet argument nous devons nous assurer que les valeurs propres du noyau $K^{u, (k)}$ varient suffisamment lentement en fonction de u . Ceci se vérifie aisément puisqu'un argument de perturbation standard montre que si la famille d'opérateurs linéaires $K(u)$ qui dépend continument de u , admet une valeur propre simple λ pour la valeur u_0 avec des fonctions propres à droite et à gauche π et ϕ , alors

$$\frac{d\lambda}{du}(u_0) = \pi \frac{dK}{du}(u_0) \phi.$$

La dérivée a pour expression

$$\frac{d}{du} K^u(x, dy) = \mathbb{E}^x \left\{ \left(\tau_{\mathcal{M}_k}^+ - 1 \right) e^{u(\tau_{\mathcal{M}_k}^+ - 1)} \mathbb{1}_{\{X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in dy\}} \right\}.$$

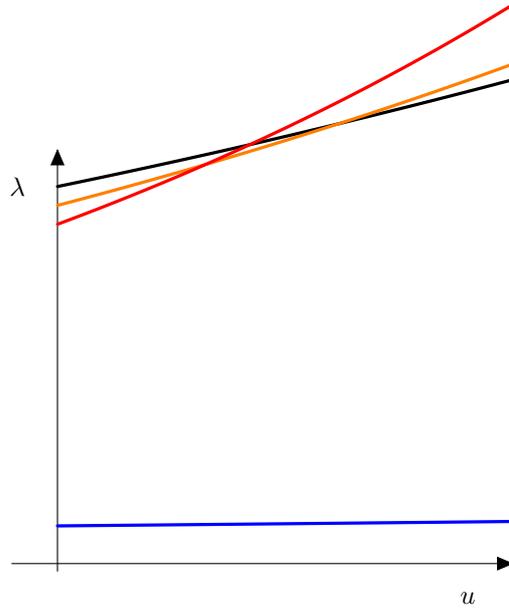


FIGURE 4.4 – Schéma de principe du comportement des valeurs propres de la famille d'opérateur K^u en fonction de u pour un système admettant $N = 3$ orbites périodiques stables. La courbe noire correspond à l'estimation de $\lambda_0(u)$, la courbe orange à l'estimation de $\lambda_1(u)$, la courbe rouge à l'estimation de $\lambda_2(u)$. La courbe bleue correspond à l'estimation de $\lambda_3(u)$. Toutes les autres valeurs propres de K^u sont situés sous la courbe bleue.

Par un raisonnement similaire à celui fait dans la preuve de la Proposition 2.3.7, nous pouvons vérifier que la norme de cet opérateur est d'ordre $\mathbb{E}^{\mathcal{M}_k} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ - 1 \}$ pour u tel que e^{-u} soit d'ordre λ_{k-1} . Le comportement des valeurs propres en fonction de u est illustré sur la Figure 4.4. \diamond

Pour justifier le trou dans le spectre donné par (4.2.2), nous utilisons le fait que pour m d'ordre $\log(\sigma^{-1})$,

$$\mathbb{P}^{\mathcal{M}_N^c} \{ X_m \in \mathcal{M}_N^c \} \leq \frac{1}{2}.$$

C'est une conséquence de l'estimation de l'espérance (3.3.10), de la Proposition 3.3.2 et de l'inégalité de Markov. Notons par $(\tilde{X}_n)_{n \geq 0} = (X_{mn})_{n \geq 0}$ le processus dilué d'un facteur m , alors la transformée de Laplace du temps où \tilde{X}_n atteint \mathcal{M}_N existe pour tout u satisfaisant $|e^{-u}| \geq 1/2$. Ainsi, par le même argument que celui utilisé précédemment, le noyau K^m a exactement N valeurs propres en dehors d'un disque de rayon $1/2$, ceci implique que le noyau K a N valeurs propres en dehors d'un disque de rayon $e^{-c_0/\log(\sigma)^{-1}}$.

Enfin, le résultat sur les valeurs propres principales donné par (4.2.3) est une conséquence du fait que la fonction propre principale du processus tué quand il atteint \mathcal{M}_{k-1} satisfait

$$\phi_0^{\mathcal{M}_{k-1}^c}(x) = \mathbb{E}^x \left\{ e^{u\tau_{B_k}} \phi_0^{\mathcal{M}_{k-1}^c}(X_{\tau_{B_k}}) \right\}.$$

Ainsi, elle est également une fonction propre du noyau

$$K_{B_k}^u(x, dy) = \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_{B_k}^+ - 1)} \mathbb{1}_{\{X_{\tau_{B_k}^+} \in dy, \tau_{B_k}^+ < \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+\}} \right\}.$$

Ce noyau peut être approché par

$$K_{B_k}^*(x, dy) = \int_{B_k} \overset{\circ}{\pi}_0^{B_k}(z) K_{B_k}^0(z, dy) dz = \mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_k}} \{X_{\tau_{B_k}^+} \in dy, \tau_{B_k}^+ < \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+\},$$

qui est un noyau de rang 1, dont la seule valeur propre non nulle a pour expression $\mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_k}} \{\tau_{B_k}^+ < \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+\}$. Puisque la norme de $K^u - K^*$ est bornée par la norme de la différence entre les noyaux K^u et K^* , nous pouvons appliquer le même argument de perturbation. \square

4.5.2 Preuve du théorème 4.2.4

Nous rappelons que la fonction propre ϕ_{k-1}^* associée à la k -ième valeur propre du noyau K^* a été obtenue dans le Lemme 4.4.8. Nous avons également $\|\phi_{k-1}^*\| = 1$. Afin d'estimer la différence entre les fonctions propres ϕ_{k-1} et ϕ_{k-1}^* , nous prenons un contour \mathcal{C} entourant λ_{k-1} et nous considérons l'opérateur de Riesz $\Pi_\sigma(K^u)$ (cf. (2.1.7)). Puisque $\Pi_\sigma(K^u)$ envoie toute fonction sur le sous espace propre associé à la valeur propre λ_{k-1} , la fonction propre ϕ_{k-1} est donnée à une constante de multiplication près par

$$\phi_{k-1} = \Pi_\sigma(K^u)\phi_{k-1}^*.$$

Par ailleurs, nous avons également

$$\phi_{k-1}^* = \Pi_\sigma(K^*)\phi_{k-1}^*,$$

où le projecteur de Riesz $\Pi_\sigma(K^*)$ est défini avec le même contour \mathcal{C} . En prenant la différence entre ces deux équations, grâce à la Proposition 2.1.11, nous obtenons que

$$\|\phi_{k-1} - \phi_{k-1}^*\| \leq C\|K^u - K^*\|,$$

où la constante C est définie dans (2.1.12), tant que $\|K^u - K^*\| < \gamma/2$, cf. (2.1.10). Nous pouvons avoir une estimation analogue pour les itérés $(K^u)^m$ et $(K^*)^m$, avec un contour autour de λ_{k-1}^m . En prenant m comme dans la section précédente, et un contour circulaire de rayon $(1 - \lambda_{k-1}^m)/2$, nous obtenons

$$\|\phi_{k-1} - \phi_{k-1}^*\| = \mathcal{O}(e^{-\theta_{k-1}/\sigma^2}),$$

où θ_{k-1} est proche d'une distance η de $H(k, M_{k-1})/2$.

Grâce à la relation de type Feynman–Kac de la Proposition 2.2.2 avec $e^{-u} = \lambda_{k-1}$, nous obtenons une expression pour la fonction propre pour tout $x \in \mathcal{M}_k$

$$e^{-u} \phi_{k-1}(x) = \mathbb{E}^x \{\phi_{k-1}(X_{\tau_{\mathcal{M}_k}})\} + \mathbb{E}^x \{(e^{u(\tau_{\mathcal{M}_k}-1)} - 1)\phi_{k-1}(X_{\tau_{\mathcal{M}_k}})\}.$$

Grâce à la Proposition 2.3.7, le second terme du membre de droite est d'ordre $e^{-(H(k, M_{k-1}) + \theta' - \eta)/\sigma^2}$. Concernant le premier terme, nous pouvons l'écrire sous une autre forme en se souvenant que ϕ_{k-1}^* est constant sur chaque B_j

$$\sum_{j=1}^k \mathbb{E}^x \left\{ \mathbb{1}_{\{X_{\tau_{\mathcal{M}_k}} \in B_j\}} \phi_{k-1}(X_{\tau_{\mathcal{M}_k}}) \right\} = \sum_{j=1}^k \mathbb{P}^x \{ \tau_{B_j} < \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_j} \} \phi_{k-1}^*(x_j^*) + \mathcal{O}(e^{-\theta_{k-1}/\sigma^2}).$$

À l'ordre le plus bas, avec le Lemme 4.4.8 et la Remarque 4.4.5, nous avons $\phi_{k-1}^*(x_j^*) = \delta_{jk} + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})$, ceci montre (4.2.4). L'expression plus précise (4.2.6) est basée sur le fait que

$$\phi^*(x_j^*) = -\frac{\mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_j}} \{ \tau_{B_k}^+ < \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ \}}{\mathbb{P}^{\overset{\circ}{\pi}_0^{B_k}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ < \tau_{B_k}^+ \}} + \mathcal{O}(e^{-2\theta^-/\sigma^2}),$$

c'est une conséquence de la Remarque 4.4.5.

Concernant la fonction propre principale $\phi_0^{\mathcal{M}_{k-1}^c}$, elle satisfait

$$e^{-u} \phi_0^{\mathcal{M}_{k-1}^c}(x) = \mathbb{E}^x \left\{ \phi_0^{\mathcal{M}_{k-1}^c}(X_{\tau_{B_k}}) \mathbb{1}_{\{\tau_{B_k} < \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}\}} \right\} + \mathbb{E}^x \left\{ (e^{u(\tau_{\mathcal{M}_k}-1)} - 1) \phi_0^{\mathcal{M}_{k-1}^c}(X_{\tau_{B_k}}) \mathbb{1}_{\{\tau_{B_k} < \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}\}} \right\},$$

où $e^{-u} = \lambda_0^{\mathcal{M}_{k-1}^c}$. Le premier terme dans le membre de droite vaut

$$\mathbb{P}^x \{ \tau_{B_k} < \tau_{\mathcal{M}_{k-1}} \} (1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_{k-1}/\sigma^2})),$$

tandis que le second peut être majoré par $\mathcal{O}(e^{-(H(k, M_{k-1}) + \theta' - \eta)/\sigma^2})$.

4.5.3 Preuve du théorème 4.2.8

En utilisant la Proposition 4.2.7 avec $A_1 = B_1$ et $A_2 = \mathcal{M}_N \setminus B_1$ ainsi que la borne obtenue a priori par les grandes déviations de la Proposition 3.4.2 nous avons $\pi_0(\mathcal{M}_N \setminus B_1) \leq e^{-\theta^-/\sigma^2} \pi_0(B_1)$. Nous avons alors montré (4.2.8) grâce à (4.2.7).

La borne (4.2.9) peut être obtenue en travaillant sur la distribution quasi-stationnaire du processus $\bar{X}^{\mathcal{M}_k^c}$ obtenue par la transformée harmonique de Doob, et en utilisant la relation (2.5.1) entre les fonctions propres à gauche des deux processus.

Pour montrer la première équation de (4.2.10), nous utilisons le Lemme 2.2.4, qui montre que π_{k-1} est une fonction propre à gauche du noyau K^u cf. (4.4.1). Ainsi, nous nous attendons à ce que π_{k-1} soit proche de la fonction propre à gauche π_{k-1}^* du noyau K^* . Grâce à la triangularisation par blocs (4.4.8), la fonction propre π_{k-1}^* satisfait

$$\pi_{k-1}^* = (\hat{\pi}, 1 - \hat{\pi}S_{12}^*) \quad \text{où} \quad \hat{\pi} = (\alpha \text{id} - T_{11})^{-1} \hat{P}_{21},$$

ceci implique

$$\begin{aligned} \pi_{k-1}^*(B_k) &= 1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2}), \\ \pi_{k-1}^*(B_j) &= -\frac{\mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_k}} \{ \tau_{B_j}^+ < \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_j}^+ \}}{\mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_k}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ < \tau_{B_k}^+ \}} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta^-/\sigma^2})] \quad \text{pour } 1 \leq j \leq k-1. \end{aligned}$$

Afin de comparer π_{k-1} et π_{k-1}^* , nous utilisons le fait que la norme L^1 du noyau K , agissant sur les mesures signées peut être bornées par $\sup_{x \in \mathcal{M}_k} K(x, \mathcal{M}_k)$. Ainsi l'argument utilisé pour les fonctions propres à droite avec les opérateurs de Riesz, peut être utilisée pour les fonctions propres à gauche et nous obtenons

$$|\pi_{k-1}(B_j) - \pi_{k-1}^*(B_j)| = \mathcal{O}(e^{-\theta_{k-1}/\sigma^2}).$$

Enfin, la seconde relation dans (4.2.10) est obtenue en comparant le processus de base et le processus tué dont l'horloge n'est incrémenté que lorsqu'il visite \mathcal{M}_j . Le noyau du processus original peut être approché par le noyau K^* de rang j tandis que le processus tué peut être approché par le processus restreint à $B_k \cup \dots \cup B_j$. Une triangularisation par blocs similaire à celle de la Section 4.4.3.1, avec des blocs de taille $k-1$ et $j-k+1$, permet d'obtenir le résultat. \square

4.5.4 Preuve du théorème 4.2.10

Nous obtiendrons le résultat désiré si nous parvenons à contrôler l'oscillation de l'espérance $\mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ \}$ lorsque x varie dans B_k . Pour ce faire, nous allons établir le lien entre le temps d'atteinte $\tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+$ pour le processus décrit par le noyau K sur Σ et le temps d'atteinte de \mathcal{M}_{k-1} pour le processus dont l'horloge n'est incrémentée que lorsqu'il visite \mathcal{M}_k et qui est tué quand il atteint \mathcal{M}_{k-1} . Remarquons que le processus est décrit par le noyau $K_{B_k}^0$ pour lequel nous contrôlons l'oscillation de la fonction propre principale. Ainsi, nous introduisons la chaîne $(\hat{X}_n)_n$ décrite par le noyau $K_{B_k}^0$. Notons $\hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}}$ le temps de mort de la chaîne \hat{X}_n . Puisque

$$\mathbb{E}^x \{ \hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}} \} \leq \mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ \} = \mathbb{E}^x \left\{ \sum_{n=0}^{\hat{\tau}-1} \mathbb{E}^{\hat{X}_n} \{ \tau_{\mathcal{M}_k} \} \right\} \leq \mathbb{E}^x \{ \hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}} \} \mathbb{E}^{B_k} \{ \tau_{\mathcal{M}_k} \},$$

en divisant de part et d'autres par $\mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_k} \}$, nous obtenons

$$1 \leq \frac{\mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ \}}{\mathbb{E}^x \{ \hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}} \}} \leq \mathbb{E}^{B_k} \{ \tau_{\mathcal{M}_k} \}.$$

Nous rappelons que la notation $\mathbb{E}^{B_k} \{ \cdot \}$ désigne la borne supérieure $\sup_{x \in B_k} \mathbb{E}^x \{ \cdot \}$, elle a été introduite par (2.2.1). Nous obtenons alors

$$\frac{\mathbb{E}^{B_k} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ \}}{\inf_{x \in B_k} \mathbb{E}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_{k-1}}^+ \}} \leq \frac{\mathbb{E}^{B_k} \{ \hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}} \}}{\inf_{x \in B_k} \mathbb{E}^x \{ \hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}} \}} \mathbb{E}^{B_k} \{ \tau_{\mathcal{M}_k} \}. \quad (4.5.1)$$

Pour contrôler l'oscillation de l'espérance de $\hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}}$, nous utilisons la décomposition spectrale (2.4.3). Nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^x \{ \hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}} \} &= \sum_{n \geq 0} (K_{B_k}^0)^n(x, B_k) \\ &= \sum_{n \geq 0} (\overset{\circ}{\lambda}_0^{B_k})^n \left\{ \overset{\circ}{\phi}_0^{B_k}(x) + \left(\frac{\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_k}}{\overset{\circ}{\lambda}_0^{B_k}} \right)^n g^n(x, B_k) \right\}. \end{aligned}$$

Puisque le noyau $K_{B_k}^0$ satisfait une condition de positivité uniforme (2.4.8) pour un n_0 d'ordre $\log(\sigma^{-1})$, nous avons

$$\mathbb{E}^x \{ \hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}} \} = \frac{1}{1 - \overset{\circ}{\lambda}_0^{B_k}} \overset{\circ}{\phi}_0^{B_k}(x) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{1 - \rho^{1/n_0} \overset{\circ}{\lambda}_0^{B_k}} \right).$$

Grâce à la Proposition 2.4.6, cela montre que l'oscillation de $\mathbb{E}^x \{ \hat{\tau}_{\mathcal{M}_{k-1}} \}$ est bornée par un terme d'ordre $\log(\sigma^{-1}) e^{-(H(k, M_{k-1}) - \eta)/\sigma^2}$. Le résultat est alors obtenu en utilisant (4.5.1). \square

Chapitre 5

Relaxation de l'hypothèse de hiérarchie métastable

Nous nous plaçons sous les mêmes hypothèses que celles formulées dans le Chapitre 3, à savoir l'hypothèse faite sur les ensembles limites de l'EDO (3.1.1) (cf. Hypothèse 3.1.9), et l'hypothèse d'ellipticité de la fonction de diffusion g de l'EDS (3.2.1) (cf. Hypothèse 3.2.1).

