

- Curriculum vitae -

**Tony LELIEVRE**

*Adresse professionnelle :* Ecole des Ponts ParisTech, CERMICS,  
6 et 8 avenue Blaise Pascal,  
77455 Marne la Vallée Cedex 2, France.

*Tél. :* +33 (0)1 64 15 35 28 *E-mail :* tony.lelievre@enpc.fr

*Web :* <http://cermics.enpc.fr/~lelievre/home.html>

*Informations personnelles :* Né le 15 novembre 1976. Citoyenneté française.  
Marié, trois enfants.

**PARCOURS PROFESSIONNEL**

- Actuellement** **Chercheur au CERMICS, Ecole des Ponts ParisTech** (depuis 2005)  
Directeur du CERMICS (depuis 2020)  
Professeur chargé de cours à l'Ecole Polytechnique (depuis 2016)  
Ingénieur en Chef des Ponts, des Eaux et des Forêts (depuis 2011)  
Membre du projet Matherials, INRIA Paris  
Professeur à l'Ecole des Ponts ParisTech (depuis 2009).
- 2019-2020** **Professeur invité à Imperial College of London.**
- 2004-2005** **Postdoctorat à l'Université de Montréal**, Centre de Recherches  
Mathématiques, dans le cadre d'une année spéciale : *Les mathématiques  
de la modélisation multi-échelle et stochastique.*
- 2001-2004** **Thèse en mathématiques appliquées** au CERMICS, Ecole des  
Ponts ParisTech.

**FORMATION**

- 2009** **Habilitation à Diriger des Recherches en mathématiques  
appliquées** de l'université Paris Dauphine, soutenue le 3 juin 2009.  
*Sujet :* Analyse mathématique et numérique de modèles pour les matériaux,  
de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique.
- 2001-2004** **Thèse en mathématiques appliquées** au CERMICS,  
soutenue le 21 juin 2004.  
*Sujet :* Modèles multi-échelles pour les fluides viscoélastiques.  
*Directeurs :* Benjamin Jourdain et Claude Le Bris.
- 1999-2002** Etudiant à l'**Ecole des Ponts**.  
*Première année* DEA d'analyse numérique de Paris VI.  
*Deuxième année* Stage d'un an en entreprise au Laboratoire de Recherche  
et de Fabrication de Pechiney (St-Jean-de-Maurienne).  
*Troisième année* Cours du DEA de probabilités de Paris VI.
- 1996-1999** Etudiant à l'**Ecole Polytechnique** (Palaiseau).

## DISTINCTIONS SCIENTIFIQUES

- Leverhulme Trust visiting professorship 2020.
- ERC consolidator grant 2013.
- Ordway visiting professor 2012-2013, University of Minnesota.
- Prix de la recherche de la fondation iXCore 2011.
- Grand prix Alcan de l'Académie des Sciences 2010.
- Prix de thèse GAMNI 2004.
- Prix de thèse ParisTech 2004.
- Prix de thèse de l'Ecole des Ponts 2004.
- Prix CS 2002 décerné par la société Communications et Systèmes (prix partagé avec Jean-Frédéric Gerbeau et Claude Le Bris) pour notre travail sur *la modélisation magnétohydrodynamique des cuves d'électrolyse d'aluminium*.

