

Randonnée aléatoire le long des solénoïdes d'un tore

Adrien Laurent

Qui suis-je ? Malgré les multiples concepts géométriques présentés sur les images, je n'ai rien d'un géomètre. Je travaille dans l'analyse numérique, un domaine oscillant entre les mathématiques et l'informatique, qui s'intéresse à la création et l'étude d'algorithmes informatiques pour résoudre des problèmes mathématiques. Dans ma recherche, je crée des méthodes numériques pour résoudre des équations mêlant des dérivées et de l'aléatoire que l'on appelle des *équations différentielles stochastiques*.

Contexte de l'algorithme utilisé. La méthode numérique utilisée ici trouve son origine dans un contexte complètement différent : la dynamique moléculaire. Si on regarde un gaz contenant un grand nombre de particules sous une haute température, on peut montrer que les particules suivent l'équation suivante, dite de *Langevin overdamped*,

$$dX(t) = -\nabla V(X(t))dt + \sigma dW(t).$$

Ici, V est un potentiel qui contraint les particules à préférer certains endroits à d'autres, et W est un mouvement Brownien, un processus aléatoire rendant compte des collisions des particules avec leur environnement. Bien souvent, les particules n'évoluent pas librement. Par exemple, dans une molécule d'eau H_2O , les trois atomes forment un angle fixe et n'évoluent donc pas librement. On appelle cela une contrainte, et cela revient à faire évoluer nos particules sur une *variété différentielle*, comme une courbe ou une surface. La marche aléatoire représentée sur l'image est en fait une particule qui se promène sur un tore (un doughnut mathématique), et subissant un potentiel V qui contraint la particule proche des solénoïdes de ce tore.

Mais à quoi ça sert ? Savoir approximer la trajectoire de particules est extrêmement utile en chimie comme en physique quantique, surtout si on peut tenir compte de différentes contraintes. Par exemple, simuler l'interaction de protéines avec leur environnement permet de choisir de bons candidats pour des vaccins. Néanmoins pour l'image présentée, j'ai choisi une trajectoire proche des solénoïdes d'un tore pour la seule raison que je trouve cela joli !

Je veux plus de détails ! Sous contraintes, on peut réécrire l'équation de Langevin overdamped sur une variété comme

$$dX(t) = -\nabla V(X(t))dt + \sigma dW(t) + \nabla \zeta(X(t))d\lambda_t, \quad \zeta(X(t)) = 0,$$

où la solution est contrainte sur la variété $\mathcal{M} = \{x \in \mathbb{R}^d, \zeta(x) = 0\}$ et λ est à interpréter comme un *multiplicateur de Lagrange*. On peut discrétiser cette équation en une *méthode de*

¹Chercheur à la section de Mathématiques de l'Université de Genève, Adrien.Laurent@unige.ch.

type Runge-Kutta de la forme

$$Y_i = X_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j) + \sigma \sqrt{h} \sum_{k=1}^l d_i^{(k)} \xi_n^{(k)} + \lambda_i \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} g(Y_j), \quad i = 1, \dots, s,$$
$$\zeta(Y_i) = 0 \quad \text{si} \quad \delta_i = 1, \quad i = 1, \dots, s,$$
$$X_{n+1} = Y_s,$$

où les $\xi_n^{(k)}$ sont des vecteurs gaussiens indépendants, et les $A = (a_{ij}), \hat{A} = (\hat{a}_{ij}) \in \mathbb{R}^{s \times s}$, $b = (b_i) \in \mathbb{R}^s$, $d^{(k)} = (d_i^{(k)}) \in \mathbb{R}^s$, $\delta_i = \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} \in \{0, 1\}$ sont les coefficients de la méthode de Runge-Kutta. Un exemple de méthode sous cette forme est la méthode d'Euler à direction implicite

$$X_{n+1} = X_n + hf(X_n) + \sigma \sqrt{h} \xi_n + \lambda g(X_{n+1}), \quad \zeta(X_{n+1}) = 0.$$

On a utilisé pour l'image une nouvelle méthode de cette forme mais d'ordre deux. Si vous êtes vraiment très intéressé, vous pouvez trouver la méthode dans l'article [1].

References

- [1] A. Laurent and G. Vilmart. *Order conditions for sampling the invariant measure of ergodic stochastic differential equations on manifolds*. Submitted, 2020.