Lorsque les quasi-potentiels entre les orbites périodiques sont proches ou égaux, ce qui se produit par exemple en présence de symétries, l'hypothèse de hiérarchie métastable (cf. Hypothèse 4.1.1) n'est pas vérifiée. Cette dégénérescence n'est pas spécifique aux systèmes non-réversibles que nous étudions. La Figure 5.1 montre des fonctions potentielles ne satisfaisant pas l'hypothèse de hiérarchie métastable.

Pour quantifier les transitions entre les orbites périodiques, nous souhaitons résoudre le problème aux valeurs propres de l'application de Poincaré aléatoire

$$(K\phi)(x) = e^{-u} \phi(x)$$

où $u \in \mathbb{C}$ est le paramètre spectral. Nous montrons que si le système déterministe admet N orbites périodiques asymptotiquement stables, alors l'application de Poincaré aléatoire admet N valeurs propres exponentiellement proches de 1. Cependant, à cause de cette dégénérescence, nous ne pouvons pas toujours associer à chaque valeur propre un unique voisinage. Le cas où deux quasi-potentiels sont proches ou égaux est discuté en détail.

Comme dans le chapitre précédent, les preuves combinent des éléments issus de la théorie des grandes déviations, de la théorie du potentiel en résolvant des problèmes aux bords, et de la théorie spectrale en approchant l'opérateur par un opérateur de rang fini. La définition de celui-ci sera légèrement différente de celle de l'opérateur de rang fini du chapitre précédent. En effet, il sera défini à partir d'une opération similaire au complément de Schur pour les opérateurs intégraux. Tout au long de ce chapitre, nous nous efforçons de donner une interprétation probabiliste pour les estimations des valeurs propres.

5.1	Idée générale de la preuve	82
5.2	Définition et propriétés de l'opérateur de rang fini	82
5.2.1	Motivation de la nouvelle définition	82
5.2.2	Complément de Schur dans le cas matriciel	83
5.2.3	Complément de Schur dans le cas des opérateurs intégraux	84
5.3	Couple d'orbites périodiques ayant un quasi-potentiel de même niveau	87
5.3.1	Idée générale du comportement des valeurs propres	87
5.3.2	Rares transitions entre les deux voisinages B_k et B_{k+1}	90
5.3.2.1	Cas où le pseudospectre est composé de deux composantes connexes	91
5.3.2.2	Cas où le pseudospectre est composé d'une seule composante connexe	92
5.3.3	Transitions probables entre les deux voisinages B_k et B_{k+1}	93
5.4	Perspectives	94
5.4.1	Calcul des fonctions propres, et espérance des temps d'atteinte	94
5.4.2	Approximation de la dynamique du processus par un modèle réduit	94
5.4.3	Lien entre les différentes distributions quasi-stationnaires	94

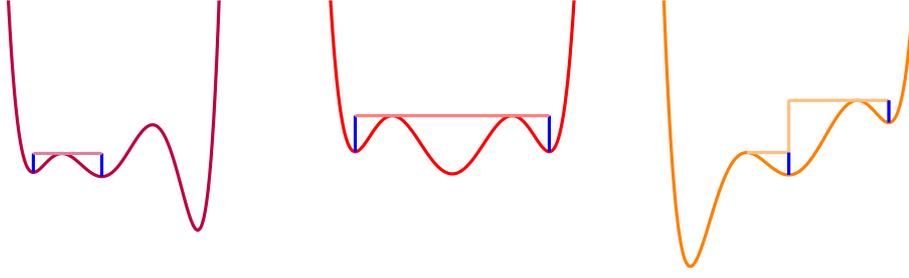


FIGURE 5.1 – Illustration de trois fonctions potentielles ne satisfaisant pas l'hypothèse de hiérarchie métastable.

5.1 Idée générale de la preuve

Pour étudier le problème aux valeurs propres,

$$(K\phi)(x) = e^{-u} \phi(x)$$

où $u \in \mathbb{C}$ est le paramètre spectral, de nombreux arguments utilisés dans le chapitre précédent restent applicables. En particulier, grâce au problème aux bords de Dirichlet, nous pouvons définir le noyau K^u sur un ensemble $A \subset \Sigma$

$$K^u(x, B) := \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_A^+ - 1)} \mathbb{1}_{\{X_{\tau_A^+} \in B\}} \right\} \quad \forall x \in A, B \subset A,$$

et étudier le problème aux valeurs propres de cet opérateur. En s'appuyant sur les résultats de la théorie spectrale, nous allons comme dans le chapitre précédent approcher cet opérateur par un opérateur de rang fini K^* , déterminer les propriétés spectrales de K^* et en déduire celle de K^u et donc de K .

Si le noyau de rang fini K^* ne sera pas exactement le même que celui utilisé dans le chapitre précédent, sa définition s'inspire des propriétés spectrales du noyau de rang fini du chapitre précédent. La principale différence avec le raisonnement effectué dans le chapitre précédent réside dans le fait que nous n'allons pas pouvoir estimer les valeurs propres une à une en prenant l'ensemble de définition du noyau restreint K^u , comme une union des voisinages des orbites périodiques. En effet, en considérant un problème aux valeurs propres défini sur $\mathcal{M}_{k+l} = \cup_{i=1}^{k+l} B_i$, en présence de l quasi-potentiels proches ou égaux et selon les configurations nous allons estimer r valeurs propres (avec $1 \leq r \leq l$). Puis nous définirons un problème aux valeurs propres sur \mathcal{M}_{k+l-r} pour le noyau K^u , et itérerons l'argument jusqu'à ce que l'on ait estimé les N valeurs propres.

5.2 Définition et propriétés de l'opérateur de rang fini en l'absence de hiérarchie métastable, cas générique

5.2.1 Motivation de la nouvelle définition

Si nous appliquons directement le raisonnement fait dans le chapitre précédent à savoir :

- définition du problème aux bords de Dirichlet sur \mathcal{M}_{k+l} ,
- définition du noyau K^u sur \mathcal{M}_{k+l} ,
- approximation du noyau K^u par les noyaux K^0 et K^* ,

nous sommes amenés à étudier les propriétés spectrales d'une matrice stochastique P à $(k+l)$ états dont les termes sont donnés par

$$P_{ij} = \mathbb{P}^{\pi_0^{B_i}} \{X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+l}}^+} \in B_j\}.$$

Puisque nous avons fait l'hypothèse qu'il y ait l quasi-potentiels de niveau égal ou proches, nous décomposons la matrice stochastique en deux blocs en l'écrivant sous la forme

$$P = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix}$$

où les matrices P_{11} et P_{22} sont des matrices réelles carrées de tailles respectives k et l . Les matrices P_{12} et P_{21} sont des matrices rectangulaires réelles de tailles respectives $k \times l$ et $l \times k$. Le rapport de deux termes diagonaux de la matrice $(\text{id} - P_{22})$ est d'ordre 1 tandis qu'il existe une constante $\theta > 0$ telle que le minimum des termes diagonaux de la matrice $(\text{id} - P_{22})$ est supérieur d'un facteur $e^{-\theta/\sigma^2}$. En effet, d'après la Proposition 3.4.2 qui repose sur la théorie des grandes déviations, si les quasi-potentiels des orbites périodiques $k+1, \dots, k+l$ sont proches ou égaux alors il existe des constantes c_j d'ordre 1 telles que

$$\begin{aligned} c_{k+1} \mathbb{P}^{x_{k+1}^*} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \} &= c_{k+2} \mathbb{P}^{x_{k+2}^*} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_{k+2}}^+ < \tau_{B_{k+2}}^+ \} \\ &= \dots \\ &= \mathbb{P}^{x_{k+l}^*} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_{k+l}}^+ < \tau_{B_{k+l}}^+ \}. \end{aligned}$$

Sans perte de généralité, et grâce à l'encadrement donné par (4.4.10), nous pouvons imposer que pour tout $k+1 \leq j \leq k+l$, les constantes c_j satisfont $1/8 \leq c_k \leq 1$. Nous allons dans un premier temps étudier le problème aux valeurs propres pour la matrice P .

Dans le cas où la hiérarchie métastable était satisfaite, nous avons pu triangulariser par blocs la matrice $(\text{id} - P)$

$$\begin{pmatrix} \text{id} - P_{11} & -P_{12} \\ -P_{21} & \text{id} - P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{id} & S_{12} \\ 0 & \text{id} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{id} & S_{12} \\ 0 & \text{id} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{11} & 0 \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}.$$

En résolvant ce système, grâce au théorème du point fixe, nous avons pu justifier l'existence d'une telle décomposition. Ainsi, les valeurs propres de la matrice $(\text{id} - P)$ sont celles de T_{11} et T_{22} . Grâce à l'hypothèse de hiérarchie métastable, nous avons majoré $\|S_{12}\|$ et nous avons montré que les valeurs propres de T_{22} sont proches de celles de P_{22} . Si nous nous contentons de réaliser une triangularisation similaire sans cette hypothèse de hiérarchie métastable, selon la structure des blocs P_{12} et P_{22} , la norme de la matrice S peut exploser. Ainsi, même si une telle décomposition existe, elle ne permet pas d'approcher les valeurs propres de $(\text{id} - P)$. Pour illustrer ce phénomène, nous considérons la matrice stochastique à trois états $\{1, 2, 3\}$

$$P = \begin{pmatrix} 1 - 2\epsilon^2 & \epsilon^2 & \epsilon^2 \\ \epsilon^3 & 1 - \epsilon - \epsilon^3 & \epsilon \\ \epsilon^6 & \epsilon & 1 - \epsilon - \epsilon^6 \end{pmatrix}$$

où les états 2 et 3 ont au premier ordre en ϵ la même probabilité de faire une transition vers n'importe quel autre état, ainsi dans cet exemple $k = 1$ et $l = 2$. La décomposition par blocs est possible mais puisque $\|S_{12}\| = \mathcal{O}(\|P_{12}(\text{id} - P_{22})^{-1}\|)$ et que pour cet exemple

$$P_{12}(\text{id} - P_{22})^{-1} = \frac{1}{\epsilon^4 + \epsilon^7 + \epsilon^9} (2\epsilon^3 + \epsilon^8 \quad 2\epsilon^3 + \epsilon^5),$$

une telle triangularisation ne donnera pas une approximation satisfaisante des valeurs propres. De plus, une telle décomposition n'a pas d'interprétation probabiliste. Nous proposons alors un autre type de décomposition, basée sur le complément de Schur.

5.2.2 Complément de Schur dans le cas matriciel

Pour une matrice P stochastique et irréductible, la matrice $(\text{id} - P)$ est une matrice singulière de rang $(k+l)$, c'est également une M -matrice, ce qui signifie que ses éléments extra-diagonaux sont négatifs et que de plus tous ses mineurs principaux sont strictement positifs. De plus, toute sous-matrice principale (différente de $(\text{id} - P)$) est une matrice non singulière [17, Théorème 4.16]. En particulier, la matrice $(\text{id} - P_{22})$ est une M -matrice non singulière, elle satisfait donc

$$(\text{id} - P_{22})^{-1} \geq 0$$

Nous pouvons donc définir la matrice carrée de taille $k \times k$

$$T_{11} = P_{11} + P_{12}(\text{id} - P_{22})^{-1}P_{21}.$$

Remarquons que cette matrice correspond à $(\text{id} - \text{Complément de Schur}(\text{id} - P_{22}))$ pour la matrice $(\text{id} - P)$. De plus, d'un point de vue probabiliste, cette matrice est une matrice stochastique qui correspond au processus trace dans les états correspondant à la matrice P_{11} . Cette matrice va nous permettre de montrer que la matrice stochastique P est proche d'une matrice triangulaire par blocs.

Proposition 5.2.1. *Soit P une matrice stochastique irréductible, décomposée en blocs de taille k et l*

$$P = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix},$$

et soit T la matrice définie à partir de la matrice P par

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & 0 \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

où $T_{11} = P_{11} + P_{12}(\text{id} - P_{22})^{-1}P_{21}$, $T_{21} = P_{21}$ et $T_{22} = P_{22}$. Alors T est une matrice stochastique et

$$\|P - T\| = \|P_{12}\|$$

Démonstration. Notons e le vecteur de taille l composé uniquement de 1. Puisque P est une matrice stochastique, nous avons

$$P_{21}e + P_{22}e = e,$$

ceci implique que

$$(\text{id} - P_{22})^{-1}P_{21}e = e.$$

Ainsi, comme les matrices P_{12} , $(\text{id} - P_{22})$ et P_{21} sont toutes composées d'éléments positifs, nous avons

$$\|T_{11} - P_{11}\| = \|P_{12}(\text{id} - P_{22})^{-1}P_{21}\| = \|P_{12}(\text{id} - P_{22})^{-1}P_{21}e\| = \|P_{12}e\| = \|P_{12}\|.$$

Nous obtenons ainsi le résultat pour $\|T - P\|$ □

Remarque 5.2.2. Si nécessaire, nous pouvons majorer la différence entre les itérés des processus définis par la matrice P et T en remarquant que pour tout entier m

$$P^m - T^m = T^{m-1}(P - T) + T^{m-2}(P - T)P + \dots + T(P - T)P^{m-2} + (P - T)P^{m-1}. \quad (5.2.1)$$

Puisque les matrices P et T sont stochastiques, pour tout entier j , les normes des itérés satisfont $\|P^j\| = \|T^j\| = 1$. Ainsi, la norme de la différence entre les itérés est majorée par

$$\|P^m - T^m\| \leq m\|P - T\|.$$

◇

Nous pouvons alors estimer les valeurs propres de la matrice T et en déduire celles de l'opérateur K en utilisant un argument de perturbation des opérateurs compacts. Cependant, pour avoir une meilleure interprétation probabiliste des valeurs propres, nous allons non pas triangulariser la matrice P mais directement l'opérateur K^0 . En effet, un analogue au complément de Schur peut être défini pour un noyau de transition irréductible sur un espace général, en introduisant le noyau "triangularisé".

