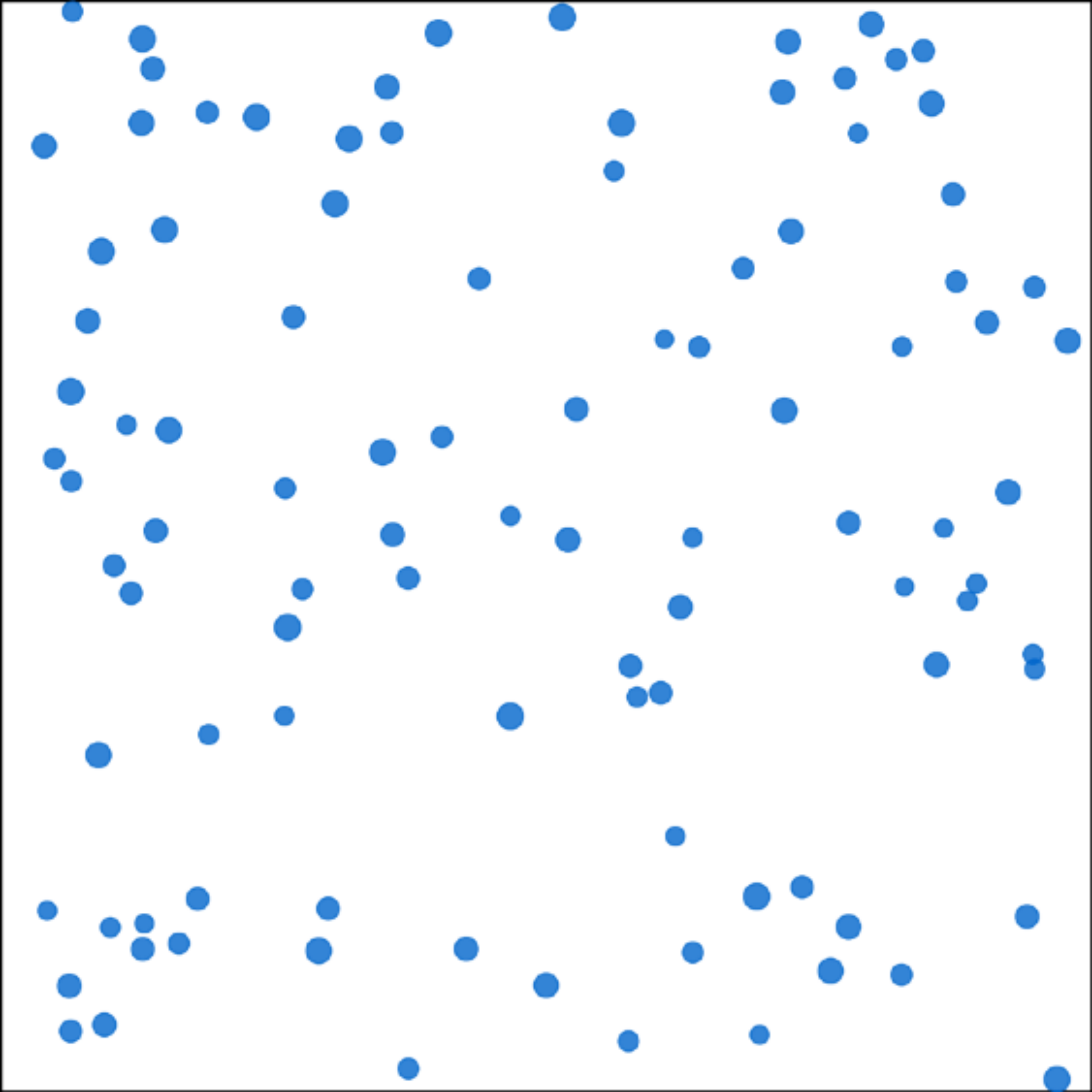
INSEA

MCMC: algorithmes avancés

Langevin Dynamics



Des particules d’un fluide dont le mouvement est expliqué par:

1. Des forces déterministes (gravitation)

2. Forces aléatoires (chaleur thermique)

3. Frottements / amortissement

$$F(\boldsymbol{X}_t)$$

$$G(X_t)$$

$$-\gamma \frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t}$$

$$m \frac{\mathrm{d}^2 X_t}{\mathrm{d}t^2} = -\gamma \frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} + \color{blue}{F}(X_t) + \color{red}{G}(X_t)$$

Loi de Newton généralisée:

$$F(X_t) = -\nabla U(X_t)$$

Définition de l’énergie potentielle U

$$m \frac{\mathrm{d}^2 X_t}{\mathrm{d}t^2} \approx 0$$

La masse d’une particule est négligeable

The Langevin Equation (1908)

