



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services Branch

395 Wellington Street
Ottawa, Ontario
K1A 0N4

Bibliothèque nationale
du Canada

Direction des acquisitions et
des services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa (Ontario)
K1A 0N4

Your file / Votre référence

Our file / Notre référence

NOTICE

The quality of this microform is heavily dependent upon the quality of the original thesis submitted for microfilming. Every effort has been made to ensure the highest quality of reproduction possible.

If pages are missing, contact the university which granted the degree.

Some pages may have indistinct print especially if the original pages were typed with a poor typewriter ribbon or if the university sent us an inferior photocopy.

Reproduction in full or in part of this microform is governed by the Canadian Copyright Act, R.S.C. 1970, c. C-30, and subsequent amendments.

AVIS

La qualité de cette microforme dépend grandement de la qualité de la thèse soumise au microfilmage. Nous avons tout fait pour assurer une qualité supérieure de reproduction.

S'il manque des pages, veuillez communiquer avec l'université qui a conféré le grade.

La qualité d'impression de certaines pages peut laisser à désirer, surtout si les pages originales ont été dactylographiées à l'aide d'un ruban usé ou si l'université nous a fait parvenir une photocopie de qualité inférieure.

La reproduction, même partielle, de cette microforme est soumise à la Loi canadienne sur le droit d'auteur, SRC 1970, c. C-30, et ses amendements subséquents.

CINÉTIQUE DES TRANSITIONS
INDUITES PAR UN BRUIT DICHOTOMIQUE
DANS UN SYSTÈME MULTIVARIÉ ET MULTISTABLE

par
Steve Guillouxic

Thèse soumise
à l'École des études supérieures et de la recherche
en réponse aux exigences
du programme de maîtrise ès sciences

Département de physique

Université d'Ottawa
Ottawa, Ontario
18 décembre 1995



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services Branch

395 Wellington Street
Ottawa, Ontario
K1A 0N4

Bibliothèque nationale
du Canada

Direction des acquisitions et
des services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa (Ontario)
K1A 0N4

Your file Votre référence

Your file Votre référence

The author has granted an irrevocable non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of his/her thesis by any means and in any form or format, making this thesis available to interested persons.

L'auteur a accordé une licence irrévocable et non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de sa thèse de quelque manière et sous quelque forme que ce soit pour mettre des exemplaires de cette thèse à la disposition des personnes intéressées.

The author retains ownership of the copyright in his/her thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without his/her permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège sa thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

ISBN 0-612-11559-3

Canada



UNIVERSITÉ D'OTTAWA
UNIVERSITY OF OTTAWA

Abrégé

On étudie l'évolution stochastique d'un système multivarié et déterministiquement multistable soumis à un bruit dichotomique markovien additif. À cette fin, on définit un support, duquel le système ne peut s'échapper, pour la densité de probabilité stationnaire. Une condition frontière est alors imposée afin d'évaluer numériquement cette distribution sur le support.

Lorsque l'amplitude du bruit est suffisamment grande, le système peut évoluer d'un attracteur stochastique à un autre. Un critère de définition permettant de séparer le support en espèces disjointes est ici suggéré. Il est alors possible d'étudier la cinétique des transitions se produisant entre ces espèces et menant vers l'état stationnaire. La méthode des projecteurs permet d'obtenir une loi phénoménologique qui est valide lorsque l'échelle de temps sur laquelle se déroulent les transitions inter-espèces est beaucoup plus longue que toutes les autres échelles de temps caractérisant le système. On obtient également une équation permettant d'évaluer à l'aide d'une simulation directe les taux de transition de la loi phénoménologique.

Comme cas particulier, on considère un système bivarié possédant de façon déterministe deux points fixes stables et un point de selle. Les résultats confirment la validité de l'expression obtenue pour les taux de transition dans la mesure où le temps de corrélation du bruit est suffisamment petit.

Remerciements

Je remercie spécialement le Dr Ivan L'Heureux pour m'avoir sensibilisé au rôle que jouent les bruits dans les phénomènes naturels et pour m'avoir guidé et soutenu tout au long de ma recherche. Je remercie le Dr Rémi Vaillancourt pour sa collaboration au niveau de l'acquisition du logiciel MODULEF, ainsi que le Dr Stéphane Pilote pour le temps qu'il a consacré à son installation. Je remercie également le Dr Bruno Grossman et le Dr Gary Slater pour leur aide au niveau informatique, sans oublier le Dr Laura Duteau et le Dr Mike Nemes pour leur expérience dans le domaine des éléments finis. Je tiens aussi à remercier le CRSNG et l'Université d'Ottawa pour leur soutien financier. Finalement, j'adresse un merci particulier à ma femme Annie ainsi qu'à toutes les personnes qui ont su, de près ou de loin, me soutenir tout au long des deux dernières années.

Table des matières

Abrégé	ii
Remerciements	iii
1. Introduction	1
2. Systèmes univariés	7
3. Systèmes multivariés	15
3.1 Introduction	15
3.2 Densités de probabilité stationnaires	15
3.3 Cinétique et taux de transition	20
3.4 Modèle étudié	31
4. Distributions stationnaires et espèces	34
4.1 Introduction	34
4.2 Algorithmes	34
4.2.1 Détermination du support	34
4.2.2 Éléments finis	36
4.2.3 Lissage	41
4.2.4 Frontières entre les espèces	43
4.3 Résultats	44

5. Cinétique	58
5.1 Introduction	58
5.2 Algorithmes	58
5.2.1 Simulation phénoménologique	58
5.2.2 Simulation directe	59
5.2.3 Fonctions caractéristiques	59
5.3 Résultats	60
6. Conclusion	69
A. Équation d'évolution	72
B. Propagateurs projeté et non-projeté	76
C. Gradient d'une fonction caractéristique	77
D. Propagateur de Heisenberg	80

Liste des tableaux

2.1	Taux de transition pour le système univarié	14
5.1	Taux de transition pour le système bivarié (2 espèces)	63

Liste des figures

2.1	Potentiel déterministe $V(x)$ quartique	11
4.1	$\bar{F}(\bar{x}) + \bar{\Delta}$ pour $\gamma = 25$	44
4.2	$\bar{F}(\bar{x}) - \bar{\Delta}$ pour $\gamma = 25$	45
4.3	$\bar{F}(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$	46
4.4	$\ln P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$ (aucun lissage)	47
4.5	$\ln P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$	48
4.6	$\ln p_+^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$	49
4.7	$\ln p_-^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$	49
4.8	$\ln Q^s(\bar{x}), Q^s(\bar{x}) > 0$ pour $\gamma = 25$	50
4.9	$\ln Q^s(\bar{x}), Q^s(\bar{x}) < 0$ pour $\gamma = 25$	50
4.10	Projection de $P^s(\bar{x})$ sur la variable x ($\gamma = 25$)	51
4.11	Projection de $Q^s(\bar{x})$ sur la variable x ($\gamma = 25$)	51
4.12	Projection de $P^s(\bar{x})$ sur la variable y ($\gamma = 25$)	52
4.13	Projection de $Q^s(\bar{x})$ sur la variable y ($\gamma = 25$)	52
4.14	$\ln P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 5$	53
4.15	$\ln P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 10$	53
4.16	$\frac{\bar{J}^s(\bar{x})}{ \bar{J}^s(\bar{x}) }$ pour $\gamma = 25$	54
4.17	$\ln (\bar{J}^s(\bar{x}))$ pour $\gamma = 25$	55
4.18	Ensemble des 2 espèces définies pour $\gamma = 25$	55
4.19	Ensemble des 4 espèces définies pour $\gamma = 25$	56
4.20	$\frac{\bar{J}^s(\bar{x})}{ \bar{J}^s(\bar{x}) }$ pour $\gamma = 10$	57

5.1	Simulation directe ($\gamma = 25$, 2 espèces)	61
5.2	Simulation phénoménologique ($\gamma = 25$, 2 espèces)	62
5.3	Taux de transition pour le système bivarié	63
5.4	Comparaison entre les taux de transition du système bivarié (simulation phénoménologique) et du système univarié	66
5.5	Simulation phénoménologique ($\gamma = 25$, 4 espèces)	67

Chapitre 1. Introduction

Dans la nature, plusieurs systèmes dissipatifs non-linéaires ont la particularité d'être déterministiquement multistables [4, 10, 14, 22, 23, 26]. Ainsi, plusieurs états stables coexistent lorsque les paramètres décrivant un tel système sont fixés à des valeurs convenablement choisies. L'état initial dans lequel celui-ci se trouve détermine alors l'état stable vers lequel il tend. Parmi ces systèmes, on trouve entre autres des oscillateurs électriques, des réactions chimiques ainsi que photo-chimiques, des systèmes optiques et des relations proies-prédateurs à l'intérieur d'un écosystème.

Tous ces systèmes sont généralement exposés à des sources de bruits, ces fluctuations environnementales rapides qu'on perçoit trop souvent comme purement aléatoires. On croit à tort qu'elles n'ont qu'un effet désorganisateur. Il est bien vrai que les états stables d'un système sont plus flous lorsqu'il est soumis à une source de bruit. Cependant, la croyance selon laquelle ces états stables représentent simplement la moyenne des états stables déterministes sur l'ensemble des conditions environnementales est non-fondée. En fait, le bruit peut permettre à un système non-linéaire de se stabiliser dans des états sans équivalent déterministe [14, 17]. Ainsi, le bruit peut avoir un effet structurant. L'étude de l'influence du bruit sur des systèmes non-linéaires dissipatifs constitue donc un domaine de recherche fertile et très important.

L'analyse d'un système soumis à du bruit commence généralement par la détermination de la probabilité qu'il a de se trouver dans chaque état qui lui est accessible. Cette densité de probabilité, définie dans l'espace des variables dynamiques (espace

des phases), évolue dans le temps. Pour un système dissipatif non-forcé, elle converge vers une densité de probabilité stationnaire caractérisant le régime dans lequel celui-ci se situe. Les paramètres décrivant le système et le bruit influencent la forme de cette distribution stationnaire. Lorsque sa nature qualitative est altérée suite à la modification d'un de ces paramètres, on dit que le système a subi une transition de phase [14]. Une variation dans le nombre d'extrema est un des critères suggérés vis-à-vis la reconnaissance d'un tel phénomène. Bien qu'analogues aux transitions rencontrées dans des systèmes déterministes, les transitions de phase induites par le bruit dénotent souvent un comportement beaucoup plus riche.

Les modèles de bruit peuvent être séparés en deux grandes catégories [14]. La première regroupe tous les bruits possédant un temps de corrélation nul, qu'ils aient un espace des phases discret ou continu. On les qualifie de "blancs" puisque leur spectre en fréquence est uniforme. Ils peuvent être utilisés dans l'étude de tout système pour lequel les échelles de temps caractéristiques sont beaucoup plus grandes que le temps de corrélation du bruit. De plus, leur utilisation est relativement aisée. Il faut cependant toujours se rappeler qu'ils sont des bruits "idéalisés" et doivent être manipulés avec précaution.

Il existe des cas où le temps de corrélation du bruit ne peut être négligé sous peine de ne plus modéliser adéquatement la réalité expérimentale. Il faut alors utiliser un des bruits dits "colorés". Parmi ceux possédant un espace des phases continu, le bruit de Ornstein-Uhlenbeck est le plus utilisé. Étant gaussien, il permet de modéliser adéquatement une grande variété de bruits retrouvés dans la nature. De plus, puisqu'il est ergodique et markovien, il se prête relativement bien à une analyse mathématique. Il est malgré tout impossible en général de déterminer exactement la densité de probabilité stationnaire associée à un système, même univarié,

qu'on soumet à ce type de bruits. Il est nécessaire de requérir à des méthodes approximatives. Celles-ci permettent généralement de considérer des cas où le temps de corrélation du bruit est très grand ou très petit. Il est cependant nécessaire de recourir à des méthodes numériques pour les cas intermédiaires.

Lorsqu'on désire étudier de façon exhaustive l'influence du temps de corrélation sur l'évolution d'un système, il est préférable de se tourner vers le bruit dichotomique markovien, bruit possédant un espace des phases discret. En effet, la densité de probabilité stationnaire d'un système univarié soumis à un bruit dichotomique markovien peut être déterminée exactement et cela peu importe la valeur du temps de corrélation. Toutefois, seules des méthodes numériques permettent de l'évaluer lorsqu'on considère un système multivarié. Bien que le bruit dichotomique markovien puisse ainsi sembler ne plus posséder d'avantage comparé au bruit d'Ornstein-Uhlenbeck, il n'en est rien. En effet, son espace des phases discret constitue parfois un atout de taille. De plus, bien que n'apparaissant pas comme un bruit fréquemment rencontré dans la nature, il est aisément réalisé en laboratoire. Il constitue donc un outil d'une grande valeur lorsqu'on désire étudier l'effet du temps de corrélation du bruit sur l'évolution d'un système.

Généralement, un système déterministe auquel est associé un potentiel possède un ou plusieurs attracteurs. À chacun d'entre eux correspond un bassin d'attraction. Si le système est initialement situé dans l'un d'eux, il évolue inexorablement vers l'attracteur correspondant. La présence de bruit modifie cependant la situation. En effet, il peut permettre à une réalisation du système de sauter d'un bassin déterministe à un autre. Ils ne sont donc plus disjoints. Il est cependant possible de définir de nouvelles régions de l'espace des phases nommées espèces, par analogie au langage utilisé pour décrire des réactions chimiques. Si les réalisations du

systeme passent davantage de temps à circuler à l'intérieur de chacune des espèces qu'à passer de l'une à l'autre, il est possible de définir un processus de transition entre celles-ci [19]. Ce type de transitions ne doit pas être confondu avec les transitions de phase précédemment mentionnées. Une transition de phase induite par le bruit constitue une modification qualitative de la densité de probabilité stationnaire définie sur l'espace des phases lorsqu'on change les paramètres décrivant le système ou le bruit. De son côté, une transition entre espèces est définie pour une réalisation donnée. Elle consiste en un passage d'une région donnée de l'espace des phases à une autre, les paramètres ci-haut mentionnés étant par ailleurs fixés.

La méthode des projecteurs est fréquemment utilisée en mécanique statistique hors d'équilibre [2], par exemple lors de l'étude des réactions chimiques [6]. Ainsi, elle a été utilisée dans l'étude du modèle de Batnagar-Gross-Krook (BGK) [3, 29] décrivant des particules qui évoluent dans un potentiel bistable tout en étant couplées à un bain thermique et subissant un grand nombre de collisions instantanées. Elle a ainsi permis d'énoncer les conditions de validité d'une loi phénoménologique décrivant l'évolution des espèces chimiques [27] ainsi que d'étudier l'influence des effets de mémoire lorsque celle-ci n'est pas valide [28].

Au cours des dernières années, il a été établi que la méthode des projecteurs est aussi un outil de choix lorsqu'on désire étudier la cinétique des transitions entre espèces dans un système soumis à du bruit [19]. Elle a été à maintes reprises utilisée dans l'étude de systèmes univariés soumis à un bruit dichotomique markovien. Ainsi, elle a permis de déterminer le régime pour lequel une loi phénoménologique décrit adéquatement les transitions entre espèces et d'obtenir une expression analytique approximative pour le taux de transition relié à celle-ci [19]. La méthode des projecteurs a également permis de mettre au point un algorithme numérique permettant

de vérifier la validité de cette même loi phénoménologique ainsi que de déterminer le taux de transition [20]. Cet algorithme est qualifié de "direct" puisqu'il ne considère que des réalisations dont le point de départ est situé sur une frontière entre espèces. Il n'est donc pas nécessaire d'attendre qu'une transition entre espèces se produise, comme c'est le cas pour une simulation phénoménologique où on se contente d'initier les réalisations selon une distribution donnée et de suivre leur évolution dans le temps. Puisque ces transitions se produisent très rarement lorsque le système est dans un régime où une loi phénoménologique est valide, une simulation "directe" est beaucoup plus efficace qu'une simulation purement phénoménologique. La méthode des projecteurs a également permis d'étudier des régimes où les effets de mémoire ne peuvent être négligés [18, 19] de telle sorte qu'une loi phénoménologique n'est pas valide. Il est également possible d'étudier le ralentissement critique se produisant dans la cinétique des transitions inter-espèces lorsqu'on fait tendre l'amplitude du bruit vers la valeur critique minimale permettant à celles-ci de se produire [19, 20].

Il ne faudrait pas penser que l'utilité de la méthode des projecteurs se limite à l'étude de systèmes soumis à un bruit dichotomique markovien. En fait, tous les type de bruits peuvent être considérés, par exemple le bruit blanc [21] et le bruit d'Ornstein-Uhlenbeck.

Un très grand nombre de systèmes dissipatifs sont décrits par plus d'une variable. Cependant, peu d'études ont porté sur les transitions entre espèces pour ce type de systèmes [21]. Il importe donc de combler cette lacune. L'approche suggérée dans [19] pour des systèmes univariés soumis à un bruit dichotomique ne peut être appliquée à des systèmes multivariés puisqu'on ne dispose pas d'une expression analytique pour la densité de probabilité stationnaire. Cependant, l'algorithme de simulation directe [20] n'utilise pas cette expression. Il peut donc être généralisé à

des systèmes multivariés.

Cette étude vise justement à réaliser cette généralisation. À cette fin, il est cependant nécessaire de définir quel doit être le support sur lequel la densité de probabilité stationnaire est non-nulle. Il faut également déterminer un critère adéquat pour la définition des espèces.

Le deuxième chapitre résume les résultats obtenus pour un système univarié. Les troisième et quatrième chapitres considèrent respectivement la densité de probabilité stationnaire et la cinétique des systèmes multivariés. Par la suite, le cinquième chapitre décrit brièvement les algorithmes mis au point pour cette étude ainsi que les résultats obtenus. Finalement, le dernier chapitre conclut la démarche et ouvre des voies d'avenir.

Chapitre 2. Systèmes univariés

Un survol des principaux résultats obtenus lors de l'étude de systèmes décrits par une variable [19, 27, 25] permet de mieux apprécier le travail accompli lors de la généralisation de cette approche à des systèmes multivariés. On considère un système dont l'évolution est donnée par:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= F(x) \\ &= -\frac{dV}{dx}(x)\end{aligned}\tag{2.1}$$

où x représente l'état du système. Une telle équation d'évolution se rencontre fréquemment en physique, notamment lors de l'étude de systèmes inertiels amortis. Un tel système est décrit par:

$$\begin{aligned}m\ddot{x} + b\dot{x} &= F_o(x) \\ &= -\frac{dV_o}{dx}(x)\end{aligned}$$

où m est la masse associée au système, b , son coefficient d'amortissement et $F_o(x)$, la force associée à un potentiel $V_o(x)$. Dans la limite suramortie ($b\dot{x} \gg m\ddot{x}$), on retrouve alors l'équation 2.1 avec:

$$\begin{aligned}F(x) &= F_o(x)/b \\ V(x) &= V_o(x)/b.\end{aligned}$$

Cette façon particulière de retrouver l'équation 2.1 explique l'abus de langage généralement accepté consistant à nommer $F(x)$ comme étant une force et $V(x)$, un potentiel.

On soumet le système décrit par l'équation 2.1 à un bruit dichotomique symétrique markovien additif $I(t)$:

$$\dot{x} = F(x) + I(t).$$

Ce type de bruit est caractérisé par un espace des phases discret ($\pm\Delta$) et par un temps de transition échantillonné selon une distribution de Poisson. De plus, les deux valeurs $\pm\Delta$ sont équiprobables. Le bruit est ainsi caractérisé par:

$$\begin{aligned} I(t) &\in \{-\Delta, +\Delta\} \\ \langle I(t) \rangle &= 0 \\ \langle I(t)I(t+\tau) \rangle &= \Delta^2 \exp(-\gamma|\tau|) \end{aligned}$$

où $\gamma = 2/\tau_{\text{corr}}$, τ_{corr} étant le temps de corrélation du bruit.

Soit $p_{\pm}(x, t)dx$, la probabilité au temps t que le système soit dans un volume dx autour de l'état x et que le bruit ait la valeur $\pm\Delta$. L'évolution de $p_{\pm}(x, t)$ peut être calculée de la même façon que pour un système multivarié (Appendice A). On obtient:

$$\partial_t \mathbf{p}(x, t) = \mathbf{D} \mathbf{p}(x, t) \quad (2.2)$$

où:

$$\mathbf{p}(x, t) = \begin{bmatrix} p_+(x, t) \\ p_-(x, t) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} -\partial_x(F(x) + \Delta) - \gamma/2 & \gamma/2 \\ \gamma/2 & -\partial_x(F(x) - \Delta) - \gamma/2 \end{bmatrix}.$$

On définit également la densité de probabilité projetée sur la variable dynamique x :

$$P(x, t) = p_+(x, t) + p_-(x, t)$$

ainsi qu'une densité de courant de probabilité $J(x, t)$:

$$\partial_t P(x, t) = -\partial_x J(x, t).$$

La densité de courant devant être nulle lorsque l'état stationnaire est atteint, l'équation 2.2 peut être utilisée afin de calculer la densité de probabilité stationnaire:

$$P^s(x) = \frac{1}{2} P^s(x) \begin{bmatrix} 1 - f(x)/\Delta \\ 1 + f(x)/\Delta \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

où:

$$P^s(x) = \begin{cases} \frac{Z}{D^{eff}(x)} \exp \phi(x), & x \in [x_A, x_B] \\ 0, & x \notin [x_A, x_B] \end{cases}$$

$$\phi(x) = \int_a^x dx' \frac{F(x')}{D^{eff}(x')}$$

$$D^{eff}(x) = \frac{\Delta^2}{\gamma} \left(1 - \frac{F^2(x)}{\Delta^2} \right).$$

La constante d est arbitraire alors que Z sert à la normalisation. La densité de probabilité stationnaire peut être évaluée seulement si l'intervalle $[x_A, x_B]$ est compact, c'est-à-dire si toutes les réalisations pénétrant à l'intérieur de celui-ci ne peuvent plus s'en échapper. On ne doit également pas oublier que le support peut être composé de plusieurs intervalles $[x_A, x_B]$ disjoints. Chacun d'entre eux est déterminé en utilisant les équations $F(x_A) - \Delta = 0$ et $F(x_B) + \Delta = 0$ et en s'assurant que $-\Delta < F(x) < \Delta$ pour tout $x \in (x_A, x_B)$. Ces conditions permettent de s'assurer que l'intervalle considéré est compact et qu'il n'est pas en réalité un ensemble de sous-intervalles disjoints. En outre, il est facile de vérifier que ces conditions impliquent que la fonction $D^{eff}(x)$, représentant un coefficient de diffusion effectif, est positive pour tout $x \in (x_A, x_B)$ et nulle pour $x = x_A, x_B$. De son côté, la fonction $\phi(x)$ représente un potentiel normalisé par $D^{eff}(x)$ de sorte que $\exp \phi(x)$ constitue un facteur de Boltzman effectif.

Lorsqu'on fait tendre Δ et γ vers l'infini tout en conservant Δ^2/γ constant, le coefficient de diffusion effectif tend vers la constante $D \equiv \Delta^2/\gamma$. En plus, le support devient infini et la densité de probabilité stationnaire tend vers celle ($P_b^s(x)$) obtenue pour un système soumis à un bruit blanc additif:

$$P_b^s(x) = Z' \exp[V(x)/D]$$

où Z' est une nouvelle constante de normalisation.

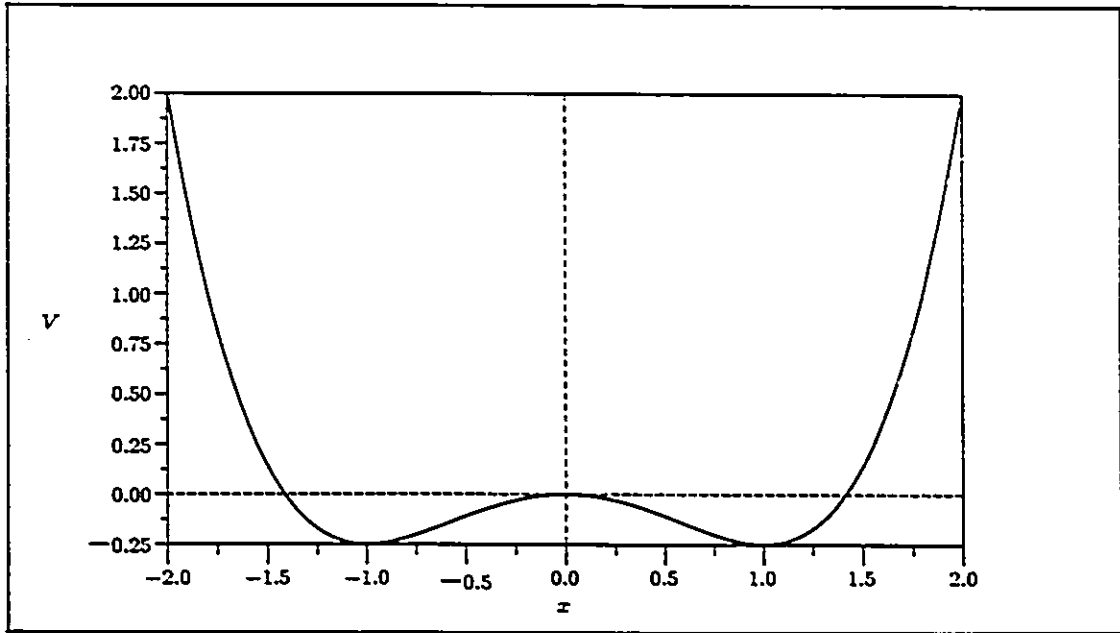
Comme cas particulier, on considère un potentiel $V(x)$ possédant deux points fixes stables séparés par un instable. Lorsque le système n'est pas soumis à du bruit, il possède ainsi deux bassins d'attraction disjoints. Le potentiel du quatrième degré,

$$V(x) = a \frac{x^4}{4} - b \frac{x^2}{2} \quad (2.4)$$

où a et b sont des constantes, est un exemple d'un tel potentiel (voir figure 2.1). Ce système constitue une forme normale permettant de modéliser un grand nombre de systèmes dissipatifs bistables et a d'ailleurs déjà été étudié [18–20, 25].