5.2.3 Complément de Schur dans le cas des opérateurs intégraux

Proposition 5.2.3. *Pour tout noyau K irréductible, nous pouvons définir le noyau K^Δ qui décrit le processus qui lorsqu'il entre A se comporte comme le processus trace dans A*

$$K^\Delta(x, B) = {}_A K(x, A \cap B)\mathbf{1}_{\{x \in A\}} + K(x, B)\mathbf{1}_{\{x \in A^c\}}.$$

La norme de la différence entre l'opérateur K^Δ et l'opérateur de départ K satisfait

$$\|(K^\Delta - K)\| \leq \sup_{x \in A} K(x, A^c).$$

Démonstration. Par définition, la norme de la différence est donnée par

$$\|K^\Delta - K\| = \sup_{\substack{\phi \in L^\infty(\Sigma) \\ \phi \neq 0}} \frac{\|(K^\Delta - K)(\phi)\|}{\|\phi\|}$$

Puisque pour $x \in A^c$, les deux processus sont identiques, nous avons

$$\begin{aligned} \|(K^\Delta - K)(\phi)\| &\leq \left\| \int_{A^c} \mathbb{1}_{\{x \in A\}} K(x, dy) \phi(y) \right\| \\ &+ \left\| \int_A \int_{A^c} \int_{A^c} \mathbb{1}_{\{x \in A\}} K(x, dz_1) (\text{id} - K \text{id}_{A^c})^{-1}(z_1, dz_2) K(z_2, dy) \phi(y) \right\|. \end{aligned}$$

Remarquons alors que

$$\|(\text{id} - K \text{id}_{A^c})^{-1} K \text{id}_{A^c}\| = 1. \quad (5.2.2)$$

En effet, puisque K est un noyau stochastique, il admet 1 comme valeur propre simple avec comme fonction propre $\phi_0 \equiv 1$. Pour tout $x \in A$, nous avons alors

$$\int_A K(x, dy) \phi_0(y) + \int_{A^c} K(x, dy) \phi_0(y) = \phi_0(x),$$

de sorte que

$$(\text{id}_A - K \text{id}_{A^c}) \phi_0(x) = K \text{id}_A \phi_0(x),$$

ceci montre (5.2.2). Ainsi,

$$\|(K^\Delta - K)\| \leq 2 \sup_{x \in A} K(x, A^c).$$

□

Remarque 5.2.4. Si nécessaire, de manière analogue à (5.2.1), nous pouvons majorer la différence entre les itérés des processus définis par K et K^Δ puisque pour tout $m \geq 1$

$$\|K^m - (K^\Delta)^m\| \leq m \|K - K^\Delta\|.$$

◇

Grâce à cette remarque, nous pouvons définir le noyau de rang fini qui nous permettra d'avoir une bonne estimation des valeurs propres dans le cas où l'hypothèse de hiérarchie métastable n'est pas satisfaite. Soit K^0 le processus trace défini sur \mathcal{M}_{k+l} . Nous introduisons le processus de rang fini K^* défini pour tout $x \in \mathcal{M}_{k+l}$, et pour tout borélien $B \subset \mathcal{M}_{k+l}$ par

$$\begin{aligned} K^*(x, B) &:= \sum_{i=1}^k \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} \mathbb{P}^{(k)\tilde{\pi}_0^{B_i}} \{X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in B\} \\ &+ \sum_{i=k+1}^{k+l} \mathbb{1}_{\{x \in B_i\}} \mathbb{P}^{(k+l)\tilde{\pi}_0^{B_i}} \{X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+l}}^+} \in B\}, \end{aligned}$$

où $(k)\tilde{\pi}_0^{B_i}$ correspond à la distribution quasi-stationnaire du processus trace défini sur \mathcal{M}_k qui est tué quand il quitte B_i , et de la même manière, $(k+l)\tilde{\pi}_0^{B_i}$ correspond à la distribution quasi-stationnaire du processus trace défini sur \mathcal{M}_{k+l} qui est tué quand il quitte B_i .

Remarquons alors que par l'inégalité triangulaire, pour tout $m \geq 1$, nous avons

$$\|(K^u)^m - (K^*)^m\| \leq \|(K^u)^m - (K^0)^m\| + \|(K^0)^m - (K^*)^m\|. \quad (5.2.3)$$

Le premier terme du membre de gauche sera majoré grâce à la Proposition 2.3.10, tandis que le second terme du membre de gauche sera majoré grâce à la Proposition 5.2.3, et en utilisant un argument analogue à celui utilisé dans la preuve de la Proposition 4.3.2. Ainsi,

$$\begin{aligned} \|(K^u)^m - (K^*)^m\| &\leq \left(1 + \frac{(1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{\mathcal{M}_{k+l}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l}}^+ - 1 \}}{1 - (1 - e^{-u}) \mathbb{E}^{\mathcal{M}_{k+l}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l}}^+ \}} \right)^m - 1 \\ &+ \max_{1 \leq i \leq k+l} m(m-1) \mathbb{P}^{B_i} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_i}^+ < \tau_{B_i}^+ \right\} \mathbb{P}^{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_i} \left\{ \tau_{B_i}^+ < \tau_{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_i}^+ \right\} \\ &+ \max_{1 \leq i \leq k} R_i + \max_{k+1 \leq i \leq k+l} S_i \end{aligned}$$

où

$$R_i = \|(k)\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i} - 1\| + 2(k)\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i} + 2\frac{1 - (k)\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i}{}^m}{1 - (k)\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i}} \mathbb{P}^{B_i} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_i}^+ < \tau_{B_i}^+ \right\} \\ + m \mathbb{P}^{B_i} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_i}^+ < \tau_{B_i}^+ \right\}$$

et

$$S_i = \|(k+l)\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i} - 1\| + 2(k+l)\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i} + 2\frac{1 - (k+l)\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i}{}^m}{1 - (k+l)\overset{\circ}{\lambda}_1^{B_i}} \mathbb{P}^{B_i} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_i}^+ < \tau_{B_i}^+ \right\}.$$

Les quantités $(k)\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i}$ et $(k)\overset{\circ}{\lambda}_j^{B_i}$ sont reliées au processus trace sur \mathcal{M}_k qui est tué quand il quitte B_i , il en est de même pour $(k+l)\overset{\circ}{\phi}_0^{B_i}$ et $(k+l)\overset{\circ}{\lambda}_j^{B_i}$ qui sont reliées au processus trace sur \mathcal{M}_{k+l} qui est tué quand il quitte B_i . Elles peuvent être estimées grâce au contrôle de l'oscillation de la fonction propre principale et du trou spectral. Pour tout m satisfaisant

$$m \mathbb{P}^{B_{k+l}} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l}}^+ < \tau_{B_{k+l}}^+ \right\} \ll 1,$$

la norme de la différence sera petite. Ainsi, nous pourrons utiliser le même argument de perturbation des opérateurs compacts.

Afin d'étudier les propriétés spectrales du noyau K^* nous lui associons la matrice stochastique P de taille $(k+l) \times (k+l)$ qui se décompose en deux blocs de taille k et l

$$P = \begin{pmatrix} T & 0 \\ R & Q \end{pmatrix} \quad (5.2.4)$$

où la matrice T est une matrice carrée de taille k de terme général

$$T_{ij} = \mathbb{P}^{(k)\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_k}^+} \in B_j \right\},$$

la matrice Q est une matrice carrée de taille l de terme général

$$Q_{ij} = \mathbb{P}^{(k+l)\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+l}}^+} \in B_j \right\},$$

et la matrice R est une matrice rectangulaire de taille $l \times k$ de terme général

$$R_{ij} = \mathbb{P}^{(k+l)\overset{\circ}{\pi}_0^{B_i}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+l}}^+} \in B_j \right\}.$$

Puisque la matrice P est triangulaire, les valeurs propres non nulles de K^* sont celles de T et celles de Q .

Proposition 5.2.5. *Les k valeurs propres de T satisfont*

$$|1 - \lambda| \leq 2 \max_{1 \leq j \leq k} \mathbb{P}^{(k)\overset{\circ}{\pi}_0^{B_j}} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_j}^+ < \tau_{B_j}^+ \right\}. \quad (5.2.5)$$

Les l valeurs propres de Q satisfont

$$|1 - \lambda| \leq 2 \max_{k \leq j \leq k+l} \mathbb{P}^{(k+l)\overset{\circ}{\pi}_0^{B_j}} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k+l} \setminus B_j}^+ < \tau_{B_j}^+ \right\}. \quad (5.2.6)$$

Démonstration. Les relations (5.2.5) et (5.2.6) sont une conséquence directe la borne supérieure sur la norme de $(\text{id} - T)$ et $(\text{id} - Q)$. \square

Remarque 5.2.6. Dans le cas dégénéré où plusieurs quasi-potentiels sont égaux ou proches, il est possible que les valeurs propres de T et Q s'entrelacent. Cela se produit lorsque les orbites ayant des quasi-potentiels qui sont égaux ou proches communiquent entre elles. Avec une telle décomposition, nous pouvons alors estimer les valeurs propres de la matrice Q qui ne s'entrelacent pas avec celles de T . Pour estimer les autres valeurs propres, nous définissons le problème aux bords de Dirichlet sur un sous-ensemble de A , puis définissons le nouveau processus trace sur cet ensemble et lui associons un nouvel opérateur de rang fini. \diamond

5.3 Couple d'orbites périodiques ayant un quasi-potentiel de même niveau

Pour une analyse détaillée des valeurs propres nous nous concentrons sur le cas $l = 2$, i.e. lorsque deux orbites périodiques stables ont des quasi-potentiels proches. En dimension deux, toutes les valeurs propres peuvent être calculées explicitement et ont une interprétation probabiliste en termes de fonctions committeurs.

5.3.1 Idée générale du comportement des valeurs propres

Trois cas génériques peuvent se produire lorsque nous nous intéressons à la structure de la matrice Q .

- La matrice $(\text{id} - Q)$ a la structure d'une matrice diagonale. Ainsi, il est plus probable de faire une transition vers des états métastables de plus bas niveau que de faire des transitions entre les deux états métastables considérés.
- La matrice $(\text{id} - Q)$ a la structure d'une matrice triangulaire. Il est moins probable de faire une transition de l'un des deux états métastables considérés vers les états métastables de plus bas niveaux que de faire une transition entre les deux états métastables considérés.
- Tous les termes de la matrice $(\text{id} - Q)$ sont proches. Il est autant probable de faire une transition entre les deux états métastables considérés que de faire une transition de ces états métastables vers les métastables de plus bas niveaux.

Quelque soit la structure de la matrice $\hat{Q} := (\text{id} - Q)$, nous pouvons calculer explicitement ses valeurs propres. Nous les notons

$$1 - \lambda_{\mp} = \frac{\text{Tr}(\hat{Q}) \pm \sqrt{(\text{Tr}(\hat{Q}))^2 - 4\det(\hat{Q})}}{2}. \quad (5.3.1)$$

Remarquons que ces deux valeurs propres sont toujours simples, réelles et distinctes. En effet, le calcul du terme dans la racine carrée montre que

$$\begin{aligned} (\text{Tr}(\hat{Q}))^2 - 4\det(\hat{Q}) &= (\hat{Q}_{22} - \hat{Q}_{11})^2 + 4 \hat{Q}_{12}\hat{Q}_{21} \\ &= (\hat{Q}_{22} - \hat{Q}_{11})^2 + 4 Q_{12}Q_{21}, \end{aligned}$$

or puisque le processus trace K^0 défini sur \mathcal{M}_{k+2} est irréductible, tous les termes de la matrice Q sont non nuls. Pour alléger les notations, nous introduisons

$$p_1 := 1 - Q_{11} = \mathbb{P}^{(k+2)\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k+2} \setminus B_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \right\}, \quad p_2 := 1 - Q_{22} = \mathbb{P}^{(k+2)\hat{\pi}_0^{B_{k+2}}} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+2}}^+ \right\},$$

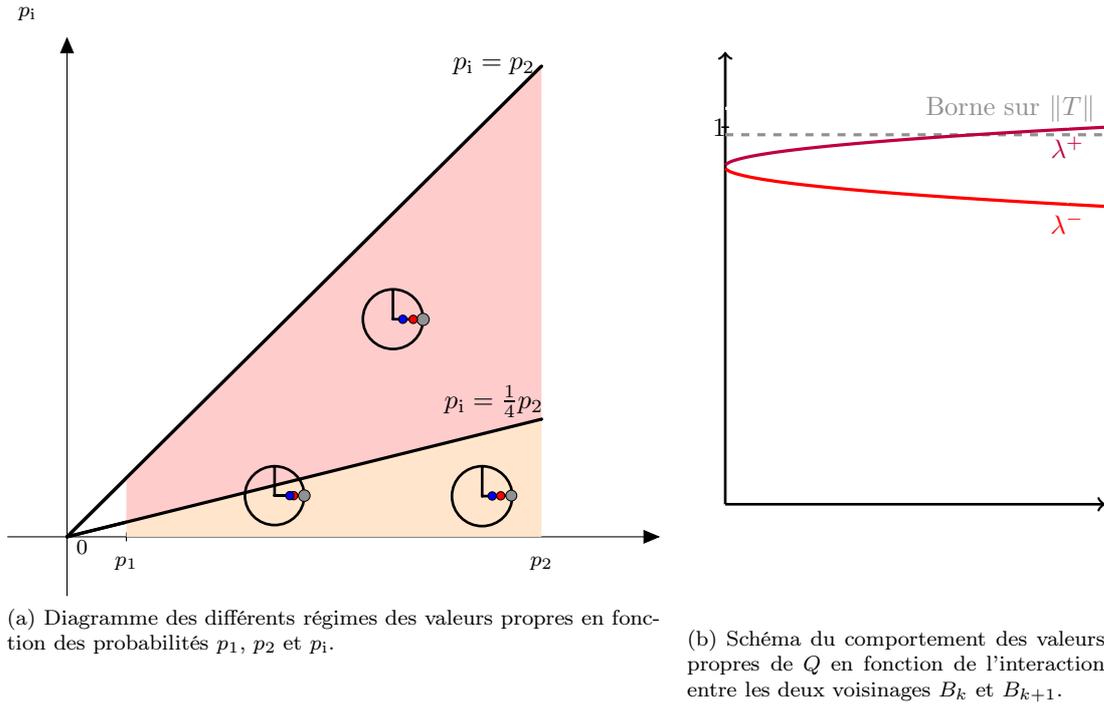
et p_i l'interaction normalisé entre les deux voisinages B_k et B_k

$$p_i = \frac{Q_{21}Q_{12}}{1 - Q_{11}} = \frac{\mathbb{P}^{(k+2)\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+2}}^+} \in B_{k+2} \right\} \mathbb{P}^{(k+2)\hat{\pi}_0^{B_{k+2}}} \left\{ X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+} \in B_{k+1} \right\}}{\mathbb{P}^{(k+2)\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}} \left\{ \tau_{\mathcal{M}_{k+2} \setminus B_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \right\}}.$$

Avec ces notations, les valeurs propres λ_+ et λ_- ont pour expression

$$1 - \lambda_{\mp} = \frac{p_1 + p_2 \pm \sqrt{(p_1 - p_2)^2 + 4p_1p_2}}{2}$$

Nous représentons sur la Figure 5.2, le comportement de ces deux valeurs propres selon les probabilités p_1 , p_2 et p_i , le cercle gris représente la borne (5.2.5) sur les valeurs propres de la matrice T , les points bleus et rouges représentent respectivement λ_- et λ_+ . Dès que $p_i > \frac{1}{4}p_2$, les deux valeurs propres sont bien séparées, elles sont à une distance d'ordre p_2 l'une de l'autre. Lorsque l'interaction p_i entre les deux voisinages continue de croître, la plus grande valeur propre continue de se rapprocher de 1 jusqu'à intersecter le voisinage des valeurs propres de la matrice T . Comme mentionné dans la Remarque 5.2.6, dans ce cas de figure, à cette étape nous n'estimerons que la plus petite valeur propre. Lorsque $p_i > \frac{1}{4}p_2$, si la différence $p_2 - p_1$ est infime ou lorsque la matrice Q est proche d'une matrice singulière, les deux valeurs propres λ_- et λ_+ sont trop proches pour être bien estimées séparément. Dans les autres cas, une estimation précise des deux valeurs propres est possible.


 FIGURE 5.2 – Comportement des valeurs propres λ_- et λ_+ de la matrice Q .