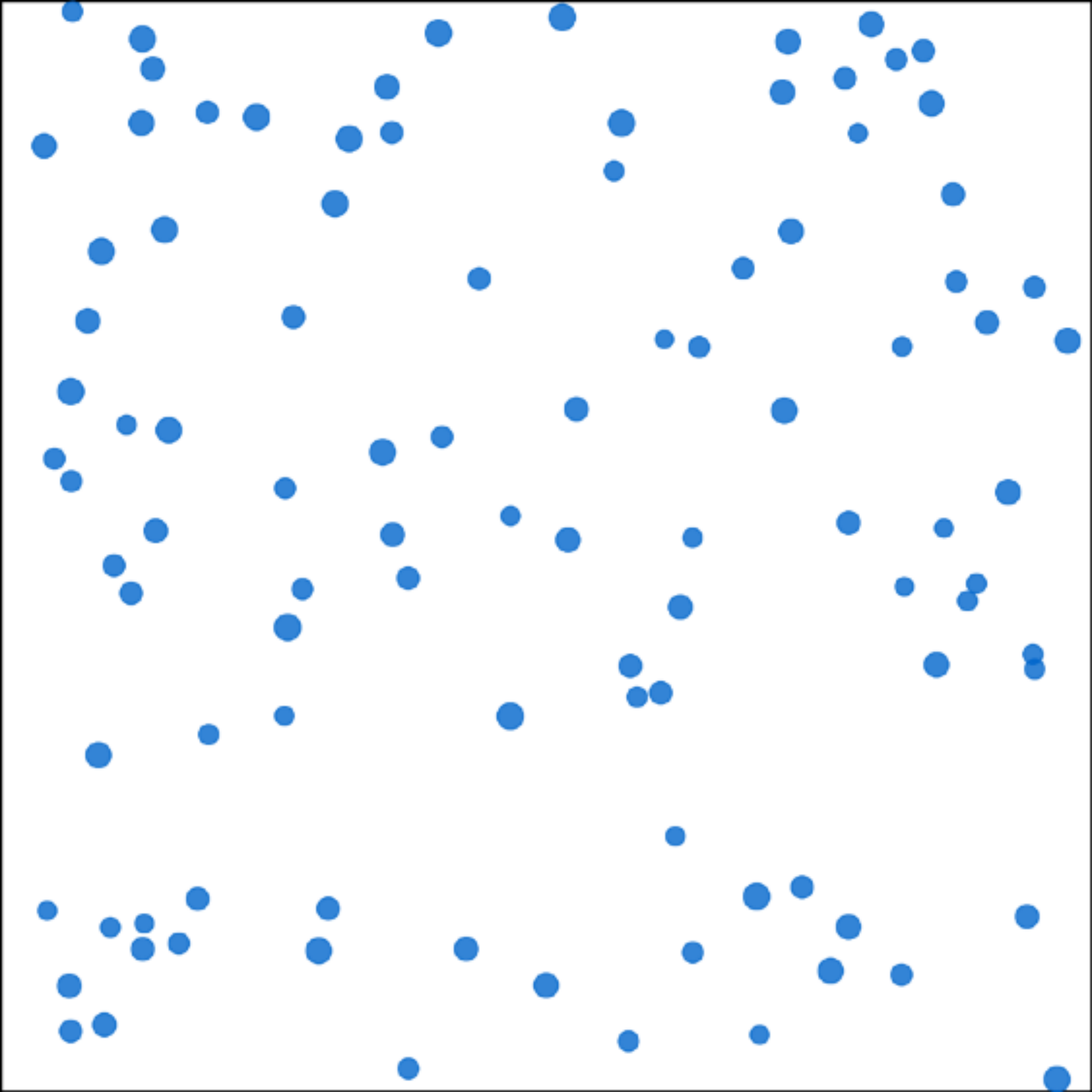
Ainsi:

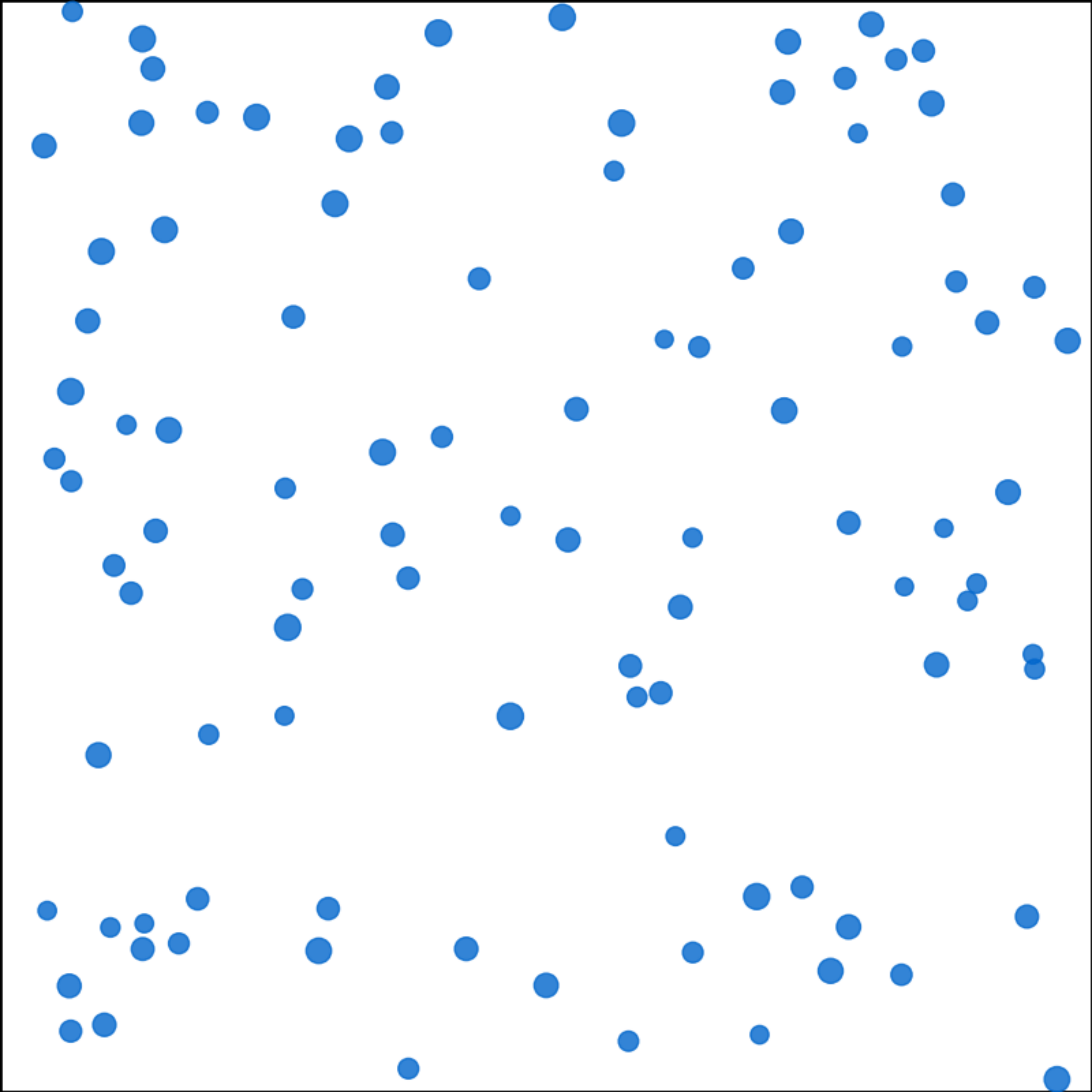
$$\boxed{\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\gamma}\nabla U(X_t) + \sqrt{\frac{2kT}{\gamma}}\xi_t}$$

