La métastabilité en physique statistique

Boris Nectoux, TU Wien

Mots-clés : Physique statistique, Eyring-Kramers, régime d'une petite température, méthodes de Monte-Carlo cinétique.

Considérons le processus de Langevin suramorti $(X_t)_{t\geq 0}$ solution de l'équation différentielle stochastique sur $\mathbb{R}^d$:

$$dX_t = -\nabla f(X_t)dt + \sqrt{h}dB_t.$$

C'est un processus prototypique utilisé en physique statistique pour modéliser l'évolution de systèmes, comme la position des atomes d'une protéine ou la position d'une impureté dans un cristal. La fonction $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ est le potentiel du système et $h > 0$ sa température. Le processus de Langevin suramorti est métastable: il reste bloqué (piégé) dans des voisinages des minima locaux de f sur de longues périodes de temps avant de s'en échapper. C'est une des raisons majeures qui rend inaccessibles l'observation de transitions entre les états macroscopiques du système ainsi que le calcul de quantités thermodynamiques par intégration directe des trajectoires de $(X_t)_{t\geq 0}$. De nombreux algorithmes ont été introduits ces dernières années pour accélérer l'échantillonnage de dynamiques métastables (tels que les méthodes de Monte-Carlo cinétique et les *accelerated dynamics algorithms* introduits par A.F. Voter *et al.* à Los Alamos). Ces algorithmes reposent sur des estimées précises de l'évènement de sortie d'un état macroscopique $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ à basse température ($h \ll 1$) et notamment sur le calcul asymptotique des taux de transition entre les états macroscopiques à l'aide de la célèbre loi d'Eyring-Kramers (1935).

Dans cet exposé, je présenterai des résultats récents marquant des avancées significatives sur l'étude précise de l'évènement de sortie d'un état macroscopique Ω pour le processus de Langevin suramorti quand $h \ll 1$. Toutefois, de nombreuses questions restent ouvertes, notamment concernant l'extension des résultats au cas de la dynamique de Langevin

$$\begin{cases} dq_t = p_t dt, \\ dp_t = -\nabla f(q_t)dt - \gamma\, p_t dt + \sqrt{h\gamma}\, dB_t, \end{cases} \tag{1}$$

où $(q_t, p_t) \in \Omega = D \times \mathbb{R}^d$ et D est un ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^d$.

Boris Nectoux, TU Wien, Institut für Analysis und Scientific Computing, Wiedner Hauptstr. 8-10, E101, Wien, 1040, AUSTRIA
boris.nectoux@asc.tuwien.ac.at