Pour tout entier $m \geq 1$, afin d'appliquer la Proposition 2.1.13 et de comparer les valeurs propres de Q^m et celles de l'opérateur $(K^u)^m$, nous devons nous intéresser au comportement de la résolvante de l'opérateur $(K^*)^m$. Puisque pour tout $z \in \mathbb{C}$,

$$\|(z \text{id} - (K^*)^m)^{-1}\| = \|(z \text{id} - (P)^m)^{-1}\|,$$

et que grâce à la décomposition par blocs (5.2.4)

$$(z \text{id} - P^m) = \begin{pmatrix} (z \text{id} - T^m) & 0 \\ \sum_{i=0}^{m-1} T^i R Q^{m-1-i} & (z \text{id} - Q^m) \end{pmatrix}$$

nous obtenons

$$\|(z \text{id} - (K^*)^m)^{-1}\| \leq \max\{\|(z \text{id} - T^m)^{-1}\|, \|(z \text{id} - Q^m)^{-1}\| (1 + m \|(z \text{id} - T^m)^{-1}\| \|R\|)\}.$$

Soit $\Delta_m > 0$, la borne supérieure sur $\|(K^u)^m - (K^*)^m\|$ donnée par (5.2.3), on cherche à définir un contour \mathcal{C} autour des valeurs propres de Q^m qui ne s'entrelacent pas avec celles de T^m tel que

$$4 \Delta_m = \frac{1}{\max_{z \in \mathcal{C}} \|(z - (K^*)^m)^{-1}\|}.$$

Grâce à la Proposition 2.1.12, nous obtiendrons ainsi une estimation des valeurs propres de K^u . Puisque notre matrice P est non autoadjointe, la norme de la résolvante peut a priori être grande même lorsque l'on est loin de ses valeurs propres. En effet, dans le cas non autoadjoint, l'ajout d'une perturbation de norme $\epsilon > 0$ à la matrice K^* peut modifier de manière significative la position de ses valeurs propres. Tandis que dans le cas autoadjoint les valeurs propres resteront dans un voisinage de taille ϵ autour de leur position initiale. Pour étudier la croissance de norme de la résolvante d'un opérateur, Lloyd Trefethen a introduit la notion de pseudospectre. La référence générale pour une étude du pseudospectre est le livre de Lloyd Trefethen et Mark Embree [76]. Le pseudospectre de niveau ϵ de l'opérateur K^* est défini par

$$\{z \in \mathbb{C}, \|(z - K^*)^{-1}\| > \epsilon^{-1}\}.$$

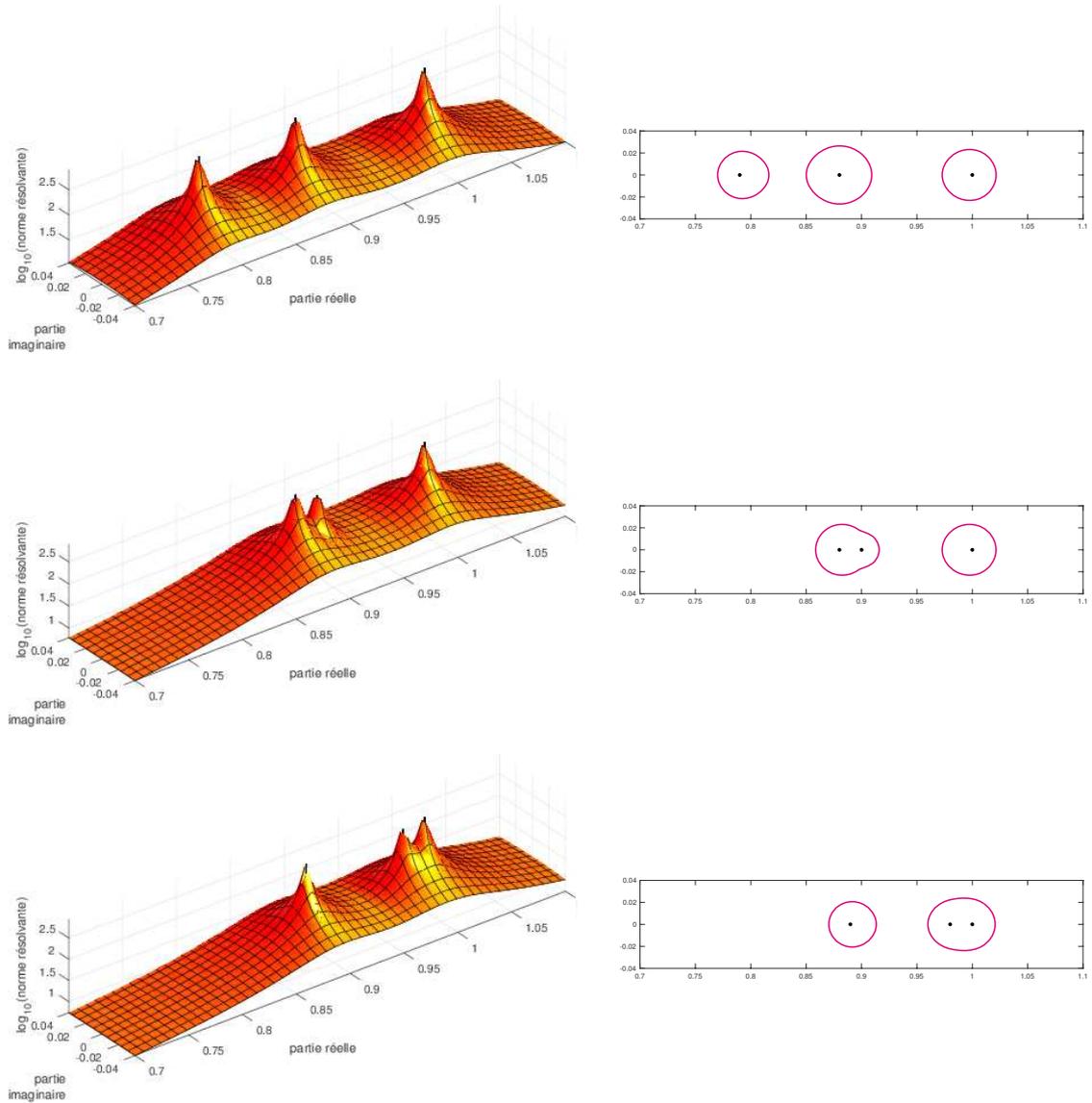


FIGURE 5.3 – Représentation de la norme euclidienne de la résolvante pour une matrice stochastique P de dimension 3 et du contour de la norme de la résolvante. Les trois comportements discutés sont illustrés.

Ainsi, la frontière du pseudospectre de niveau ϵ d'un opérateur est exactement la ligne de niveau ϵ^{-1} de la norme de la résolvante. Par continuité des valeurs propres d'une matrice, pour une valeur de ϵ suffisamment petite, le pseudospectre de l'opérateur K^* a exactement $k + 1$ composantes connexes distinctes. Pour estimer correctement les valeurs propres λ_{\pm} de l'opérateur K^* , nous nous intéressons uniquement au comportement des composantes connexes dans le voisinages de λ_{\pm} , et nous nous contentons d'une estimation grossière sur la forme des composantes dans le voisinage des valeurs propres correspondant aux valeurs propres de la matrice T . Nous pouvons distinguer trois types de comportements différents pour la norme de la résolvante, ils sont illustrés par la Figure 5.3.

- Soit le contour \mathcal{C} défini dans le voisinage des valeurs propres λ_{\pm} est composé de deux composantes connexes disjointes entre elles et disjoint du contour dans le voisinage des valeurs propres de T , dans ce cas l'estimation précise des deux valeurs propres sera possible.
- Soit le contour \mathcal{C} défini dans le voisinage des valeurs propres λ_{\pm} est composé d'une seule composante connexe qui est disjoint du contour dans le voisinage des valeurs propres de T , dans ce cas nous ne pourrons estimer que la moyenne des valeurs propres λ_{\pm} .
- Soit le contour \mathcal{C} défini dans le voisinage des valeurs propres λ_{\pm} est composé d'une composante connexe autour de λ_{-} et d'une composante connexe qui englobe les valeurs propres de T et λ_{+} .

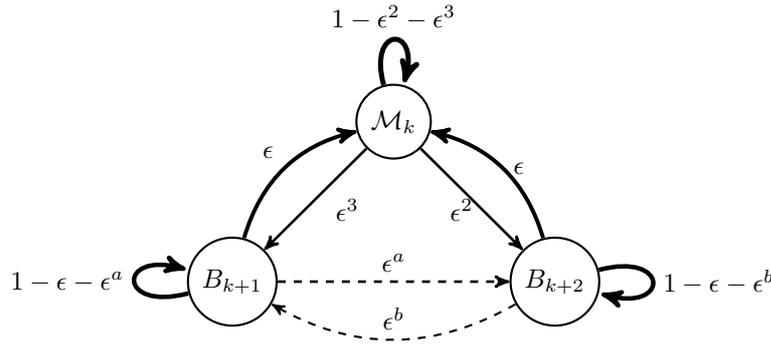


FIGURE 5.4 – Cas où les transitions entre les deux voisinages sont plus rares que les transitions des voisinages de plus bas niveau, $a, b \geq 2$

Dans ce cas, nous estimerons seulement λ_- .

Notons

$$p_{\min} := \max_{1 \leq j \leq k} \mathbb{P}^{(k) \tilde{\pi}_0^{B_j}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_j}^+ < \tau_{B_j}^+ \}, \quad (5.3.2)$$

puisque $\|\text{id} - T^m\| \leq 2mp_{\min}$, pour tout $z \in \mathbb{C}$ tel que $2mp_{\min} > |1 - z|$, nous avons

$$\|(z \text{id} - T^m)^{-1}\| \leq \frac{1}{|1 - z| - 2mp_{\min}}.$$

De plus,

$$\|R\| \leq \max(\mathbb{P}^{(k+2) \tilde{\pi}_0^{B_k}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1} \setminus B_k}^+ < \tau_{B_k}^+ \}, \mathbb{P}^{(k+1) \tilde{\pi}_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \}),$$

ainsi nous prendrons m tel que $m \mathbb{P}^{(k+1) \tilde{\pi}_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \} \leq 1$. Il reste donc à estimer la résolvante de la matrice Q^m .

Remarque 5.3.1. Puisque le pseudospectre des matrices est un objet mathématique qui a fait l'objet de nombreuses études. Le raisonnement sur le nombre de composantes connexes peut se généraliser pour des matrices de dimension supérieure. \diamond

5.3.2 Rares transitions entre les deux voisinages B_k et B_{k+1}

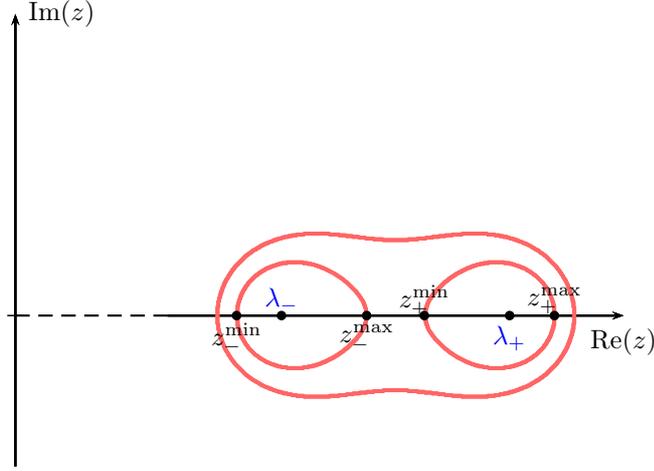
Nous nous intéressons au régime $0 < p_1 < 1/4p_2$ représenté en orange sur la Figure 5.2, une schématisation d'une telle configuration est donnée par la Figure 5.4. Dans cette zone, les valeurs propres de la matrice T sont bien séparées de celles de la matrice Q puisque pour toute valeur propre λ de la matrice T

$$|1 - \lambda| \leq 2p_{\min} < p_1/2 \leq 1 - \lambda_+ < 1 - \lambda_- ,$$

Ainsi la ligne de niveau $(4\Delta_m)^{-1}$ de la norme de la résolvante de $(K^*)^m$ est composée d'au moins deux composantes connexes disjointes, l'une autour des valeurs propres de T^m et l'autre autour des valeurs propres de Q^m . Lorsque la matrice Q est proche d'une matrice non diagonalisable, ou lorsque les valeurs propres λ_- et λ_+ sont très proches, la ligne de niveau de la norme de la résolvante de T^m peut être formée d'une seule composante connexe ou de deux composantes connexes disjointes autour de chacune des valeurs propres λ_{\pm} .

Si d'un point de vue probabiliste, il est plus naturel de travailler avec la norme infinie. Cependant, pour une meilleure interprétation géométrique du pseudospectre et donc des lignes de niveau de la norme de la résolvante, nous travaillerons dans cette section avec la norme euclidienne pour étudier la résolvante de la matrice Q . En effet, dans le cas d'une matrice carrée de taille 2, toutes les caractéristiques du pseudospectre par rapport à la norme euclidienne peuvent être déterminées. Nous noterons la norme euclidienne $\|\cdot\|_2$ et norme infinie sera simplement notée $\|\cdot\|$. Rappelons que pour un vecteur de dimension n ,

$$\|x\| \leq \|x\|_2 \leq \sqrt{n} \|x\| .$$


 FIGURE 5.5 – Schéma des lignes de niveau du pseudospectre de la matrice Q .

5.3.2.1 Cas où le pseudospectre est composé de deux composantes connexes

Rappelons que la matrice Q est diagonalisable. Nous introduisons la matrice de passage S vérifiant $Q = SDS^{-1}$ où $D = \text{diag}(\lambda_+, \lambda_-)$. La matrice S a pour expression

$$S := \frac{1}{\sqrt{\delta^2 + 4p_i p_1}} \begin{pmatrix} \delta & -2Q_{12} \\ 2Q_{21} & \delta \end{pmatrix}$$

où $\delta = (p_2 - p_1) + \sqrt{(p_2 - p_1)^2 + 4p_i p_1}$. Nous introduisons également la variable

$$\cot^2 \Theta := \frac{4(Q_{21} - Q_{12})^2}{(p_1 - p_2)^2 + 4p_i p_1}$$

où Θ représente l'angle entre les deux vecteurs propres à droite. Avec ces notations, les points $z \in \mathbb{C}$ qui appartiennent à la ligne de niveau ϵ^{-1} de la norme euclidienne de la résolvante de Q^m satisfont

$$(\epsilon^2 - (z - \lambda_+^m)^2)(\epsilon^2 - (z - \lambda_-^m)^2) = \epsilon^2(\lambda_+^m - \lambda_-^m) \cot^2(\Theta). \quad (5.3.3)$$

Ce résultat ainsi que ceux qui suivent sont une conséquence des résultats obtenus dans la thèse de Michael Karow [57, Section 5.5]. Si la constante $\epsilon > 0$ est telle que cette équation est composée de deux composantes connexes disjointes alors nous pouvons calculer les intersections z_+^{\min} , z_+^{\max} et z_-^{\min} , z_-^{\max} de cette ligne de niveau avec la droite d'équation

$$z = (1 - t)\lambda_+^m + t\lambda_-^m; \quad (5.3.4)$$

$t \in \mathbb{R}$, joignant les valeurs propres λ_+ et λ_- (i.e. l'axe des abscisses). La Figure 5.5 illustre le positionnement de ces points.