## ANIMATION DE LA RECHERCHE

### *Organisation de conférences :*

- Co-organisateur du programme *Numerical methods in molecular simulation* dans le cadre du HIM program on Computational Mathematics Hausdorff Center for Mathematics, Bonn, Avril-Mai 2008, (avec F. Legoll, M. Rousset et G. Stoltz).
- Co-organisateur d'un workshop sur le thème des mathématiques appliquées aux modèles pour les fluides complexes, Ecole des Ponts, Janvier 2009. (avec R. Kupferman, C. Le Bris et P. Zhang).
- Co-organisateur d'un workshop sur le thème *Hybrid simulations of dynamical systems and applications to molecular dynamics*, Institut Henri Poincaré, Septembre 2010, (avec E. Faou, F. Legoll et G. Stoltz).
- Co-organisateur d'un workshop sur le thème *Metastability and stochastic processes*, Ecole des Ponts, Septembre 2011, (avec A. Guillin).
- Co-organisateur d'un workshop CECAM sur le thème *Free energy calculations : From theory to applications*, Ecole des Ponts, Juin 2012 (avec C. Chipot et A. Pohorille).
- Co-organisateur du CEMRACS 2013 sur le thème *Modelling and simulation of complex systems : stochastic and deterministic approaches*, CIRM, Marseille, Juillet-Août 2013 (avec N. Champagnat et A. Nouy).
- Co-organisateur du workshop NASPDE 2013 (avec J. Erhel et E. Faou).
- Co-organisateur des journées EDP-proba à l'Institut Henri Poincaré, 2013-2018 (avec F. Malrieu).
- Co-organisateur du Workshop *Numerical methods for high-dimensional problems*, Ecole des Ponts, 14-18 Avril 2014 (avec V. Ehrlacher, Y. Maday et A. Nouy).
- Co-organisateur des Journées *Inverse problems for multiscale and stochastic problems*, Ecole des Ponts, 2-3 Octobre 2014 (avec V. Ehrlacher, F. Legoll et K. Sab).
- Co-organisateur de la conférence MoMaS'14, CIRM, 17-20 Novembre 2014 (avec G. Allaire, C. Cancès, A. Ern et R. Herbin).
- Co-organisateur de la conférence *Free-energy calculations : A mathematical perspective*, BIRS, Casa Matemática Oaxaca, Mexico, 19-24 Juillet 2015. (avec C. Chipot et R. Skeel).
- Co-organisateur de la conférence *COmputational Statistics and MOlecular Simulation*, Paris, 2-5 février 2016. (avec A. Guyader et G. Stoltz)

- Co-organisateur de la conférence *Recent developments in numerical methods for model reduction*, IHP, 7-10 Novembre 2016. (avec S. Perotto et G. Rozza).
- Co-organisateur de la conférence *Piecewise Deterministic Markov Processes and sampling*, January 25-27th, 2017. (avec F. Malrieu et P.-A. Zitt).
- Co-organisateur de la conférence *Stochastic Computation Workshop*, FoCM 2017, July 10th-12th 2017 (avec A. Jentzen).
- Co-organisateur du programme ICTS sur *Large deviation theory in statistical physics : Recent advances and future challenges*, Bangalore, 14 Août - 13 Octobre 2017. (avec A. Ayyer, F. den Hollander, A. Dhar, J.P. Garrahan, C. Jarzynski, M. Krishnapur, S. Sabhapandit et H. Touchette).
- Co-organisateur du programme IPAM sur *Complex high-dimensional energy landscapes*, Los Angeles, 11 Septembre - 15 Décembre 2017. (avec C. Clementi, G. Henkelman, R. Hennig, M. Luskin, N. Marom, P. Plechac et C. Schuette).
- Co-organisateur de la conférence *Advances in Computational Statistical Physics*, CIRM, 17-21 Septembre 2018 (avec G. Stoltz et G. Pavliotis).
- Co-organisateur de la rencontre CECAM *Coarse-graining with Machine Learning in molecular dynamics*, Sanofi Campus Gentilly, 4-8 Décembre 2018 (avec P. Gkeka, P. Monmarché and G. Stoltz).
- Co-organisateur de la rencontre CECAM *Learning the collective variables of biomolecular processes* à INRIA Paris, 10-12 Juillet 2019 (avec L. Delemotte, J. Hénin et G. Stock).
- Co-organisateur de la conférence ICL/CNRS *Interacting Particle Systems and applications* à Imperial College of London, 9-10 Décembre 2019 (avec G. Pavliotis).
- Co-organisateur de la conférence RESIM 2021 13th International Workshop on Rare-Event Simulation, Les Cordeliers Paris, 18-21 Mai 2021 (avec G. Fort, E. Gobet et A. Guyader).

