

Projet d'Initiation à la Recherche ou Projet d'Innovation-Recherche (barrer)

Nom du laboratoire ou de l'entreprise/établissement :

LAAS

TUTEUR(S)

NOM-Prénom

Tel

Mel

- NÜSKE Feliks

LAAS-CNRS nueske@mpi-magdeburg.mpg.de

-

Tuteurs INSA si projet industriel:

Prénom NOM

Mel:

TITRE DU PROJET

Deep-Learning based Adaptive Sampling for Stochastic Simulation

MOT-CLES

DESCRIPTIF (RESUME), indiquer l'enjeu sociétal de l'INSA de Toulouse s'il y a lieu

Le descriptif du projet donnera : Large-scale stochastic simulations are widely used in computational natural and engineering sciences. Typically, these simulations serve to explore the configurational space of a system of interest, which allows evaluation of observables of interest. In molecular biology, these simulations help predict observations which can be compared to experimental data.

A common challenge for many applications is that sufficient exploration of the available state space can take extremely long (sampling problem). Therefore, a wide range of *adaptive* sampling techniques have been proposed. The goal of this project is to implement and benchmark a new adaptive technique based on the concept of *kinetic distance (KD)*. The focus will be on efficient learning of the KD metric using deep learning techniques, as well as on-the-fly updating of KD from streaming data.

Le contexte du projet, les objectifs et les étapes de réalisation, la thématique de l'état de l'art (celle-ci peut être beaucoup plus large que le scope du projet en lui-même)

Literature Review :

- Basic principles of stochastic simulation and its application in statistics and biology
- Origin of the sampling problem
- Basic principles of adaptive simulation algorithms
- kinetic distance : definition and practical computation
-
-

- **Research Project :**
- implement computation of kinetic distance from a large number of parallel simulations using neural network approximations
- implement efficient updating of kinetic distance from streaming data
- implementation of decision criteria for adaptive sampling and walker re-distribution
- performance benchmarking using model systems
- (optional) application to simulations in molecular biology

PROFIL DES ETUDIANTS SOUHAITE (1 seul choix par projet)

☒ AE-SE : spécialité Automatique-Electronique parcours Systèmes Embarqués

☐ IR-SI : spécialité Informatique parcours Systèmes Informatiques

☐ IR-SC : spécialité Informatique parcours Systèmes Communicants

☐ (optionnel) ce projet peut être proposé à un ou des étudiants d'échange sur la partie réalisation seule (semestre 1 et/ou semestre 2)

PRIORITE : si vous posez plusieurs sujets, indiquer ici la priorité de ce sujet (1= plus prioritaire)