Lorsqu'on applique un bruit $I(t)$, la position des attracteurs est modifiée. De plus, si l'amplitude ($|\Delta|$) du bruit est suffisamment grande, la bistabilité est détruite. Pour chaque valeur du bruit, il ne survit qu'un seul attracteur. Le système est alors alternativement attiré par chacun des deux attracteurs stochastiques au fur et à mesure que la valeur du bruit passe de $\pm\Delta$ à $\mp\Delta$. Dans cette étude, on se limite à ce cas puisqu'il est alors possible de définir deux espèces ainsi qu'un taux de transition entre celles-ci.

La distribution $P^s(x)$ possède deux maxima localisés aux points fixes stables déterministes. Le point x_0 où se trouve le minimum local entre ceux-ci sert à définir deux espèces. L'espèce A est définie comme étant l'ensemble des points $\Omega_A = \{x|x \in$

Figure 2.1: Potentiel déterministe $V(x)$ quartique

$[x_A, x_o]$ et l'espèce B, $\Omega_B = \{x|x \in (x_o, x_B]\}$. Le point x_o correspond également à un maximum local de $V(x)$. Ainsi, $F(x_o) = 0$. La population moyenne de chaque espèce au temps t est définie comme étant:

$$\bar{N}_\alpha(t) \equiv \int_{\mathfrak{R}} dx P(x, t) \theta_\alpha(x)$$

où la fonction caractéristique de la région Ω_α est donnée par:

$$\theta_\alpha(x) \equiv \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_\alpha \\ 1/2 & \text{si } x = x_o \\ 0 & \text{autrement} \end{cases}$$

et \mathfrak{R} représente l'ensemble des nombres réels. La population stationnaire moyenne est similairement obtenue:

$$\eta_\alpha \equiv \int_{\mathfrak{R}} dx P^s(x) \theta_\alpha(x).$$

Afin de simplifier les calculs, on définit l'écart d'une population par rapport à sa valeur stationnaire:

$$\delta N_\alpha(t) \equiv \bar{N}_\alpha(t) - \eta_\alpha.$$

Soient τ_{pop} , l'échelle de temps sur laquelle varie les populations et τ_{mic} , celle sur laquelle varie le plus lent de tous les autres degrés de liberté du système. Lorsqu'il y a une bonne séparation des échelles de temps ($\tau_{pop} \gg \tau_{mic}$), on s'attend à ce que les populations moyennes évoluent de la même façon que les espèces chimiques dans une réaction d'isomérisation $A \rightleftharpoons B$:

$$\begin{aligned} \delta \dot{N}_A(t) &= -k_{AA}\delta N_A(t) + k_{AB}\delta N_B(t) \\ \delta \dot{N}_B(t) &= k_{BA}\delta N_A(t) - k_{BB}\delta N_B(t) \end{aligned} \quad (2.5)$$

où k_{AA} , k_{AB} , k_{BA} et k_{BB} sont les taux de transition (positifs) caractérisant l'évolution des populations. La population totale ($\bar{N}_A(t) + \bar{N}_B(t)$) étant constante, ces taux de transition ne sont pas tous indépendants. En fait, $k_{AA} = k_{BA}$ et $k_{BB} = k_{AB}$. De plus, les équations phénoménologiques 2.5 peuvent être réécrites sous la forme:

$$\delta \dot{N}_\alpha(t) = -\tau_{pop}^{-1} \delta N_\alpha(t).$$

où $\tau_{pop}^{-1} = k_{AB} + k_{BA}$. En termes de τ_{pop}^{-1} , k_{AB} et k_{BA} peuvent s'exprimer comme étant:

$$\begin{aligned} k_{AB} &= \tau_{pop}^{-1} \eta_A \\ k_{BA} &= \tau_{pop}^{-1} \eta_B. \end{aligned}$$

La méthode des projecteurs permet de déterminer une expression pour le taux de transition τ_{pop}^{-1} . Ce calcul n'est pas présenté ici puisqu'il est un cas spécial de celui présenté dans le chapitre sur les systèmes multivariés. Le résultat obtenu peut

s'écrire sous la forme:

$$\tau_{pop}^{-1} = P^s(x_o) \frac{\Delta}{2} (\eta_A \eta_B)^{-1} \{ \langle \theta_A^r(\Delta t | x_o, -\Delta) \rangle - \langle \theta_A^r(\Delta t | x_o, +\Delta) \rangle \} \quad (2.6)$$

où

$$\tau_{mic} \ll \Delta t \ll \tau_{pop}.$$

La quantité $\theta_A^r(t | x_o, \pm\Delta)$ représente la valeur de la fonction caractéristique $\theta_\alpha(x)$ au temps t pour une réalisation du système, étant donné qu'elle était dans l'état x_o et que le bruit avait la valeur $\pm\Delta$ au temps $t = 0$. L'opérateur $\langle \dots \rangle$ représente quant à lui une moyenne sur un ensemble de réalisations. Il est important de noter que dans les cas où la loi phénoménologique est valide, la quantité $\langle \theta_A^r(t | x_o, -\Delta) \rangle - \langle \theta_A^r(t | x_o, +\Delta) \rangle$ est approximativement constante pour $\tau_{mic} \ll t \ll \tau_{pop}$. La présence ou l'absence de ce plateau constitue ainsi un critère permettant de vérifier la validité de la loi phénoménologique pour un régime donné.

Le tableau 2.1 présente un résumé des taux de transition obtenus lors de l'étude du système décrit par le potentiel 2.4 pour $a = b = \Delta = 1$ et plusieurs valeurs de γ [20, 25]. La figure 5.4 présente ces mêmes résultats parallèlement avec ceux obtenus à l'aide de simulations phénoménologiques pour le système bivarié décrit à la section 3.4.

γ	k_{AB}	τ_{pop}^{-1}
15	$(2.74 \pm 0.12) \times 10^{-3}$	$(5.5 \pm 0.2) \times 10^{-3}$
20	$(7.4 \pm 0.4) \times 10^{-4}$	$(1.48 \pm 0.08) \times 10^{-3}$
30	$(4.9 \pm 0.3) \times 10^{-5}$	$(9.8 \pm 0.6) \times 10^{-5}$
40	$(3.2 \pm 0.2) \times 10^{-6}$	$(6.4 \pm 0.4) \times 10^{-6}$
50	$(2.01 \pm 0.14) \times 10^{-7}$	$(4.0 \pm 0.3) \times 10^{-7}$

Tableau 2.1: Taux de transition pour le système univarié possédant le potentiel déterministe 2.4 lorsque $a = b = \Delta = 1$ [20, 25]. Pour ce système, $k_{AB} = k_{BA}$. Ainsi, $\tau_{pop}^{-1} = 2k_{AB}$.

Chapitre 3. Systèmes multivariés

3.1 Introduction

La généralisation à des systèmes multivariés du calcul présenté au chapitre 2 pour des systèmes univariés est loin d'être triviale. Tout d'abord, la présence d'une densité de courant de probabilité non-nulle entrave le calcul devant mener à une expression analytique pour la densité de probabilité stationnaire. On doit en plus recourir à un nouveau critère dans la détermination du support ainsi qu'imaginer une nouvelle définition pour les frontières inter-espèces.

3.2 Densités de probabilité stationnaires

On considère un système décrit par un vecteur d'état \vec{x} à n composantes. Son évolution est donnée par:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x})$$

où $\vec{F}(\vec{x})$ est une pseudo-force. Ce système est soumis à un bruit dichotomique symétrique markovien additif:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) + \vec{I}(t) \tag{3.1}$$

celui-ci étant décrit par:

$$\begin{aligned} \vec{I}(t) &\in \{-\vec{\Delta}, +\vec{\Delta}\} \\ \langle \vec{I}(t) \rangle &= 0 \\ \langle \vec{I}(t) \cdot \vec{I}(t + \tau) \rangle &= |\vec{\Delta}|^2 \exp(-\gamma |\tau|) \end{aligned}$$

où $\gamma = 2/\tau_{cor}$, τ_{cor} étant le temps de corrélation du bruit.

Soit $p_{\pm}(\vec{x}, t)d^n x$, la probabilité au temps t que le système soit dans un volume $d^n x$ autour de l'état \vec{x} et que le bruit ait la valeur $\pm\bar{\Delta}$. Tel que démontré dans l'appendice A, l'évolution de $p_{\pm}(x, t)$ est donnée par:

$$\partial_t \mathbf{p}(\vec{x}, t) = \mathbf{D} \mathbf{p}(\vec{x}, t) \quad (3.2)$$

où:

$$\mathbf{p}(\vec{x}, t) = \begin{bmatrix} p_+(\vec{x}, t) \\ p_-(\vec{x}, t) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} -\bar{\nabla} \cdot (\bar{F}(\vec{x}) + \bar{\Delta}) - \gamma/2 & \gamma/2 \\ \gamma/2 & -\bar{\nabla} \cdot (\bar{F}(\vec{x}) - \bar{\Delta}) - \gamma/2 \end{bmatrix}.$$

Soit $P(\vec{x}, t)d^n x$, la probabilité projetée sur les variables dynamiques \vec{x} . De même, soit $Q(\vec{x}, t)d^n x$, la différence au temps t entre les probabilités que le bruit ait la valeur $+\bar{\Delta}$ ou $-\bar{\Delta}$, alors que le système est dans un volume $d^n x$ autour de l'état \vec{x} . Ainsi:

$$P(\vec{x}, t) \equiv p_+(\vec{x}, t) + p_-(\vec{x}, t)$$

$$Q(\vec{x}, t) \equiv p_+(\vec{x}, t) - p_-(\vec{x}, t).$$

La condition de normalisation s'exprime sous la forme:

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n x P(\vec{x}, t) = 1.$$

Puisque les valeurs $\pm\bar{\Delta}$ du bruit sont équiprobables:

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n x p_+(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x p_-(\vec{x}, t) = \frac{1}{2}$$

et:

$$\int_{\mathbb{R}^n} d^n x Q(\vec{x}, t) = 0.$$

L'équation 3.2 devient après quelques manipulations algébriques:

$$\begin{aligned}\partial_t P(\vec{x}, t) &= -\vec{\nabla} \cdot [\vec{F}(\vec{x})P(\vec{x}, t) + \vec{\Delta}Q(\vec{x}, t)] \\ \partial_t Q(\vec{x}, t) &= -\vec{\nabla} \cdot [\vec{F}(\vec{x})Q(\vec{x}, t) + \vec{\Delta}P(\vec{x}, t)] - \gamma Q(\vec{x}, t).\end{aligned}$$

En définissant les champs vectoriels:

$$\begin{aligned}\vec{J}(\vec{x}, t) &\equiv \vec{F}(\vec{x})P(\vec{x}, t) + \vec{\Delta}Q(\vec{x}, t) \\ \vec{K}(\vec{x}, t) &\equiv \vec{F}(\vec{x})Q(\vec{x}, t) + \vec{\Delta}P(\vec{x}, t),\end{aligned}\tag{3.3}$$

on obtient:

$$\begin{aligned}\partial_t P(\vec{x}, t) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{x}, t) \\ \partial_t Q(\vec{x}, t) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{K}(\vec{x}, t) - \gamma Q(\vec{x}, t)\end{aligned}\tag{3.4}$$

et il devient clair que $\vec{J}(\vec{x}, t)$ représente la densité de courant correspondant à la densité de probabilité $P(\vec{x}, t)$. À un point donné, le système ne peut avoir que deux vitesses: $\dot{\vec{x}}_{\pm}(\vec{x}) \equiv \vec{F}(\vec{x}) \pm \vec{\Delta}$. Cependant, en utilisant les définitions de $P(\vec{x}, t)$ et $Q(\vec{x}, t)$, en plus de l'équation 3.1, les équations 3.3 deviennent:

$$\begin{aligned}\vec{J}(\vec{x}, t) &= \dot{\vec{x}}_+(\vec{x})p_+(\vec{x}, t) + \dot{\vec{x}}_-(\vec{x})p_-(\vec{x}, t) \\ \vec{K}(\vec{x}, t) &= \dot{\vec{x}}_+(\vec{x})p_+(\vec{x}, t) - \dot{\vec{x}}_-(\vec{x})p_-(\vec{x}, t).\end{aligned}$$

On voit donc que $\vec{J}(\vec{x}, t)$ peut être interprétée comme étant la moyenne sur les réalisations au temps t de la vitesse du système au point \vec{x} . De son côté, $\vec{K}(\vec{x}, t)$ caractérise l'écart moyen des vitesses du système au temps t sur un ensemble de réalisations et cela à chaque point du support.

Après une longue période de temps ($t \rightarrow \infty$), $p_+(\vec{x}, t)$ et $p_-(\vec{x}, t)$ tendent vers des distributions stationnaires:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_{\pm}(\vec{x}, t) = p_{\pm}^s(\vec{x}).$$

Ainsi:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(\bar{x}, t) = P^s(\bar{x})$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} Q(\bar{x}, t) = Q^s(\bar{x})$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{J}(\bar{x}, t) = \bar{J}^s(\bar{x})$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{K}(\bar{x}, t) = \bar{K}^s(\bar{x}).$$

On dit alors familièrement que le système a atteint l'état stationnaire alors que c'est plutôt la moyenne sur un ensemble de réalisations décrite par $p_{\pm}(\bar{x}, t)$ qui a atteint un état stationnaire.

Semblablement à ce qui est fait pour les systèmes univariés, on se limite maintenant à un champ de force $\bar{F}(\bar{x})$ possédant plus d'un attracteur déterministe. À chacun d'entre eux correspond un bassin d'attraction déterministe. Lorsqu'une réalisation du système est initiée dans un bassin donné, elle évolue inexorablement vers l'attracteur correspondant. En général, le bruit appliqué au système modifie la position des attracteurs et l'étendue des bassins d'attraction. De plus, les frontières séparant les bassins d'attraction acquièrent une certaine étendue. Il est alors possible pour une réalisation donnée d'évoluer un certain temps à l'intérieur d'une frontière avant de pénétrer à l'intérieur d'un des bassins d'attraction modifiés. Cependant une fois qu'il y est entré, il ne peut plus en sortir. On qualifie ces attracteurs déplacés, ces bassins d'attraction modifiés et ces frontières étendues de "stochastiques", puisqu'ils doivent leur existence à la présence du bruit. Pour une amplitude du bruit suffisamment grande, il est possible qu'une réalisation ayant atteint un attracteur stochastique donné puisse évoluer vers un des autres attracteurs stochastiques. Les bassins d'attraction stochastiques de ces deux attracteurs se sont donc effectivement fusionnés afin de devenir un bassin d'attraction stochastique

possédant plusieurs attracteurs stochastiques.

Dans le cadre de cette étude, on se concentre sur un bassin d'attraction stochastique donné comportant au moins deux attracteurs. On désire calculer les densités de probabilité stationnaires sur ce bassin. Celles-ci sont non-nulles uniquement sur une sous-région du bassin d'attraction. Cette sous-région, qui constitue le support (Ω) des densités de probabilité stationnaires, est définie comme étant l'ensemble des états pouvant être atteints par le système lorsque celui-ci évolue pendant une très longue période de temps à partir de chacun des attracteurs situés à l'intérieur du bassin d'attraction stochastique considéré. Une telle définition est sensée puisqu'il est certain qu'après une période de temps suffisamment longue chaque réalisation du système se sera approchée de chacun des attracteurs stochastiques localisés à l'intérieur du bassin d'attraction où elle évolue. La frontière ($\partial\Omega$) du support est nécessairement composée de segments appartenant à des lignes définies par $\vec{x} = \vec{F}(\vec{x}) \pm \vec{\Delta}$. Ainsi, en chaque point de celle-ci:

$$\hat{N}_{\partial\Omega} \cdot [\vec{F}(\vec{x}) + \vec{\Delta}] = 0 \quad \text{et/ou} \quad \hat{N}_{\partial\Omega} \cdot [\vec{F}(\vec{x}) - \vec{\Delta}] = 0 \quad (3.5)$$

où $\hat{N}_{\partial\Omega}$ est un vecteur perpendiculaire à la frontière et pointant vers l'extérieur du support.

Le système ne pouvant pas se trouver à l'extérieur du support lorsque l'état stationnaire est atteint, $P^s(\vec{x})$ est nulle à l'extérieur de celui-ci. La densité de courant de la probabilité stationnaire ne peut donc avoir de composante non-nulle perpendiculairement à la frontière du support:

$$\hat{N}_{\partial\Omega} \cdot \vec{J}^s(\vec{x}) = 0. \quad (3.6)$$

En utilisant les équations 3.5, on remarque que la condition précédente implique

également que:

$$\hat{N}_{\partial\Omega} \cdot \bar{K}^s(\bar{x}) = 0.$$

Les densités de probabilité stationnaires peuvent ainsi être calculées à partir des équations différentielles 3.4 et de la condition frontière 3.5:

$$\begin{aligned}\bar{\nabla} \cdot \bar{J}^s(\bar{x}) &= 0 \\ \bar{\nabla} \cdot \bar{K}^s(\bar{x}) + \gamma Q^s(\bar{x}) &= 0 \\ \hat{N}_{\partial\Omega} \cdot \bar{J}^s(\bar{x}) &= 0.\end{aligned}$$

Contrairement au système à une variable, la densité de courant $\bar{J}^s(\bar{x})$ n'est pas a priori nulle sur le support. On ne peut donc pas obtenir une expression analytique pour la densité de probabilité stationnaire. Il est nécessaire d'utiliser une méthode numérique, telle les éléments finis, afin de l'évaluer.

3.3 Cinétique et taux de transition

Lorsque $P^s(\bar{x})$ et $Q^s(\bar{x})$ sont connues, on sépare le support en m espèces α , auxquelles correspondent m régions disjointes Ω_α , telles que la densité de courant de la probabilité stationnaire n'a pas de composante perpendiculaire aux frontières $\partial\Omega_\alpha$ de ces régions:

$$\hat{N}_{\partial\Omega_\alpha} \cdot \bar{J}^s(\bar{x}) = 0 \quad (3.7)$$

où $\hat{N}_{\partial\Omega_\alpha}$ est un vecteur perpendiculaire à la frontière $\partial\Omega_\alpha$ et pointant vers l'extérieur de la région Ω_α . Les points des frontières inter-espèces où un vecteur perpendiculaire ne peut être défini constituent les seuls endroits où il peut y avoir des échanges de densité de probabilité stationnaire entre les espèces. Ces dernières possèdent donc des densités de probabilité stationnaires presque entièrement isolées les unes

des autres. Tel que démontré plus loin dans cette section, le critère de définition des espèces 3.7 possède en outre l'avantage qu'il permet d'obtenir une expression simple pour le taux de transition phénoménologique entre les espèces. On obtient une cinétique des populations similaire à celle des systèmes univariés.

Une fonction caractéristique est définie pour chaque espèce:

$$\theta_\alpha(\vec{x}) \equiv \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{x} \in \Omega_\alpha, \vec{x} \notin \partial\Omega_\alpha \\ 1 & \text{si } \vec{x} \in \partial\Omega_\alpha^s \\ 1/2 & \text{si } \vec{x} \in \partial\Omega_\alpha^c \\ 0 & \text{autrement} \end{cases}$$

où $\partial\Omega_\alpha^c$ est la portion de $\partial\Omega_\alpha$ séparant Ω_α des autres espèces et $\partial\Omega_\alpha^s$, la portion de $\partial\Omega_\alpha$ sur la frontière du support à l'exclusion des points appartenant à $\partial\Omega_\alpha^c$. La population moyenne d'une espèce au temps t est alors donnée par:

$$\bar{N}_\alpha(t) \equiv \sum_i \int_{\mathbb{R}^n} d^n x p_i(\vec{x}, t) \theta_\alpha(\vec{x})$$

et sa population stationnaire par:

$$\eta_\alpha \equiv \sum_i \int_{\mathbb{R}^n} d^n x p_i^s(\vec{x}) \theta_\alpha(\vec{x}),$$

où $i = \pm$. Tel que mentionné ci-haut, il y a peu de densité de courant qui circule entre les espèces à l'état stationnaire. On s'attend ainsi à ce que les populations moyennes varient plus lentement que les autres degrés de liberté du système. On définit ainsi un projecteur sur les populations moyennes, afin de pouvoir discriminer entre leur dynamique et celle des autres degrés de liberté:

$$\mathcal{P} \rho_i(\vec{x}, t) \equiv \sum_\alpha \left[\sum_j \int_{\mathbb{R}^n} d^n x' \theta_\alpha(\vec{x}') \rho_j(\vec{x}', t) \right] \eta_\alpha^{-1} \theta_\alpha(\vec{x}) p_i^s(\vec{x}) \quad (3.8)$$

où $\rho_i(\vec{x}, t)$ est une fonction définie sur l'état du système \vec{x} et la valeur du bruit $i\vec{\Delta}$. Il est facile de vérifier que \mathcal{P} est linéaire et que $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$, démontrant ainsi que \mathcal{P}

est véritablement un projecteur. Dans le cas où $\rho_i(\bar{x}, t) = p_i(\bar{x}, t)$, l'équation 3.8 devient:

$$\mathcal{P}p_i(\bar{x}, t) = \left[\sum_{\alpha} \theta_{\alpha}(\bar{x}) \bar{N}_{\alpha}(t) \eta_{\alpha}^{-1} \right] p_i^s(\bar{x}). \quad (3.9)$$

On définit également un projecteur complémentaire:

$$\mathcal{Q} \equiv \mathcal{I} - \mathcal{P}$$

où \mathcal{I} est l'opérateur identité. Il est encore une fois facile de vérifier que \mathcal{Q} est réellement un projecteur.

En insérant $\mathcal{P} + \mathcal{Q} = \mathcal{I}$ dans l'équation d'évolution 3.2, on obtient:

$$\partial_t \mathbf{p}(\bar{x}, t) = \mathbf{D} (\mathcal{P} + \mathcal{Q}) \mathbf{p}(\bar{x}, t).$$

Cette dernière équation nous permet d'obtenir des équations couplées décrivant l'évolution des degrés de liberté sur lesquelles projettent \mathcal{P} et \mathcal{Q} :

$$\partial_t \mathcal{P} \mathbf{p}(\bar{x}, t) = \mathcal{P} \mathbf{D} (\mathcal{P} + \mathcal{Q}) \mathbf{p}(\bar{x}, t) \quad (3.10)$$

$$\partial_t \mathcal{Q} \mathbf{p}(\bar{x}, t) = \mathcal{Q} \mathbf{D} (\mathcal{P} + \mathcal{Q}) \mathbf{p}(\bar{x}, t). \quad (3.11)$$

On intègre l'équation 3.11:

$$\mathcal{Q} \mathbf{p}(\bar{x}, t) = e^{\mathcal{Q} \mathbf{D} t} \mathcal{Q} \mathbf{p}(\bar{x}, 0) + \int_0^t d\sigma e^{\mathcal{Q} \mathbf{D} \sigma} \mathcal{Q} \mathbf{D} \mathcal{P} \mathbf{p}(\bar{x}, t - \sigma).$$

On insère ce dernier résultat dans l'équation 3.10:

$$\partial_t \mathcal{P} \mathbf{p}(\bar{x}, t) = \mathcal{P} \mathbf{D} \mathcal{P} \mathbf{p}(\bar{x}, t) + \mathcal{P} \mathbf{D} e^{\mathcal{Q} \mathbf{D} t} \mathcal{Q} \mathbf{p}(\bar{x}, 0) + \int_0^t d\sigma \mathcal{P} \mathbf{D} e^{\mathcal{Q} \mathbf{D} \sigma} \mathcal{Q} \mathbf{D} \mathcal{P} \mathbf{p}(\bar{x}, t - \sigma). \quad (3.12)$$

Soient τ_{pop} , le temps de vie associé aux populations et τ_{mic} , au plus rapide de tous les autres degrés de liberté. S'il y a une bonne séparation des échelles de temps ($\tau_{pop} \gg \tau_{mic}$), le terme dépendant des conditions initiales dans l'équation 3.12 décroît

rapidement. On peut donc le négliger dans la mesure où on considère des temps longs par rapport à τ_{mic} :

$$\partial_t \mathcal{P} \mathbf{p}(\bar{x}, t) = \mathcal{P} \mathcal{D} \mathcal{P} \mathbf{p}(\bar{x}, t) + \int_0^t d\sigma \mathcal{P} \mathcal{D} e^{\mathcal{Q} \mathcal{D} \sigma} \mathcal{Q} \mathcal{D} \mathcal{P} \mathbf{p}(\bar{x}, t - \sigma). \quad (3.13)$$

Alternativement, on peut démontrer que $\mathcal{Q} \mathbf{p}(\bar{x}, 0) = 0$ si $\mathbf{p}(\bar{x}, 0)$ est proportionnel à $\mathbf{p}^s(\bar{x})$ séparément dans chaque région. Il est clair que lorsque $\tau_{pop} \gg \tau_{mic}$, $\mathbf{p}(\bar{x}, t)$ tend rapidement vers une telle distribution. Il est donc physiquement réaliste de négliger l'influence de l'état initial sur l'évolution à long terme de $\mathbf{p}(\bar{x}, t)$.