Remarquons que les points z_{\pm}^{\min} , z_{\pm}^{\max} correspondent aux points de la ligne de niveau où la distance entre cette ligne de niveau et la valeur propre λ_+ (respectivement λ_-) atteint ses extremums. En résolvant l'équation (5.3.3) pour z appartenant à la droite d'équation (5.3.4), nous obtenons les valeurs de t qui correspondent aux points z_{\pm}^{\min} , z_{\pm}^{\max} . Ainsi, en notant $\rho_m := (\lambda_+^m - \lambda_-^m)$, la distance entre les valeurs propres de Q^m

$$\begin{aligned} t_-^{\min} &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{\rho_m^2 + 4\epsilon^2 + 4\epsilon\rho_m(\csc \Theta)}}{\rho_m} \right), & t_-^{\max} &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{\rho_m^2 + 4\epsilon^2 - 4\epsilon\rho_m(\csc \Theta)}}{\rho_m} \right) \\ t_+^{\min} &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{\rho_m^2 + 4\epsilon^2 + 4\epsilon\rho_m(\csc \Theta)}}{\rho_m} \right), & t_+^{\max} &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{\rho_m^2 + 4\epsilon^2 - 4\epsilon\rho_m(\csc \Theta)}}{\rho_m} \right). \end{aligned}$$

Ainsi tant que

$$\rho_m^2 + 4\epsilon^2 - 4\epsilon\rho_m(\csc\Theta) > 0, \quad (5.3.5)$$

nous avons bien deux composantes connexes. En résolvant (5.3.5) en fonction de ρ^m , nous avons deux composantes connexes disjointes tant que la distance entre les puissances des valeurs propres satisfait

$$\rho_m > 2\epsilon(\cot(\Theta) + \csc(\Theta)).$$

Remarquons alors que pour tout $m \geq 1$, la distance entre les puissances des valeurs propres vérifie

$$\rho_m \geq m\sqrt{(p_2 - p_1)^2 + 4p_1p_2}\left(1 - \frac{p_1 + p_2}{2}\right)^{m-1},$$

tandis que

$$(\cot(\Theta) + \csc(\Theta)) = \frac{(p_2 - p_1)^2 + 4(Q_{21}^2 + Q_{12}^2 - Q_{12}Q_{21})}{\sqrt{(p_2 - p_1)^2 + 4p_1p_2}}.$$

Ainsi, pour une constante $c > 0$ indépendante de σ , la ligne de niveau $(c\Delta_m)^{-1}$ de la norme de la résolvante de P^m aura deux composantes connexes disjointes autour des valeurs propres de λ_- et λ_+ lorsque

$$m(p_2 - p_1)^2 + 4p_1p_2\left(1 - \frac{p_1 + p_2}{2}\right)^{m-1} > 2c\Delta_m((p_2 - p_1)^2 + 4(Q_{21}^2 + Q_{12}^2 - Q_{12}Q_{21})).$$

Pour donner une interprétation probabiliste aux deux valeurs propres que nous souhaitons estimer, rappelons que la trace d'une matrice est égale à la somme de ses valeurs propres, nous avons pour la matrice $(\text{id} - Q)$

$$(1 - \lambda_+) + (1 - \lambda_-) = \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_{k+2}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+2}}^+ \} + \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+2} \setminus B_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \}.$$

En effet, nous pouvons approcher la valeur propre λ_+ par la valeur propre principale du processus décrit par le noyau $K_{B_k \cup B_{k+1}}^0$ i.e. le processus trace sur \mathcal{M}_k tué quand il quitte l'union $B_k \cup B_{k+1}$. Remarquons que la norme de la différence entre les processus tués quand ils quittent l'union $B_k \cup B_{k+1}$ est donnée par

$$\|(K_{B_k \cup B_{k+1}}^0)^m - (K_{B_k \cup B_{k+1}}^*)^m\| \leq 2e^{-mco/\log(\sigma^{-1})} + [M_0 \log(\sigma^{-1}) + m^2 e^{-H'_k/\sigma^2}] e^{-H'_k/\sigma^2},$$

avec $H'_k = H(k+1, M_k) - \eta$. (Ce résultat est une conséquence des estimations des propriétés spectrales du processus tué quand ils quittent B_i et de la Proposition 4.3.2.) Pour $m = \log(\sigma^{-1}) e^{(2\eta + H(k+1, M_k)/2)/\sigma^2}$, nous avons bien l'approximation de λ_+ par la valeur propre principale du processus tué quand il quitte $B_k \cup B_{k+1}$. Pour tout $\eta > 0$, nous avons donc

$$1 - \lambda_{k+1} = \left(\mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_{k+2}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+2}}^+ \} + \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+2} \setminus B_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \} \right. \\ \left. - \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_{k+2} \cup B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1} \cup B_{k+2}}^+ \} \right) [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2})].$$

où les distribution quasi-stationnaires sont définies à partir du processus trace sur \mathcal{M}_{k+2} , et la constante θ_k vaut $\theta_k = H(k+2, M_{k+1})/2 - \eta$.

5.3.2.2 Cas où le pseudospectre est composé d'une seule composante connexe

Les calculs réalisés dans la section précédente montre que dans le régime $0 < p_i < 1/4p_2$, lorsqu'une seule composante connexe entoure les deux valeurs propres λ_- et λ_+ , il n'est pas possible de comprendre le comportement de ces deux valeurs propres séparément lorsque l'on perturbe la matrice P . Ainsi, lorsque nous estimons les valeurs propres de l'opérateur K^u pris comme une perturbation de l'opérateur de rang fini K^* , nous ne pouvons qu'affirmer qu'il possède deux valeurs propres compris dans un contour centré en $(p_1 + p_2)/2$ de rayon d'ordre $e^{-(H(k+2, M_{k+1})/2 - \eta)}$. En particulier, rien ne permet a priori d'affirmer que ces valeurs propres sont réelles.

Les deux valeurs propres λ_k et λ_{k+1} ne sont pas nécessairement réelles. Elles satisfont pour $j \in \{k, k+1\}$

$$|1 - \lambda_j| \leq \frac{1}{2} \left(\mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_{k+2}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+2}}^+ \} + \mathbb{P}^{\hat{\pi}_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+2} \setminus B_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \} \right) [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2})],$$

où les distribution quasi-stationnaires sont définies à partir du processus trace sur \mathcal{M}_{k+2} , et la constante θ_k vaut $\theta_k = H(k+2, M_{k+1})/2 - \eta$.

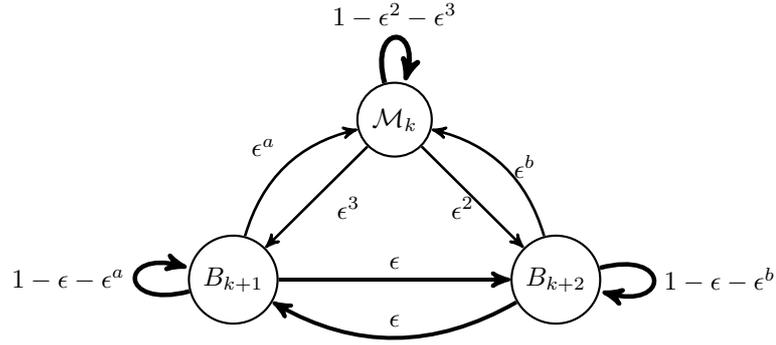


FIGURE 5.6 – Cas où les transitions entre deux orbites périodiques stables de plus bas niveaux sont probables, $a, b > 1$.

5.3.3 Transitions probables entre les deux voisinages B_k et B_{k+1}

Dans le régime $1/4p_2 \leq p_1 \leq p_2$ représenté en rouge sur la Figure 5.2, les transitions entre les orbites périodiques stables ayant des quasi-potentielles proches ou égaux sont plus probables que des transitions vers les autres orbites périodiques stables. Une schématisation d'une telle configuration est donnée par la Figure 5.6. La différence entre les valeurs propres est donnée par

$$\lambda_+ - \lambda_- = \sqrt{(p_2 - p_1)^2 + 4p_1p_2}$$

est d'ordre $e^{-H(k+1, M_k)/\sigma^2}$. Ainsi, la ligne de niveau $(4\Delta_m)^{-1}$ de la norme de la résolvante de Q^m a deux composantes connexes disjointes. Ainsi, puisque les valeurs propres de Q^m sont bien séparées, le calcul de la norme de la résolvante ne pose pas de difficulté et il n'est pas nécessaire d'utiliser les propriétés du pseudospectre pour s'en convaincre. En effet, la matrice de passage S diagonalisant la matrice $Q = SDS^{-1}$ avec $D = \text{diag}(\lambda_+, \lambda_-)$ est donnée par

$$S := \frac{1}{\sqrt{\delta^2 + 4p_1p_2}} \begin{pmatrix} \delta & -2Q_{12} \\ 2Q_{12} & +\delta \end{pmatrix}$$

où $\delta = (p_2 - p_1) + \sqrt{(p_2 - p_1)^2 + 4p_1p_2}$. Puisque nous avons $\|S\| = \|S^{-1}\|$ et que pour $1/4 \leq p_1p_2 \leq p_2$, nous avons

$$\|S\| \leq 4(3 + \sqrt{5}),$$

il existe une constante numérique $c > 0$ indépendante de σ telle que

$$\|(z \text{ id} - Q^m)^{-1}\| \leq \frac{c}{|z - (\lambda_+)^m| |z - (\lambda_-)^m|}.$$

Comme dans le régime $0 < p_1 < 1/4p_2$, nous pouvons approcher la valeur propre λ_+ par la valeur propre principale du processus tué quand il quitte $B_k \cup B_{k+1}$ et utiliser la formule de la trace pour obtenir

$$(1 - \lambda_+) + (1 - \lambda_-) = \mathbb{P}_{\tilde{\pi}_0^{B_{k+2}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+2}}^+ \} + \mathbb{P}_{\tilde{\pi}_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+2} \setminus B_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \},$$

où les distributions quasi-stationnaires sont définies à partir du processus trace sur \mathcal{M}_{k+2} . L'estimation de la valeur propre λ_+ ne pose pas de problème si on regarde uniquement une perturbation de la matrice Q^m , mais lorsque nous considérons des perturbations de la matrice P^m , il faut prendre en compte l'interaction des valeurs propres de la matrice Q^m avec celles de T^m .

Les valeurs propres de la matrice T n'interagissent pas avec la valeur λ_+ de la matrice Q tant que

$$2 p_{\min} \leq 1 - \lambda_+,$$

avec p_{\min} donné par (5.3.2). Ainsi, en utilisant l'expression (5.3.1) pour la valeur propre λ_+ , les valeurs propres n'interagissent pas tant que

$$8 p_{\min} \frac{p_1 + p_2}{p_1} \leq p_1 - \frac{p_1 p_1}{p_2}. \quad (5.3.6)$$

En notant (X_n^*) le processus décrit par le noyau de transition K^* , le membre de droite correspond à la probabilité $\mathbb{P}^{x_{k+1}^*} \{X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^*}^* \notin B_{k+1}\}$. En effet, en utilisant la Remarque 2.3.6 entre les différents processus traces

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^{x_{k+1}^*} \{X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^*}^* \notin B_{k+1}\} &= 1 - \mathbb{P}^{x_{k+1}^*} \{X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^*}^* \in B_{k+1}\} \\ &= 1 - (\mathbb{P}^{x_{k+1}^*} \{X_{\tau_{\mathcal{M}_{k+2}}^*}^* \in B_{k+1}\} + Q_{12}(1 - Q_{11})^{-1}Q_{21}), \end{aligned}$$

ceci correspond au membre de droite de (5.3.6).

Ces remarques nous conduisent au résultat suivant. Pour tout $\eta > 0$,

$$\begin{aligned} 1 - \lambda_{k+1} &= \left(\mathbb{P}^{\tilde{\pi}_0^{B_{k+2}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+2}}^+ \} \right) + \mathbb{P}^{\tilde{\pi}_0^{B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+2} \setminus B_{k+1}}^+ < \tau_{B_{k+1}}^+ \} \\ &\quad - \mathbb{P}^{\tilde{\pi}_0^{B_{k+2} \cup B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_k}^+ < \tau_{B_{k+1} \cup B_{k+2}}^+ \} \left[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2}) \right]. \end{aligned}$$

où les distributions quasi-stationnaires sont définies à partir du processus trace sur \mathcal{M}_{k+2} , et la constante θ_k vaut $\theta_k = H(k+2, M_{k+1})/2 - \eta$.

Si la communication entre les deux orbites périodiques ne vient pas interférer le spectre de T alors

$$1 - \lambda_k = \left(\mathbb{P}^{\tilde{\pi}_0^{B_{k+2} \cup B_{k+1}}} \{ \tau_{\mathcal{M}_{k+1}}^+ < \tau_{B_k \cup B_{k+1}}^+ \} \right) \left[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta_k/\sigma^2}) \right].$$

Sinon, il faut définir le problème aux bords de Dirichlet sur \mathcal{M}_{k+1} et par un raisonnement analogue, nous pouvons estimer les valeurs propres de module supérieur.

5.4 Perspectives

5.4.1 Calcul des fonctions propres, et espérance des temps d'atteinte

Ce chapitre permet de calculer les valeurs propres de l'application de Poincaré aléatoire lorsque l'hypothèse de hiérarchie métastable est violée. Pour bien comprendre la dynamique l'application de Poincaré aléatoire, il est également nécessaire d'avoir un contrôle sur les fonctions propres. La décomposition que nous avons utilisé permet d'avoir une estimation de ces valeurs propres. En effet, nous pouvons calculer les fonctions propres à droite et à gauche associées aux N plus grandes valeurs propres du noyau de transition de rang fini K^* et par des arguments similaires à ceux utilisés dans les Sections 4.5.2 et 4.5.2 en déduire une approximation de celles du noyau de transition K . Cependant, les expressions des fonctions propres de K^* n'ont pas d'interprétation probabiliste triviale en termes de fonctions committeurs.

De plus, une relation analogue à (4.2.11) entre les valeurs propres du processus et les temps d'atteinte des voisinages des orbites périodiques devrait pouvoir être établie.

5.4.2 Approximation de la dynamique du processus par un modèle réduit

Le travail présenté dans les deux derniers chapitres montre que l'application de Poincaré K d'un système admettant N orbites périodiques stables i.e. N états métastables, a ses N plus grandes valeurs propres proches de celles d'un noyau de rang fini décrivant une chaîne de Markov à N états. Ainsi, nous avons ramené l'étude d'une chaîne de Markov à temps discret et à espace d'états continu à l'étude d'une chaîne de Markov à temps discret et à espace à N états. Nous avons également montré que la norme de la différence des itérés du processus trace sur l'union des voisinages métastables et de l'opérateur décrivant la chaîne de Markov était petite. Nous pouvons alors nous demander jusqu'à quel point la dynamique de la chaîne de Markov décrit celle du processus trace (voir de l'opérateur) sur les différentes échelles de temps.

5.4.3 Lien entre les différentes distributions quasi-stationnaires

L'estimation des N plus grandes valeurs propres de l'application de Poincaré aléatoire se fait par un argument de récurrence. A chaque étape du raisonnement, nous définissons le problème aux bords sur une union de voisinages des orbites périodiques stables, nous définissons un processus trace sur cette union

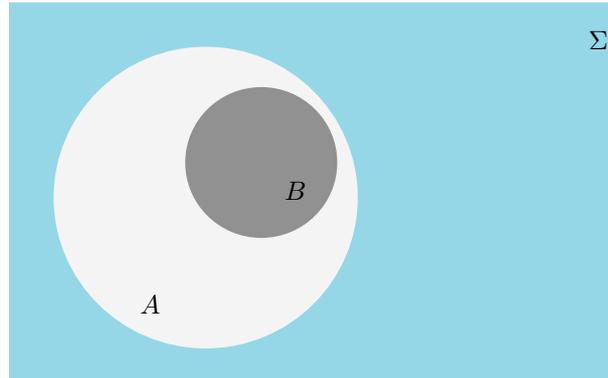


FIGURE 5.7 – Inclusion des différents sous-ensembles impliqués dans la définition des processus traces et des processus tués.

et en introduisant les distributions quasi-stationnaires nous ramenons à un opérateur de rang fini. Pour estimer la N -ième valeur propre, nous définissons le processus trace sur $\mathcal{M}_N \cup_{i=1}^N B_i$ et introduisons N distributions quasi-stationnaires, une pour chaque processus trace tué quand il quitte un B_i . Puis pour estimer la $N-1$ -ième valeur propre, nous définissons le processus trace sur $\mathcal{M}_{N-1} \cup_{i=1}^{N-1} B_i$ et introduisons $N-1$ distributions quasi-stationnaires, une pour chaque processus trace tué quand il quitte un B_i . Ainsi, l'ordre de grandeur du nombre de distributions quasi-stationnaires introduites se comporte en N^2 .

Étant donné un noyau de transition Markovien, K définit sur un espace d'états Σ , le Corolaire 2.3.2 permet de faire le lien entre la distribution stationnaire de ce processus et celle du processus trace dans un sous-ensemble $A \subset \Sigma$, ${}_A K$. Établir un lien similaire entre la distribution quasi-stationnaire d'un processus tué quand il quitte un sous-ensemble $B \subset A \subset \Sigma$ (le noyau K_B est un processus sous-Markovien) et la distribution quasi-stationnaire du processus trace dans un sous-ensemble $A \subset \Sigma$ tué quand il quitte l'ensemble B n'est pas évident. La difficulté vient du fait que les processus sont sous-Markoviens. Il serait pourtant intéressant de comprendre le lien entre ces distributions quasi-stationnaires, outre la compréhension purement théorique, un intérêt numérique serait de réduire le nombre de distribution quasi-stationnaires à simuler pour estimer les valeurs propres.

Enfin, jusqu'à présent, nous ne sommes pas en mesure de caractériser les propriétés du processus trace tué quand il quitte une union de voisinages d'état métastables. En effet, l'argument de couplage utilisé pour contrôler la constante de positivité uniforme du processus tué ne fonctionne pas si le processus se rapproche d'ensembles instables.