*Participation à des comités, activités d'expertise :*

- Participation à des comités de sélection : université de Lille et université de Paris 7, 2009 ; université de Paris 7, 2010 ; université de Nancy et université de Paris 7, 2011 ; université de Paris 7, 2012 ; ENSTA, 2017 ; Ecole Polytechnique, 2018 ; Ecole Polytechnique, 2019 ; Sorbonne Université, 2019 ; Sorbonne Université et Université de Paris, 2020 ; Université Côte d'Azur, 2020, Ecole Polytechnique 2021, Université de Lorraine 2021.
- Jurys de thèse : David Pommier (examinateur, Paris 6, 2008), Leonardo Figueroa (rapporteur, Oxford, 2011), Svetlana Artemova (rapporteur, Grenoble, 2012), Raman Sheshka (rapporteur, Ecole Polytechnique, 2012), Charles-Edouard Bréhier (rapporteur, ENS Rennes, 2012), Moulay Abdellah Chkifa (rapporteur, Paris 6, 2014), Max Fathi (examinateur, Paris 6, 2014), Pierre Monmarché (rapporteur, Université de Toulouse, 2014), Christelle Vergé (rapporteur, Ecole Polytechnique, 2015), Dominika Lesnicki (rapporteur, Université Pierre et Marie Curie, 2015), Olivier Zahm (examinateur, Ecole Centrale de Nantes, 2015), Tomasz Badowski (rapporteur, Freie Universität Berlin, 2016), Ahmed-Amine Homman (président, Ecole des Ponts, 2016), Gang Liu (président, Ecole Polytechnique, 2016), Arthur Talpaert (rapporteur, Ecole Polytechnique, 2017), Romain Poncet (examinateur, Ecole Polytechnique, 2017), Manon Baudel (président, Université d'Orléans, 2017), Riad Sanchez (rapporteur, Université Paris Saclay, 2017), Bob Pépin (examinateur, Université du Luxembourg, 2018), Michel Nowak (rapporteur, Université Paris Sa-

clay, 2018), Ze Lei (rapporteur, PSL-ENS, 2018), Augustin Chevallier (rapporteur, Université Côte d’Azur, 2019), Oleg Balabanov (rapporteur, Université Bretagne Loire, 2019), Lara Neureither (rapporteur, Brandenburgische Technische Universität, 2019), Rishabh Sunil Gvalani (rapporteur, Imperial College of London, 2020), Loucas Pillaud-Vivien (examinateur, ENS-INRIA Paris-PSL, 2020), Adel Ouled Said (rapporteur, Université de Bretagne Occidentale, 2020), Giacomo Garegnani (rapporteur, EPFL, 2021), Arthur Macherey (président, Centrale Nantes, 2021), Adrien Laurent (examinateur, Université de Genève, 2021), Louis Thiry (rapporteur, Ecole Normale Supérieure, 2021), Dario Lucente (examinateur, Ecole Normale Supérieure de Lyon, 2021).

- Jurys d’habilitation : Mathias Rousset (examinateur, Paris Est, 2014), Julian Tugaut (rapporteur, université Jean Monnet, 2015), Pierre Etoré (rapporteur, université de Grenoble, 2016), Fabio Pietrucci (examinateur, UPMC, 2017), Denis Villemonais (président, Université de Lorraine, 2019), Pierre Monmarché, (examinateur, Sorbonne Université, 2021), Charles-Edouard Bréhier (examinateur, Université de Lyon 1, 2021), Julien Reygner (examinateur, Université Paris Est Sup, 2021).
- Membre du Comité d’Evaluation Scientifique “Mathématiques-Informatique Théorique” de l’Agence Nationale de la Recherche (2013-2014 et 2015-2016). Membre d’un comité d’évaluation pour la DFG (2018).
- Expert auprès du Conseil Scientifique d’IFPEN (depuis 2022).

*Responsabilités collectives :*

- Membre élu du Conseil d’Administration de la SMAI (Société de Mathématiques Appliquées et Industrielles) (2011-2020).
- Directeur du GDR MoMaS (2012-2015).
- Responsable du Thème 4 du Labex MMCD (2012-2015).
- Membre élu du Conseil d’Administration de l’Ecole des Ponts ParisTech (2016-)
- Membre du Bureau de Comités des équipes-Projets d’Inria Paris (depuis 2022)

*Financements :*

- Responsable de l’ANR MEGAS : *METHODES Géométriques et échantillonnage : Application à la Simulation moléculaire*, 2009-2012.
- Membre du LIA CNRS/Université de l’Illinois (C. Chipot, CNRS Nancy).
- PI de l’ERC MSMATH (consolidator ERC grant, 2014-2019).

*Activités éditoriales :*

- Co-éditeur en chef de *ESAIM : Proceedings and Surveys*, avec D. Chafai, P. Lafitte et C. Imbert (2012-2020).
- Membre du comité éditorial de *SIAM/ASA : Journal of Uncertainty Quantification* (depuis 2017), *IMA Journal of Numerical Analysis* (depuis 2018), *Communications in Mathematical Sciences* (depuis 2019), *Journal of Computational Physics* (depuis 2019) et *ESAIM :M2AN* (depuis 2020).

<b>LIVRES, CHAPITRES DE LIVRES</b>
------------------------------------

- *Mathematical methods for the Magnetohydrodynamics of liquid metals*, Numerical Mathematics and Scientific Computation, Oxford University Press, 2006. (avec J-F. Gerbeau et C. Le Bris).

