

Echantillonnage et métastabilité

Tony LELIEVRE, CERMICS, Ecole des Ponts - IPP - Champs sur Marne

Pierre MONMARCHE, LJLL et LCT, Sorbonne Université - Paris

L'échantillonnage efficace de mesures de probabilité est au cœur de nombreux problèmes pratiques, notamment en statistique (inférence bayésienne, quantification d'incertitude, fiabilité) et en physique computationnelle (simulation moléculaire et applications en chimie, biologie ou sciences des matériaux). Ces mesures de probabilité sont typiquement définies sur des espaces de grande dimension, voire sur des espaces de dimension infinie lorsqu'il s'agit d'échantillonner des trajectoires aléatoires, ce qui constitue une question fondamentale en dynamique moléculaire. Au-delà des défis liés à la dimension des objets aléatoires, des difficultés numériques redoutables apparaissent lorsque les événements d'intérêt sont rares, et que la distribution cible est multi-modale ou fortement anisotrope.

De nombreuses pistes sont actuellement explorées par les mathématiciens pour analyser ces problèmes et proposer de nouveaux algorithmes efficaces. Sur le plan théorique, on peut citer l'interprétation d'algorithmes comme des flots gradients, l'analyse de la métastabilité par les distributions quasi-stationnaires, l'étude des schémas de discrétisation pour les équations de Langevin avec potentiels singuliers, le comportement en temps long des modèles cinétiques,... Sur le plan algorithmique, des avancées récentes ont été réalisées dans plusieurs directions : l'introduction de processus de saut, les méthodes de splitting ou d'importance sampling adaptatives, les méthodes génératives en apprentissage automatique, l'utilisation de réseaux de neurones pour apprendre des fonctions d'importance ou des variables collectives, l'échantillonnage de mesures sur des sous-variétés,...

Dans ce mini-symposium, nous souhaitons réunir des chercheurs de ce domaine afin d'échanger sur les avancées récentes, tant sur les aspects théoriques (analyse de la métastabilité, efficacité des algorithmes : vitesse de convergence, variance asymptotique, etc.) que sur des questions plus appliquées (développement de nouveaux algorithmes, couplage avec des méthodes d'apprentissage, etc.). Nous proposons d'organiser deux sessions de 2h sur ce thème, avec à chaque fois un chercheur confirmé et trois jeunes chercheurs en fin de thèse ou en post-doctorat.

Les orateurs pressentis sont listés ci-dessous.

Chercheurs permanents :

- Marylou Gabrié
- Anna Korba

ou si elles ne sont pas disponibles : Boris Nectoux, Mouad Ramil, Julien Reygner, Mathias Rousset.

Chercheurs juniors :

- Noé Blassel
- Nicolaï Gouraud
- Tim Johnston
- Lucas Journal
- Lionel Riou-Durand
- Oliver Tough

ou si ils ne sont pas disponibles : Pierre Le Bris, Régis Santet.