

Problèmes numériques liés à la simulation d'équations différentielles stochastiques avec contraintes. Application à l'échantillonnage de mesure et au calcul d'énergies libres.

Tony LELIEVRE, CERMICS

On présentera des schémas numériques pour des équations différentielles stochastiques (EDS) avec contraintes. Ces EDS apparaissent notamment en mécanique (dynamique de Langevin pour des polymères rigides) ou en dynamique moléculaire (calcul d'énergies libres, par exemple). Après avoir discuté la consistance des schémas numériques, on s'intéressera plus particulièrement à l'échantillonnage de la projection d'une mesure de Boltzmann-Gibbs sur une sous-variété par une dynamique de gradient. On expliquera comment ces schémas numériques permettent de calculer le gradient de l'énergie libre, en utilisant soit des dynamiques quasi-statiques (*thermodynamic integration*) ou des dynamiques hors équilibre (*Jarzynski equality*).

Références

- [1] G. CICCOTTI, T. LELIÈVRE, AND E. VANDEN EIJNDEN, *Sampling Boltzmann-Gibbs distributions restricted on a manifold with diffusions: application to free energy calculations*, en préparation.
- [2] C. LE BRIS, T. LELIÈVRE, AND E. VANDEN EIJNDEN, *Consistency of various schemes for constrained SDEs*, en préparation.
- [3] T. LELIÈVRE, M. ROUSSET, AND G. STOLTZ, *Computation of free energy differences through nonequilibrium stochastic dynamics: the reaction coordinate case*, Rapport CERMICS 2006-306.