- Free energy computations : A mathematical perspective, Imperial College Press, 2010. (avec M. Rousset et G. Stoltz).
- *Mathematical foundations of Accelerated Molecular Dynamics methods, and Long-Timescale Simulations : Challenges, Pitfalls, Best Practices, for Development and Applications* In : Andreoni W., Yip S. (eds) Handbook of Materials Modeling. Springer, 2018.

<b>ARTICLES DANS DES REVUES A COMITE DE LECTURE</b>
---

1. *Numerical analysis of micro-macro simulations of polymeric fluid flows : a simple case*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 12(9), 1205-1243, 2002, avec B. Jourdain et C. Le Bris.
2. *Simulations of MHD flows with moving interfaces*, Journal of Computational Physics, 184, 163-191, 2003, avec J-F. Gerbeau et C. Le Bris.
3. *Modelling and simulation of the industrial production of aluminium : the nonlinear approach*, Computers and Fluids, 33, 801-814, 2004, avec J-F. Gerbeau et C. Le Bris.
4. *Optimal error estimate for the CONNFESSIT approach in a simple case*, Computers and Fluids, 33, 815-820, 2004.
5. *Existence of solution for a micro-macro model of polymeric fluid : the FENE model*, Journal of Functional Analysis, 209, 162-193, 2004, avec B. Jourdain et C. Le Bris.
6. *On a variance reduction technique for the micro-macro simulations of polymeric fluids*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 122, 91-106, 2004, avec B. Jourdain et C. Le Bris.
7. *Efficient pricing of Asian options by the PDE approach*, Journal of Computational Finance, 8(2), 55-64, 2005, avec F. Dubois.
8. *Analysis and simulation of a coupled hyperbolic/parabolic model problem*, Journal of Numerical Mathematics, 13(2), 81-156, 2005, avec J.P. Croisille, A. Ern et J. Proft.
9. *An elementary argument regarding the long-time behaviour of the solution to a stochastic differential equation*, Annals of Craiova University, Mathematics and Computer Science series, 32, 39-47, 2005, avec B. Jourdain et C. Le Bris.
10. *Quantum Monte Carlo simulations of fermions. A mathematical analysis of the fixed-node approximation*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 16(9), 1403-1440, 2006, avec E. Cancès et B. Jourdain.
11. *Long-time asymptotics of a multiscale model for polymeric fluid flows*, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 181(1), 97-148, 2006, avec B. Jourdain, C. Le Bris et F. Otto.
12. *Projection of diffusions on submanifolds : Application to mean force computation*, Communications on Pure and Applied Mathematics, 61(3), 371-408, 2008, avec G. Ciccotti et E. Vanden-Eijnden.
13. *Computation of free energy differences through nonequilibrium stochastic dynamics : the reaction coordinate case*, Journal of Computational Physics, 222(2), 624-643, 2007, avec M. Rousset et G. Stoltz.
14. *An efficient sampling algorithm for Variational Monte Carlo*, J. Chem. Phys., 125, 114105, 2006, avec M. Caffarel, E. Cancès, A. Scemama et G. Stoltz.