L'équation 3.13 décrit l'évolution des densités de probabilité projetées sur les populations. Elle permet donc d'étudier l'évolution de ces dernières et de noter l'importance des effets de mémoire sur celle-ci.

En substituant la définition du projecteur \mathcal{P} , on obtient une équation décrivant explicitement l'évolution des populations:

$$\begin{aligned} \left[\sum_{\alpha} \theta_{\alpha}(\bar{x}) \eta_{\alpha}^{-1} \dot{\tilde{N}}_{\alpha}(t) \right] \mathbf{p}^s(\bar{x}) &= \mathcal{P} \mathcal{D} \mathbf{p}^s(\bar{x}) \left[\sum_{\alpha} \theta_{\alpha}(\bar{x}) \eta_{\alpha}^{-1} \tilde{N}_{\alpha}(t) \right] \\ &+ \int_0^t d\sigma \mathcal{P} \mathcal{D} e^{\mathcal{Q} \mathcal{D} \sigma} \mathcal{Q} \mathcal{D} \mathbf{p}^s(\bar{x}) \left[\sum_{\alpha} \theta_{\alpha}(\bar{x}) \eta_{\alpha}^{-1} \tilde{N}_{\alpha}(t - \sigma) \right]. \end{aligned}$$

L'intégration sur une région quelconque Ω_{β} et la somme sur les valeurs du bruit permettent d'isoler la dérivée par rapport au temps d'une seule population:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{N}}_{\beta}(t) &= \sum_{ij\alpha} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) \mathcal{P} D_{ij} p_j^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) \eta_{\alpha}^{-1} \tilde{N}_{\alpha}(t) \\ &+ \int_0^t d\sigma \sum_{ijkl\alpha} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) \mathcal{P} D_{ij} \left(e^{\mathcal{Q} \mathcal{D} \sigma} \right)_{jk} \mathcal{Q} D_{kl} p_l^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) \eta_{\alpha}^{-1} \tilde{N}_{\alpha}(t - \sigma). \end{aligned}$$

Afin de simplifier les équations, il est préférable de considérer l'écart entre la population moyenne et sa valeur stationnaire:

$$\delta N_{\alpha}(t) \equiv \tilde{N}_{\alpha}(t) - \eta_{\alpha}.$$

En utilisant le fait que:

$$\sum_{\alpha} \theta_{\alpha}(\bar{x}) = 1$$

sur tout le support et que:

$$\mathbf{D}p^s(\bar{x}) = 0,$$

on obtient:

$$\begin{aligned} \delta \dot{N}_{\beta}(t) &= \sum_{ij\alpha} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) \mathcal{P} D_{ij} p_j^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) \eta_{\alpha}^{-1} \delta N_{\alpha}(t) \\ &+ \int_0^t d\sigma \sum_{ijkl\alpha} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) \mathcal{P} D_{ij} \left(e^{\mathcal{QD}\sigma} \right)_{jk} \mathcal{Q} D_{kl} p_l^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) \eta_{\alpha}^{-1} \delta N_{\alpha}(t - \sigma). \end{aligned}$$

Il est possible d'éliminer les projecteurs \mathcal{P} apparaissant dans l'équation ci-haut puisque:

$$\begin{aligned} &\sum_i \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) \mathcal{P} \rho_i(\bar{x}, t) \\ &= \sum_{i\alpha} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) \left[\sum_j \int_{\mathbb{R}^n} d^n x' \theta_{\alpha}(\bar{x}') \rho_j(\bar{x}', t) \right] \eta_{\alpha}^{-1} \theta_{\alpha}(\bar{x}) p_i^s(\bar{x}) \\ &= \sum_j \int_{\mathbb{R}^n} d^n x' \theta_{\beta}(\bar{x}') \rho_j(\bar{x}', t). \end{aligned}$$

On obtient alors:

$$\delta \dot{N}_{\beta}(t) = \delta \dot{N}'_{\beta}(t) + \delta \dot{N}''_{\beta}(t)$$

où:

$$\begin{aligned} \delta \dot{N}'_{\beta}(t) &\equiv \sum_{ij\alpha} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) D_{ij} \left[p_j^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) \right] \eta_{\alpha}^{-1} \delta N_{\alpha}(t) \\ \delta \dot{N}''_{\beta}(t) &\equiv \int_0^t d\sigma \sum_{ijkl\alpha} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) D_{ij} \left[\left(e^{\mathcal{QD}\sigma} \right)_{jk} \mathcal{Q} D_{kl} p_l^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) \right] \eta_{\alpha}^{-1} \delta N_{\alpha}(t - \sigma). \end{aligned}$$

Utilisant le fait que $\mathbf{D}p^s(\bar{x}) = 0$, on peut démontrer que:

$$\mathbf{D} \left[p^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) \right] = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \bar{J}^s(\bar{x}) + \bar{K}^s(\bar{x}) \\ \bar{J}^s(\bar{x}) - \bar{K}^s(\bar{x}) \end{bmatrix} \cdot \bar{\nabla} \theta_{\alpha}(\bar{x}). \quad (3.14)$$

On obtient ainsi:

$$\delta \dot{N}'_{\beta}(t) = - \sum_{\alpha} \eta_{\alpha}^{-1} \delta N_{\alpha}(t) \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) \bar{J}^s(\bar{x}) \cdot \bar{\nabla} \theta_{\alpha}(\bar{x}).$$

Tel que démontré dans l'appendice C, le gradient de la fonction caractéristique correspond à un delta de Dirac permettant d'obtenir la composante d'un vecteur perpendiculairement à la frontière. Ainsi:

$$\delta \dot{N}'_{\beta}(t) = \sum_{\alpha} \eta_{\alpha}^{-1} \delta N_{\alpha}(t) \int_{\partial \Omega_{\alpha}} d^{n-1} x g(\bar{x}) \theta_{\beta}(\bar{x}) \hat{N}_{\partial \Omega_{\alpha}} \cdot \bar{J}^s(\bar{x})$$

où la procédure d'intégration et la fonction $g(\bar{x})$ sont définies dans l'appendice C. Puisqu'il n'y a pas de densité de courant de probabilité perpendiculairement à la frontière $\partial \Omega_{\alpha}$:

$$\hat{N}_{\partial \Omega_{\alpha}} \cdot \bar{J}^s(\bar{x}) = 0,$$

alors:

$$\delta \dot{N}'_{\beta}(t) = 0.$$

Il appert donc que le flux instantané est nul et qu'ainsi la cinétique est entièrement déterminée par les effets de mémoire. La même conclusion est atteinte pour un système univarié. Le critère de détermination des espèces utilisé pour les systèmes multivariés permet donc de retrouver une caractéristique observée pour les systèmes décrits par seulement une variable.

En insérant la définition de \mathcal{Q} dans $\delta \dot{N}''_{\beta}(t)$, on obtient:

$$\begin{aligned} & \delta \dot{N}''_{\beta}(t) \\ &= \int_0^t d\sigma \sum_{ijkl\alpha} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_{\beta}(\bar{x}) D_{ij} \left[\left(e^{\mathcal{Q}D\sigma} \right)_{jk} (\mathcal{I} - \mathcal{P}) D_{kl} p_l^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) \right] \eta_{\alpha}^{-1} \delta N_{\alpha}(t - \sigma). \end{aligned}$$

Le raisonnement utilisé pour démontrer que $\delta \dot{N}'_{\beta}(t) = 0$ permet d'arriver à la conclusion que:

$$\mathcal{P} D_{kl} p_l^s(\bar{x}) \theta_{\alpha}(\bar{x}) = 0.$$

On obtient ainsi:

$$\begin{aligned}\delta\dot{N}_\beta(t) &= \sum_{ijkl\alpha} \int_0^t d\sigma \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_\beta(\bar{x}) D_{ij} \left[\left(e^{\mathcal{QD}\sigma} \right)_{jk} D_{kl} p_l^s(\bar{x}) \theta_\alpha(\bar{x}) \right] \eta_\alpha^{-1} \delta N_\alpha(t - \sigma) \\ &= - \sum_\alpha \int_0^t d\sigma M_{\beta\alpha}(\sigma) \delta N_\alpha(t - \sigma),\end{aligned}\quad (3.15)$$

la fonction de mémoire étant définie par:

$$M_{\beta\alpha}(t) \equiv - \sum_{ijkl} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_\beta(\bar{x}) D_{ij} \left(e^{\mathcal{QD}t} \right)_{jk} D_{kl} p_l^s(\bar{x}) \theta_\alpha(\bar{x}) \eta_\alpha^{-1}.$$

Il est intéressant de noter que l'équation 3.15 est formellement exacte dans la mesure où les transients dus à l'état initial peuvent être négligés.

S'il y a une bonne séparation des échelles de temps ($\tau_{pop} \gg \tau_{mic}$), on s'attend à ce que la loi phénoménologique suivante soit valide:

$$\delta\dot{N}_\beta(t) = - \sum_\alpha \tau_{\beta\alpha}^{-1} \delta N_\alpha(t). \quad (3.16)$$

Les $\tau_{\beta\alpha}^{-1}$ représentent des taux de transition (positifs ou négatifs) caractérisant l'effet qu'a une population sur sa propre évolution ou celle des autres. Cette loi sera respectée si et seulement si $M_{\beta\alpha}(t)$ tend rapidement vers 0 (avec un temps de vie de l'ordre de τ_{mic}) de sorte que $\delta N_\alpha(t)$ puisse être sorti de l'intégrale sur le temps dans l'équation 3.15. De plus, l'intégrale de $M_{\beta\alpha}(t)$ présente alors un plateau pour $t \gg \tau_{mic}$:

$$R_{\beta\alpha}(t) \equiv \int_0^t d\sigma M_{\beta\alpha}(\sigma)$$

Il est alors possible d'identifier $\tau_{\beta\alpha}^{-1}$ à la valeur du plateau de $R_{\beta\alpha}(t)$:

$$\tau_{\beta\alpha}^{-1} \equiv R_{\beta\alpha}(\Delta t)$$

où $\Delta t \gg \tau_{mic}$. Il ne reste plus qu'à évaluer cette intégrale. Il est cependant possible de simplifier l'équation 3.15 en remplaçant le propagateur projeté ($e^{\mathcal{QD}t}$) par le

propagateur non-projeté ($e^{\mathbf{D}t}$). Cette substitution est valable à la condition que l'on ne considère que des temps qui sont courts par rapport aux temps de vie des populations ($\Delta t \ll \tau_{pop}$). Le point de départ de cette constatation est l'identité:

$$e^{\mathcal{Q}\mathbf{D}t} = e^{\mathbf{D}t} - \int_0^t d\sigma e^{\mathbf{D}(t-\sigma)} \mathcal{P}\mathbf{D}e^{\mathcal{Q}\mathbf{D}\sigma} \quad (3.17)$$

dérivée dans l'appendice B. Le propagateur non-projeté $e^{\mathbf{D}t}$ permet aux densités de probabilité de relaxer suivant tous leurs degrés de liberté. De son côté, le propagateur projeté ne leur permet d'évoluer que selon les degrés de liberté orthogonaux aux populations, c'est-à-dire les degrés de liberté rapides. Le terme intégral correspond donc à l'évolution lente des populations et il est possible de le négliger pour des temps courts ($t \ll \tau_{pop}$). De façon plus précise, on peut estimer que:

$$\int_0^t d\sigma e^{\mathbf{D}(t-\sigma)} \mathcal{P}\mathbf{D}e^{\mathcal{Q}\mathbf{D}\sigma} \sim \frac{t}{\tau_{pop}} e^{\mathbf{D}t}$$

étant donné que $\mathcal{P}\mathbf{D}$ fait ressortir un facteur τ_{pop}^{-1} et l'intégration, un facteur t . De son côté, puisqu'il n'agit que sur des degrés de liberté lents, le propagateur non-projeté $e^{\mathbf{D}(t-\sigma)}$ peut-être approximé par $e^{\mathbf{D}t}$ et sorti de l'intégrale pour $t \ll \tau_{pop}$. Le deuxième terme de l'équation 3.17 peut donc être négligé dans la mesure où $t \ll \tau_{pop}$. Ainsi:

$$M_{\beta\alpha}(t) = M_{\beta\alpha}(t) \left[1 + \mathcal{O}\left(\frac{t}{\tau_{pop}}\right) \right]$$

où:

$$\mathcal{M}_{\beta\alpha}(t) \equiv - \sum_{ijkl} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_\beta(\vec{x}) D_{ij} \left(e^{\mathbf{D}\sigma} \right)_{jk} D_{kl} p_i^s(\vec{x}) \theta_\alpha(\vec{x}) \eta_\alpha^{-1}.$$

À la condition de choisir $\tau_{mic} \ll \Delta t \ll \tau_{pop}$, on peut alors librement approximer:

$$\tau_{\beta\alpha}^{-1} \simeq \mathcal{R}_{\beta\alpha}(\Delta t)$$

où:

$$\mathcal{R}_{\beta\alpha}(t) \equiv \int_0^t d\sigma \mathcal{M}_{\beta\alpha}(\sigma).$$

On obtient donc à un ordre $\Delta t/\tau_{pop}$ près:

$$\begin{aligned}\tau_{\beta\alpha}^{-1} &= -\sum_{ijkl} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_\beta(\vec{x}) D_{ij} \left[\int_0^{\Delta t} d\sigma e^{\mathbf{D}\sigma} \right]_{jk} D_{kl} p_l^s(\vec{x}) \theta_\alpha(\vec{x}) \eta_\alpha^{-1} \\ &= -\sum_{jkl} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_\beta(\vec{x}) \left[(e^{\mathbf{D}\Delta t})_{jk} - \mathcal{I} \right] D_{kl} p_l^s(\vec{x}) \theta_\alpha(\vec{x}) \eta_\alpha^{-1} \\ &= -\sum_{jkl} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_\beta(\vec{x}) (e^{\mathbf{D}\Delta t})_{jk} D_{kl} p_l^s(\vec{x}) \theta_\alpha(\vec{x}) \eta_\alpha^{-1}\end{aligned}$$

Dans la deuxième ligne, le second terme a été annulé en utilisant le même raisonnement que pour $\delta \dot{N}_\beta(t) = 0$.

En utilisant l'équation 3.14, on obtient:

$$\tau_{\beta\alpha}^{-1} = \frac{\eta_\alpha^{-1}}{2} \sum_{ij} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \theta_\beta(\vec{x}) (e^{\mathbf{D}\Delta t})_{ij} \left[\bar{J}^s(\vec{x}) + j \bar{K}^s(\vec{x}) \right] \cdot \bar{\nabla} \theta_\alpha(\vec{x})$$

où $j = \pm$. Jusqu'à maintenant, le problème a été étudié en utilisant la représentation de Schrödinger, c'est-à-dire en laissant évoluer les densités de probabilité. Ainsi, il découle de l'équation d'évolution:

$$\partial_t \mathbf{p}(\vec{x}, t) = \mathbf{D} \mathbf{p}(\vec{x}, t)$$

que le propagateur $e^{\mathbf{D}t}$ détermine la densité de probabilité au temps t étant donnée celle au temps initial:

$$\mathbf{p}(\vec{x}, t) = e^{\mathbf{D}t} \mathbf{p}(\vec{x}, 0).$$

On définit \mathbf{D}^\dagger , l'opérateur adjoint de \mathbf{D} :

$$\sum_{ij} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \rho_i^1(\vec{x}, t) D_{ij} \rho_j^2(\vec{x}, t) = \sum_{ij} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \rho_j^2(\vec{x}, t) D_{ji}^\dagger \rho_i^1(\vec{x}, t)$$

où $\rho_i^1(\vec{x}, t)$ et $\rho_i^2(\vec{x}, t)$ sont des fonctions définies sur l'état du système \vec{x} et la valeur du bruit $i\tilde{\Delta}$. On détermine ainsi que:

$$\mathbf{D}^\dagger = \begin{bmatrix} (\bar{F}(\vec{x}) + \bar{\Delta}) \cdot \bar{\nabla} - \gamma/2 & \gamma/2 \\ \gamma/2 & (\bar{F}(\vec{x}) - \bar{\Delta}) \cdot \bar{\nabla} - \gamma/2 \end{bmatrix}.$$

Il est alors possible de passer à la représentation de Heisenberg, où ce sont les quantités définies sur l'état du système qui évoluent. L'expression des taux de transition devient ainsi:

$$\tau_{\beta\alpha}^{-1} = \frac{\eta_{\alpha}^{-1}}{2} \sum_{ij} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \left[\left(e^{\mathbf{D}^t \Delta t} \right)_{ji} \theta_{\beta}(\bar{x}) \right] \left[\bar{J}^s(\bar{x}) + j \bar{K}^s(\bar{x}) \right] \cdot \bar{\nabla} \theta_{\alpha}(\bar{x}).$$

Puisque $\bar{\nabla} \theta_{\alpha}(\bar{x})$ correspond à un delta de Dirac et que $\hat{N}_{\partial\Omega_{\alpha}} \cdot \bar{J}^s(\bar{x}) = 0$:

$$\tau_{\beta\alpha}^{-1} = -\frac{\eta_{\alpha}^{-1}}{2} \sum_{ij} \int_{\partial\Omega_{\alpha}} d^{m-1} x g(\bar{x}) j \left[\left(e^{\mathbf{D}^t \Delta t} \right)_{ji} \theta_{\beta}(\bar{x}) \right] \hat{N}_{\partial\Omega_{\alpha}} \cdot \bar{K}^s(\bar{x})$$

où la procédure d'intégration et la fonction $g(\bar{x})$ sont définies dans l'appendice C. Tel que démontré dans l'appendice D, $\left[\sum_i \left(e^{\mathbf{D}^t \Delta t} \right)_{ji} \theta_{\beta}(\bar{x}) \right]$ représente la moyenne sur les réalisations au temps t de la fonction caractéristique $\theta_{\beta}(\bar{x})$ étant donné qu'à $t = 0$, le système était dans l'état \bar{x} et que le bruit avait la valeur $j\bar{\Delta}$. On définit $\theta_{\beta}^r(t|\bar{x}_o, j\bar{\Delta})$ comme étant la valeur de $\theta_{\beta}(\bar{x})$ au temps t pour une réalisation donnée initiée au temps $t = 0$ avec le système dans l'état \bar{x}_o et le bruit égal à $j\bar{\Delta}$. On peut alors écrire:

$$\langle \theta_{\beta}^r(t|\bar{x}, j\bar{\Delta}) \rangle = \sum_i \left(e^{\mathbf{D}^t \Delta t} \right)_{ji} \theta_{\beta}(\bar{x})$$

où la moyenne sur les réalisations $\langle \dots \rangle$ est explicitement indiquée. On obtient ainsi l'expression finale permettant de déterminer les taux de transition:

$$\tau_{\beta\alpha}^{-1} = \frac{\eta_{\alpha}^{-1}}{2} \int_{\partial\Omega_{\alpha}} d^{m-1} x g(\bar{x}) \left[\langle \theta_{\beta}^r(\Delta t|\bar{x}, -\bar{\Delta}) \rangle - \langle \theta_{\beta}^r(\Delta t|\bar{x}, +\bar{\Delta}) \rangle \right] \hat{N}_{\partial\Omega_{\alpha}} \cdot \bar{K}^s(\bar{x}) \quad (3.18)$$

où $\tau_{mic} \ll \Delta t \ll \tau_{pop}$.

Cette équation constitue le résultat central de cette thèse. Elle permet de retrouver, comme cas particulier, l'équation 2.6 obtenue pour des systèmes univariés. Il faut pour cela définir le point x_o comme frontière entre les deux espèces puisque $\bar{J}^s(\bar{x})$ est nulle sur tout le support et qu'elle ne peut donc pas être utilisée pour la

déterminer. L'intégrale de l'équation 3.18 devient tout simplement une évaluation au point \bar{x}_o . Étant donné que $F(x_o) = 0$, $\hat{N}_{\partial\Omega_\alpha} \cdot \vec{K}^s(\bar{x})$ se réduit à $\Delta P^s(x_o)$. Il ne reste plus qu'à sommer:

$$\begin{aligned}\tau_{pop}^{-1} &= k_{AA} + k_{AB} \\ &= \tau_{AA}^{-1} - \tau_{AB}^{-1}\end{aligned}$$

pour retrouver l'équation 2.6.

Il est intéressant d'étudier le sens de chacun des termes composant l'équation 3.18. Le taux de transition $\tau_{\beta\alpha}^{-1}$ caractérise l'influence de la population $\bar{N}_\alpha(t)$ sur l'évolution de la population $\bar{N}_\beta(t)$. La composante perpendiculaire de $\vec{K}^s(\bar{x})$ par rapport à la frontière de la région Ω_α prend en considération la rapidité à laquelle un ensemble de réalisations s'éloignent les unes des autres perpendiculairement à la frontière. La différence entre les valeurs moyennes de la fonction caractéristique envisage quant à elle l'évolution des réalisations du système après qu'elles aient quitté la frontière. Elle correspond ainsi à un coefficient de transmission, permettant de savoir quelle est la proportion des réalisations du système qui se sont rendues dans la région Ω_β parce qu'elles évoluaient dès le départ dans la bonne direction. De son côté, le facteur η_α^{-1} permet de normaliser le taux de transition par rapport à la population stationnaire de la région Ω_α . Semblablement au cas univarié, la présence ou l'absence d'un plateau lors du calcul de $\mathcal{R}_{\beta\alpha}(\Delta t)$ ($\tau_{mic} \ll \Delta t \ll \tau_{pop}$) permet de vérifier la validité de la loi phénoménologique 3.16.

Cette loi peut être reformulée sous la forme:

$$\delta\dot{N}(t) = K\delta N(t) \quad (3.19)$$

où le vecteur $\delta N(t)$ regroupe les écarts de population $\delta N_\alpha(t)$ pour les m espèces, et

la matrice \mathbf{K} , les m^2 taux de transition $\tau_{\beta\alpha}^{-1}$. La condition de normalisation:

$$\sum_{\alpha} \delta N_{\alpha}(t) = 0$$

implique que seulement $m^2 - m$ taux de transition apparaissant dans la loi phénoménologique 3.16 (ou 3.19) sont indépendants et que la matrice \mathbf{K} est singulière.

Le calcul des valeurs et des vecteurs propres de la matrice \mathbf{K} permet de connaître les modes propres de la cinétique des populations. La valeur propre nulle correspond à l'état stationnaire. La valeur propre minimale suivante, qu'on nomme τ_{pop}^{-1} , correspond quant à elle au temps de vie le plus lent du système. Cette dernière peut être évaluée à l'aide d'une simple simulation phénoménologique dans la mesure où elle est beaucoup plus petite que toutes les autres valeurs propres non-nulles.

3.4 Modèle étudié

En l'absence de bruit, le système étudié ici possède deux points fixes stables et un point de selle. Son évolution est décrite par:

$$\dot{x} = -ax^3 + bx \pm \Delta_x$$

$$\dot{y} = -cy \pm \Delta_y.$$

En utilisant le système d'unité:

$$[x] = \sqrt{c/a}$$

$$[y] = \Delta_y/c$$

$$[t] = 1/c$$

on obtient:

$$\dot{x}^* = -(x^*)^3 + b^*x^* \pm \Delta_x^*$$

$$\dot{y}^* = -y^* \pm 1$$

où:

$$x = x^* \sqrt{c/a}$$

$$y = y^* \Delta_y / c$$

$$t = t^* / c$$

et:

$$b^* = b/c$$

$$\Delta_x^* = \Delta_x \sqrt{a/c^3}.$$

De plus, $\gamma^* = \gamma/c$. Dans le reste de cette thèse, on laisse tomber l'astérisque tout en utilisant implicitement ce système d'unités.

L'amplitude du bruit est choisie de telle sorte que pour chaque valeur du bruit ($\pm \bar{\Delta}$), il ne subsiste qu'un seul attracteur. Ce système bivarié consiste effectivement en deux sous-systèmes déterministiquement découplés, le système en x ayant déjà été étudié [18–20, 25]. Les seules corrélations entre les deux systèmes sont causées par les transitions synchronisées du bruit. Une fois calculées, les densités de probabilité de ce système bivarié peuvent donc être projetées sur chacune des variables d'état et comparées avec les solutions connues des systèmes à une variable. Il est clair que l'évolution de chacun des sous-systèmes n'influence en rien celle de l'autre. Cependant, la définition des espèces couple les deux variables du système. La cinétique des populations pour ce système bivarié pourrait donc être sensiblement différente de celle de chacune de ses parties.

Pour cette première étude, on s'est concentré sur l'influence qu'a le temps de

corrélation du bruit sur le comportement du système. On a donc fixé:

$$b = \Delta_z = 1$$

et fait varier γ .

Chapitre 4. Distributions stationnaires et espèces

4.1 Introduction

Les algorithmes mis au point pour déterminer le support, les densités de probabilité stationnaires et les frontières entre espèces ont été conçus pour des systèmes bivariés. Les techniques des éléments finis et de lissage devraient pouvoir être généralisées sans problème majeur afin de considérer des systèmes décrits par un plus grand nombre de variables d'état. En contrepartie, l'algorithme de maillage pourrait nécessiter un plus grand nombre de modifications. De plus, les algorithmes de détermination du support et des frontières entre espèces sont très dépendants de la topologie du problème. Il ne peuvent donc être utilisés que pour des systèmes bivariés possédant deux points fixes stables. Leur généralisation à d'autres types de systèmes est possible, mais nécessiterait une révision en profondeur.