Chapitre 6

Discussion sur les aspects numériques

Nos résultats donnent une relation entre les valeurs propres et fonctions propres de l'application de Poincaré, et les fonctions committeurs pour des voisinages des orbites périodiques stables (partant éventuellement selon une distribution quasi-stationnaire d'un processus tué quand il atteint les voisinages des orbites périodiques). Contrairement aux résultats connus pour les processus réversibles, nos résultats ne permettent pas de déterminer le préfacteur comme dans les formules de type Eyring–Kramers. Par la théorie des grandes déviations, nous n'avons qu'une expression du comportement exponentiel en termes de quasi-potentiel. Si nous n'avons pas accès au préfacteur pour estimer précisément les valeurs propres et les fonctions propres, des méthodes numériques ont été développées pour les estimer.

6.1 Généralités pour la simulation d'applications de Poincaré aléatoires

Si nous connaissons les coordonnées d'un point appartenant à une orbite périodique du système de dimension $d + 1$

$$\dot{z} = f(z),$$

nous pouvons construire un hyperplan Σ de la manière suivante : si z^* appartient à une orbite périodique stable, en notant le vecteur $h = f(z^*)$, dans le voisinage de l'orbite périodique stable, la section de Poincaré a pour équation

$$H(z) = \langle h, z - z^* \rangle = 0.$$

Ainsi, la section de Poincaré divise \mathbb{R}^{d+1} en deux régions,

$$\Sigma_- = \{z \in \mathbb{R}^{d+1}, \langle h, z - z^* \rangle < 0\} \quad \Sigma_+ = \{z \in \mathbb{R}^{d+1}, \langle h, z - z^* \rangle > 0\},$$

et toute trajectoire va passer de Σ_- à Σ_+ .

Pour localiser la première intersection de la trajectoire sur la section de Poincaré Σ , la position est alors calculée par un simple schéma d'interpolation.

Pour simuler l'application de Poincaré aléatoire, à cause des irrégularités du mouvement Brownien, nous devons construire une seconde application de Poincaré en suivant les définitions (3.2.11).

6.2 Méthodes de calcul naïves des valeurs propres

6.2.1 Méthode directe sur le noyau K

Calculer directement les valeurs propres de l'application de Poincaré aléatoire revient à calculer les valeurs propres de opérateur linéaire sur un espace continu

$$\int_{\Sigma} K(x, dy) \phi(y) = e^{-u} \phi(x),$$

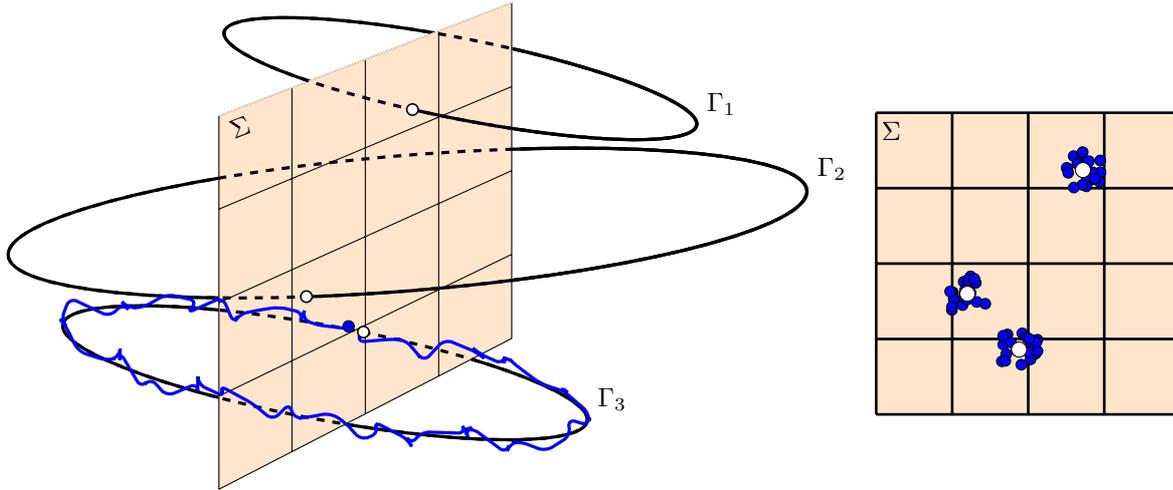


FIGURE 6.1 – Schéma de la méthode naïve par discrétisation de Σ d'un système admettant trois orbites périodiques stables. Les points bleus représentent les positions de premier retour de trajectoires du système stochastique sur la section de Poincaré après une excursion.

pour lequel nous n'avons pas d'expression explicite. Pour calculer numériquement ses valeurs propres et fonctions propres, nous pouvons simuler un nombre suffisant de trajectoires, discrétiser l'espace d'états puis estimer les valeurs propres de la discrétisation (cf. Figure 6.1).

Pour tout entier $m \geq 1$, puisque e^{-u} est une valeur propre de K si et seulement si e^{mu} est une valeur propre de K^m , au lieu de calculer les valeurs propres du noyau K nous pouvons estimer celles du noyau K^m . En effet, à cause du comportement métastable du système, si nous nous contentons de la position de premier retour sur l'application de Poincaré aléatoire, l'estimation des valeurs propres ne sera pas précise. Les transitions entre les orbites périodiques étant un événement rare, il faudra simuler un très grand nombre de trajectoires pour que ce phénomène soit pris en compte dans l'estimation des valeurs propres. Sans étude plus approfondie sur les temps de transitions, nous ne pouvons établir de critère pertinent sur le choix optimal de l'entier m . Cette méthode est très coûteuse à la fois en temps et en mémoire et particulièrement lorsque la dimension est grande.

6.2.2 Méthode directe sur le noyau K^u

Une approche un peu moins naïve consiste à utiliser la relation de type Feynman-Kac (cf. Proposition 2.2.2). En effet, grâce au Corollaire 2.2.3, nous pouvons étudier les propriétés spectrales du noyau K^u défini sur \mathcal{M}_N , le voisinage des orbites périodiques stables, par

$$K^u(x, B) := \mathbb{E}^x \left\{ e^{u(\tau_{\mathcal{M}_N}^+ - 1)} \mathbf{1}_{\{X_{\tau_{\mathcal{M}_N}^+} \in B\}} \right\},$$

avec $u \in \mathbb{C}$ satisfaisant la condition d'existence des transformées de Laplace

$$\sup_{x \in \mathcal{M}_N^c} \mathbb{P}^x \{X_1 \in \mathcal{M}_N^c\} < |e^{-u}|.$$

Grâce à l'introduction de ce noyau, l'espace de définition du problème aux valeurs propres à étudier a été réduit (cf. Figure 6.2) ce qui rend la discrétisation plus raisonnable. Pour estimer les valeurs propres, nous pouvons résoudre le système de deux équations à deux inconnues

$$\begin{aligned} (K^u \phi^u)(x) &= v \phi^u(x) \\ v &= e^{-u}. \end{aligned} \tag{6.2.1}$$

En pratique, nous simulons un grand nombre de trajectoires allant de \mathcal{M}_N jusqu'à ce qu'elles reviennent sur \mathcal{M}_N et nous stockons la valeur du temps de retour $\tau_{\mathcal{M}_N}^+$. Nous pouvons alors avoir une estimation cohérente de l'application décrite par le noyau K^u pour différentes valeurs de u . L'estimation des valeurs

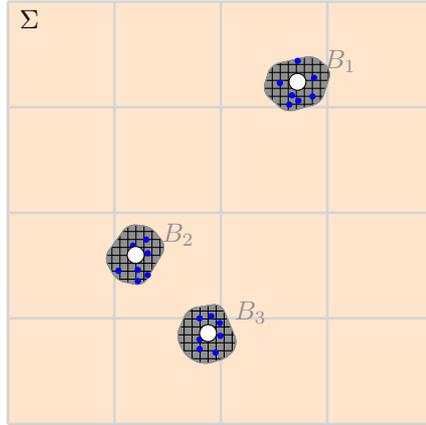


FIGURE 6.2 – Schéma de la méthode d'estimation des valeurs propres par discrétisation de $\mathcal{M}_3 = B_1 \cup B_2 \cup B_3$. L'espace de définition du problème aux valeurs propres a été réduit.

propres est alors réalisée en cherchant les intersections entre les différentes valeurs propres du noyau K^u et la courbe e^{-u} , cette recherche est malheureusement très coûteuse. Des estimations des valeurs propres ont été réalisées pour le système modélisant une réaction enzymatique dans le cadre de la glycolyse (cf. (1.1.2)). Rappelons que ce système admet deux orbites périodiques stables. Sur la Figure 6.3, nous avons représenté les modules des valeurs propres du noyau K^u pour différentes valeurs de u . Les deux points en rouge sont une estimation des solutions du système (6.2.1) i.e. les valeurs propres du système satisfaisant une condition d'existence de transformée de Laplace. Sans surprise, les simulations numériques montrent qu'une valeur propre vaut 1, une deuxième valeur propre est proche de 1. Ces deux valeurs propres correspondent aux deux voisinages des orbites périodiques. Le reste du spectre est bien séparé de ces deux valeurs propres.

6.2.3 Estimations des valeurs propres principales

Une autre approche possible pour calculer numériquement les valeurs propres de l'application de Poincaré aléatoire consiste à utiliser leur approximation en termes de valeurs propres de processus tué (4.2.3). En effet, il est moins coûteux de calculer les valeurs propres principales (et fonctions propres principales et distributions quasi-stationnaires) que de calculer une valeur propre quelconque puisqu'il suffit de simuler un processus sur les états non absorbants.

Grâce à l'expression des éléments propres, en termes d'éléments propres de processus tués, il n'est plus nécessaire de résoudre un système de deux équations à deux inconnus. Il faut néanmoins toujours discrétiser l'espace des états non-absorbants des processus. Notons que la taille de celui-ci diminue lorsque nous estimons les valeurs propres par ordre décroissant.

6.3 Estimation par la simulation d'événements rares

Les trois méthodes naïves que nous avons présentées reposent sur des simulations de trajectoires par des méthodes de Monte Carlo classiques. Or les transitions entre les voisinages des orbites périodiques sont des événements rares. Il faut simuler un nombre considérable de trajectoires pour avoir observé des transitions et obtenir un estimateur fiable.

L'expression des valeurs propres en termes de fonctions committeurs permet d'utiliser des algorithmes spécialement implémentés pour la simulation d'événements rares comme l'échantillonnage préférentiel (Importance Sampling) ou les méthodes multi-niveaux (Multilevel Splitting). Ces deux méthodes sont présentées dans le livre de Gerardo Rubino et Bruno Tuffin [73].

L'échantillonnage préférentiel est une méthode de réduction de variance, l'idée principale consiste donc à simuler des réalisations selon une distribution qui facilite les événements rares. L'estimateur ainsi obtenu sera biaisé, mais nous pourrions obtenir un estimateur non biaisé en le corrigeant par le ratio de

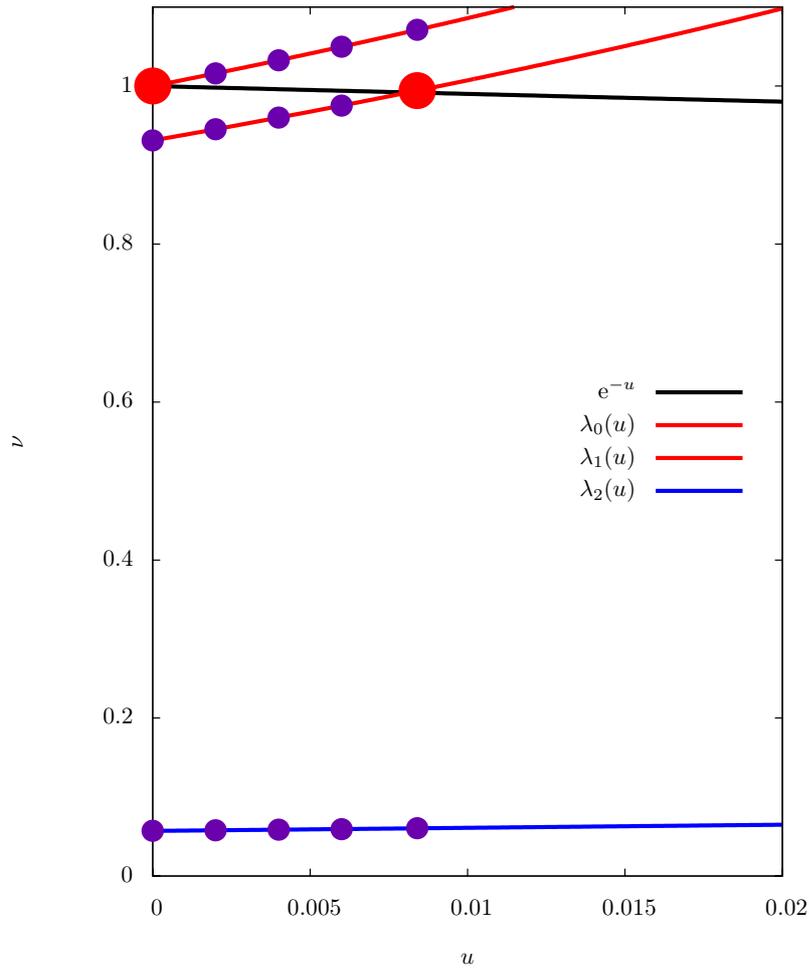


FIGURE 6.3 – Estimation par simulations des valeurs propres du noyau K^u pour le système décrivant la glycolyse (cf. (1.1.2)).

vraisemblance approprié. L'inconvénient de cette méthode est qu'elle nécessite une bonne connaissance du système pour avoir une "bonne" distribution biaisée.

La méthode multi-niveaux estime la probabilité d'un événement rare par un produit de probabilités conditionnelles. L'idée générale est de décomposer l'événement rare en suite d'événements pour lesquels la probabilité d'atteinte est plus grande. Les algorithmes multi-niveaux peuvent être vus comme des algorithmes génétiques de mutation-sélection. L'étape de mutation laisse les simulations évoluer tandis que l'étape de sélection ne retient que celles qui se rapprochent de l'événement rare qui nous intéresse. Les méthodes classiques multi-niveaux requièrent donc également une connaissance raisonnable du système pour déterminer le nombre de sélections à effectuer et réaliser de bonnes sélections. L'algorithme multi-niveaux adaptatif a été mis en place pour fixer les critères de sélection au fil de l'eau [29] et ne requiert que peu d'information sur le système.

6.3.1 Généralités sur l'algorithme multi-niveaux adaptatif

Nous présentons ici l'idée générale de cet algorithme pour un processus en temps continu. Soit $(X_t)_{t \geq 0}$ un processus de Markov à temps continu sur $\mathbb{R}^d \setminus (A \cup B)$, avec A et B disjoints. Le but de cet algorithme est de calculer la probabilité que le processus atteigne l'ensemble $B \subset \mathbb{R}^d$ avant de retourner dans A alors qu'il commence dans le voisinage de l'ensemble A . Pour ce faire, nous définissons une fonction score

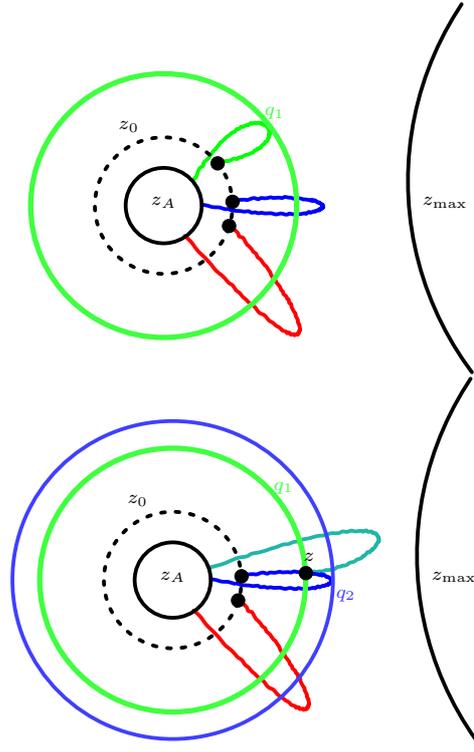


FIGURE 6.4 – Schéma de principe de l'algorithme adaptatif multi-niveaux. Dans cet exemple, $n_{\text{rep}} = 3$, la fonction score utilisée est prise selon la coordonnée radiale. Après l'initialisation, la trajectoire verte est celle qui a le plus bas niveau, elle est donc tuée et une nouvelle trajectoire est simulée à partir de z .