15. *Diffusion Monte Carlo method : numerical analysis in a simple case*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 41(2), 189–213, 2007, avec M. El Makrini et B. Jourdain.
16. *Computation of free energy profiles with parallel adaptive dynamics*, J. Chem. Phys., 126, 134111, 2007, avec M. Rousset et G. Stoltz.
17. *Adaptive models for polymeric fluid flow simulation*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, 344(7), 473–476, 2007, avec A. Ern.
18. *New entropy estimates for the Oldroyd-B model, and related models*, Commun. Math. Sci., 5(4), 909–916, 2007, avec D. Hu.
19. *Analysis of some discretization schemes for constrained Stochastic Differential Equations*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I., 346(7-8), 471-476, 2008, avec C. Le Bris et E. Vanden-Eijnden.
20. *Long-time convergence of an Adaptive Biasing Force method*, Nonlinearity, 21, 1155-1181, 2008, avec M. Rousset et G. Stoltz.
21. *Conservative stochastic differential equations : Mathematical and numerical analysis*, Mathematics of Computation, 78, 2047-2074, 2009, avec E. Faou.
22. *A general two-scale criteria for logarithmic Sobolev inequalities*, Journal of Functional Analysis, 256(7), 2211-2221, (2008).
23. *Generalized Navier Boundary Condition and Geometric Conservation Law for surface tension*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 198(5-8), 644-656, 2009, avec J.-F. Gerbeau.
24. *Free-energy-dissipative schemes for the Oldroyd-B model*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 43, 523-561, 2009, avec S. Boyaval et C. Mangoubi.
25. *Results and questions on a nonlinear approximation approach for solving high-dimensional partial differential equations*, Constructive Approximation, 30(3), 621-651, 2009, avec C. Le Bris et Y. Maday.
26. *A variance reduction method for parametrized stochastic differential equations using the reduced basis paradigm*, Communications in Mathematical Sciences, 8(3), 735-762, 2010, avec S. Boyaval.
27. *Existence, uniqueness and convergence of a particle approximation for the Adaptive Biasing Force process*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 44, 831-865, 2010, avec B. Jourdain et R. Roux.
28. *Potential of mean force calculations : a multiple-walker adaptive biasing force approach*, Journal of Chemical Theory and Computation, 6(4), 1008-1017, 2010, avec C. Chipot et K. Minoukadeh.
29. *Reduced basis techniques for stochastic problems*, Archives of Computational Methods in Engineering, 17(4), 435-454, 2010, avec S. Boyaval, C. Le Bris, Y. Maday, N.C. Nguyen et A.T. Patera.
30. *Free energy calculations : An efficient adaptive biasing potential method*, Journal of Physical Chemistry B, 114, 5823-5830, 2010, avec B. Dickson, F. Legoll, G. Stoltz et P. Fleurat-Lessard.
31. *Beyond multiscale and multiphysics : Multimaths for model coupling*, Networks and Heterogeneous Media, 5(3), 423-460, 2010, avec X. Blanc, F. Legoll et C. Le Bris.

32. *A numerical closure approach for kinetic models of polymeric fluids : exploring closure relations for FENE dumbbells*, Computers and Fluids, 43, 119-133, 2011, avec V. Legat et G. Samaey.
33. *Effective dynamics using conditional expectations*, Nonlinearity, 23, 2131-2163, 2010, avec F. Legoll.
34. *A multiple replica approach to simulate reactive trajectories*, Journal of Chemical Physics, 134, 054108, 2011, avec F. C erou, A. Guyader et D. Pommier.
35. *Long-time convergence of an Adaptive Biasing Force method : the bi-channel case*, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 202(1), 1-34, 2011, avec K. Minoukadeh.
36. *Convergence of a greedy algorithm for high-dimensional convex nonlinear problems*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 21(12), 2433-2467, 2011, avec E. Canc es et V. Ehrlacher.
37. *Free energy methods for Bayesian inference : efficient exploration of univariate Gaussian mixture posteriors*, Statistics and Computing, 22(4), 897-916, 2012, avec N. Chopin et G. Stoltz.
38. *Enhanced sampling of multidimensional free-energy landscapes using adaptive biasing forces*, SIAM Journal of Applied Mathematics, 71(5), 1673-1695, 2011, avec C. Chipot.
39. *Numerical study of a thin liquid film flowing down an inclined wavy plane*, Physica D, 240(21), 1714-1723, 2011, avec A. Ern et R. Joubaud.
40. *Langevin dynamics with constraints and computation of free energy differences*, Mathematics of Computation, 81(280), 2071-2125, 2012, avec M. Rousset et G. Stoltz.
41. *Periodic long-time behaviour for an approximate model of nematic polymers*, Kinetic and Related Models, 5(2), 357-382, 2012, avec L. He et C. Le Bris.
42. *Mathematical study of non-ideal electrostatic correlations in equilibrium electrolytes*, Nonlinearity 25, 1635-1652, 2012, avec A. Ern et R. Joubaud.
43. *A mathematical formalization of the parallel replica dynamics*, Monte Carlo Methods and Applications, 18(2), 119-146, 2012, avec C. Le Bris, M. Luskin et D. Perez.
44. *Mathematical analysis of a one-dimensional model for an aging fluid*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 23(9), 1561-1602, 2013, avec D. Benoit, L. He et C. Le Bris.
45. *Derivation of Langevin Dynamics in a nonzero Background Flow Field*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 47(6), 1583-1626, 2013, avec M. Dobson, F. Legoll et G. Stoltz.
46. *A micro-macro parareal algorithm : application to singularly perturbed ordinary differential equations*, SIAM Journal on Scientific Computing, 35(4), A1951-A1986, 2013, avec F. Legoll et G. Samaey.
47. *On the length of one-dimensional reactive paths*, ALEA Latin American Journal of Probability and Mathematical Statistics, 10(2), 359-389, 2013, avec F. C erou, A. Guyader et F. Malrieu.
48. *Optimal non-reversible linear drift for the convergence to equilibrium of a diffusion*, Journal of Statistical Physics, 152(2), 237-274, 2013, avec F. Nier et G. Pavliotis.