4.2 Algorithmes

4.2.1 Détermination du support

La première étape du calcul devant mener à l'évaluation des taux de transition entre les espèces consiste à déterminer le support sur lequel la densité de probabilité stationnaire est a priori non-nulle. Tel que mentionné précédemment, celui-ci est défini comme étant l'ensemble des états pouvant être atteints à partir des attracteurs lorsque le système évolue pendant une très longue période de temps.

Le contour du support est calculé numériquement sous la forme d'une séquence de segments de droite, chacun faisant partie d'une trajectoire menant vers un des attracteurs. Le calcul de cette séquence se divise en deux étapes. La première consiste à fournir une approximation initiale et la deuxième, à améliorer itérativement cette dernière.

L'approximation initiale qu'on a choisi d'utiliser consiste en une courbe fermée ne renfermant aucune surface. Celle-ci est déterminée par une trajectoire déterministe reliant les deux attracteurs. On utilise une réalisation dont le point de départ se situe à l'attracteur correspondant à $\vec{I}(t) = +\vec{\Delta}$. On intègre alors numériquement l'équation $\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) - \vec{\Delta}$, à l'aide d'un algorithme de Runge-Kutta avec pas adaptatif, afin d'obtenir une séquence de points situés sur une trajectoire déterministe reliant les deux attracteurs. En utilisant ces points, on construit une boucle fermée et dégénérée reliant les deux attracteurs et n'englobant aucune surface. Cette séquence de segments constitue l'approximation initiale de la frontière du support. La méthode fonctionne tout aussi bien si on utilise l'attracteur correspondant à $\vec{I}(t) = -\vec{\Delta}$ comme point de départ et si on intègre ensuite numériquement l'équation $\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) + \vec{\Delta}$. On obtient tout simplement une approximation initiale différente.

Tel que mentionné ci-haut, la deuxième étape consiste en une boucle où l'approximation du support est raffinée jusqu'à ce qu'elle soit suffisamment précise. Il est important de noter que l'approximation initiale du support, tout comme chacune des approximations subséquentes, est un sous-ensemble du véritable support. On cherche donc à agrandir le support de manière itérative jusqu'à ce qu'il soit pleinement déterminé. À cette fin, on considère tour à tour chacun des points définissant la séquence de segments de droite qui approxime le support. Pour chaque point, on vérifie s'il existe une trajectoire déterministe, décrite par $\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) - \vec{\Delta}$ ou

$\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) + \vec{\Delta}$, passant par lui et permettant de sortir du support tel que décrit par l'approximation courante. Si tel est le cas, on intègre numériquement l'équation correspondante, soit $\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) - \vec{\Delta}$ ou $\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) + \vec{\Delta}$, jusqu'à ce que la trajectoire déterministe rejoigne la présente approximation du support. Cette dernière est alors mise à jour afin d'englober la nouvelle région ainsi calculée. Ce faisant, on élimine la partie de la frontière qui ne délimite plus l'extérieur du support. On continue par la suite à examiner chaque point à tour de rôle, mais en considérant seulement ceux qui définissent la nouvelle approximation de la frontière. Lorsqu'il n'y a plus de trajectoires déterministes menant vers l'extérieur du support, on considère alors que ce dernier est entièrement déterminé.

Bien qu'étant relativement complexe, cette procédure est très efficace. Quelques minutes suffisent pour déterminer le support d'un problème donné sur une station de travail moyenne. Il faut cependant mentionner que la performance de l'algorithme est intimement liée à l'ordre dans lequel on utilise les trajectoires permettant d'agrandir le support. On a bien entendu avantage à utiliser en premier celles qui agrandissent le plus le support puisque cela minimise le travail à accomplir. La continuité du champ de forces permet d'ailleurs d'optimiser l'ordre dans lequel l'algorithme utilise les trajectoires déterministes.

4.2.2 Éléments finis

Son support ayant été déterminé, la densité de probabilité stationnaire est évaluée en utilisant la méthode des éléments finis [5, 8, 30]. Cette méthode a été préférée à celle des différences finies puisqu'elle permet plus facilement de considérer des supports de forme irrégulière.

La programmation devant mener au calcul des densités de probabilité stationnaires par la méthode des éléments finis a été effectuée dans le cadre de la bibliothèque de programmes MODULEF [9, 11-13, 15, 16, 24] mise au point par le club du même nom. Celui-ci a été fondé en 1974 par l'Institut national de recherche en informatique et en automatique de France (INRIA) afin de faciliter la résolution de divers problèmes (transfert de chaleur, élasticité, mécanique des fluides) par la méthode des éléments finis. Notre problème ne pouvait cependant se ramener à un de ceux déjà programmés. Il a donc été nécessaire de se familiariser avec le fonctionnement interne de la bibliothèque MODULEF afin de pouvoir calculer les densités de probabilité stationnaires.

On considère les deux équations différentielles couplées suivantes ainsi que la condition frontière qui leur est associée:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}^s(\vec{x}) = 0 \quad (4.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{K}^s(\vec{x}) + \gamma Q^s(\vec{x}) = 0 \quad (4.2)$$

$$\hat{N}_{\partial\Omega} \cdot \vec{J}^s(\vec{x}) = 0 \quad (4.3)$$

où $\hat{N}_{\partial\Omega}$ est un vecteur unitaire perpendiculaire à la frontière du support et pointant vers l'extérieur de celui-ci. Il est important de se rappeler que l'équation 4.3 implique également:

$$\hat{N}_{\partial\Omega} \cdot \vec{K}^s(\vec{x}) = 0. \quad (4.4)$$

Le point de départ de la méthode des éléments finis consiste à multiplier les équations 4.1 et 4.2 par des fonctions arbitraires $H_J(\vec{x})$ et $H_K(\vec{x})$ et à les intégrer sur le support:

$$\int_{\Omega} d^2x H_J(\vec{x}) \vec{\nabla} \cdot \vec{J}^s(\vec{x}) = 0$$

$$\int_{\Omega} d^2x H_K(\vec{x}) [\vec{\nabla} \cdot \vec{K}^s(\vec{x}) + \gamma Q^s(\vec{x})] = 0.$$

En utilisant le théorème de la divergence ainsi que les conditions frontières 4.3 et 4.4, on obtient la formulation intégrale dite faible:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d^2x \bar{\nabla} H_J(\bar{x}) \cdot \bar{J}^s(\bar{x}) &= 0 \\ \int_{\Omega} d^2x \left[\bar{\nabla} H_K(\bar{x}) \cdot \bar{K}^s(\bar{x}) - \gamma H_K(\bar{x}) Q^s(\bar{x}) \right] &= 0. \end{aligned}$$

Celle-ci contient implicitement les conditions frontières. Elles sont donc des conditions frontières dites naturelles et n'auront pas besoin d'être forcées lors de la résolution du système d'équations linéaires. La dernière étape de préparation des équations différentielles consiste à substituer les définitions de $\bar{J}^s(\bar{x})$, $\bar{K}^s(\bar{x})$ et $Q^s(\bar{x})$ afin de les exprimer en termes des densités de probabilités stationnaires $p_{\pm}^s(\bar{x})$:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d^2x \left\{ \left[\bar{\nabla} H_J(\bar{x}) \cdot (\bar{F}(\bar{x}) - \bar{\Delta}) \right] p_{-}^s(\bar{x}) \right. \\ \left. + \left[\bar{\nabla} H_J(\bar{x}) \cdot (\bar{F}(\bar{x}) + \bar{\Delta}) \right] p_{+}^s(\bar{x}) \right\} = 0 \\ \int_{\Omega} d^2x \left\{ \left[-\bar{\nabla} H_K(\bar{x}) \cdot (\bar{F}(\bar{x}) - \bar{\Delta}) + \gamma H_K(\bar{x}) \right] p_{-}^s(\bar{x}) \right. \\ \left. + \left[\bar{\nabla} H_K(\bar{x}) \cdot (\bar{F}(\bar{x}) + \bar{\Delta}) - \gamma H_K(\bar{x}) \right] p_{+}^s(\bar{x}) \right\} = 0. \end{aligned}$$

L'étape du maillage consiste à diviser le support en éléments. Les quantités devant être calculées sont alors approximées par des fonctions d'interpolation sur ces éléments. Pour les fins de cette étude, les éléments finis sélectionnés sont des triangles sur lesquels sont définies des fonctions d'interpolation linéaire. Ainsi, les densités de probabilité stationnaires sont d'abord évaluées aux coins (noeuds) des triangles. Les fonctions d'interpolation permettent ensuite de connaître leur valeur à chaque point du support.

Les triangles composant le maillage sont qualifiés de réels, par opposition au triangle de référence utilisé dans tous les calculs numériques. Ce triangle est défini par les points $(0,0)$, $(1,0)$ et $(0,1)$. La transformation T obtenue en utilisant les

polynômes de Lagrange d'ordre 1 (L_1, L_2, L_3) permet de passer de ce triangle de référence à un triangle réel:

$$T \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = L_1^o(x_0, y_0) \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} + L_2^o(x_0, y_0) \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} + L_3^o(x_0, y_0) \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

où (x_1, y_1) , (x_2, y_2) et (x_3, y_3) sont les coordonnées des noeuds d'un triangle réel, (x_0, y_0) , les coordonnées d'un point quelconque sur le triangle de référence, et $L_1^o(x_0, y_0) = 1 - x_0 - y_0$, $L_2^o(x_0, y_0) = x_0$ et $L_3^o(x_0, y_0) = y_0$, les polynômes de Lagrange définis sur le triangle de référence. Ces mêmes polynômes de Lagrange sont utilisés dans la construction de la fonction d'interpolation sur le triangle de référence. Celle-ci permet de calculer les densités de probabilité stationnaires à un point quelconque du triangle de référence ($p_{\pm}^{os}(x_0, y_0)$) lorsqu'elles sont connues à ses noeuds ($p_{\pm i}^s$):

$$\begin{aligned} p_{\pm}^{os}(x_0, y_0) &= L_1^o(x_0, y_0)p_{\pm 1}^s + L_2^o(x_0, y_0)p_{\pm 2}^s + L_3^o(x_0, y_0)p_{\pm 3}^s \\ &= [L^o(\vec{x})]_{1 \times 3} [p_{\pm}^s]_{3 \times 1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

où $[X]_{3 \times 1}$ est une matrice composée de trois rangées et d'une colonne contenant la valeur de la quantité X aux noeuds d'un triangle. De même, la matrice $[L^o(\vec{x})]_{1 \times 3}$ contient les polynômes de Lagrange définis sur le triangle de référence. L'utilisation de $T^{-1}(x, y) \mapsto (x_0, y_0)$ et de l'équation 4.5 permet d'obtenir la fonction d'interpolation correspondant à chaque triangle réel \mathcal{T} :

$$\begin{aligned} p_{\pm}^s(\vec{x}) &= p_{\pm}^{os}(x_0(x, y), y_0(x, y)) \\ &= [L^{\mathcal{T}}(\vec{x})]_{1 \times 3} [p_{\pm}^s]_{3 \times 1} \\ \begin{bmatrix} \partial_x p_{\pm}^s(\vec{x}) \\ \partial_y p_{\pm}^s(\vec{x}) \end{bmatrix} &= [DL^{\mathcal{T}}(\vec{x})]_{2 \times 3} [p_{\pm}^s]_{3 \times 1} \end{aligned}$$

où $[L^T(\bar{x})]_{1 \times 3}$ contient les polynômes de Lagrange d'ordre 1 définis sur le triangle réel \mathcal{T} et $[DL^T(\bar{x})]_{2 \times 3}$, leurs dérivées par rapport à x et y .

Pour cette étude, on a choisi d'utiliser la méthode de Galerkin. Elle consiste à définir les fonctions arbitraires $H_J(\bar{x})$ et $H_K(\bar{x})$ en termes des fonctions d'interpolation utilisées pour approximer les densités de probabilité stationnaires. Ainsi:

$$\begin{aligned} H_{J,K}(\bar{x}) &= [L^T(\bar{x})]_{1 \times 3} [H_{J,K}]_{3 \times 1} \\ \begin{bmatrix} \partial_x H_{J,K}(\bar{x}) \\ \partial_y H_{J,K}(\bar{x}) \end{bmatrix} &= [DL^T(\bar{x})]_{2 \times 3} [H_{J,K}]_{3 \times 1}. \end{aligned}$$

Jusqu'à maintenant, les noeuds ont été numérotés localement sur chaque triangle (noeuds 1, 2 et 3). Afin de pouvoir utiliser une numérotation globale, c'est-à-dire pour l'ensemble du maillage, on définit pour chaque triangle une matrice de changement de base $[B^T]_{3 \times N}$ permettant de passer de la numérotation globale (N noeuds) à la numérotation locale (3 noeuds). On définit également la matrice $[X]_{N \times 1}$ contenant la valeur de la quantité X à chaque noeud suivant la numérotation globale.

Les équations différentielles deviennent alors:

$$\begin{aligned} & [\tilde{H}_J]_{1 \times N}^t \left\{ \sum_{\mathcal{T} \in \Omega} [B^T]_{N \times 3}^t [M_{J-}^T]_{3 \times 3} [B^T]_{3 \times N} \right\} [\tilde{p}_-^s]_{N \times 1} \\ & + [\tilde{H}_J]_{1 \times N}^t \left\{ \sum_{\mathcal{T} \in \Omega} [B^T]_{N \times 3}^t [M_{J+}^T]_{3 \times 3} [B^T]_{3 \times N} \right\} [\tilde{p}_+^s]_{N \times 1} = 0 \\ & [\tilde{H}_K]_{1 \times N}^t \left\{ \sum_{\mathcal{T} \in \Omega} [B^T]_{N \times 3}^t [M_{K-}^T]_{3 \times 3} [B^T]_{3 \times N} \right\} [\tilde{p}_-^s]_{N \times 1} \\ & + [\tilde{H}_K]_{1 \times N}^t \left\{ \sum_{\mathcal{T} \in \Omega} [B^T]_{N \times 3}^t [M_{K+}^T]_{3 \times 3} [B^T]_{3 \times N} \right\} [\tilde{p}_+^s]_{N \times 1} = 0 \end{aligned}$$

où les sommes sont effectuées sur tous les triangles \mathcal{T} du support. Les matrices

élémentaires sont données par:

$$\begin{aligned}
[M_{J-}^T]_{3 \times 3} &= \int_{\mathcal{T}} d^2x [DL^T(\bar{x})]_{3 \times 2}^t [\bar{F}(\bar{x}) - \bar{\Delta}]_{2 \times 1} [L^T(\bar{x})]_{1 \times 3} \\
[M_{J+}^T]_{3 \times 3} &= \int_{\mathcal{T}} d^2x [DL^T(\bar{x})]_{3 \times 2}^t [\bar{F}(\bar{x}) + \bar{\Delta}]_{2 \times 1} [L^T(\bar{x})]_{1 \times 3} \\
[M_{K-}^T]_{3 \times 3} &= \int_{\mathcal{T}} d^2x \left(- [DL^T(\bar{x})]_{3 \times 2}^t [\bar{F}(\bar{x}) - \bar{\Delta}]_{2 \times 1} [L^T(\bar{x})]_{1 \times 3} \right. \\
&\quad \left. + \gamma [L^T(\bar{x})]_{3 \times 1}^t [L^T(\bar{x})]_{1 \times 3} \right) \\
[M_{K+}^T]_{3 \times 3} &= \int_{\mathcal{T}} d^2x \left([DL^T(\bar{x})]_{3 \times 2}^t [\bar{F}(\bar{x}) + \bar{\Delta}]_{2 \times 1} [L^T(\bar{x})]_{1 \times 3} \right. \\
&\quad \left. - \gamma [L^T(\bar{x})]_{3 \times 1}^t [L^T(\bar{x})]_{1 \times 3} \right).
\end{aligned}$$

Puisque $[\bar{H}_J]_{N \times 1}$ et $[\bar{H}_K]_{N \times 1}$ sont arbitraires, on obtient un ensemble de $2N$ équations linéaires pouvant être résolues afin d'obtenir $[\bar{p}_{\pm}^s]_{N \times 1}$. Le système d'équations étant homogène, cette solution n'est déterminée qu'à une constante de proportionnalité près. La condition de normalisation est ensuite utilisée afin de la déterminer uniquement.

4.2.3 Lissage

La solution obtenue par la méthode des éléments finis possède des oscillations de faible amplitude superposées à la solution proprement dite. Ces oscillations ont une longueur d'onde de l'ordre de la grandeur des triangles composant le maillage et sont donc causées par la nature discrète de l'approximation. À condition de choisir un maillage suffisamment fin, elles ne posent aucun problème en ce qui concerne les pics de la densité de probabilité stationnaire. Cependant, la région la plus importante est celle entre les pics puisque c'est là que se situe en principe la frontière entre les espèces. Les ressources informatiques limitées utilisées pour cette étude ne peuvent permettre une réduction suffisante des oscillations dans cette région pour

le type d'éléments finis décrit à la section 4.2.2. Il est ainsi impossible d'y obtenir directement des distributions suffisamment claires pour définir les espèces.

Il est donc nécessaire d'utiliser une technique de lissage effectuant la moyenne sur des noeuds voisins afin d'éliminer ces indésirables oscillations. La technique utilisée réduit l'étalement des pics tout en éliminant de façon efficace les oscillations et en préservant la normalisation des distributions. Pour ce faire, elle pondère la moyenne selon la rapidité avec laquelle varient les distributions d'un noeud à l'autre.

La première étape consiste à calculer comment rapidement varie la densité de probabilité stationnaire sur les segments de tous les triangles afin de connaître les valeurs extrêmes de la dérivée sur l'ensemble du support. La transformation suivante est alors utilisée afin de qualifier la dérivée de la distribution sur les segments:

$$h_{ij} = 1 - \left[\frac{\left| \frac{P_i - P_j}{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}} \right| - \min_{k,l \in \mathcal{T}; \mathcal{T} \in \Omega} \left| \frac{P_l - P_k}{\sqrt{(x_l - x_k)^2 + (y_l - y_k)^2}} \right|}{\max_{k,l \in \mathcal{T}; \mathcal{T} \in \Omega} \left| \frac{P_l - P_k}{\sqrt{(x_l - x_k)^2 + (y_l - y_k)^2}} \right| - \min_{k,l \in \mathcal{T}; \mathcal{T} \in \Omega} \left| \frac{P_l - P_k}{\sqrt{(x_l - x_k)^2 + (y_l - y_k)^2}} \right|} \right]$$

où $i, j = 1, 2, 3$ (la numérotation est locale à chaque triangle) et les extrema sont évalués en considérant l'ensemble du support. Ainsi, à la dérivée la plus élevée correspond $h = 0$ et à la plus petite, $h = 1$.

La moyenne est alors effectuée séparément sur chaque triangle. Pour chaque noeud, on considère les deux segments adjacents. Si h est petit, on moyenne peu sur ce segment; si h est élevé, on moyenne beaucoup sur ce segment. Afin d'obtenir ce résultat, on utilise l'interpolation bilinéaire suivante [8]:

$$P'_i = P_i (1 - h_{ij}) (1 - h_{ik}) + \left[\frac{P_i + P_j}{2} \right] h_{ij} (1 - h_{ik}) \\ + \left[\frac{P_i + P_k}{2} \right] (1 - h_{ij}) h_{ik} + \left[\frac{P_i + P_j + P_k}{3} \right] h_{ij} h_{ik}$$

où P_m représente les valeurs initiales et P'_m , les valeurs moyennes, suivant une numérotation locale à chaque triangle. Les moyennes sont considérées comme étant

faites en même temps sur toutes les arêtes du domaine. En d'autres mots, les mêmes valeurs initiales sont utilisées dans le calcul de toutes les valeurs moyennes.

La dernière étape consiste à combiner les nouvelles valeurs calculées pour un même noeud sur tous les triangles dont il fait partie. Ceci est fait en considérant l'aire A_i de chacun de ces triangles:

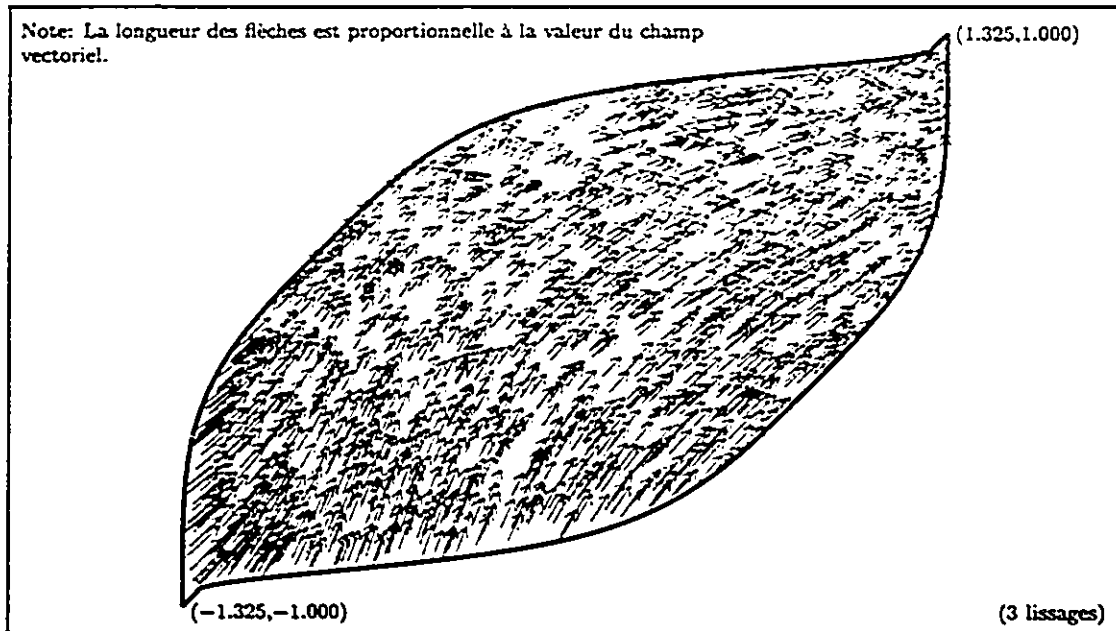
$$\bar{P}_i'' = \frac{\sum_j \bar{P}_{ij}' A_j}{\sum_j A_j}$$

où \bar{P}_{ij}' représente la valeur obtenue lors de la première étape sur le triangle j pour le noeud global i et \bar{P}_i'' , la nouvelle valeur associée au noeud global i . Il est relativement facile de vérifier que la normalisation des densités de probabilité stationnaires est respectée.

Il peut être nécessaire d'appliquer ce lissage à plus d'une reprise afin d'obtenir une distribution claire. Il faut cependant être attentif à la perte de détails pouvant résulter d'un abus.

4.2.4 Frontières entre les espèces

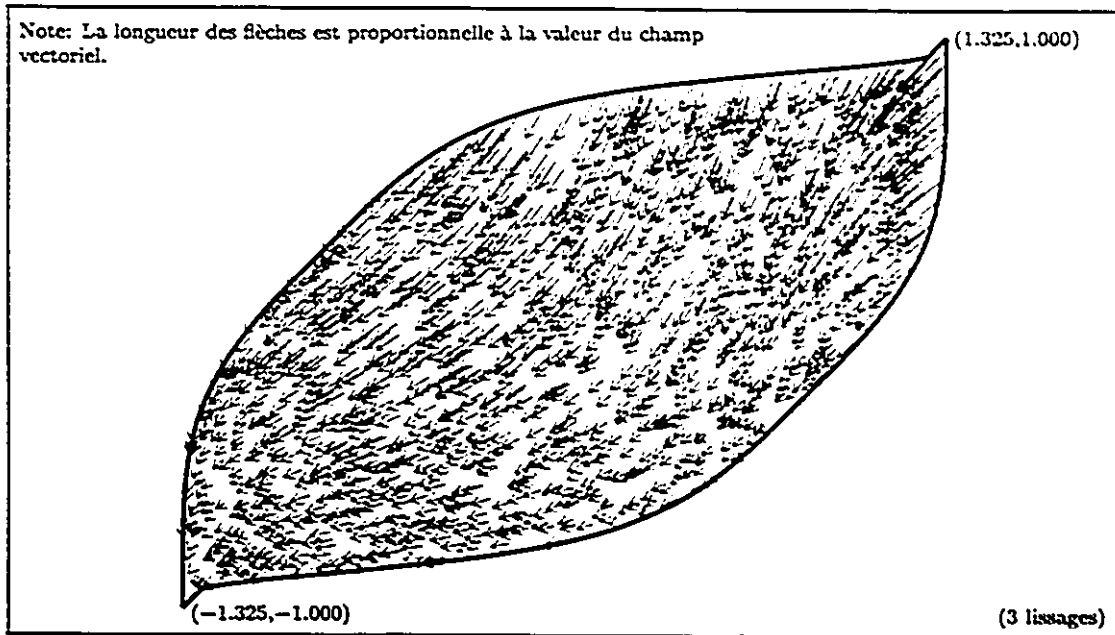
Le lissage ayant permis d'obtenir des distributions raisonnablement précises pour les densités de probabilité stationnaires, il est possible de calculer la densité de courant $\bar{J}^s(\bar{x})$. Les frontières entre espèces peuvent alors être déterminées à partir de celle-ci. La technique utilisée consiste à partir d'un point faisant nécessairement partie de la frontière pour le système particulier à l'étude et ensuite à remonter, ou descendre, le courant jusqu'à ce que la frontière rejoigne le contour du support. Les frontières sont ainsi décrites par une suite de segments déterminés numériquement. On utilise pour le calcul de chaque segment une technique s'apparentant à une méthode d'Euler. On commence par tracer le nouveau segment de telle sorte qu'il soit colinéaire avec

Figure 4.1: $\vec{F}(\vec{x}) + \vec{\Delta}$ pour $\gamma = 25$

le segment qui le précède. Par la suite, on modifie itérativement l'orientation du nouveau segment jusqu'à ce qu'il soit colinéaire avec la densité de courant $\vec{J}^s(\vec{x})$ au nouveau point.