$\xi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ qui décrit la progression vers l'ensemble B . Nous faisons l'hypothèse que nous pouvons écrire

$$A = \{A \in \mathbb{R}^d, \xi(x) \leq z_A\},$$

et qu'il existe une constante $z_{\text{max}} \in \mathbb{R}$ telle que

$$B \subset \xi^{-1}(]z_{\text{max}}, +\infty[)$$

avec $z_{\text{max}} > z_A$. L'algorithme va permettre d'estimer la fonction committeur qu'un processus ayant une condition initiale située entre z_0 et z_{max} , atteigne B sans retourner vers A . Les différentes étapes de l'algorithme sont les suivantes :

- Initialisation de n_{rep} copies de processus de Markov $\{X_t^n\}$, $n = 1, \dots, n_{\text{rep}}$ en simulant les processus jusqu'à ce qu'ils soient tous retournés dans A (ou qu'ils aient atteints z_{max}). Dans le cas où une réalisation a atteint z_{max} , nous ne modifions plus cette réalisation mais la probabilité qu'un tel événement se produise est très faible. Posons $j = 1$.
- Itérer sur j les étapes suivantes jusqu'à ce que toutes les trajectoires aient atteint z_{max} :
 - Pour chaque copie simulée, nous gardons la position la plus éloignée de la trajectoire selon la fonction score $S_n^j = \sup \xi(X_t^n)$.
 - Nous introduisons le quantile empirique $q_j = \min_n S_n^j$.
 - La copie dont le niveau maximum est q_j est tuée puis une copie est simulée à partir des $n_{\text{rep}} - 1$ autres copies. Plus précisément, nous tirons uniformément une copie parmi les $n_{\text{rep}} - 1$ copies qui ont atteint un niveau supérieur à q_j , et indexons par k la copie choisie. Soit z la position de première atteinte du niveau q_j pour la copie k . Alors pour la copie indexé par k , nous simulons une nouvelle copie du processus avec comme condition initiale z , et la laissons évoluer jusqu'à ce qu'elle atteigne z_A ou z_{max} .
- Parmi toutes les trajectoires simulées, il y a une proportion $P_{\text{corr}} > 0$ qui ont atteint le niveau z_{max} . L'estimateur de la fonction committeur est alors $(1 - \frac{1}{n_{\text{rep}}})^j P_{\text{corr}}$.

Afin de réduire le nombre d'itération, nous pourrions utiliser un quantile plus grand : à la place de tuer et donc de simuler une seule copie, nous pourrions tuer un nombre fixe n_{kill} de copies, et chacune de ces copies serait alors remplacées par des copies parmi les copies survivantes. Cependant, l'article de Charles-Edouard Bréhier, Tony Lelièvre, et Mathias Rousset [26] montre qu'il est préférable de ne tuer qu'une copie à la fois. C'est la raison pour laquelle nous avons présenté l'algorithme sous cette forme.

6.3.2 Algorithme multi-niveaux pour les applications de Poincaré aléatoires

En adaptant l'algorithme présenté ci-dessus nous allons pouvoir calculer les fonctions committeurs

$$\mathbb{P}^x \{ \tau_{\mathcal{M}_k \setminus B_i}^+ < \tau_{B_i}^+ \} \quad (6.3.1)$$

avec une condition initiale x dans \mathcal{A}_i , le bassin d'attraction de B_i .

En effet, pour tout $x \in \mathcal{A}_i \setminus B_i$, une application directe de l'algorithme développé pour des systèmes à temps discret et à espace quelconque dans [26] permet d'obtenir un estimateur sans biais de (6.3.1). Comme expliqué dans l'article, l'implémentation de l'algorithme à des systèmes en temps discret soulève deux questions. Une première question naturelle est jusqu'à quel niveau faut-il copier la copie que nous dupliquons : jusqu'au dernier moment où elle a un niveau inférieur au niveau maximal atteint par la trajectoire tuée, ou jusqu'au premier moment où la copie atteint un niveau supérieur. Il est montré dans [26] que copier la trajectoire jusqu'au moment où elle franchit un niveau supérieur à celui de la trajectoire que nous venons de tuer conduit à un estimateur sans biais. De plus, en temps discret, plusieurs copies peuvent atteindre exactement le même niveau. Dans ce cas, toutes ces copies doivent être tuées, et l'estimateur doit être corrigé.

Étudier les probabilités de transition sur la section de Poincaré, plutôt que dans l'espace des phases complet présente l'avantage de simplifier la définition de la fonction score, puisqu'elle n'a pas besoin d'être définie tout le long des orbites périodiques. Cependant, la convergence de l'algorithme pour estimer les événements rares sur une section de Poincaré peut dépendre du choix de la section de Poincaré. En effet, il va dépendre des sections de Poincaré par rapport à la position des premières sorties des bassins d'attraction des orbites périodiques i.e. là où le quasi-potentiel est minimal. Pour accélérer la convergence de l'algorithme, nous proposons d'utiliser plusieurs sections de Poincaré. Étant donné une section de Poincaré, nous définissons $n_\Sigma - 1$ autres sections de Poincaré en les plaçant là où les trajectoires stochastiques s'éloignent le plus de la trajectoire déterministe. Plus précisément, nous simulons une trajectoire déterministe le long d'une orbite périodique et gardons en mémoire le temps déterministe nécessaire pour retourner sur la section de Poincaré T_Σ . Nous divisons cette période de temps en n_Σ temps déterministes $T_1, \dots, T_{n_\Sigma} = T_\Sigma$ et construisons une section de Poincaré Σ_i^{temp} à chaque temps $x_{T_i}^{\text{det}}$. Jusqu'à présent nous avons construit des sections de Poincaré, mais nous n'avons pas pris en compte les positions de premières sorties. Pour ce faire, nous simulons des trajectoires déterministes et regardons la position maximale argmax le long de l'orbite périodique où la distance entre la trajectoire simulée et l'orbite périodique est la plus grande lorsque la trajectoire évolue entre deux sections Poincaré temporaires. Puis nous construisons une section de Poincaré en cet argument argmax . Et nous faisons ceci entre toutes les sections de Poincaré construites temporairement.

Remarque 6.3.1. Puisque le temps pris pour les trajectoires stochastiques entre les sections de Poincaré n'est pas le même que celui pris par la trajectoire déterministe, nous sommes amenés à comparer deux séries temporelles ayant des longueurs différentes. Un algorithme appelé Déformation Dynamique Temporelle (en anglais Dynamic Time Warping (DTW)) permet de comparer la distance entre deux séries dont les vitesses peuvent varier au cours du temps [2]. Cependant, puisque simuler une trajectoire déterministe n'est pas très coûteux, pour chaque trajectoire stochastique simulée nous préférons simuler une nouvelle trajectoire déterministe ayant la même longueur et comparer ces deux séries. \diamond

Une fois que les sections de Poincaré ont été placées, nous définissons une chaîne de Markov \mathbb{X}_n qui enregistre les intersections successives d'une trajectoire sur les différentes section de Poincaré $\Sigma, \Sigma_1, \dots, \Sigma_{n_\Sigma-1}$. Nous rappelons que Z_t^z correspond à la solution de (3.2.1) ayant la condition initiale z au temps 0.

La chaîne de Markov \mathbb{X}_n a pour espace d'états $S = \Sigma \times \Sigma_1 \times \dots \times \Sigma_{n_\Sigma-1}$. Nous posons $\tau_0^0 = 0$, où l'exposant correspond au numéro de la section de Poincaré et pour tout $1 \leq i \leq n_\Sigma$, nous définissons les temps d'arrêt

$$\tau_0^i = \inf \{ t > \tau_0^{i-1} : Z_t^{X_0} \in \Sigma_i \}.$$

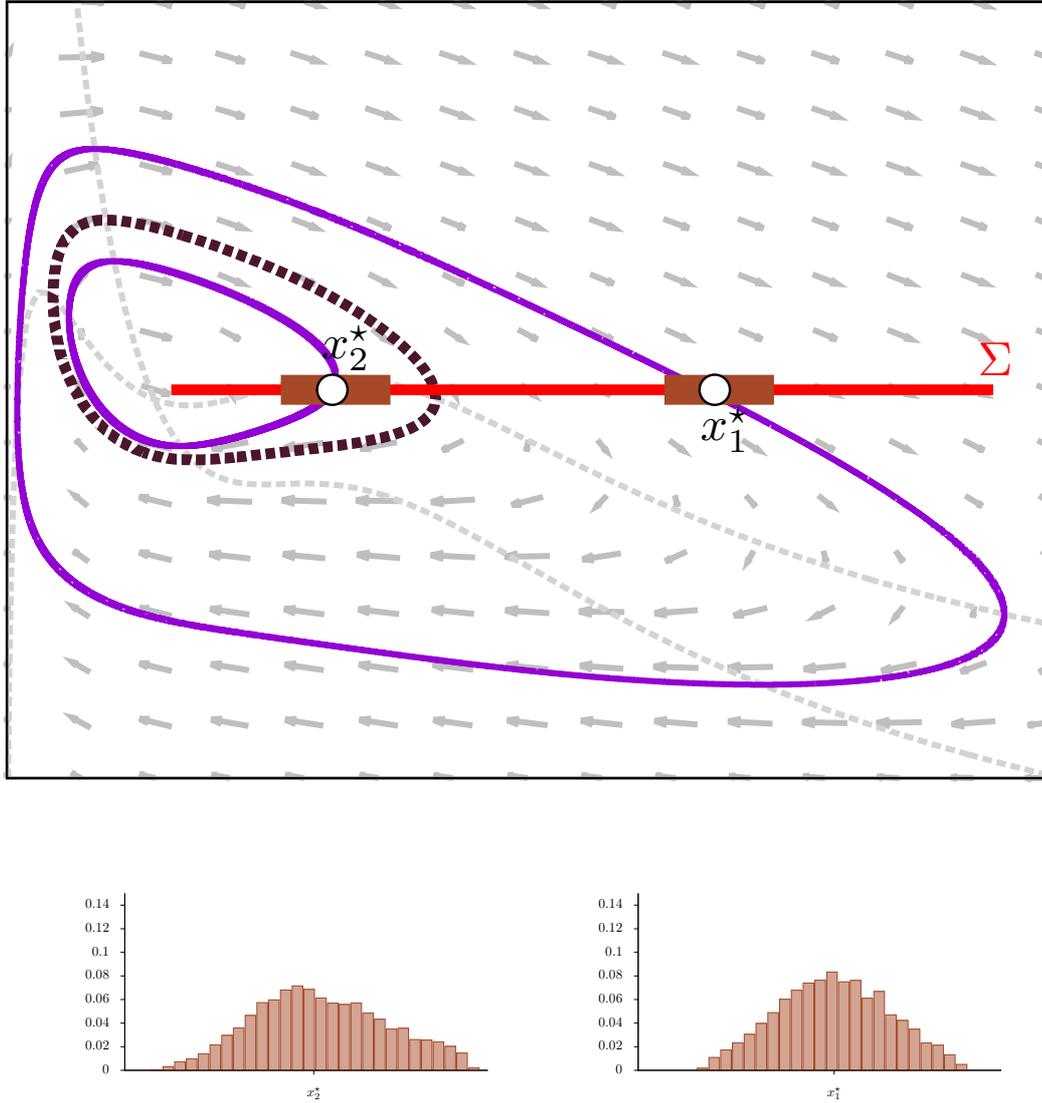


FIGURE 6.5 – Simulation des distributions quasi-stationnaires $\hat{\pi}_0^{B_2}$ et $\hat{\pi}_0^{B_1}$ associées à l'application de Poincaré aléatoire du système modélisant la glycolyse.

Nous posons alors $\mathbb{X}_0 = (Z_{\tau_0}^{X_0}, \dots, Z_{\tau_0^{n_{\Sigma}-1}}^{X_0})$, ce qui signifie que la condition initiale est composée des coordonnées radiales de la trajectoire stochastique sur les différentes sections de Poincaré. Pour $n \geq 1$ et pour tout $1 \leq i \leq n_{\Sigma}$, nous définissons les temps d'arrêt

$$\begin{aligned} \tau_n^0 &= \inf\{t > \tau_{n-1}^{n_{\Sigma}} : Z_t^{X_0} \in \Sigma\}, \\ \tau_n^i &= \inf\{t > \tau_{n-1}^{i-1} : Z_t^{X_0} \in \Sigma_i\}. \end{aligned}$$

et nous posons $\mathbb{X}_{n+1} = (Z_{\tau_{n+1}^0}^{X_0}, \dots, Z_{\tau_{n+1}^{n_{\Sigma}-1}}^{X_0})$.

La propriété de Markov forte implique que la loi de \mathbb{X}_{n+1} étant donné \mathbb{X}_n est indépendante de n et de tous \mathbb{X}_m avec $m < n$, ainsi la suite $(\mathbb{X}_n)_{n \geq 0}$ forme bien une chaîne de Markov homogène. Nous pouvons appliquer l'algorithme multi-niveaux pour calculer les probabilités de transitions.

Remarque 6.3.2. L'algorithme multi-niveaux permet d'estimer les fonctions committeurs pour une condition initiale située en dehors des états métastable tandis que les valeurs propres que nous voulons

estimer dépendent de fonctions committeurs distribuées selon certaines distributions quasi-stationnaires concentrées dans ces voisinages. Il s'agit en fait, d'un faux problème. En effet, grâce à l'analyse du processus tué, nous savons que le trou spectral associé au processus tué est au moins d'ordre logarithmique en σ , donc quelque soit la distribution initiale avec laquelle nous partons, la distribution quasi-stationnaire pourra être simulée en un temps raisonnable. En pratique, nous laissons évoluer une trajectoire dans son espace d'états autorisés pour obtenir des réalisations de cette distribution quasi-stationnaire. Nous attendons que la trajectoire quitte l'espace d'états autorisés de la distribution quasi-stationnaire pour estimer la fonction committeur. \diamond

Des simulations réalisées sur l'exemple de la glycolyse présenté dans l'introduction, montrent que cette méthode permet une estimation plus rapide des valeurs propres par rapport aux algorithmes naïfs. La Figure 6.5 illustre une des sections de Poincaré Σ et les deux voisinages B_1 et B_2 des orbites périodiques stables. Les simulations mettent en évidence qu'il est plus facile de quitter l'orbite périodique stable située à l'intérieur de l'orbite périodique instable qu'il l'est de quitter l'orbite périodique stable située à l'extérieur. Dans cet exemple, l'hypothèse de hiérarchie métastable semble vérifiée.

