

Optimisation des échelles de temps pour l'échantillonnage accéléré de dynamiques métastables

Noé BLASSEL, CERMICS - Champs-sur-Marne

Tony LELIÈVRE, CERMICS - Champs-sur-Marne

Gabriel STOLTZ, CERMICS - Champs-sur-Marne

On travaille sur la dynamique réversible dans \mathbb{R}^d :

$$dX_t = -a(X_t)\nabla V(X_t) dt + \frac{1}{\beta}\operatorname{div}a(X_t) dt + \sqrt{\frac{2}{\beta}}a^{1/2}(X_t)dW_t, \quad (1)$$

qui modélise le mouvement d'un système moléculaire à température $1/\beta$, sous l'action d'un potentiel V , en présence d'un champ de diffusion inhomogène a . Cette dynamique est en pratique métastable, ce qui pose un réel problème pour l'échantillonnage de longues trajectoires, essentielles pour les applications de ce modèle, notamment en biologie.

Des méthodes comme l'algorithme Parallel Replica [3] permettent néanmoins d'accélérer sans biais l'échantillonnage des trajectoires, étant donné des domaines métastables $\Omega \subset \mathbb{R}^d$.

En cherchant à maximiser l'efficacité de cette méthode par rapport à la définition des domaines Ω , on est naturellement amené à maximiser le rapport des échelles de temps métastables

$$N^*(\Omega) = \frac{\lambda_2(\Omega) - \lambda_1(\Omega)}{\lambda_1(\Omega)} = \frac{\text{Taux de convergence vers l'équilibre local}}{\text{Taux de sortie métastable}} \quad (2)$$

où $-\lambda_k(\Omega)$ est la k -ème valeur propre du générateur

$$\mathcal{L} = \frac{e^{\beta V}}{\beta}\operatorname{div}(e^{-\beta V}a\nabla\cdot) \quad (3)$$

sur $L^2(\Omega; e^{-\beta V})$ avec conditions au bord de Dirichlet homogènes sur $\partial\Omega$, et où la notion d'équilibre local dans Ω est donnée par la distribution quasi-stationnaire.

Nous proposons dans [1, 2] deux approches complémentaires pour appréhender ce problème d'optimisation de forme.

1. Une approche numérique dans [2] basée sur le calcul de la dérivée de forme de $N^*(\Omega)$, combiné avec une méthode de Galerkin pour réduire le problème aux valeurs propre original (posé en dimension $d \gg 1$) à un problème analogue sur la dynamique effective de coordonnées de réactions bien choisies. Nous appliquons cette méthode à la dynamique de la Dialanine solvatée ($d = 1860$).
2. Une approche asymptotique (voir [1]) basée sur le calcul d'estimées spectrales pour le générateur dans la limite petite température ($\beta \rightarrow \infty$), en présence d'un bord dépendant du paramètre asymptotique. Cette étude amène des résultats théoriques nouveaux et quantitatifs, comme notamment une extension de la formule d'Eyring-Kramers prenant en compte de manière fine la géométrie du bord.

[1] N. Blassel, T. Lelièvre, G. Stoltz. *Quantitative low-temperature asymptotics for reversible diffusions in temperature-dependent domains*. arXiv preprint arXiv :2501.16082, 2024.

[2] N. Blassel, T. Lelièvre, G. Stoltz. *Shape optimization of metastable states*. In preparation, 2025.

[3] A. Voter. *Parallel replica method for dynamics of infrequent events*. Physical Review B, **57(22)**, 9599–9606, 1998.