49. *Accurate and efficient evaluation of the a posteriori error estimator in the reduced basis method*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 48(1), 207-229, 2014, avec F. Casenave et A. Ern.
50. *Optimal scaling for the transient phase of the random walk Metropolis algorithm : the longtime behavior*, Bernoulli, 20(4), 1930-1978, 2014, avec B. Jourdain et B. Miasojedow.
51. *Convergence of the Wang-Landau algorithm*, , Mathematics of Computation, 84(295), 2297-2327, 2015, avec G. Fort, B. Jourdain, E. Kuhn et G. Stoltz.
52. *Efficiency of the Wang-Landau algorithm*, AMRX, 2, 275-311, 2014, avec G. Fort, B. Jourdain, E. Kuhn et G. Stoltz.
53. *Using Bayes formula to average the biasing forces and recover free energies in adaptive Monte Carlo simulations*, Journal of Chemical Physics, 140, 104108, 2014, avec M. Athènes, L. Cao, M.-C. Marinica et G. Stoltz.
54. *Mathematical analysis of Temperature Accelerated Dynamics*, SIAM Multiscale Modeling and Simulation, 12(1), 290-317, 2014, avec D. Aristoff.
55. *Optimal scaling for the transient phase of the random walk Metropolis algorithm : the mean-field limit*, Annals of Applied Probability, 25(4), 2263-2300, 2015, avec B. Jourdain et B. Miasojedow.
56. *Analysis and macroscopic limit of a one-dimensional model for aging fluids*, SIAM Multiscale Modeling and Simulation, 12(3), 1335-1378, 2014, avec D. Benoit et C. Le Bris.
57. *Greedy algorithms for high-dimensional eigenvalue problems*, Constructive Approximation, 40(3), 387-423, 2014, avec E. Cancès et V. Ehrlacher.
58. *A nonintrusive Reduced Basis Method applied to aeroacoustic simulations*, Advances in Computational Mathematics, 1-26, 2014, avec F. Casenave et A. Ern.
59. *The parallel replica method for simulating long trajectories of Markov chains*, AMRX, 2, 332-352, 2014, avec D. Aristoff et G. Simpson.
60. *The adaptive biasing force method : everything you always wanted to know, but were afraid to ask*, The Journal of Physical Chemistry B, 119(3), 1129-1151, 2015, avec J. Comer, J.C. Gumbart, J. Hénin, A. Pohorille et C. Chipot.
61. *Analysis of Adaptive Multilevel Splitting algorithms in an idealized case*, ESAIM P&S, 19, 361-394, 2015, avec C.E. Bréhier et M. Rousset.
62. *Low temperature asymptotics for Quasi-Stationary Distributions in a bounded domain*, Analysis & PDE, 8(3), 561-628, 2015, avec F. Nier.
63. *A Generalized Parallel Replica Dynamics*, Journal of Computational Physics, 284, 595-616, 2015, avec A. Binder et G. Simpson.
64. *Long-time convergence of an adaptive biasing force method : Variance reduction by Helmholtz projection*, SMAI Journal of Computational Mathematics, 1, 55-82, 2015, avec H. Alrachid.
65. *Variants of the Empirical Interpolation Method : symmetric formulation, choice of norms and rectangular extension*, Advances in Computational Mathematics, 41(5), 961-986, 2015, avec F. Casenave et A. Ern.
66. *Local and global solution for a nonlocal Fokker-Planck equation related to the adaptive biasing force processes*, Journal of Differential Equations 260, 7032-7058, 2016, avec H. Alrachid et R. Talhouk.