$$G(X_t) = \sqrt{2\gamma k T}\,\xi_t \qquad \xi_t \sim \mathcal{N}(0,1)$$

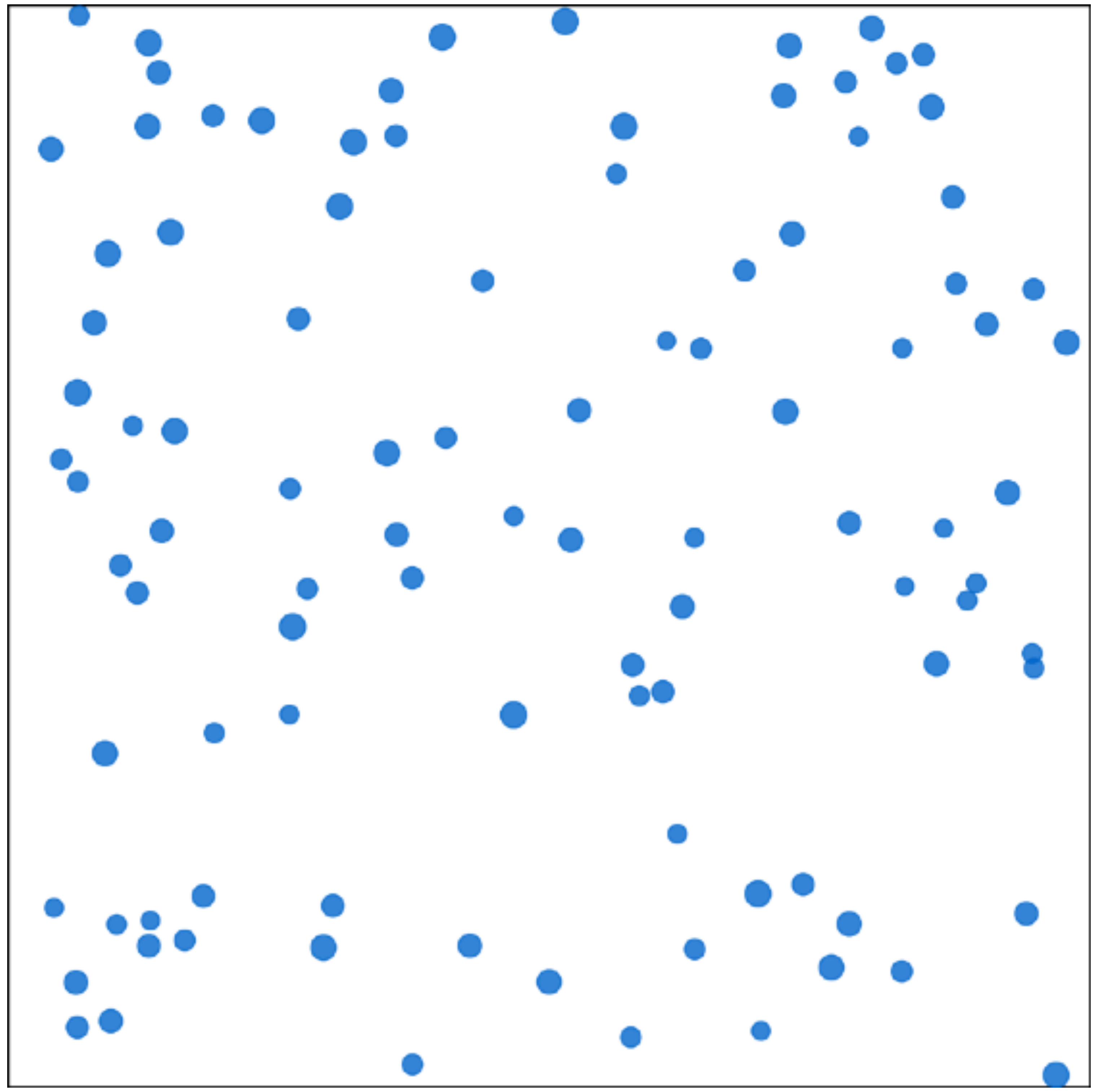
Moyenne des forces aléatoires modélisée par une Gaussienne (thm. central)

k: constante de Boltzmann





Langevin Dynamics



Des particules d'un fluide dont le mouvement est expliqué par:

1. Des forces déterministes (gravitation) $F(X_t)$
2. Forces aléatoires (chaleur thermique) $G(X_t)$
3. Frottements / amortissement $-\gamma \frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t}$

Loi de Newton généralisée:

The Langevin Equation (1908)

$$m \frac{\mathrm{d}^2 X_t}{\mathrm{d}t^2} = -\gamma \frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} + F(X_t) + G(X_t)$$

$$m \frac{\mathrm{d}^2 X_t}{\mathrm{d}t^2} \approx 0$$

La masse d'une particule est négligeable

$$F(X_t) = -\nabla U(X_t)$$

Définition de l'énergie potentielle U

$$G(X_t) = \sqrt{2\gamma k T}\xi_t \qquad \xi_t \sim \mathcal{N}(0,1)$$

Moyenne des forces aléatoires modélisée par une Gaussienne (thm. central)

k: constante de Boltzmann

Ainsi:

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\gamma}\nabla U(X_t) + \sqrt{\frac{2kT}{\gamma}}\xi_t$$

1. Pourquoi Monte-Carlo ? (Exemple de modèle hiérarchique)

2. Introduction à la méthode Monte-Carlo (historique, PRNG)

3. Algorithmes de simulation i.i.d (PRNG, transformation, rejet)

4. Méthodes MCMC (Gibbs, Metropolis)

5. Diagonstics de convergence MCMC

6. Méthodes MCMC avancées (Langevin, HMC, NUTS)

INSEA

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\gamma}\nabla U(X_t) + \sqrt{\frac{2kT}{\gamma}}\xi_t$$

INSEA