

Echantillonnage préférentiel dynamique appliqué à la formule de Green–Kubo

Raphael GASTALDELLO, CNRS, CERMICS, Inria - Paris, Champs-sur-Marne

Gabriel STOLTZ, CERMICS, Inria - Champs-sur-Marne, Paris

Urbain VAES, Inria, CERMICS - Paris, Champs-sur-Marne

La physique statistique numérique a pour but de calculer les propriétés macroscopiques de la matière à partir de modèles microscopiques. Un cas complexe concerne les coefficients de transport, qui quantifient la réponse d'un système à une perturbation externe. Ici, nous nous intéressons aux approches basées sur la formule de Green–Kubo, d'après laquelle les coefficients de transport peuvent s'exprimer comme l'intégrale en temps d'une fonction de corrélation :

$$\rho = \int_0^{+\infty} \mathbb{E}_\mu [R(q_t)S(q_0)] dt. \quad (1)$$

Nous considérerons R et S deux observables suffisamment régulières. L'utilisation d'une telle méthode, pour le calcul de coefficients de transport, nécessite néanmoins d'appliquer des méthodes de réduction de variance. En effet, la variance de l'estimateur numérique standard de la formule (1), basé sur une troncature de l'intégrale en temps et sur une méthode de Monte-Carlo, est proportionnelle au temps d'intégration. Nous considérons une approche d'échantillonnage d'importance au niveau des trajectoires, fondée sur le théorème de Girsanov. Ce choix est inspiré par des résultats récents obtenus par des chimistes qui utilisent le théorème de Girsanov pour le calcul d'autocorrélations liées à des protéines, voir par exemple [1, 2]. Pour décrire plus précisément l'approche étudiée, nous partons de la dynamique stochastique suivante

$$dq_t = b(q_t) dt + \sigma(q_t) dW_t, \quad (2)$$

avec b et σ des fonctions supposées $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{T}^d)$. La dynamique (2) est biaisée par l'ajout d'une perturbation u

$$dq_t^\alpha = b(q_t^\alpha) dt + \alpha \sigma(q_t^\alpha) u(q_t^\alpha) dt + \sigma(q_t^\alpha) dW_t. \quad (3)$$

Cette modification, au travers du théorème de Girsanov, permet d'obtenir un nouveau estimateur non biaisé de ρ dépendant de α . Le but est de trouver et quantifier la valeur de α qui permet de minimiser de manière optimale la variance. Nous montrons dans [3] l'existence et l'unicité d'une telle valeur de α et nous donnons des estimées quantitatives de la réduction de variance optimale dans le régime asymptotique en temps long.

- [1] L. Donati, C. Hartmann, B. G. Keller. *Girsanov reweighting for path ensembles and Markov state models*. Journal of Chemical Physics, **146(24)**, 2017.
- [2] L. Donati, C. Hartmann, B. G. Keller. *Girsanov reweighting for metadynamics simulations*. The Journal of Chemical Physics, **149(7)**, 2018.
- [3] R. Gastaldello, G. Stoltz, U. Vaes. *Dynamical reweighting for estimation of fluctuation formulas*. En préparation.