4.3 Résultats

Les figures 4.1 et 4.2 illustrent les champs de force stochastiques $\vec{F}(\vec{x}) \pm \vec{\Delta}$ sur le support pour le modèle présenté à la section 3.4. Elles permettent de valider d'un coup d'oeil l'approximation calculée par l'algorithme de détermination du support. Celui-ci est déterminé de façon entièrement déterministe. Il ne dépend aucunement de la valeur de γ . Contrairement à ce qu'on aurait pu imaginer, la frontière du support présente plusieurs aspérités. Ceci souligne la complexité que peut camoufler

Figure 4.2: $\vec{F}(\vec{x}) - \vec{\Delta}$ pour $\gamma = 25$

un système à première vue très simple.

La figure 4.3 présente le champ de force $\vec{F}(\vec{x})$. Elle permet de constater que les attracteurs ainsi que le point de selle déterministes sont situés à l'intérieur du support de la densité de probabilité stationnaire pour le régime considéré ici.

Les points où la frontière n'est pas lisse peuvent engendrer des perturbations dans la distribution de la densité de probabilité stationnaire calculée par la méthode des éléments finis. Ces perturbations sont cependant de nature locale et peuvent être minimisées en raffinant le maillage. Le plus grand problème rencontré lors de l'utilisation de la méthode des éléments finis provient des oscillations de faible amplitude superposées aux distributions de densité de probabilité stationnaire (figure 4.4). Elles ne nous poseraient aucun problème si on s'intéressait tout simplement aux pics de la densité de probabilité stationnaire. Elles sont problématiques

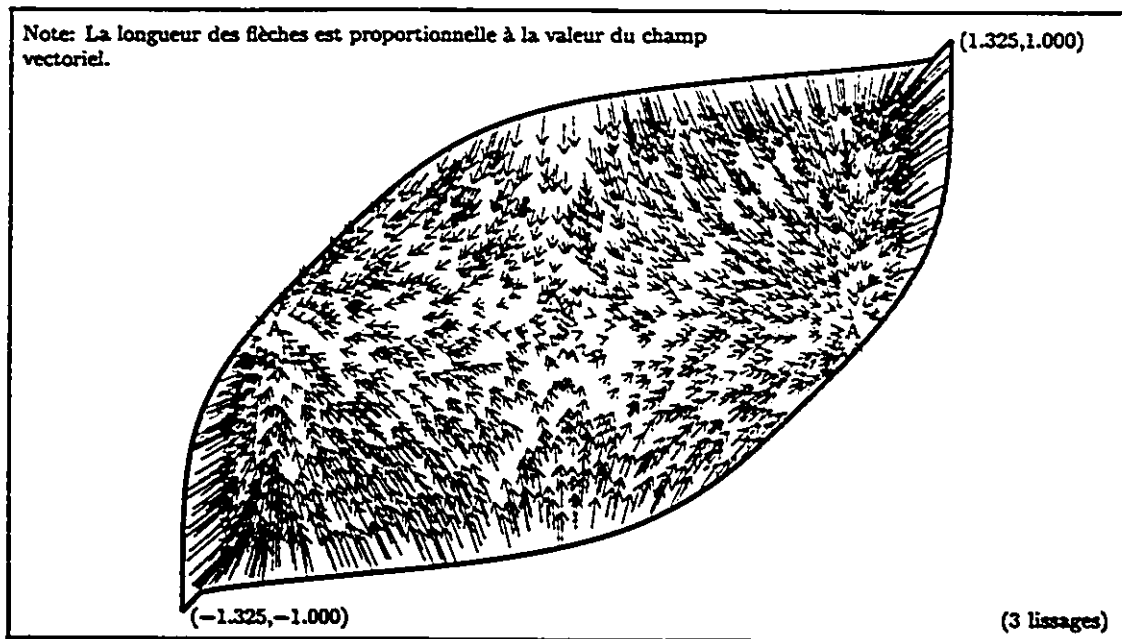


Figure 4.3: $\vec{F}(\vec{x})$ pour $\gamma = 25$. Les lettres "A" identifient la position des points fixes stables déterministes et la lettre "S", du point de selle déterministe.

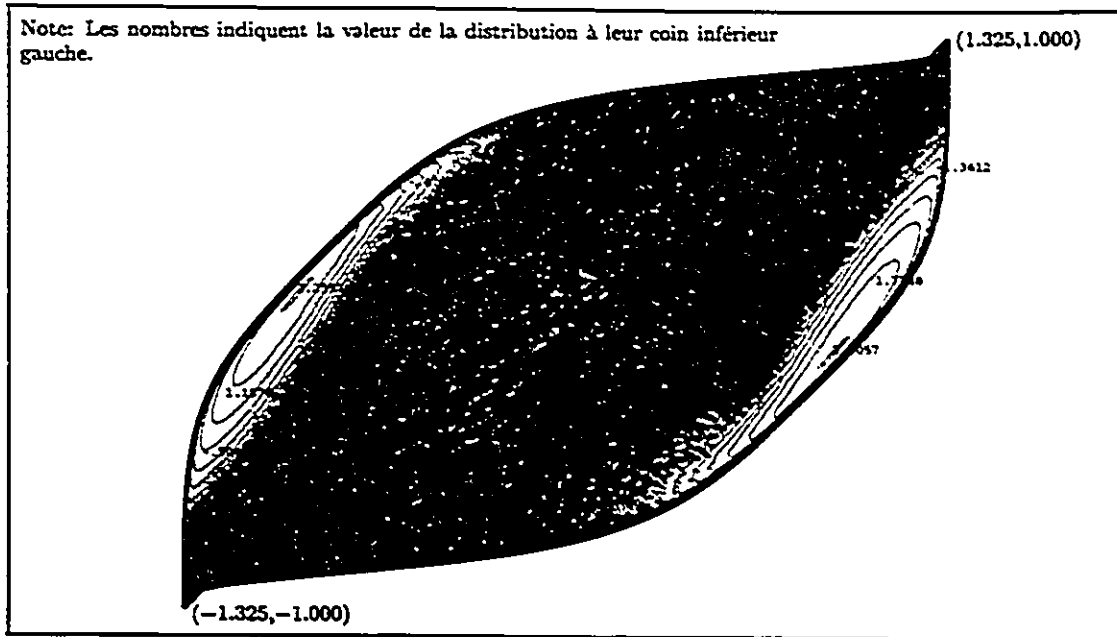
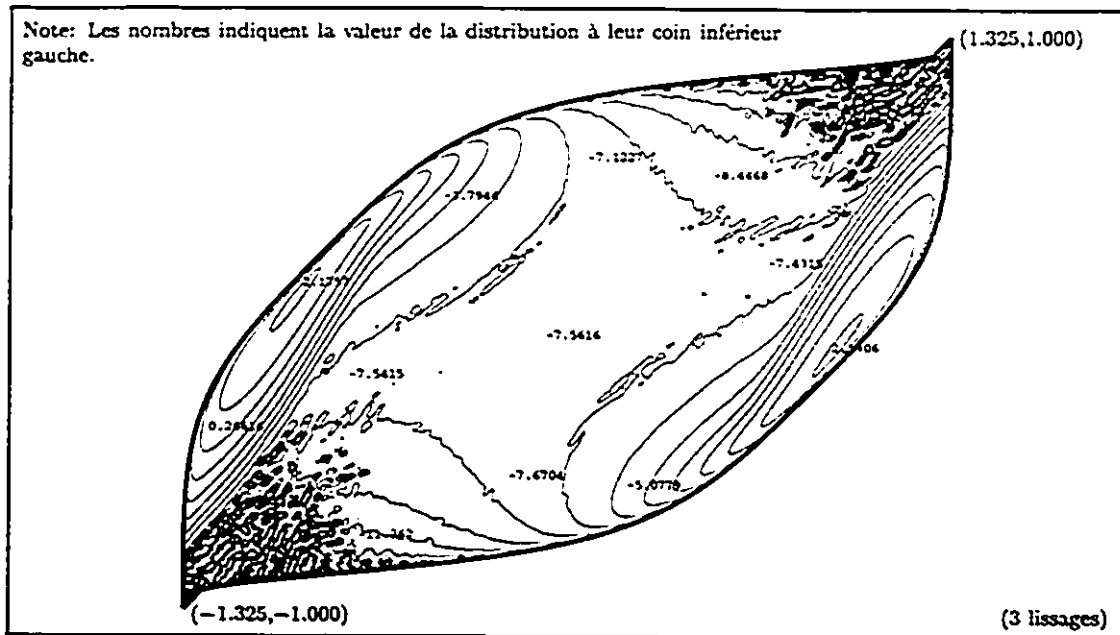


Figure 4.4: $\ln P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$ (aucun lissage)

seulement lorsqu'on s'intéresse à la région située entre les pics, comme c'est le cas lors de la détermination des frontières entre espèces.

Un lissage permet, dans la mesure où on n'en abuse pas, de clarifier les distributions de densité de probabilité stationnaire (figure 4.5). Il fait disparaître les variations locales, laissant transparaître les tendances plus globales des distributions. On note une grande clarification de la distribution. Il est cependant permis de se questionner sur la précision de la distribution ainsi obtenue. Pour cette étude, on a utilisé des éléments finis linéaires permettant d'obtenir des distributions ayant une continuité C^0 entre les triangles. Il est possible que l'utilisation d'éléments finis d'un ordre plus élevé et garantissant une continuité C^1 entre les éléments puissent améliorer les résultats. Les distributions ainsi obtenues pourraient possiblement être utilisées directement, c'est-à-dire sans lissage.

Figure 4.5: $\ln P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$

On note la présence d'une grande symétrie dans les distributions stationnaires obtenues pour $\gamma = 25$ (figures 4.5 à 4.9). Ceci constitue une vérification de la validité des algorithmes puisqu'elle n'a pas été utilisée par ceux-ci. Comme test supplémentaire de la précision des distributions obtenues par la méthode des éléments finis, les distributions peuvent être projetées sur les variables x ou y et comparées avec celles obtenues par intégration numérique à partir de l'équation 2.3. Les figures 4.10 et 4.11 présentent une telle comparaison pour une projection effectuée sur la variable x , et les figures 4.12 et 4.13, sur la variable y . Ces comparaisons supportent sans contredit la validité des densités de probabilité stationnaires obtenues pour le système bivarié.

On peut comparer la distribution $P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$ (figure 4.5) avec celles obtenues pour $\gamma = 5$ (figure 4.14) et $\gamma = 10$ (figure 4.15). En considérant la

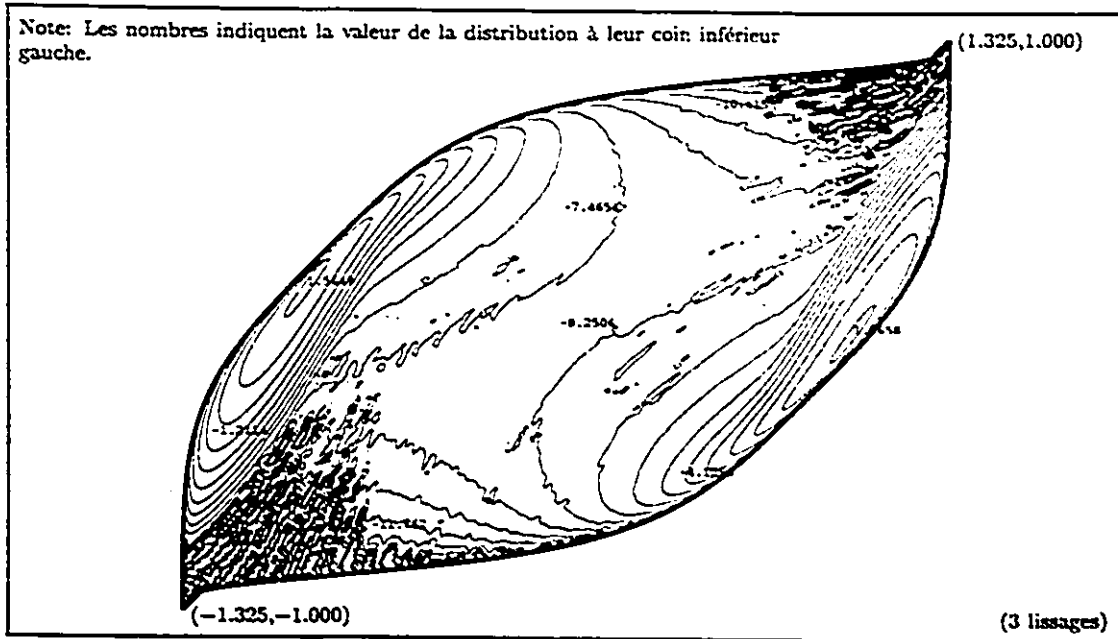


Figure 4.6: $\ln p_+^\gamma(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$

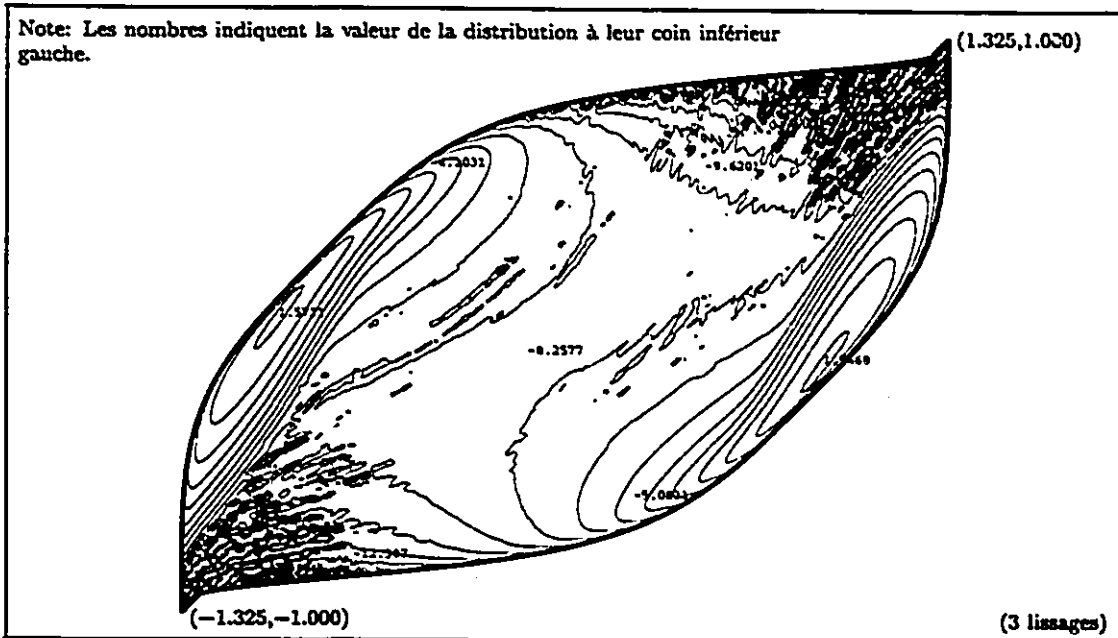


Figure 4.7: $\ln p_-^\gamma(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$

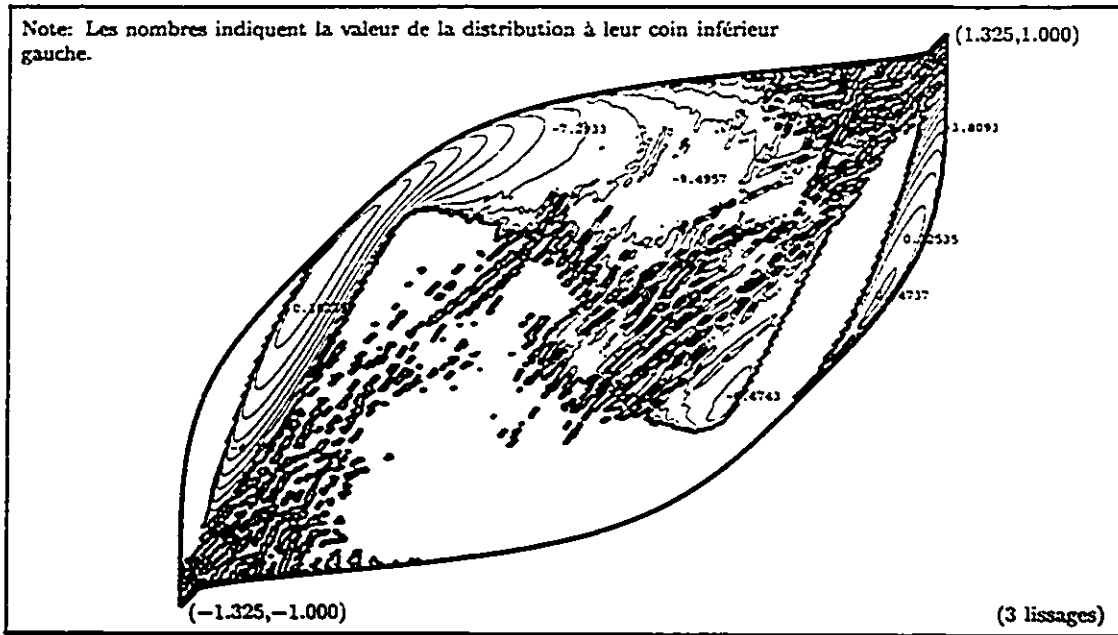


Figure 4.8: $\ln Q^s(\bar{x}), Q^s(\bar{x}) > 0$ pour $\gamma = 25$

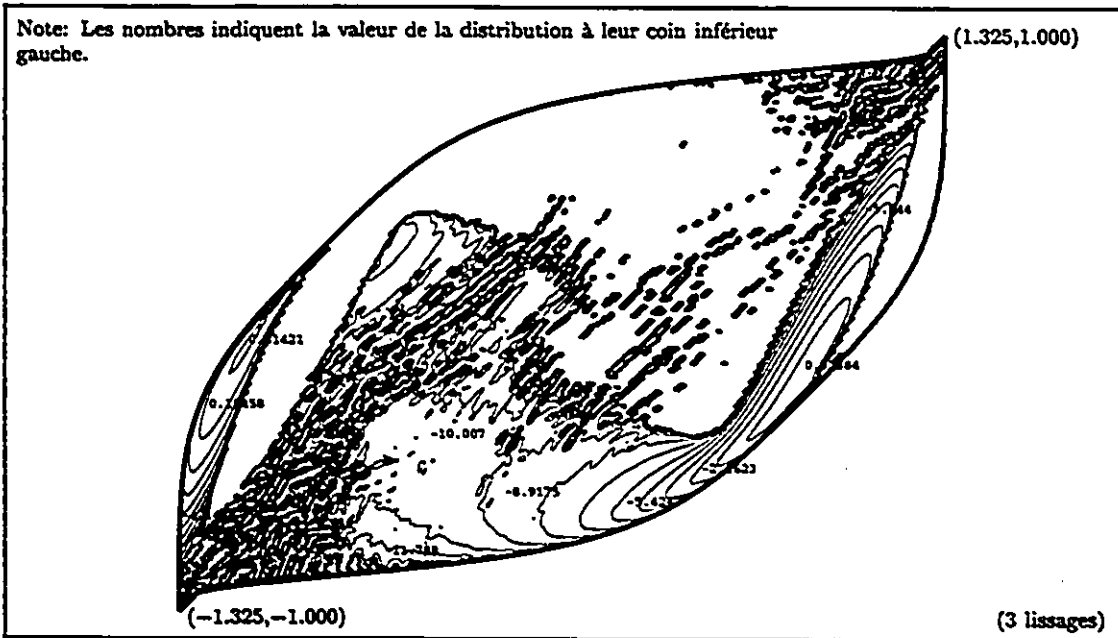


Figure 4.9: $\ln Q^s(\bar{x}), Q^s(\bar{x}) < 0$ pour $\gamma = 25$

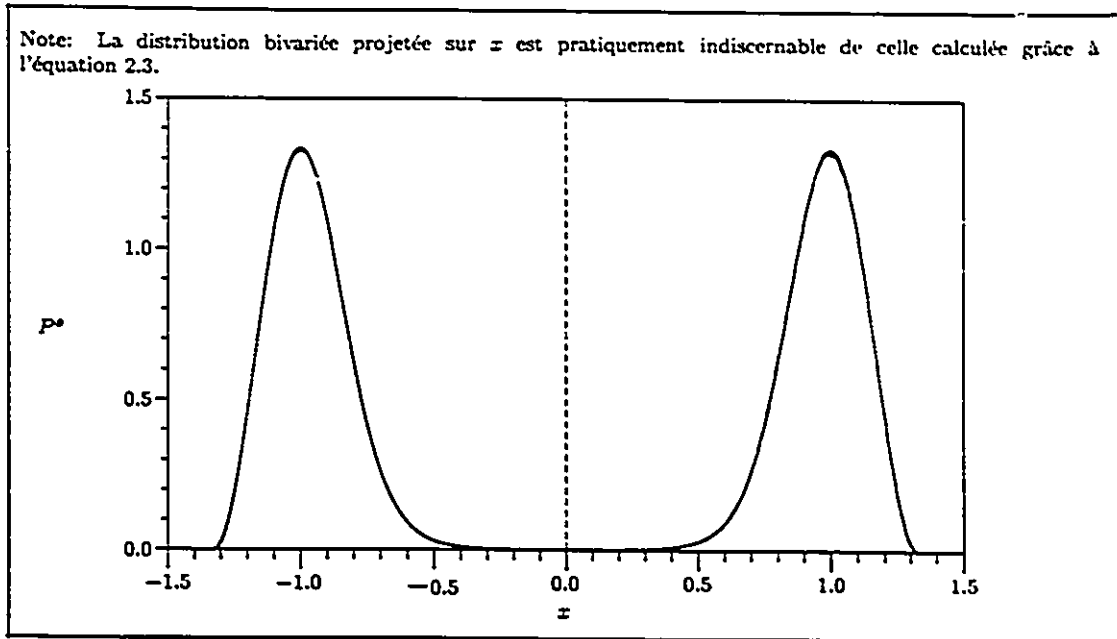


Figure 4.10: Projection de $P^s(\bar{x})$ sur la variable x ($\gamma = 25$)

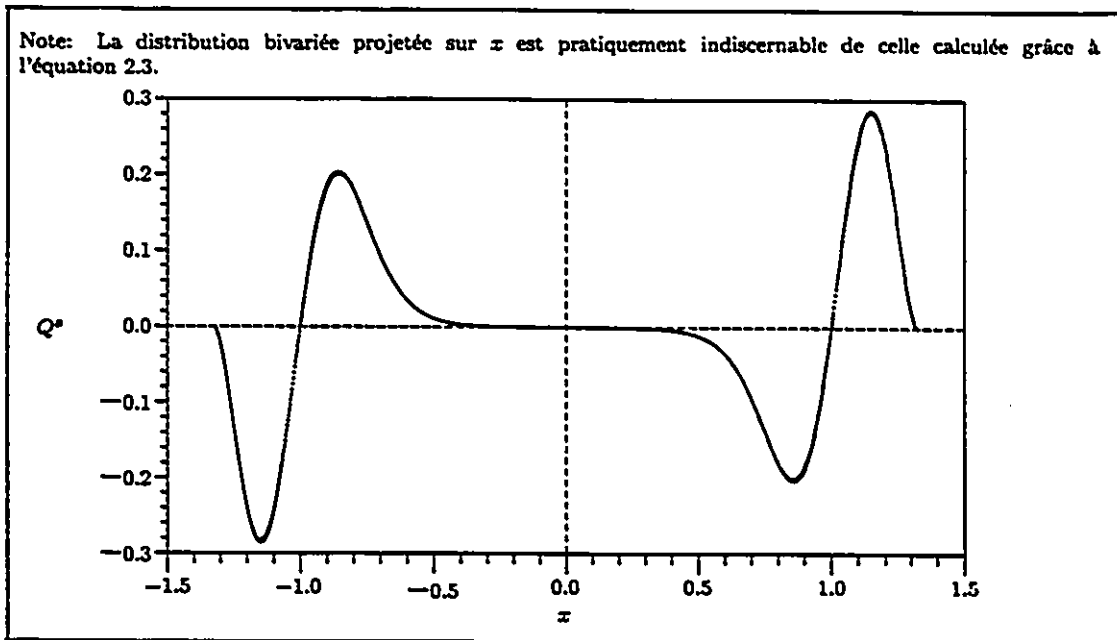


Figure 4.11: Projection de $Q^s(\bar{x})$ sur la variable x ($\gamma = 25$)