67. *Self-Healing Umbrella Sampling : Convergence and efficiency* , Statistics and computing, 27(1), 147-168, 2017, avec G. Fort, B. Jourdain et G. Stoltz.
68. *Variance reduction using nonreversible Langevin samplers*, Journal of Statistical Physics, 163(3), 457-491, 2016, avec A.B. Duncan et G.A. Pavliotis.
69. *Unbiasedness of some generalized Adaptive Multilevel Splitting algorithms*, Annals of Applied Probability, 26(6), 3559-3601, 2016, avec C.-E. Bréhier, M. Gazeau, L. Goudenège et M. Rousset.
70. *Adaptive multilevel splitting method for molecular dynamics calculation of benzamidine-trypsin dissociation time*, Journal of Chemical Theory and Computation, 12(6), 2983-2989, 2016, avec C. Mayne, K. Schulten et I. Teo.
71. *Coupling a reactive potential with a harmonic approximation for atomistic simulations of material failure*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 305, 422-440, 2016, avec L. Brochard, E. Cancès, F. Legoll, G. Stoltz et I.G. Tejada.
72. *A non linear approximation method for solving high dimensional partial differential equations : Application in Finance*, Mathematics and Computers in Simulation, 143, 14-34, 2018 avec J. Infante Acevedo.
73. *Partial differential equations and stochastic methods in molecular dynamics*, Acta Numerica, 25, 681-880, 2016, avec G. Stoltz.
74. *Jump Markov models and transition state theory : the Quasi-Stationary Distribution approach*, Faraday Discussion, 195, 469-495, 2016, avec G. Di Gesù, D. Le Peutrec et B. Nectoux.
75. *Smoothed biasing forces yield unbiased free energies with the extended-system adaptive biasing force method*, Journal of Physical Chemistry B, 121(15), 3676-3685, 2017, avec J. Hénin, A. Lesage et G. Stoltz.
76. *Pathwise estimates for an effective dynamics*, Stochastic Processes and their Applications, 127, 2841-2863, 2017, avec F. Legoll et S. Olla.
77. *The Extended Generalized Adaptive Biasing Force Algorithm for Multidimensional Free-Energy Calculations*, Journal of Chemical Theory and Computation, 13(4), 1566-1576, 2017, avec T. Zhao, H. Fu, X. Shao, C. Chipot et W. Cai.
78. *Computation of sensitivities for the invariant measure of a parameter dependent diffusion*, Stochastics and Partial Differential Equations : Analysis and Computations, 6(2), 125-183, 2018, avec R. Assaraf, B. Jourdain et R. Roux.
79. *Convergence and efficiency of adaptive importance sampling techniques with partial biasing*, Journal of Statistical Physics, 171(2), 220-268, 2018, avec G. Fort, B. Jourdain et G. Stoltz.
80. *Central Limit Theorem for stationary Fleming-Viot particle systems in finite spaces*, ALEA Latin American Journal of Probability and Mathematical Statistics, 15, 1163-1182, 2018, avec L.Pillaud-Vivien et J. Reygner.
81. *gen.parRep : a first implementation of the Generalized Parallel Replica dynamics for the long time simulation of metastable biochemical systems*, Computer Physics Communications, 239, 311-324, 2019, avec F. Hédin.
82. *Analysis of the Adaptive Multilevel Splitting method with the alanine di-peptide's isomerization*, Journal of Computational Chemistry, 40(11), 1198-1208, 2019, avec L.J.S. Lopes.

83. *Sharp asymptotics of the first exit point density*, Annals of PDE, 5(1), 2019, avec G. Di Gesù, D. Le Peutrec et B. Nectoux.
84. *On a new class of score functions to estimate tail probabilities of some stochastic processes with Adaptive Multilevel Splitting*, Chaos : An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 29(3), 033126, 2019, avec C.-E. Bréhier.
85. *The exit from a metastable state : concentration of the exit point distribution on the low energy saddle points, part 1*, Journal de Mathématiques Pures et Appliquées, 138, 242-306, 2020, avec G. Di Gesù, D. Le Peutrec et B. Nectoux.
86. *Hybrid Monte Carlo methods for sampling probability measures on submanifolds*, Numerische Mathematik, 143(2), 379-421, 2019, avec M. Rousset et G. Stoltz.
87. *Pathwise estimates for effective dynamics : the case of nonlinear vectorial reaction coordinates*, SIAM Multiscale Modeling and Simulation, 17(3), 1019-1051, 2019, avec W. Zhang.
88. *Analysis of a micro-macro acceleration method with minimum relative entropy moment matching*, Stochastic Processes and their Applications, 130, 3753-3801, 2020, avec G. Samaey et P. Zielinski.
89. *Stochastic homogenization of a scalar viscoelastic model exhibiting stress-strain hysteresis*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 54, 879-928, 2020, avec T. Hudson et F. Legoll.
90. *Effective dynamics for non-reversible stochastic differential equations : a quantitative study*, Nonlinearity, 32(12), 4779, 2019, avec F. Legoll et U. Sharma.
91. *Local and global perspectives on diffusion maps in the analysis of molecular systems*, Proceedings of the Royal Society A, 476, 20190036, 2020, avec Z. Trstanova et B. Leimkuhler.
92. *Parareal computation of stochastic differential equations with time-scale separation : a numerical study*, Computing and Visualization in Science, 23(9), 2020, avec F. Legoll, K. Myerscough et G. Samaey.
93. *Machine learning force fields and coarse-grained variables in molecular dynamics : application to materials and biological systems*, Journal of Chemical Theory and Computation, 16(8), 4757-4775, 2020, avec P. Gkeka, G. Stoltz, A. Barati Farimani, Z. Belkacemi, M. Ceriotti, J. Chodera, A.R. Dinner, A. Ferguson, J.-B. Maillet, H. Minoux, C. Peter, F. Pietrucci, A. Silveira, A. Tkatchenko, Z. Trstanova et R. Wiewiora.
94. *Convergence of metadynamics : discussion of the adiabatic hypothesis*, Annals of Applied Probability, 31(5), 2441-2477, 2021, avec B. Jourdain et P.A. Zitt.
95. *The exit from a metastable state : concentration of the exit point distribution on the low energy saddle points, part 2*, à paraître dans Stochastics and Partial Differential Equations : Analysis and Computations, avec D. Le Peutrec et B. Nectoux.
96. *An adaptive parareal algorithm : application to the simulation of molecular dynamics trajectories*, SIAM Journal on Scientific Computing, 44(1), B146-B176, 2022, avec F. Legoll et U. Sharma.
97. *Adaptive force biasing algorithms : new convergence results and tensor approximations of the bias*, à paraître dans Annals of Applied Probability, avec V. Ehrlicher et P. Monmarché.