Bibliographie

- [1] Sergio Angel Almada Monter and Yuri Bakhtin. Normal forms approach to diffusion near hyperbolic equilibria. *Nonlinearity*, 24(6) :1883–1907, 2011.
- [2] Chotirat Ann and Ratanamahatana Eamonn Keogh. Everything you know about dynamic time warping is wrong, 2004.
- [3] David Aristoff, Tony Lelièvre, Christopher G. Mayne, and Ivan Teo. Adaptive multilevel splitting in molecular dynamics simulations. In *CEMRACS 2013—modelling and simulation of complex systems : stochastic and deterministic approaches*, volume 48 of *ESAIM Proc. Surveys*, pages 215–225. EDP Sci., Les Ulis, 2015.
- [4] Yuri Bakhtin. Exit asymptotics for small diffusion about an unstable equilibrium. *Stochastic Process. Appl.*, 118(5) :839–851, 2008.
- [5] J. Beltrán and C. Landim. Metastability of reversible finite state Markov processes. *Stochastic Process. Appl.*, 121(8) :1633–1677, 2011.
- [6] Gérard Ben Arous, Shigeo Kusuoka, and Daniel W. Stroock. The Poisson kernel for certain degenerate elliptic operators. *J. Funct. Anal.*, 56(2) :171–209, 1984.
- [7] N. Berglund and B. Gentz. The Eyring-Kramers law for potentials with nonquadratic saddles. *Markov Process. Related Fields*, 16(3) :549–598, 2010.
- [8] Nils Berglund. Kramers’ law : validity, derivations and generalisations. *Markov Process. Related Fields*, 19(3) :459–490, 2013.
- [9] Nils Berglund and Sébastien Dutercq. The Eyring–Kramers law for Markovian jump processes with symmetries. *Journal of Theoretical Probability*, pages 1–40, 2013.
- [10] Nils Berglund and Barbara Gentz. Geometric singular perturbation theory for stochastic differential equations. *J. Differential Equations*, 191 :1–54, 2003.
- [11] Nils Berglund and Barbara Gentz. *Noise-induced phenomena in slow-fast dynamical systems. A sample-paths approach*. Probability and its Applications (New York). Springer-Verlag London, Ltd., London, 2006.
- [12] Nils Berglund and Barbara Gentz. On the noise-induced passage through an unstable periodic orbit II : General case. *SIAM J. Math. Anal.*, 46(1) :310–352, 2014.
- [13] Nils Berglund, Barbara Gentz, and Christian Kuehn. Hunting french ducks in a noisy environment. *J. Diff. Eq.*, 252(9) :4786–4841, 2012.
- [14] Nils Berglund, Barbara Gentz, and Christian Kuehn. From random Poincaré maps to stochastic mixed-mode-oscillation patterns. *J. Dynam. Differential Equations*, 27(1) :83–136, 2015.
- [15] Nils Berglund, Barbara Gentz, and Christian Kuehn. From random Poincaré maps to stochastic mixed-mode-oscillation patterns. *J. Dynam. Differential Equations*, 27(1) :83–136, 2015.
- [16] Nils Berglund and Damien Landon. Mixed-mode oscillations and interspike interval statistics in the stochastic FitzHugh–Nagumo model. *Nonlinearity*, 25(8) :2303–2335, 2012.
- [17] Abraham Berman and Robert J. Plemmons. *Nonnegative matrices in the mathematical sciences*, volume 9 of *Classics in Applied Mathematics*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1994. Revised reprint of the 1979 original.
- [18] Volker Betz and Stéphane Le Roux. Multi-scale metastable dynamics and the asymptotic stationary distribution of perturbed markov chains. *Stochastic Processes and their Applications*, 126(11) :3499–3526, 2016.

- [19] Alessandra Bianchi and Alexandre Gaudillière. Metastable states, quasi-stationary distributions and soft measures. *Stochastic Process. Appl.*, 126(6) :1622–1680, 2016.
- [20] Garrett Birkhoff. Extensions of Jentzsch’s theorem. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 85 :219–227, 1957.
- [21] Freddy Bouchet and Julien Reygner. Generalisation of the Eyring–Kramers transition rate formula to irreversible diffusion processes. *Annales Henri Poincaré*, pages 1–34, 2016.
- [22] Anton Bovier and Frank den Hollander. *Metastability. A potential-theoretic approach*, volume 351 of *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Springer, Cham, 2015.
- [23] Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayrard, and Markus Klein. Metastability and small eigenvalues in Markov chains. *J. Phys. A*, 33(46) :L447–L451, 2000.
- [24] Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayrard, and Markus Klein. Metastability in reversible diffusion processes. I. Sharp asymptotics for capacities and exit times. *J. Eur. Math. Soc. (JEMS)*, 6(4) :399–424, 2004.
- [25] Anton Bovier, Véronique Gayrard, and Markus Klein. Metastability in reversible diffusion processes. II. Precise asymptotics for small eigenvalues. *J. Eur. Math. Soc. (JEMS)*, 7(1) :69–99, 2005.
- [26] Charles-Edouard Bréhier, Tony Lelièvre, and Mathias Rousset. Analysis of adaptive multilevel splitting algorithms in an idealized case. *ESAIM Probab. Stat.*, 19 :361–394, 2015.
- [27] Maria Cameron and Tingyue Gan. A graph-algorithmic approach for the study of metastability in markov chains. [arXiv:1607.00078](https://arxiv.org/abs/1607.00078), 2016.
- [28] Maria Cameron and Eric Vanden-Eijnden. Flows in complex networks : theory, algorithms, and application to Lennard-Jones cluster rearrangement. *J. Stat. Phys.*, 156(3) :427–454, 2014.
- [29] Frédéric Cérou and Arnaud Guyader. Adaptive multilevel splitting for rare event analysis. *Stoch. Anal. Appl.*, 25(2) :417–443, 2007.
- [30] Nicolas Champagnat and Denis Villemonais. Exponential convergence to quasi-stationary distribution and Q -process. *Probab. Theory Related Fields*, 164(1-2) :243–283, 2016.
- [31] Raphaël Chetrite and Hugo Touchette. Nonequilibrium Markov processes conditioned on large deviations. *Ann. Henri Poincaré*, 16(9) :2005–2057, 2015.
- [32] Ofra Citri and Irving R Epstein. Systematic design of chemical oscillators. 43. Mechanistic study of a coupled chemical oscillator : the bromate-chlorite-iodide reaction. *Journal of Physical Chemistry*, 92(7) :1865–1871, 1988.
- [33] Pierre Collet, Servet Martí nez, and Jaime San Martí n. *Quasi-stationary distributions*. Probability and its Applications (New York). Springer, Heidelberg, 2013. Markov chains, diffusions and dynamical systems.
- [34] Harald Cramér. Sur un nouveau théoreme-limite de la théorie des probabilités. *Actualités scientifiques et industrielles*, 736(5-23) :115, 1938.
- [35] Edward Brian Davies. Metastable states of symmetric Markov semigroups. I. *Proc. London Math. Soc. (3)*, 45(1) :133–150, 1982.
- [36] Edward Brian Davies. Metastable states of symmetric Markov semigroups ii. *Journal of the London Mathematical Society*, 2(3) :541–556, 1982.
- [37] Edward Brian Davies. Spectral properties of metastable Markov semigroups. *J. Funct. Anal.*, 52(3) :315–329, 1983.
- [38] Olivier Decroly and Albert Goldbeter. Birhythmicity, chaos, and other patterns of temporal self-organization in a multiply regulated biochemical system. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 79(22) :6917–6921, 1982.
- [39] Giacomo Di Gesù, Tony Lelièvre, Dorian Le Peutrec, and Boris Nectoux. Jump Markov models and transition state theory : the quasi-stationary distribution approach. *Faraday Discuss.*, 195 :469–495, 2016.
- [40] Susanne Ditlevsen and Priscilla Greenwood. The Morris-Lecar neuron model embeds a leaky integrate-and-fire model. *J. Math. Biol.*, 67(2) :239–259, 2013.
- [41] Joseph L. Doob. *Classical potential theory and its probabilistic counterpart*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 2001. Reprint of the 1984 edition.

- [42] Aline Duarte, Eva Löcherbach, and Guilherme Ost. Stability and perfect simulation of non-linear Hawkes processes with Erlang kernels. Preprint [arXiv:1610.03300](https://arxiv.org/abs/1610.03300), 2106.
- [43] Weinan E and Eric Vanden-Eijnden. Towards a theory of transition paths. *J. Stat. Phys.*, 123(3) :503–523, 2006.
- [44] Henry Eyring. The activated complex in chemical reactions. *The Journal of Chemical Physics*, 3(2) :107–115, 1935.
- [45] Ivar Fredholm. Sur une classe d'équations fonctionnelles. *Acta Math.*, 27(1) :365–390, 1903.
- [46] M. I. Freidlin and A. D. Wentzell. *Random perturbations of dynamical systems*, volume 260 of *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Springer-Verlag, New York, second edition, 1998. Translated from the 1979 Russian original by Joseph Szücs.
- [47] Bernard Gaveau and Lawrence Schulman. Theory of nonequilibrium first-order phase transitions for stochastic dynamics. *J. Math. Phys.*, 39(3) :1517–1533, 1998.
- [48] David Gilbarg and Neil S. Trudinger. *Elliptic partial differential equations of second order*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 2001. Reprint of the 1998 edition.
- [49] Israel Gohberg and Seymour Goldberg. *Basic operator theory*. Birkhäuser Boston, Inc., Boston, MA, 2001. Reprint of the 1981 original.
- [50] Israel Gohberg, Seymour Goldberg, and Marinus A. Kaashoek. *Basic classes of linear operators*. Birkhäuser Verlag, Basel, 2003.
- [51] Ivan G. Graham and Ian H. Sloan. On the compactness of certain integral operators. *J. Math. Anal. Appl.*, 68(2) :580–594, 1979.
- [52] Jack K. Hale. *Ordinary differential equations*. Robert E. Krieger Publishing Co., Inc., Huntington, N.Y., second edition, 1980.
- [53] Pawel Hitczenko and Georgi S. Medvedev. Bursting oscillations induced by small noise. *SIAM J. Appl. Math.*, 69(5) :1359–1392, 2009.
- [54] Pawel Hitczenko and Georgi S. Medvedev. The Poincaré map of randomly perturbed periodic motion. *J. Nonlinear Sci.*, 23(5) :835–861, 2013.
- [55] R. Höpfner, E. Löcherbach, and M. Thieullen. Ergodicity for a stochastic Hodgkin-Huxley model driven by Ornstein-Uhlenbeck type input. *Ann. Inst. Henri Poincaré Probab. Stat.*, 52(1) :483–501, 2016.
- [56] Robert Jentzsch. Über Integralgleichungen mit positivem Kern. *J. f. d. reine und angew. Math.*, 141 :235–244, 1912.
- [57] Michael Karow. *Geometry of spectral value sets*. PhD thesis, PhD thesis, Universität Bremen, 2003.
- [58] Tosio Kato. *Perturbation theory for linear operators*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 1995. Reprint of the 1980 edition.
- [59] Yuri Kifer. The exit problem for small random perturbations of dynamical systems with a hyperbolic fixed point. *Israel J. Math.*, 40(1) :74–96, 1981.
- [60] Panki Kim, Renming Song, and Zoran Vondraček. On harmonic functions for trace processes. *Math. Nachr.*, 284(14-15) :1889–1902, 2011.
- [61] Hendrik Anthony Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, 7(4) :284–304, 1940.
- [62] Claudio Landim, Mauro Mariani, and Insuk Seo. A Dirichlet and a Thomson principle for non-selfadjoint elliptic operators, Metastability in non-reversible diffusion processes. preprint [arXiv:1701.00985](https://arxiv.org/abs/1701.00985), 2017.
- [63] Claudio Landim and Insuk Seo. Metastability of non-reversible random walks in a potential field, the Eyring–Kramers transition rate formula. *J. Stat. Phys.*, 165(4) :693–726, 2016.
- [64] Jianfeng Lu and James Nolen. Reactive trajectories and the transition path process. *Probab. Theory Related Fields*, 161(1-2) :195–244, 2015.
- [65] Pierre Mathieu. Spectra, exit times and long time asymptotics in the zero-white-noise limit. *Stochastics Stochastics Rep.*, 55(1-2) :1–20, 1995.

- [66] Sean Peter Meyn and Richard Lewis Tweedie. Stability of Markovian processes. III. Foster-Lyapunov criteria for continuous-time processes. *Adv. in Appl. Probab.*, 25(3) :518–548, 1993.
- [67] Federico Moran and Albert Goldbeter. Onset of birhythmicity in a regulated biochemical system. *Biophysical chemistry*, 20(1-2) :149–156, 1984.
- [68] Esa Nummelin. *General irreducible Markov chains and nonnegative operators*, volume 83 of *Cambridge Tracts in Mathematics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1984.
- [69] Enzo Olivieri and Maria Eulália Vares. *Large deviations and metastability*, volume 100 of *Encyclopedia of Mathematics and its Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- [70] Steven Orey. *Lecture notes on limit theorems for Markov chain transition probabilities*. Van Nostrand Reinhold Co., London-New York-Toronto, Ont., 1971. Van Nostrand Reinhold Mathematical Studies, No. 34.
- [71] Michael Reed and Barry Simon. *Methods of modern mathematical physics.*, volume I. Functional analysis. Academic Press, Inc. [Harcourt Brace Jovanovich, Publishers], New York, second edition, 1980.
- [72] Daniel Revuz. *Markov chains*, volume 11 of *North-Holland Mathematical Library*. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, second edition, 1984.
- [73] Gerardo Rubino and Bruno Tuffin. *Rare event simulation using Monte Carlo methods*. John Wiley & Sons, 2009.
- [74] Barry Simon. Notes on infinite determinants of Hilbert space operators. *Advances in Math.*, 24(3) :244–273, 1977.
- [75] Martin Slowik. *Contributions to the potential theoretic approach to metastability with applications to the random field Curie-Weiss-Potts model*. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2012.
- [76] Lloyd N. Trefethen and Mark Embree. *Spectra and pseudospectra*. Princeton University Press, Princeton, NJ, 2005. The behavior of nonnormal matrices and operators.
- [77] Alexander D. Ventcel'. The asymptotic behavior of the eigenvalues of matrices with elements of the order $\exp\{-V_{ij}/(2\varepsilon^2)\}$. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 202 :263–265, 1972.
- [78] Alexander D. Ventcel'. The asymptotic behavior of the largest eigenvalue of a second order elliptic differential operator with a small parameter multiplying the highest derivatives. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 202 :19–22, 1972.

Manon BAUDEL
Théorie spectrale pour des applications de Poincaré
aléatoires

Résumé :

Nous nous intéressons à des équations différentielles stochastiques obtenues en perturbant par un bruit blanc des équations différentielles ordinaires admettant N orbites périodiques asymptotiquement stables. Nous construisons une chaîne de Markov à temps discret et espace d'états continu appelée application de Poincaré aléatoire qui hérite du comportement métastable du système. Nous montrons que ce processus admet exactement N valeurs propres qui sont exponentiellement proches de 1 et nous donnons des expressions pour ces valeurs propres et les fonctions propres associées en termes de fonctions committeurs dans les voisinages des orbites périodiques. Nous montrons également que ces valeurs propres sont bien séparées du reste du spectre. Chacune de ces valeurs propres exponentiellement proche de 1 est également reliée à un temps d'atteinte de ces voisinages. De plus, les N valeurs propres exponentiellement proches de 1 et fonctions propres à gauche et à droite associées peuvent être respectivement approchées par des valeurs propres principales, des distributions quasi-stationnaires, et des fonctions propres principales à droite de processus tués quand ils atteignent ces voisinages. Les preuves reposent sur une représentation de type Feynman–Kac pour les fonctions propres, la transformée harmonique de Doob, la théorie spectrale des opérateurs compacts et une propriété de type équilibré détaillé satisfaite par les fonctions committeurs.

Mots clés : équation différentielle stochastique, orbite périodique, application de Poincaré aléatoire, chaîne de Markov, métastabilité, distribution quasi-stationnaire, transformée harmonique de Doob, théorie spectrale, théorie de Fredholm, problème de première sortie.

Spectral theory for random Poincaré maps

Abstract :

We consider stochastic differential equations, obtained by adding weak Gaussian white noise to ordinary differential equations admitting N asymptotically stable periodic orbits. We construct a discrete-time, continuous-space Markov chain, called a random Poincaré map, which encodes the metastable behaviour of the system. We show that this process admits exactly N eigenvalues which are exponentially close to 1, and provide expressions for these eigenvalues and their left and right eigenfunctions in terms of committor functions of neighbourhoods of periodic orbits. We also provide a bound for the remaining part of the spectrum. The eigenvalues that are exponentially close to 1 and the right and left eigenfunctions are well-approximated by principal eigenvalues, quasistationary distributions, and principal right eigenfunctions of processes killed upon hitting some of these neighbourhoods. Each eigenvalue that is exponentially close to 1 is also related to the mean exit time from some metastable neighborhood of the periodic orbits. The proofs rely on Feynman–Kac-type representation formulas for eigenfunctions, Doob's h -transform, spectral theory of compact operators, and a recently discovered detailed balance property satisfied by committor functions.

Keywords : stochastic differential equation, periodic orbit, random Poincaré map, Markov chain, metastability, quasistationary distribution, Doob h -transform, spectral theory, Fredholm theory, first-passage time.



MAPMO - CNRS, UMR 7349
Bâtiment de mathématiques
Route de Chartres
Université d'Orléans, B.P. 6759
F-45067 Orléans cedex 2
France