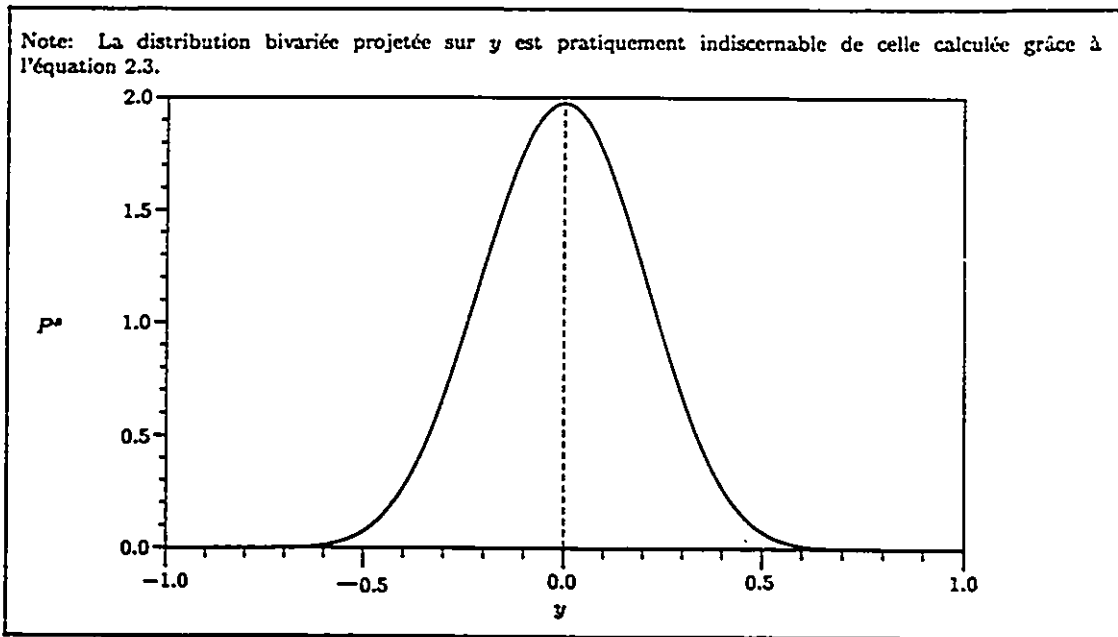


Figure 4.12: Projection de $P^s(\bar{x})$ sur la variable y ($\gamma = 25$)

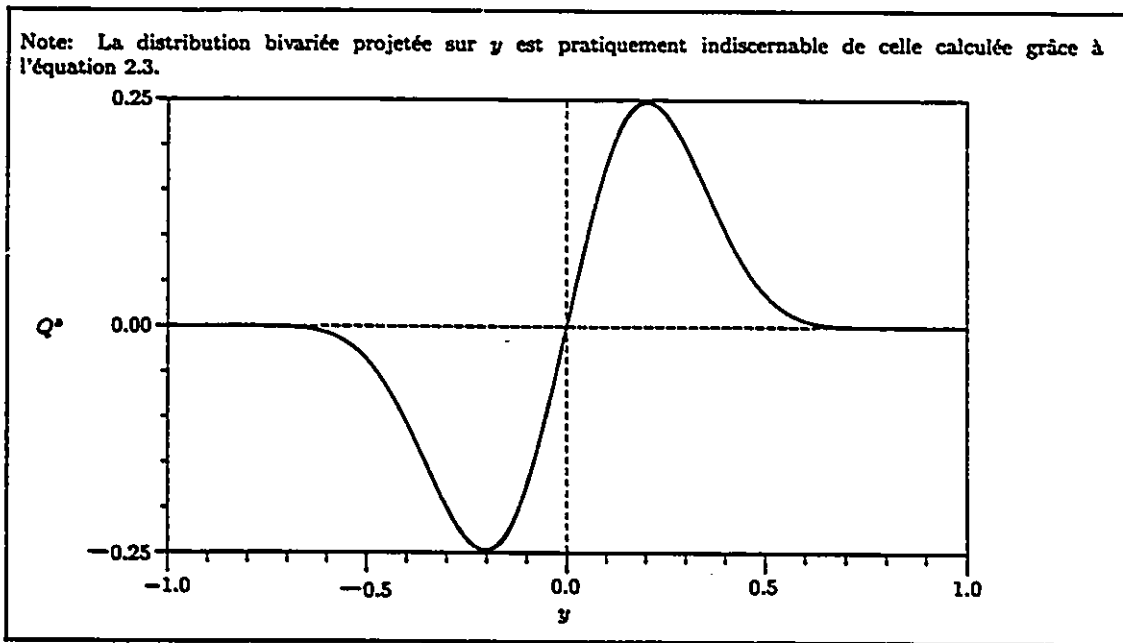


Figure 4.13: Projection de $Q^s(\bar{x})$ sur la variable y ($\gamma = 25$)

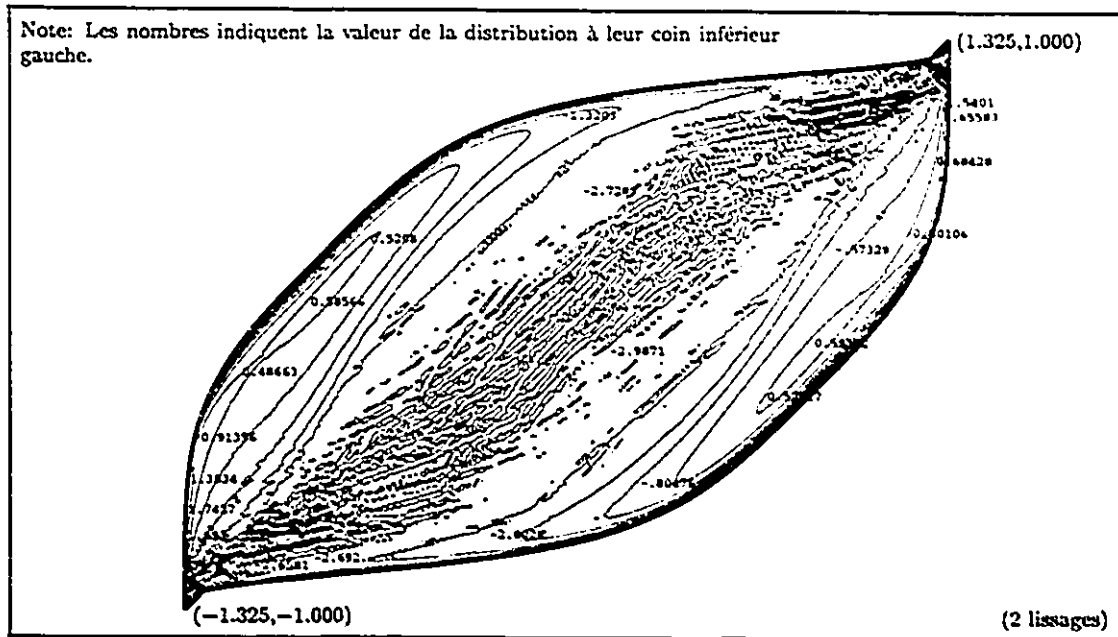


Figure 4.14: $\ln P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 5$

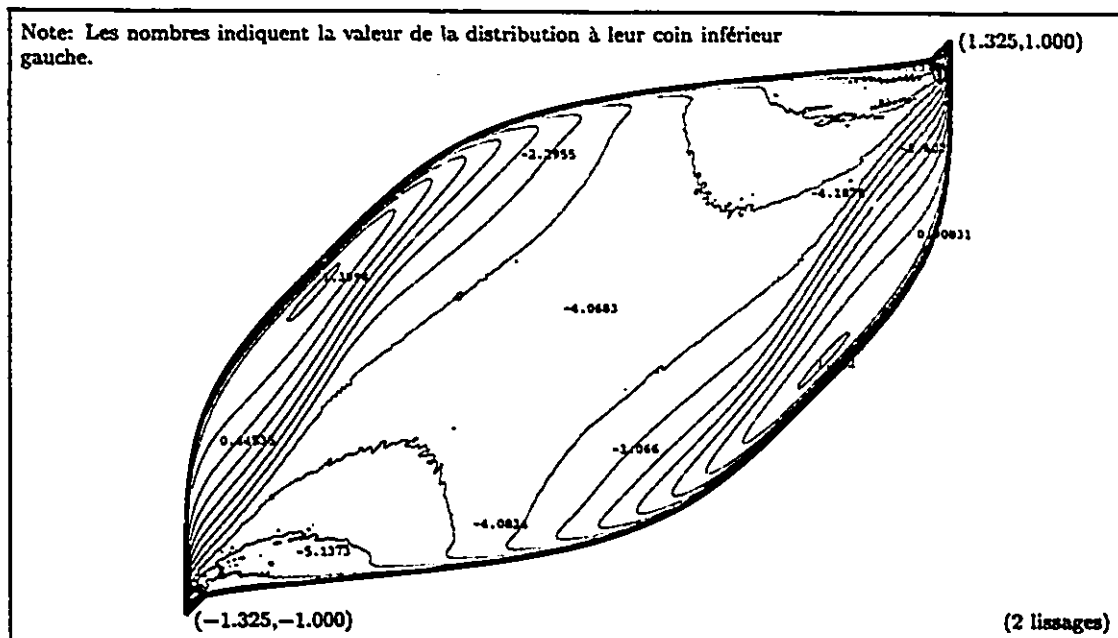


Figure 4.15: $\ln P^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 10$

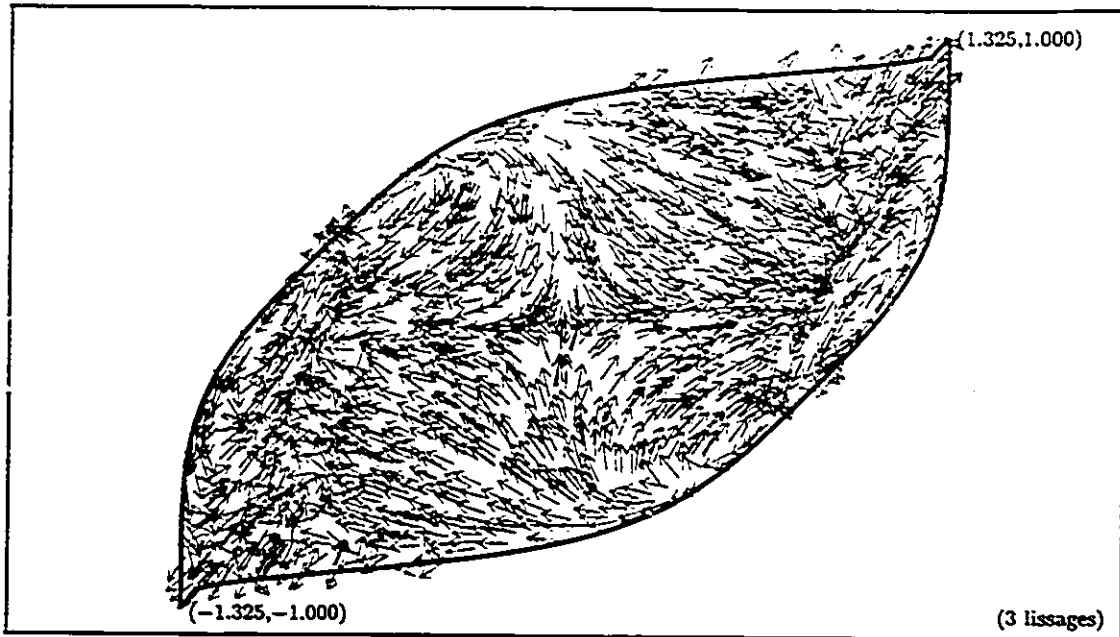


Figure 4.16: $\frac{\bar{J}^s(\bar{x})}{|\bar{J}^s(\bar{x})|}$ pour $\gamma = 25$

position des extrema des densités de probabilité stationnaires $P^s(\bar{x})$, on remarque qu'il se produit une transition de phase induite par le bruit lorsque γ passe de 5 à 25. Les résultats présentés ici ne permettent pas de déterminer exactement la valeur critique de γ , mais on peut estimer qu'elle se situe près de $\gamma = 10$.

En regardant la densité de courant $\bar{J}^s(\bar{x})$ pour $\gamma = 25$ (figures 4.16 et 4.17), on remarque que la condition frontière 4.3 est vérifiée. On note également qu'il est possible de déterminer une frontière passant par l'origine et séparant le domaine en deux espèces (figure 4.18). Cette frontière correspond à la variété stable du point de selle déterministe autour de celui-ci. Il semble également possible de calculer une autre frontière passant par l'origine et correspondant localement à la variété instable de ce même point de selle. Cependant, celle-ci se rapproche de la frontière du support sans tout à fait la rejoindre. Il est donc probable qu'elle ne permette pas de définir

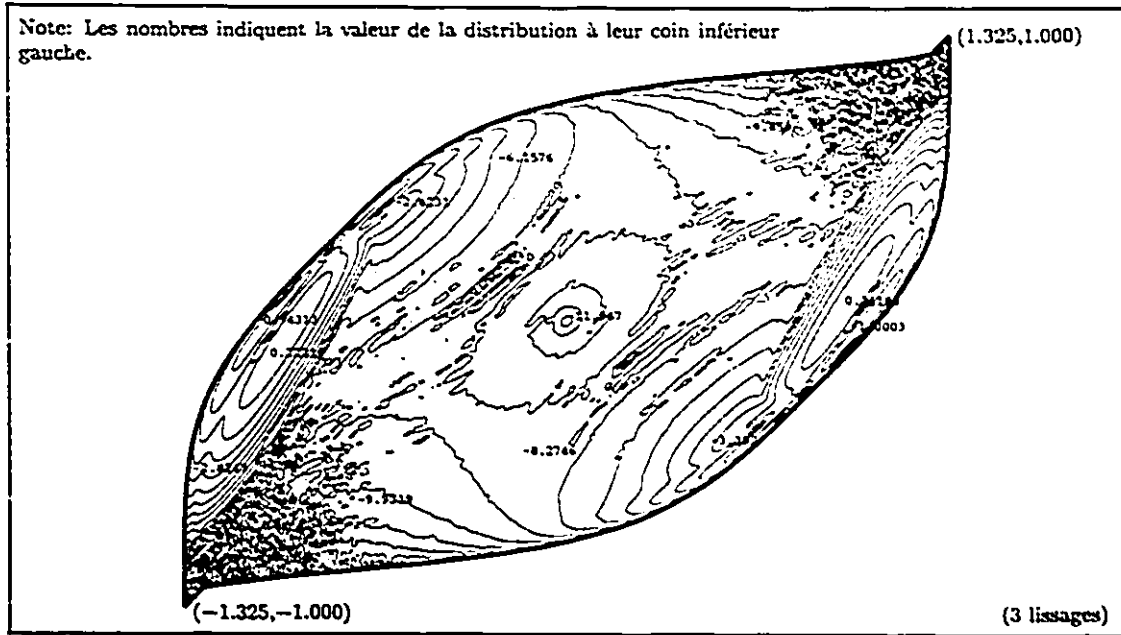


Figure 4.17: $\ln(|J^s(\bar{x})|)$ pour $\gamma = 25$

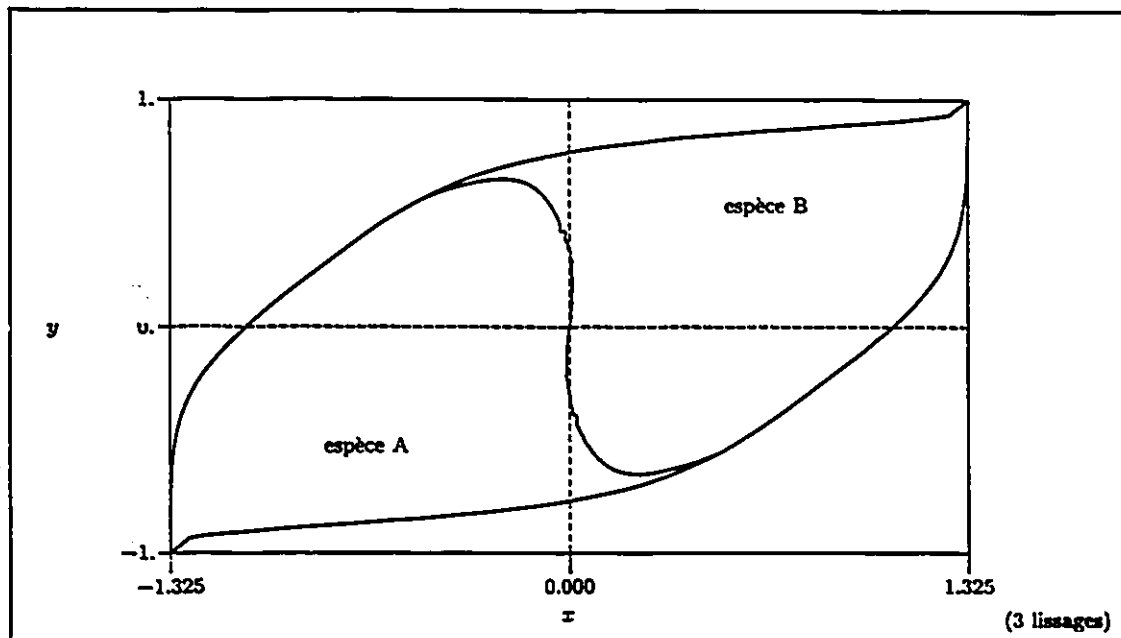


Figure 4.18: Ensemble des 2 espèces définies pour $\gamma = 25$

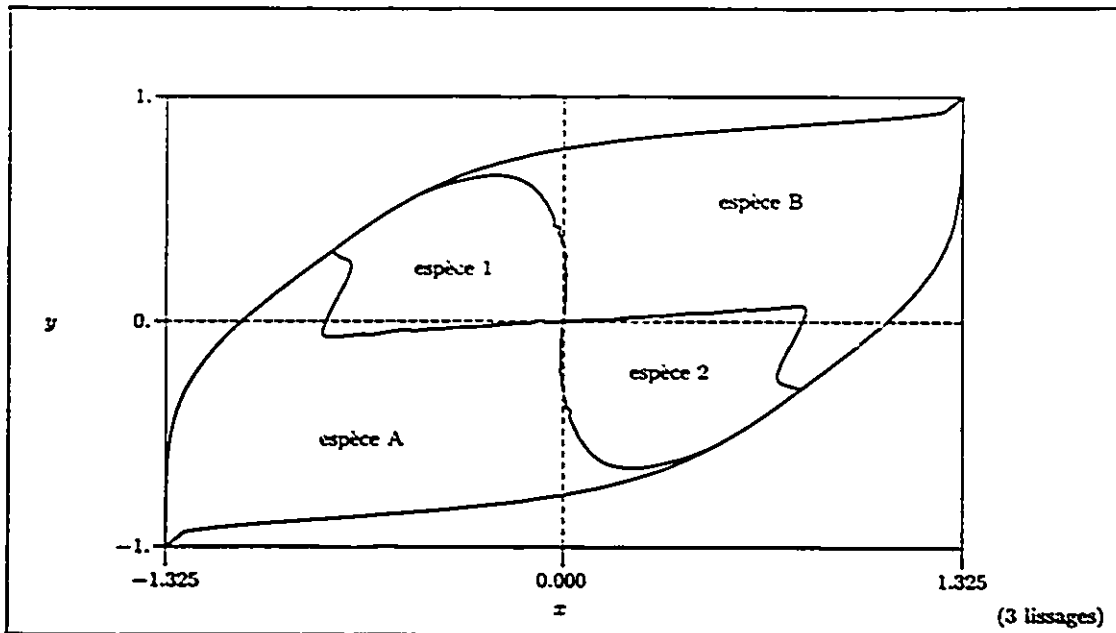


Figure 4.19: Ensemble des 4 espèces définies pour $\gamma = 25$

des espèces pour lesquelles une loi phénoménologique serait valide. On a tout de même choisi d'étudier cette possibilité, lui faisant rejoindre la frontière du support là où elle s'en rapproche le plus, de façon à définir quatre espèces (figure 4.19). Les simulations phénoménologiques et directes devraient permettre de déterminer si une partition est supérieure à l'autre.

Pour le cas où $\gamma = 10$, il a été impossible de calculer une frontière passant par l'origine et rejoignant la frontière du support (figure 4.20). Pour des raisons de symétrie, on ne peut donc pas définir deux espèces renfermant chacune un pic de densité de probabilité stationnaire. Il peut cependant être possible de définir d'autres espèces, toujours en utilisant le critère 4.3, pour lesquelles une loi phénoménologique serait valide. Cette avenue mériterait d'être étudiée plus en détails.

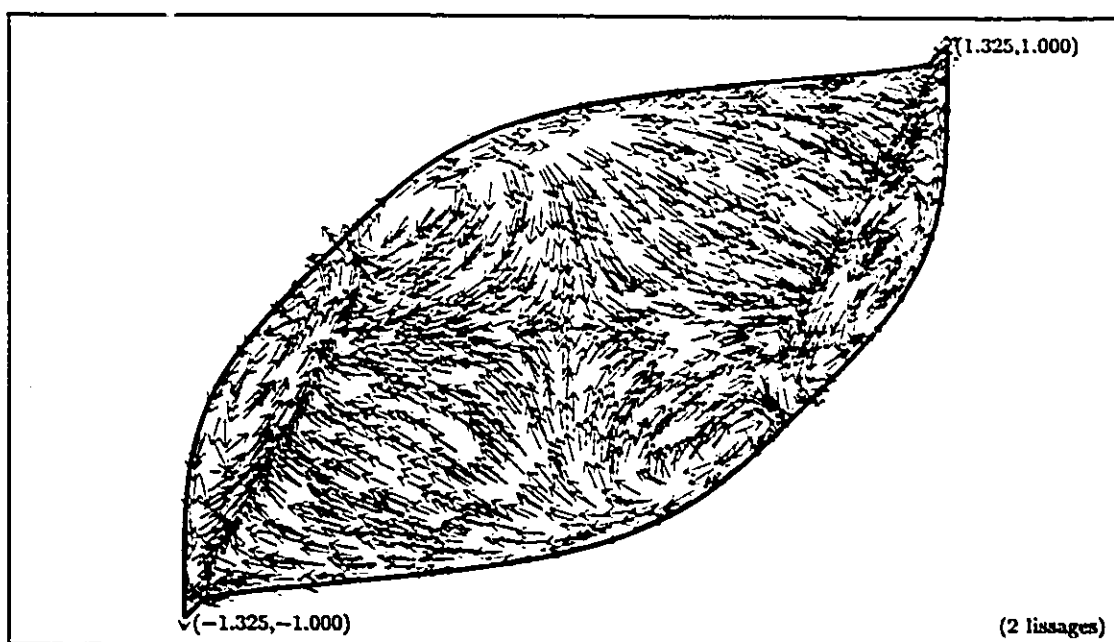


Figure 4.20: $\frac{\bar{J}^s(\bar{z})}{|J^s(\bar{z})|}$ pour $\gamma = 10$

Chapitre 5. Cinétique

5.1 Introduction

Les algorithmes utilisés pour étudier la cinétique ont été eux aussi conçus pour étudier des systèmes bivariés. L'évaluation de la fonction caractéristique constitue le seul élément qui nécessiterait un peu plus de travail afin de généraliser l'approche à des systèmes décrits par plus de deux variables d'état. Ainsi, bien que le concept utilisé soit applicable pour un nombre quelconque de variables, sa réalisation exigerait une réflexion plus approfondie.

5.2 Algorithmes

5.2.1 Simulation phénoménologique

Une simulation phénoménologique est certainement la première qui vient à l'esprit lorsqu'on désire évaluer le taux de transition entre deux espèces à l'aide d'une simulation. Il suffit de laisser évoluer un ensemble de réalisations du système à partir d'une espèce donnée et d'évaluer la population moyenne des espèces en fonction du temps. Il est par la suite possible d'ajuster ces résultats à la loi phénoménologique. Cependant pour des systèmes où une telle loi est valide, les transitions se produisent rarement, les trajectoires demeurant longtemps à l'intérieur d'une espèce avant d'atteindre sa frontière. Cette procédure peut donc être très inefficace. Elle peut cependant être utilisée afin de vérifier la précision de la méthode directe présentée

ci-après.

5.2.2 Simulation directe

Une meilleure approche consiste à utiliser l'algorithme suggéré par la formule 3.18. Toutes les trajectoires étudiées commencent alors sur une frontière entre espèces. Ce type de simulations est qualifié de "direct" puisqu'il considère directement les transitions entre espèces plutôt que d'attendre qu'elles se produisent. On s'attend à ce que cette approche soit de loin plus efficace que la précédente.

De plus, une simulation directe permet de calculer directement l'ensemble des taux de transition "lents" caractérisant la cinétique d'un système peu importe le nombre d'espèces. Il suffit simplement qu'il y ait une bonne séparation des échelles de temps entre les degrés de liberté "lents" et "rapides". Pour pouvoir faire de même à l'aide d'une simulation phénoménologique, il doit y avoir une bonne séparation d'échelles de temps entre toutes les transitions qu'on désire quantifier, en plus d'avec tous les degrés de liberté "rapides".

