# Analyse d'une méthode de biaisage adaptatif dans des processus de diffusion

**Charles-Edouard Brehier**, Université Claude Bernard Lyon 1

Pour calculer des moyennes du type $\mu^\beta(\varphi) = \int_{\mathbb{T}^N} \varphi d\mu^\beta$, où $\mu^\beta(dx) = \exp(-\beta V(x))dx$ pour une fonction d'énergie potentielle $V$ suffisamment régulière, et $\beta > 0$, une stratégie MCMC consiste à introduire le processus de diffusion

$$dX_t = -\nabla V(X_t) + \sqrt{2\beta^{-1}} dB_t,$$

dont l'unique distribution invariante est $\mu_\beta$.
Bien que la loi de $X_t$ converge, en temps $t \to \infty$, vers $\mu_\beta$, la convergence est en pratique très lente, quand $\beta \to \infty$, et si $V$ a plusieurs minima locaux: le processus $X$ est métastable.
L'idée des méthodes de biaisage, utilisées en pratique en simulation moléculaire avec applications en biologie et chimie, consiste à remplacer la fonction potentiel $V$ par $V - A \circ \xi$, où typiquement $\xi : \mathbb{T}^N \to \mathbb{T}$ est une fonction caractérisant un comportement macroscopique du système, et $A : \mathbb{T} \to \mathbb{R}$.
Je présenterai une analyse mathématique d'une méthode où le biaisage est adaptatif: la fonction $A = A_t$ dépend du temps, à travers le passé de la trajectoire du processus. J'expliquerai comment définir des mesures $\mu_t$, qui permettent d'estimer de façon consistante $\mu^\beta(\varphi)$: le résultat principal est la convergence presque sûre $\mu_t(\varphi) \to \mu^\beta(\varphi)$, quand $t \to \infty$. Enfin, je présenterai des arguments justifiant l'efficacité de ce type de méthodes.
Il s'agit d'un travail en collaboration avec Michel Benaïm (Université de Neuchâtel).

**Charles-Edouard Brehier**, Université Claude Bernard Lyon 1
`brehier@math.univ-lyon1.fr`