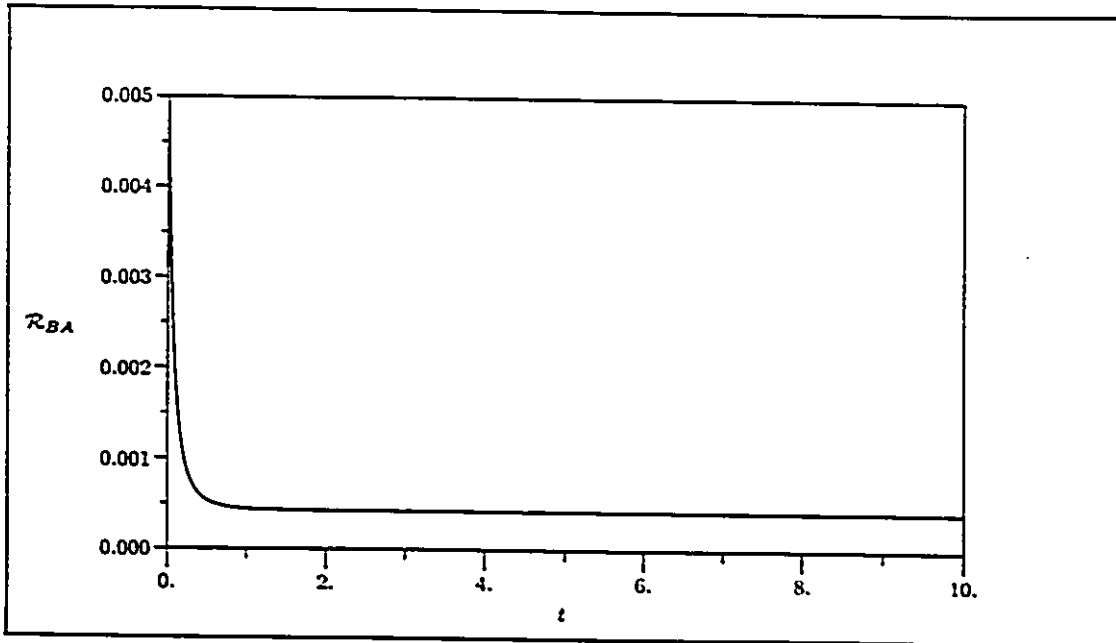
5.2.3 Fonctions caractéristiques

Dans chacune des deux simulations, le principal problème consiste à évaluer les fonctions caractéristiques, c'est-à-dire à déterminer si le système se trouve à l'intérieur des espèces considérées. Une méthode très générale permettant de résoudre ce problème consiste à compter combien de fois une demi-droite originant du point où se trouve le système coupe le polygone décrivant la frontière de l'espèce. Si le décompte est impair, le point est à l'intérieur, sinon il est à l'extérieur. La demi-droite peut être quelconque mais les calculs sont beaucoup plus simples si elle est parallèle à un des axes. Celle qu'on a choisi d'utiliser est parallèle à l'axe des x

et pointe vers les x positifs. Afin d'accélérer l'algorithme, relativement lent lorsque le polygone comporte un grand nombre de segments, la région est divisée par des droites équidistantes parallèles à l'axe y . Le calcul s'effectue alors en deux temps. On commence par déterminer dans quelle sous-région, décrite par un petit nombre de segments, pourrait se trouver le système. Par la suite, l'algorithme initial permet de déterminer si le système s'y situe réellement.

5.3 Résultats

Les simulations directes ne se sont pas avérées être une panacée. Ainsi, il existe des cas où une simulation phénoménologique est plus rapide. Les problèmes correspondant à ces deux types de simulations sont pourtant bien différents. Une simulation phénoménologique est limitée par le fait qu'on doit attendre que les transitions entre espèces, souvent rares, se produisent. De son côté, la faiblesse de la simulation directe provient de la soustraction $\langle \theta_{\beta}^r(\Delta t | \bar{x}, -\bar{\Delta}) \rangle - \langle \theta_{\beta}^r(\Delta t | \bar{x}, +\bar{\Delta}) \rangle$ que l'on retrouve dans l'équation 3.18. Plus cette différence est petite, plus le nombre de réalisations devant être effectuées pour avoir une précision raisonnable est élevé. Afin de calibrer la simulation directe, on explore un domaine de γ où les temps d'exécution des deux types de simulations sont raisonnables. Pour les régimes considérés, le temps d'exécution des simulations directes lorsque le support est divisé en quatre espèces est de loin supérieur à ce qu'il est pour deux espèces. Pour une cinétique à quatre espèces ($\gamma = 25$), on a donc dû se contenter de résultats préliminaires indiquant l'ordre de grandeur des taux de transition inter-espèces. Les résultats obtenus pour ce cas ne sont d'ailleurs pas suffisamment précis pour confirmer ou infirmer l'existence de plateaux pour les fonctions $\mathcal{R}_{\beta\alpha}(t)$. On a cependant étudié plus en

Figure 5.1: Simulation directe ($\gamma = 25$, 2 espèces)

détails la cinétique des populations lorsqu'on considère deux espèces. Les prochains paragraphes portent d'ailleurs exclusivement sur ce cas.

Tel que mentionné à la section 3.3, la présence ou l'absence d'un plateau lors du calcul de $\tau_{\beta\alpha}^{-1}$ à l'aide de l'équation 3.18 permet de déterminer la validité de l'équation phénoménologique 3.16. Ce critère permet de conclure que cette dernière est valide dans le cas où $\gamma = 25$ (figure 5.1). En plus, étant donné que l'échelle de temps τ_{mic} correspond au temps de vie des transients de la fonction $\mathcal{R}_{BA}(t)$, on observe que $\tau_{mic} \sim 10^{-1}$ pour ce cas. On note également que $\tau_{pop} \sim 10^3$. La présence d'une bonne séparation des échelles de temps est ainsi confirmée. Ceci constitue une vérification supplémentaire de la validité de la loi phénoménologique 3.16 pour le cas où $\gamma = 25$. L'ajustement des résultats d'une simulation phénoménologique à l'équation 3.16 corrobore également ce fait (figure 5.2). On voit donc qu'une description à deux

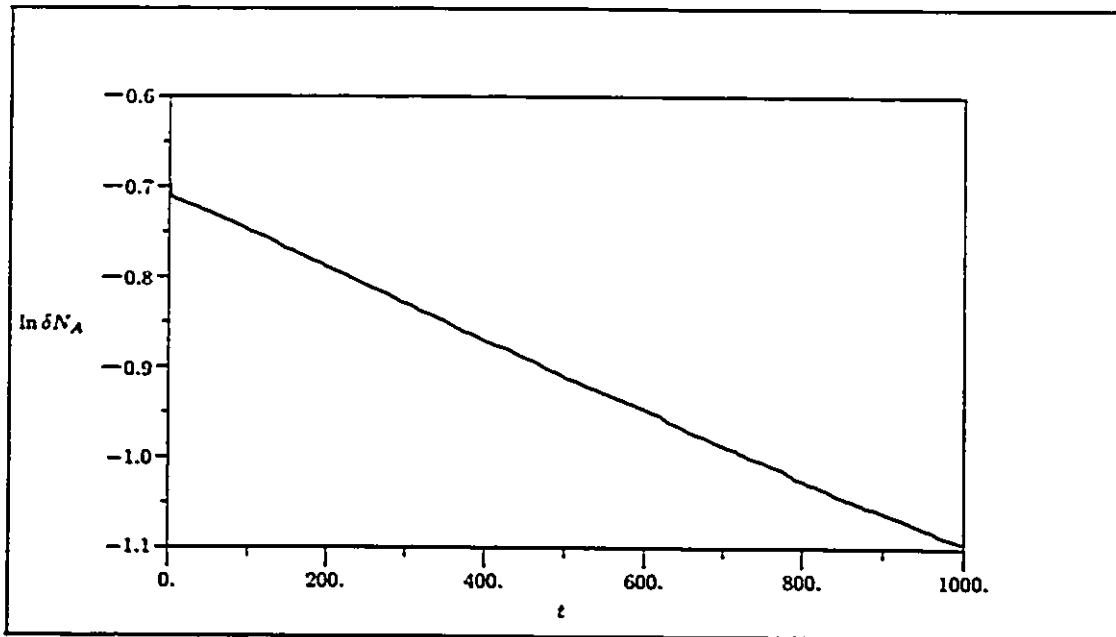


Figure 5.2: Simulation phénoménologique ($\gamma = 25$, 2 espèces)

espèces est satisfaisante pour ce cas. On atteint d'ailleurs la même conclusion pour les cas où $\gamma = 20$, 30 et 35. Les taux de transition obtenus grâce aux deux types de simulations sont compilés au tableau 5.1 et repris à la figure 5.3. Dans ce tableau, on présente également la population stationnaire η_A calculée en intégrant numériquement sur la région Ω_A la densité de probabilité stationnaire $P^s(\vec{x})$ obtenue grâce aux éléments finis. Le fait que celle-ci soit dans chaque cas très près de 0.5 tend à confirmer la validité du calcul des frontières inter-espèces. Tel que discuté plus loin, ce résultat ne peut cependant servir à qualifier la précision avec laquelle ces frontières ont été déterminées.

On s'aperçoit assez rapidement que les taux de transition calculés par les deux méthodes sont du même ordre de grandeur, bien qu'il y ait un facteur d'environ 2

γ	η_A	τ_{pop}^{-1}	
		<i>simulation directe</i>	<i>simulation phénoménologique</i>
20	0.4997	$(3.421 \pm 0.010) \times 10^{-3}$	$(1.55 \pm 0.06) \times 10^{-3}$
25	0.5001	$(8.405 \pm 0.017) \times 10^{-4}$	$(3.89 \pm 0.10) \times 10^{-4}$
30	0.5004	$(2.0966 \pm 0.0013) \times 10^{-4}$	$(9.66 \pm 0.19) \times 10^{-5}$
35	0.5024	$(5.841 \pm 0.006) \times 10^{-5}$	$(2.44 \pm 0.07) \times 10^{-5}$

Tableau 5.1: Taux de transition pour le système bivarié (2 espèces). Les incertitudes sont déterminées à l'aide d'une régression linéaire servant à ajuster aux équations 3.16 et 3.18 les résultats provenant des simulations. On évalue donc seulement l'incertitude de source statistique.

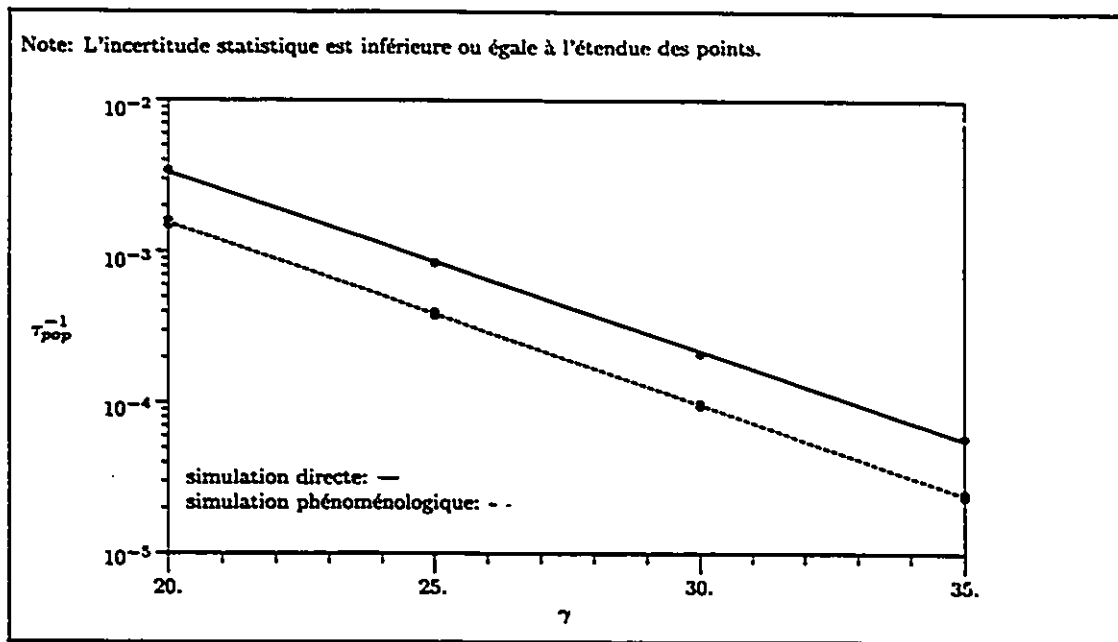


Figure 5.3: Taux de transition pour le système bivarié

les séparant. Ce résultat est très encourageant lorsqu'on considère le grand nombre de manipulations numériques impliquées dans le processus de détermination des taux de transition. Le résultat obtenu par une simulation phénoménologique dépend seulement de la position de la frontière entre les deux espèces. Puisque celle-ci est située relativement loin des pics de densité de probabilité stationnaire, on s'attend à ce qu'il soit relativement peu affecté par un positionnement imprécis de la frontière. Il en va tout autrement du taux de transition déterminé par une simulation directe. En examinant attentivement l'algorithme utilisé pour calculer la position des frontières entre espèces, on remarque qu'il exagère systématiquement la courbure de la frontière. Celle-ci aurait donc dû rejoindre la limite du support plus loin des maxima de densité de probabilité stationnaire. Puisque le terme à l'intérieur de l'intégrale 3.18 dépend de $P^s(\bar{x})$ et $Q^s(\bar{x})$ et que ces deux distributions varient rapidement près des extrémités de la frontière, cette simple erreur systématique pourrait bien expliquer la majeure partie de la différence entre les taux de transition obtenus grâce aux deux types de simulations. De plus, le calcul de la frontière inter-espèces étant effectué à partir de l'origine et le système étant symétrique par rapport à ce point, une telle déviation n'a aucune influence sur le calcul numérique des populations stationnaires. Le fait que les populations aient été numériquement évaluées comme étant très près de 0.5 ne peut donc pas servir à infirmer la possibilité que ce type d'erreur se soit produit.

La formule 3.18 apparaît donc comme valide. En effet, les deux types de simulations permettent d'obtenir des taux de transition qui sont du même ordre de grandeur. Les algorithmes utilisés pour effectuer les calculs intermédiaires doivent cependant être minutieusement mis au point. Cela vaut d'ailleurs également pour

une simulation phénoménologique. Bien que la position de la frontière n'ait probablement pas influencé outre mesure les résultats obtenus ici grâce à cette méthode, il pourrait en être tout autrement pour un autre système.

En considérant les taux de transition obtenus par l'entremise de simulations phénoménologiques, on voit que τ_{pop}^{-1} décroît exponentiellement lorsque γ augmente. De façon plus précise, on obtient:

$$\tau_{pop}^{-1} = 0.394 \exp(-0.277\gamma).$$

Semblablement, les simulations directes nous donnent:

$$\tau_{pop}^{-1} = 0.767 \exp(-0.272\gamma).$$

Il est intéressant de comparer les taux de transition obtenus pour la cinétique à deux espèces du système bivarié avec ceux obtenus pour le système en x considéré isolément (tableau 2.1). La figure 5.4 compare les taux de transition obtenus pour le système univarié en x avec ceux du système bivarié tels que calculés grâce aux simulations phénoménologiques. On remarque que la cinétique des populations pour le système bivarié semble être peu influencée par le système en y . Ce résultat est sensé puisque la frontière entre les espèces est située relativement près de la ligne $x = 0$ servant de frontière pour le système en x . Les espèces sont donc approximativement équivalentes dans les deux cas.

Finalement, un mot sur les résultats concernant la cinétique à quatre espèces. La simulation phénoménologique nous permet de voir que la loi phénoménologique 3.16 est valide (figure 5.5). De plus, on obtient comme taux de transition: $\tau_{pop}^{-1} = (3.9 \pm 0.2) \times 10^{-4}$. Ainsi, les populations évoluent à long terme de la même façon que lorsqu'on considère seulement deux espèces. Tout autre résultat aurait d'ailleurs pu

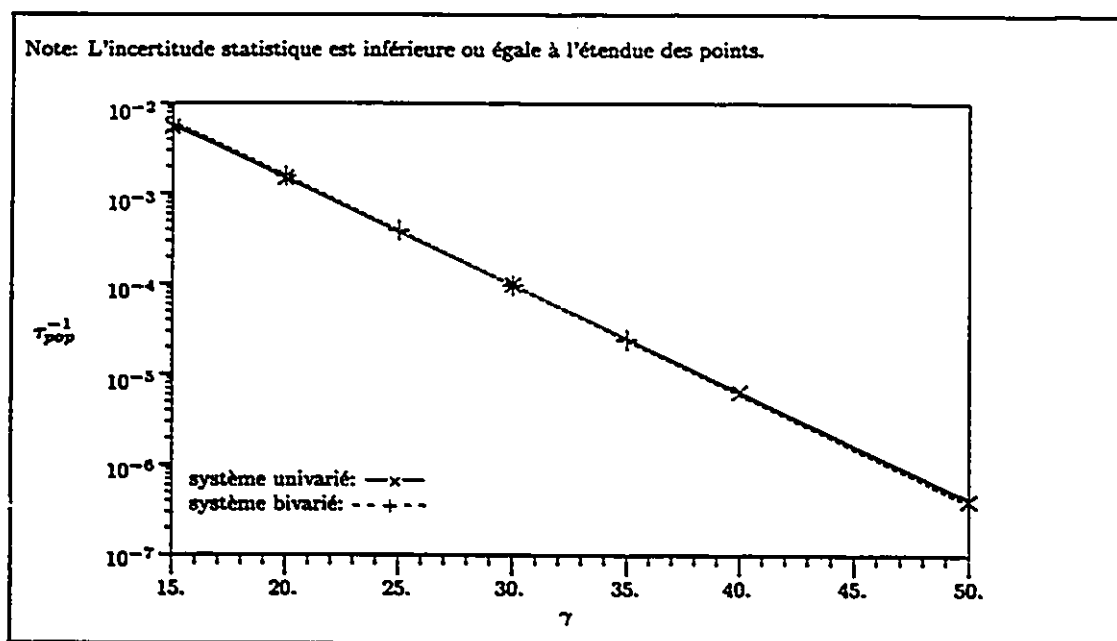


Figure 5.4: Comparaison entre les taux de transition du système bivarié (simulation phénoménologique) et du système univarié

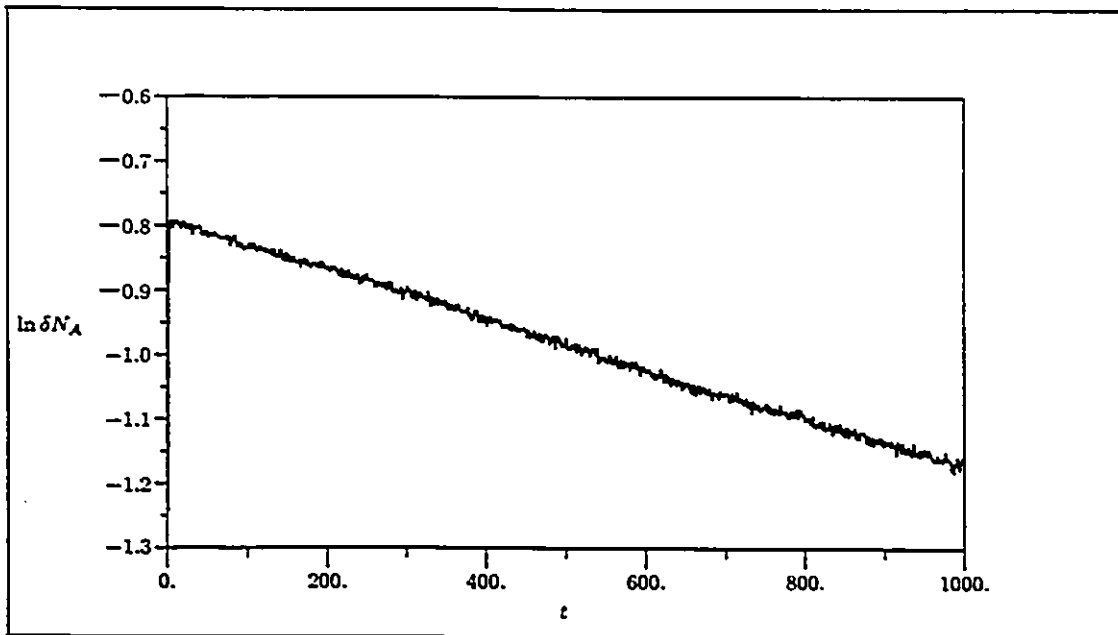


Figure 5.5: Simulation phénoménologique ($\gamma = 25$, 4 espèces)

être considéré comme suspect puisqu'on considère dans les deux cas un seul et même système. On peut conclure de ceci qu'il y a au moins trois échelles de temps présents dans ce système. Les degrés de liberté considérés comme rapides relaxent sur une échelle de temps égale ou inférieure à τ_{mic} . Il existe ensuite une échelle de temps τ_{pop} décrivant les variations de population à long terme. Celles-ci se produisent avec les quatre espèces regroupées en deux supra-espèces. Les échanges entre les membres d'un couple d'espèces se produisent sur une échelle de temps intermédiaire τ_{inter} . Le fait que les descriptions à deux et quatre espèces soient toutes les deux valides indique que ces trois échelles de temps sont bien séparées ($\tau_{pop} \gg \tau_{inter} \gg \tau_{mic}$). Une simulation directe doit permettre de déchiffrer les taux de transition reliant les quatre espèces. Cependant, des ressources informatiques limitées font en sorte qu'il est présentement difficile d'obtenir une précision suffisante. Les résultats

préliminaires ont permis d'obtenir un τ_{pop}^{-1} qui est du même ordre de grandeur que le taux de transition obtenu grâce à la simulation phénoménologique. Il est cependant nécessaire d'améliorer la précision de ce calcul avant d'en arriver à une conclusion. Il reste d'ailleurs des techniques d'optimisation de la simulation directe qui n'ont pas encore été explorées, notamment au chapitre du calcul du nombre de réalisations requis en chaque point de la frontière afin d'obtenir la précision désirée pour les taux de transition.

Chapitre 6. Conclusion

Dans le cadre de cette thèse, on a considéré de façon générale un système multivarié avec attracteurs multiples soumis à un bruit dichotomique symétrique markovien additif. On a obtenu une équation permettant d'évaluer à l'aide de simulations directes l'ensemble des taux de transition inter-espèces caractérisant la cinétique "lente" du système et apparaissant dans la loi phénoménologique 3.16. Ce faisant, on a précisé les conditions devant être remplies afin que cette loi phénoménologique soit valide, en plus d'obtenir un critère permettant de vérifier cette même validité en utilisant les résultats des simulations directes.

Les résultats obtenus pour le système décrit à la section 3.4 ont confirmé la validité de l'équation 3.18 pour les systèmes bivariés possédant deux points fixes stables. Ils ont aussi souligné l'importance d'une mise au point minutieuse des algorithmes utilisés. L'utilisation d'éléments finis d'un ordre supérieur et garantissant une plus grande continuité, e.g. C^1 , entre les éléments pourrait permettre de réduire les oscillations qui sont superposées aux densités de probabilité stationnaires. Dans un autre ordre d'idée, un algorithme de Runge-Kutta avec pas adaptatif permettrait de déterminer la position des frontières entre les espèces avec plus de précision qu'il n'ait possible d'atteindre avec une méthode d'Euler ayant un pas fixe.

Bien que le système bivarié étudié ici soit déterministiquement découplé, la forme du support est loin d'être triviale. De plus, la structure des densités de probabilité stationnaires démontre une grande complexité. Ceci illustre clairement toute la richesse qui peut émerger d'un système à première vue simple lorsque celui-ci est

soumis à du bruit.

Plusieurs pistes de recherches sont ouvertes. Les algorithmes utilisés ici permettent notamment d'étudier un potentiel du quatrième degré couplé à un oscillateur de Morse [1, 7]. Ce système est utilisé dans la modélisation de réactions d'isomérisation couplées avec un degré de rotation interne. Le bruit peut par exemple représenter les variations stochastiques d'un champ électrique auquel seraient soumis les isomères.

Cette algorithmes pourrait également permettre d'étudier des systèmes inertiels. Par exemple, soit un système dont l'évolution est donnée par:

$$\ddot{x} + \beta \dot{x} = F(x) + I(t)$$

où $I(t)$ représente un bruit dichotomique symétrique markovien. En définissant:

$$y = \dot{x},$$

on obtient:

$$\dot{y} = -\beta y + F(x) + I(t)$$

$$\dot{x} = y.$$

Si $I(t) \in \{-\Delta_y, +\Delta_y\}$, on a:

$$\dot{y} = -\beta y + F(x) \pm \Delta_y$$

$$\dot{x} = y \pm \Delta_x$$

où $\Delta_x = 0$. Ce type de système peut facilement être étudié par le type d'approche présenté dans cette étude.

La théorie présentée ici peut être utilisée afin d'étudier des systèmes comportant d'autres types d'attracteurs, notamment des cycles limites. Les algorithmes

déjà conçus pourraient être assez facilement généralisés à de tels systèmes bivariés. Il serait également possible de considérer des systèmes décrits par plus de deux variables d'états en utilisant toujours la même théorie.

Également, ce calcul pourrait être généralisé afin de considérer des bruits dichotomiques markoviens asymétriques, ainsi que multiplicatifs.

Appendice A. Équation d'évolution

Ce calcul est une simple généralisation de la dérivation pour un système univarié présentée dans [14]. On considère un système caractérisé par un vecteur d'état \vec{x} à n composantes soumis à un bruit dichotomique symétrique markovien additif $\vec{I}(t)$ et dont l'évolution est décrite par l'équation 3.1:

$$\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) + \vec{I}(t). \quad (\text{A.1})$$

Le bruit $\vec{I}(t)$ est quant à lui caractérisé par:

$$\begin{aligned} \vec{I}(t) &\in \{-\vec{\Delta}, +\vec{\Delta}\} \\ \langle \vec{I}(t) \rangle &= 0 \\ \langle \vec{I}(t) \cdot \vec{I}(t + \tau) \rangle &= |\vec{\Delta}|^2 \exp(-\gamma |\tau|) \end{aligned}$$

où $\gamma = 2/\tau_{cor}$, τ_{cor} étant le temps de corrélation du bruit.

Si l'état \vec{x} du système et la valeur du bruit $\vec{I}(t)$ son connus au temps t_o , il est possible de décrire statistiquement leur évolution pour les temps à venir sans se préoccuper de ce qui s'est passé avant t_o . En d'autres termes, le processus (\vec{x}, I) est markovien. Il est donc possible d'utiliser l'équation de Chapman-Kolmogorov afin d'étudier cette évolution:

$$p(\vec{x}, i, t + \tau | \vec{x}_o, i_o, t_o) = \sum_j \int_{\mathbb{R}^n} d^n y p(\vec{x}, i, t + \tau | \vec{y}, j, t) p(\vec{y}, j, t | \vec{x}_o, i_o, t_o) \quad (\text{A.2})$$

où $p(\vec{x}, i, t | \vec{x}_o, j, t_o)$ est définie comme étant la probabilité que le système soit dans l'état \vec{x} et que le bruit ait la valeur i au temps t , étant donné que le système était

dans l'état \bar{x}_o et que le bruit avait la valeur j au temps t_o . Soit $h(\bar{x})$, une fonction quelconque avec un support compact. En multipliant l'équation A.2 par $h(\bar{x})$ et en intégrant, on obtient:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\bar{x}) p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t + \tau | \bar{x}_o, i_o, t_o) \\ &= \sum_j \int_{\mathbb{R}^n} d^n y p(\bar{y}, j, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) \left[\int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\bar{x}) p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t + \tau | \bar{y}, j, t) \right] \end{aligned}$$

où on considère le cas $i = -\bar{\Delta}$. On soustrait $\int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\bar{x}) p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o)$ de chaque côté, on divise par τ et on prend la limite lorsque $\tau \rightarrow 0$, afin d'obtenir:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\bar{x}) \partial_t p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) \\ &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\{ \sum_j \int_{\mathbb{R}^n} d^n y p(\bar{y}, j, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) \left[\int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\bar{x}) p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t + \tau | \bar{y}, j, t) \right] \right. \\ & \quad \left. - \int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\bar{x}) p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Pour τ petit, il est possible d'approximer les probabilités de transition par des fonctions linéaires en τ . Ainsi, pour le cas où il n'y a pas de transition au cours de l'intervalle de temps τ ($-\bar{\Delta} \rightarrow -\bar{\Delta}$):

$$P_{-\bar{\Delta}, -\bar{\Delta}}(\tau) = 1 - \frac{\gamma}{2}\tau + \mathcal{O}(\tau^2)$$

où $P_{i,j}(\Delta t)$ est la probabilité que le bruit soit égal à j au début d'un intervalle de temps Δt et égal à i à la fin. Cette approximation découle directement du fait que la probabilité de transition est uniformément distribuée dans le temps pour le bruit dichotomique markovien. La probabilité qu'il y ait une transition unique ($+\bar{\Delta} \rightarrow -\bar{\Delta}$) est donnée par:

$$P_{-\bar{\Delta}, +\bar{\Delta}}(\tau) = \frac{\gamma}{2}\tau + \mathcal{O}(\tau^2).$$

À un ordre τ^2 près, tous les cas où il se produit plus d'une transition peuvent être négligés. L'évolution du système se déroulant de façon déterministe entre les transitions du bruit, on obtient pour le cas où il n'y a pas de transition:

$$\begin{aligned} p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t + \tau | \bar{y}, -\bar{\Delta}, t) \\ = \delta(\bar{x} - [\bar{y} + (\bar{F}(\bar{x}) - \bar{\Delta})\tau]) \left(1 - \frac{\gamma}{2}\tau\right) + \mathcal{O}(\tau^2). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Dans le cas où il y a une transition unique, on définit ν comme étant la fraction du temps τ qui s'est écoulée avant que la transition ne se produise. On a alors:

$$\begin{aligned} p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t + \tau | \bar{y}, \bar{\Delta}, t) \\ = \delta(\bar{x} - [\bar{y} + (\bar{F}(\bar{x}) + \bar{\Delta})\nu\tau + (\bar{F}(\bar{x}) - \bar{\Delta})(1 - \nu)\tau]) \frac{\gamma}{2}\tau + \mathcal{O}(\tau^2). \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

On insère les équations A.4 et A.5 dans l'équation A.3 et on intègre afin d'obtenir à un ordre τ^2 près:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\bar{x}) \partial_t p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) \\ = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\{ \int_{\mathbb{R}^n} d^n y p(\bar{y}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) h(\bar{y} + (\bar{F}(\bar{y}) - \bar{\Delta})\tau) \left(1 - \frac{\gamma}{2}\tau\right) \right. \\ + \int_{\mathbb{R}^n} d^n y p(\bar{y}, \bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) h(\bar{y} + (\bar{F}(\bar{y}) + \bar{\Delta})\nu\tau + (\bar{F}(\bar{y}) - \bar{\Delta})(1 - \nu)\tau) \frac{\gamma}{2}\tau \\ \left. - \int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\bar{x}) p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) \right\} \end{aligned}$$

En développant $h(\bar{x})$ en série de Taylor tout en négligeant encore une fois les termes d'ordre τ^2 et en prenant ensuite la limite lorsque τ tend vers 0, on obtient:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} d^n y h(\bar{x}) \partial_t p(\bar{x}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) \\ = \int_{\mathbb{R}^n} d^n y h(\bar{y}) \frac{\gamma}{2} [-p(\bar{y}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) + p(\bar{y}, \bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o)] \\ + \int_{\mathbb{R}^n} d^n y p(\bar{y}, -\bar{\Delta}, t | \bar{x}_o, i_o, t_o) \sum_{i=1}^n (F_{x_i}(\bar{y}) - \Delta_{x_i}) \partial_{y_i} h(\bar{y}). \end{aligned}$$

Puisque $h(\vec{x})$ possède un support compact. l'intégration par partie du dernier terme permet d'obtenir:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^n} d^n y h(\vec{x}) \partial_t p(\vec{x}, -\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o) \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} d^n x h(\vec{x}) \left\{ -\vec{\nabla} \cdot [(\bar{F}(\vec{x}) - \bar{\Delta}) p(\vec{x}, -\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o)] - \frac{\gamma}{2} p(\vec{x}, -\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o) \right. \\ & \quad \left. + \frac{\gamma}{2} p(\vec{x}, \bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o) \right\} \end{aligned}$$

où on a renommé \vec{y} , \vec{x} . Puisque $h(\vec{x})$ est arbitraire:

$$\begin{aligned} & \partial_t p(\vec{x}, -\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o) \\ &= -\vec{\nabla} \cdot [(\bar{F}(\vec{x}) - \bar{\Delta}) p(\vec{x}, -\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o)] - \frac{\gamma}{2} p(\vec{x}, -\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o) \\ & \quad + \frac{\gamma}{2} p(\vec{x}, \bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o). \end{aligned}$$

Similairement, on obtient:

$$\begin{aligned} & \partial_t p(\vec{x}, \bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o) \\ &= -\vec{\nabla} \cdot [(\bar{F}(\vec{x}) + \bar{\Delta}) p(\vec{x}, +\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o)] - \frac{\gamma}{2} p(\vec{x}, +\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o) \\ & \quad + \frac{\gamma}{2} p(\vec{x}, -\bar{\Delta}, t | \vec{x}_o, i_o, t_o). \end{aligned}$$

Ces deux dernières équations peuvent être réécrites sous la forme:

$$\partial_t \mathbf{p}(\vec{x}, t) = \mathbf{D} \mathbf{p}(\vec{x}, t) \tag{A.6}$$

où:

$$\mathbf{p}(\vec{x}, t) = \begin{bmatrix} p_+(\vec{x}, t) \\ p_-(\vec{x}, t) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} -\vec{\nabla} \cdot (\bar{F}(\vec{x}) + \bar{\Delta}) - \gamma/2 & \gamma/2 \\ \gamma/2 & -\vec{\nabla} \cdot (\bar{F}(\vec{x}) - \bar{\Delta}) - \gamma/2 \end{bmatrix}$$

et:

$$p_{\pm}(\vec{x}, t) = \sum_i \int_{\mathbb{R}^n} d^n x' p(\vec{x}, \pm \bar{\Delta}, t | \vec{x}', i, t_o).$$

Appendice B. Propagateurs projeté et non-projeté

Le calcul qui suit est tiré de [2]. Soit le propagateur $e^{\mathbf{D}t}$. Sa transformée de Laplace est calculée comme étant:

$$\mathcal{L}\{e^{\mathbf{D}t}\} = [s - \mathbf{D}]^{-1} \quad (\text{B.1})$$

On définit le projecteur \mathcal{P} ainsi que son projecteur complémentaire $\mathcal{Q} = \mathcal{I} - \mathcal{P}$, \mathcal{I} étant l'opérateur identité. On insère $\mathcal{P} + \mathcal{Q} = \mathcal{I}$ dans l'équation B.1:

$$\mathcal{L}\{e^{\mathbf{D}t}\} = [s - (\mathcal{P} + \mathcal{Q})\mathbf{D}]^{-1}$$

L'utilisation de l'identité:

$$A^{-1} - B^{-1} = A^{-1}(B - A)B^{-1}$$

avec $A = s - (\mathcal{P} + \mathcal{Q})\mathbf{D}$ et $B = s - \mathcal{Q}\mathbf{D}$ donne:

$$[s - \mathbf{D}]^{-1} - [s - \mathcal{Q}\mathbf{D}]^{-1} = [s - \mathbf{D}]^{-1}\mathcal{P}\mathbf{D}[s - \mathcal{Q}\mathbf{D}]^{-1}.$$

Une inversion de Laplace nous permet finalement d'obtenir une relation entre le propagateur projeté $e^{\mathcal{Q}\mathbf{D}t}$ et le propagateur non-projeté $e^{\mathbf{D}t}$:

$$e^{\mathbf{D}t} - e^{\mathcal{Q}\mathbf{D}t} = \int_0^t d\sigma e^{\mathbf{D}(t-\sigma)}\mathcal{P}\mathbf{D}e^{\mathcal{Q}\mathbf{D}\sigma}.$$

Appendice C. Gradient d'une fonction caractéristique

On considère l'intégrale Ψ :

$$\Psi = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \bar{\nabla} \theta_\alpha(\bar{x}) \cdot A(\bar{x}) \quad (\text{C.1})$$

où $A(\bar{x})$ est une fonction quelconque et $\theta_\alpha(\bar{x})$, la fonction caractéristique de l'espèce α :

$$\theta_\alpha(\bar{x}) \equiv \begin{cases} 1 & \text{si } \bar{x} \in \Omega_\alpha, \bar{x} \notin \partial\Omega_\alpha \\ 1 & \text{si } \bar{x} \in \partial\Omega_\alpha^i \\ 1/2 & \text{si } \bar{x} \in \partial\Omega_\alpha^e \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases}$$

Il est clair que $\bar{\nabla} \theta_\alpha(\bar{x})$ est nul partout sauf où $\theta_\alpha(\bar{x})$ est discontinue, c'est à dire sur la frontière $\partial\Omega_\alpha$ de l'espèce Ω_α . Cette discontinuité n'est pas exactement la même sur les frontières entre espèces (où $\theta_\alpha(\bar{x}) = 1/2$) que sur la frontière du support (où $\theta_\alpha(\bar{x}) = 1$). Cependant, cela ne change rien à la discussion qui suit. On peut donc ainsi approximer $\theta_\alpha(\bar{x})$ par $\theta'_\alpha(\bar{x})$:

$$\theta'_\alpha(\bar{x}) \equiv \begin{cases} 1 & \text{si } \bar{x} \in \Omega_\alpha, \bar{x} \notin \partial\Omega_\alpha \\ 1/2 & \text{si } \bar{x} \in \partial\Omega_\alpha \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases}$$

La discontinuité de la fonction $\theta'_\alpha(\bar{x})$ et la position de la frontière peuvent être dissociées l'une de l'autre:

$$\theta'_\alpha(\bar{x}) = H(f(\bar{x}))$$

où $H(x)$ est la fonction saut de Heavyside:

$$H(x) \equiv \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1/2 & \text{si } x = 0 \\ 1 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

et $f(\vec{x})$ est une fonction continue telle que:

$$f(\vec{x}) \begin{cases} > 0 & \text{si } \vec{x} \in \Omega_\alpha, \vec{x} \notin \partial\Omega_\alpha \\ = 0 & \text{si } \vec{x} \in \partial\Omega_\alpha \\ < 0 & \text{autrement.} \end{cases}$$

L'équation C.1 peut alors s'exprimer sous la forme:

$$\Psi = \int_{\mathfrak{R}^n} d^n x \vec{\nabla} f(\vec{x}) \cdot A(\vec{x}) \delta(f(\vec{x})). \quad (\text{C.2})$$

On partitionne l'espace \mathfrak{R}^n en régions disjointes Ω^k telles que pour chacune d'entre elles on puisse choisir une coordonnée x^{ki} par rapport à laquelle $f(\vec{x})$ n'a que des zéros simples. En d'autres mots, dans chaque régions Ω^k , $\partial_{x^{ki}} f(\vec{x}) \neq 0$ à chaque point où $f(\vec{x}) = 0$. On peut alors sortir la fonction $f(\vec{x})$ du delta de Dirac dans l'équation C.2:

$$\Psi = \sum_{jk} \int_{\Omega^k} d^n x \vec{\nabla} f(\vec{x}) \cdot A(\vec{x}) \frac{\delta(x - x_{oj}^{ki})}{|\partial_{x^{ki}} f(x_{oj}^{ki})|}$$

La somme sur k est effectuée sur les régions disjointes Ω^k et celle sur j , sur les zéros simples x_o^{ki} de $f(\vec{x})$ par rapport à la dimension x^{ki} à l'intérieur de la région Ω^k . En intégrant dans chaque région sur la dimension x^{ki} , on obtient:

$$\Psi = \sum_{jk} \int_{\Omega^k |_{f(x)=0}} d^{n-1} x \vec{\nabla} f(\vec{x}) \cdot A(\vec{x}) \frac{1}{|\partial_{x^{ki}} f(x_{oj}^{ki})|}$$

où dans chaque région Ω^k , l'intégrale est faite sur les $n - 1$ dimensions excluant x^{ki} , cette dernière étant déterminée par les $n - 1$ autres grâce à l'équation $f(\vec{x}) = 0$.

À un point quelconque \vec{x}_o sur la frontière $\partial\Omega_\alpha$, le vecteur unitaire $\hat{N}_{\partial\Omega_\alpha}$ perpendiculaire à celle-ci et pointant vers l'extérieur de la région Ω_α est donnée par:

$$\hat{N}_{\partial\Omega_\alpha} = -\frac{\bar{\nabla}f(\vec{x}_o)}{|\bar{\nabla}f(\vec{x}_o)|}.$$

On obtient ainsi:

$$\Psi = -\sum_{jk} \int_{\Omega^k|_{f(\vec{x})=0}} d^{n-1}x \hat{N}_{\partial\Omega_\alpha} \cdot A(\vec{x}) \left| \frac{\bar{\nabla}f(\vec{x}_o)}{\partial_{x^{ki}}f(x_o^{ki})} \right|$$

Il peut être possible d'effectuer un changement de variables $\vec{x} \rightarrow \vec{x}'$, où \vec{x}' est un système de coordonnées à $n-1$ dimensions permettant de déterminer uniquement chaque point de la frontière. On a alors plus besoin de sommer explicitement sur les j zéros simples de $f(\vec{x})$ puisque le nouveau système de coordonnées permet de les distinguer. On obtient ainsi:

$$\Psi = -\sum_k \int_{\partial\Omega_\alpha \cap \Omega^k} d^{n-1}x' \hat{N}_{\partial\Omega_\alpha} \cdot A(\vec{x}') \left| \frac{\bar{\nabla}f(\vec{x}_o)}{\partial_{x^{ki}}f(x_o^{ki})} \right| \frac{\partial_k(\vec{x})}{\partial(\vec{x}')}$$

où $\frac{\partial_k(\vec{x})}{\partial(\vec{x}')}$ est le Jacobien de la transformation permettant de passer du système de coordonnées composé des $n-1$ coordonnées de \vec{x} excluant x^{ki} au système de coordonnées \vec{x}' . On définit la quantité $g(\vec{x}')$:

$$g(\vec{x}') = \left| \frac{\bar{\nabla}f(\vec{x}_o)}{\partial_{x^{ki}}f(x_o^{ki})} \right| \frac{\partial_k(\vec{x})}{\partial(\vec{x}')}, \vec{x}' \in \Omega^k \quad (\text{C.3})$$

Il est alors possible d'écrire:

$$\Psi = -\int_{\partial\Omega_\alpha} d^{n-1}x' g(\vec{x}') \hat{N}_{\partial\Omega_\alpha} \cdot A(\vec{x}') \quad (\text{C.4})$$

Lorsqu'on considère l'intégrale C.1 dans un espace à deux dimensions, il est très avantageux de paramétriser la frontière d'une espèce (soit une ligne) par sa longueur. Dans un tel cas, $g(\vec{x}') = 1$. On obtient donc:

$$\Psi = -\int_{\partial\Omega_\alpha} ds \hat{N}_{\partial\Omega_\alpha} \cdot A(\vec{x}') \quad (\text{C.5})$$

Appendice D. Propagateur de Heisenberg

Ce calcul suit une procédure inspirée de ce qu'on retrouve dans [2]. Soit $A(\bar{x}, k\bar{\Delta})$, une variable dynamique définie par l'état du système \bar{x} et la valeur du bruit $k\bar{\Delta}$, où $k = \pm$. Sa moyenne au temps t sur un ensemble de réalisations et sur les conditions initiales peut être calculée de deux façons différentes, mais équivalentes ($i = \pm$):

$$\langle A(\bar{x}, k\bar{\Delta}) \rangle_t = \sum_i \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \langle A^r(t_o | \bar{x}, i\bar{\Delta}, t_o) \rangle p_i(\bar{x}, t) \quad (D.1)$$

$$= \sum_i \int_{\mathbb{R}^n} d^n x p_i(\bar{x}, t_o) \langle A^r(t | \bar{x}, i\bar{\Delta}, t_o) \rangle \quad (D.2)$$

où $p_i(\bar{x}, t)$ est définie comme étant la probabilité que le système soit au point \bar{x} et que le bruit ait la valeur $i\bar{\Delta}$ au temps t , et $A^r(t | \bar{x}, i\bar{\Delta}, t_o)$, la valeur de la variable dynamique A au temps t pour une réalisation initiée au temps t_o avec le système au point \bar{x} et le bruit égal à $i\bar{\Delta}$. L'opérateur $\langle \dots \rangle$ représente une moyenne sur les réalisations, alors que l'opérateur $\langle \dots \rangle_t$ désigne une moyenne effectuée au temps t sur les réalisations et l'état initial.

Dans la première équation, c'est la densité de probabilité qui évolue, alors que dans la seconde, c'est la moyenne sur les réalisations de la variable dynamique $A^r(t | \bar{x}, i\bar{\Delta}, t_o)$. Ces deux équations correspondent donc respectivement aux formalismes de Schrödinger et de Heisenberg. À partir de l'équation D.1, on obtient:

$$\begin{aligned} \langle A(\bar{x}, k\bar{\Delta}) \rangle_t &= \sum_{ij} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \langle A^r(t_o | \bar{x}, i\bar{\Delta}, t_o) \rangle (e^{D^t})_{ij} p_j(\bar{x}, t_o) \\ &= \sum_{ij} \int_{\mathbb{R}^n} d^n x p_j(\bar{x}, t_o) (e^{D^t})_{ji} \langle A^r(t_o | \bar{x}, i\bar{\Delta}, t_o) \rangle \end{aligned} \quad (D.3)$$

où $e^{\mathbf{D}t}$ est le propagateur de $p_i(\vec{x}, t)$, c'est à dire le propagateur de Schrödinger, et \mathbf{D}^\dagger , l'opérateur adjoint de \mathbf{D} .

Les densités de probabilité initiales étant arbitraires, les équations D.2 et D.3 impliquent que $e^{\mathbf{D}^\dagger t}$ est le propagateur de la moyenne $\langle A^r(t|\vec{x}, i\vec{\Delta}, t_o) \rangle$:

$$\langle A^r(t|\vec{x}, i\vec{\Delta}, t_o) \rangle = \sum_j \left(e^{\mathbf{D}^\dagger t} \right)_{ij} \langle A^r(t_o|\vec{x}, j\vec{\Delta}, t_o) \rangle$$

Cette dernière équation peut être réécrite sous la forme:

$$\langle A^r(t|\vec{x}, t_o) \rangle = e^{\mathbf{D}^\dagger t} \langle A^r(t_o|\vec{x}, t_o) \rangle$$

où:

$$A^r(t|\vec{x}, t_o) = \begin{bmatrix} A^r(t|\vec{x}, +\Delta, t_o) \\ A^r(t|\vec{x}, -\Delta, t_o) \end{bmatrix}.$$

On voit alors que \mathbf{D}^\dagger est l'opérateur d'évolution de la moyenne $\langle A^r(t|\vec{x}, t_o) \rangle$:

$$\partial_t \langle A^r(t|\vec{x}, t_o) \rangle = \mathbf{D}^\dagger \langle A^r(t|\vec{x}, t_o) \rangle.$$

Références

- [1] Sanjaya Baratham, Ivan L'Heureux, and Raymond Kapral. Reactive dynamics in a deterministic thermal bath. *Journal of Chemical Physics*, 91:5602–5612, 1989.
- [2] Bruce J. Berne. Projection operator techniques in the theory of fluctuations. In Bruce J. Berne, editor, *Statistical Mechanics, Part B: Time-Dependant Processes*, chapter 5, pages 233–257. Plenum Press, New York, 1977.
- [3] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, 94:511–525, 1954.
- [4] C. M. Bowden, M. Clifton, and H. R. Robb. *Optical Bistability*. Plenum, New York, 1982.
- [5] Graham F. Carey and J. Tinsley Oden. *Finite Elements: A Second Course*, volume II of *The Texas Finite Element Series*. Prentice-Hall Canada Inc., Toronto, 1983.
- [6] David Chandler. Statistical mechanics of isomerization dynamics in liquids and the transition state approximation. *Journal of Chemical Physics*, 68:2959–2970, 1978.

- [7] Nelson De Leon and B. J. Berne. Intramolecular rate process: Isomerization dynamics and the transition to chaos. *Journal of Chemical Physics*, 75:3495-3510, 1981.
- [8] Gouri Dhatt et Gilbert Touzot. *Une présentation de la méthode des éléments finis*. Les Presses de l'Université Laval, Québec, 1981.
- [9] Helena du Toit et Pascale Paté. *Guide n° 1: Introduction à MODULEF*. INRIA, France.
- [10] R. Field and M. Burger, editors. *Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems*. Wiley, New York, 1985.
- [11] P. L. George. *Guide n° 3: Construction et modification de maillages*. INRIA, France.
- [12] P. L. George, A. Perronnet, et M. Vidrascu. *Brochure 95: Intégration d'un nouvel élément fini. Création d'une bibliothèque d'éléments finis*. INRIA, France.
- [13] P. L. George et E. Saltel. *Guide n° 6: Post-traitements et graphiques*. INRIA, France.
- [14] Werner Horsthemke and René Lefever. *Noise-Induced Transitions: Theory and Applications in Physics, Chemistry, and Biology*, volume 15 of *Springer Series in Synergetics*. Springer-Verlag, New York, 1984.
- [15] P. Joly et M. Vidrascu. *Guide n° 5: Résolution des systèmes linéaires*. INRIA, France.
- [16] P. L. George et P. Laug. *Guide n° 2: Norme d'utilisation et de programmation*. INRIA, France.

- [17] Ivan L'Heureux. Dichotomous noise-induced transitions in a bistable interference filter. *Physics Letters A*, 171:204-210, 1992.
- [18] Ivan L'Heureux. Reaction rate kernel for dichotomous noise-induced transitions in bistable systems. *Physical Review E*, 51:2787-2798, 1995.
- [19] Ivan L'Heureux and Raymond Kapral. Transition rates in a bistable system driven by external dichotomous noise. *Journal of Chemical Physics*, 88:7468-7477, 1988.
- [20] Ivan L'Heureux and Raymond Kapral. Direct simulation of dichotomous noise-induced transitions in a bistable system. *Journal of Chemical Physics*, 90:2453-2459, 1989.
- [21] Ivan L'Heureux and Raymond Kapral. White noise induced transitions between a limit cycle and a fixed point. *Physics Letters A*, 136:472-476, 1989.
- [22] Ivan L'Heureux, Raymond Kapral, and Kedma Bar-Eli. Noise-induced transitions in an excitable system. *Journal of Chemical Physics*, 91:4285-4298, 1989.
- [23] F. Moss and P.V.E. McClintock, editors. *Noise in Nonlinear Dynamical Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [24] P. Paté et M. Vidrascu. *Guide n° 4: Interpolation - Création des tableaux élémentaires*. INRIA, France.
- [25] Josep M. Porrà, Jaume Masoliver, Katja Lindenberg, Ivan L'Heureux, and Raymond Kapral. Bistability driven by dichotomous noise: A comment. *Physical Review A*, 45:6092-6094, 1992.

- [26] A. T. Winfree. *The Geometry of Biological Time*. Springer, New York, 1980.
- [27] Xiao-Guang Wu and Raymond Kapral. Projected dynamics: Analysis of a chemical reaction model. *Journal of Chemical Physics*, 91:5528-5543, 1989.
- [28] Xiao-Guang Wu and Ivan L'Heureux. Projected dynamics for fast barrier-crossing processes with BGK kinetics. *Chemical Physics Letters*, 191:463-468, 1992.
- [29] Xiao-Guang Wu, Ivan L'Heureux, and Raymond Kapral. Projected dynamics for BGK reaction kinetics. *Chemical Physics Letters*, 176:242-248, 1991.
- [30] O. C. Zienkiewicz and K. Morgan. *Finite Elements and Approximation*. John Wiley & Sons, Inc., Toronto, 1983.