98. *Chasing Collective Variables using Autoencoders and biased trajectories*, Journal of Chemical Theory and Computation, 18(1), 59-78, 2022, avec Z. Belkacemi, P. Gkeka et G. Stoltz.
99. *Multiple projection MCMC algorithms on submanifolds*, à paraître dans IMA Journal of Numerical Analysis, avec G. Stoltz et W. Zhang.
100. *Quasi-stationary distribution for the Langevin process in cylindrical domains, part I : existence, uniqueness and long-time convergence*, Stochastic Processes and their Applications, 144, 176-201, 2022, avec M. Ramil et J. Reygner.
101. *The Adaptive Biasing Force algorithm with non-conservative forces and related topics*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 56(2), 529-564, 2022, avec L. Maurin et P. Monmarché.

<b>ACTES DE CONFERENCES (avec comité de lecture)</b>
--

1. *Metal pad roll instabilities*, proceedings of the 2002 TMS Annual Meeting and Exhibition, Light Metals, 483-487, 2002, avec J-F. Gerbeau, C. Le Bris et N. Ligonesche.
2. *Mathematical analysis of a stochastic differential equation arising in the micro-macro modelling of polymeric fluids*, Probabilistic Methods in Fluids Proceedings of the Swansea 2002 Workshop, Eds : I M Davies, N Jacob, A Truman, O Hassan, K Morgan and N P Weatherill, 205-223, 2002, avec B. Jourdain.
3. *Numerical simulations of two-fluids MHD flows*, Fundamental and Applied MHD. Proceedings of the Fifth international PAMIR Conference, I.101-I.105, 2002, avec J-F. Gerbeau et C. Le Bris.
4. *Modeling and simulation of MHD phenomena in aluminium reduction cells*, Proceedings of the fourth International Conference on Electromagnetic Processing of Materials, EPM 2003, C3-10.4, 57-62, 2003, avec J-F. Gerbeau et C. Le Bris.
5. *Coupling PDEs and SDEs : the illustrative example of the multiscale simulation of viscoelastic flows*, in Multiscale Methods in Science and Engineering, B. Engquist, P. Lötstedt, O. Runborg, eds., Lecture Notes in Computational Science and Engineering 44, Springer, 151-170, 2005, avec B. Jourdain et C. Le Bris.
6. *Stability analysis of simplified electrolysis cells with Mistral*, Proceedings of the 2006 TMS Annual Meeting and Exhibition, Light Metals, 2006, avec T. Tomasino, M. Le Hervet et O. Martin.
7. *Linear versus nonlinear approaches for the stability analysis of aluminium production cells*, Proceedings de la conférence ECCOMAS 2006, avec J.-F. Gerbeau, C. Le Bris, A. Orriols et T. Tomasino.
8. *Variational formulation of the Generalized Navier Boundary Condition*, in Recent Progress in Scientific computing, SCPDE05 conference proceeding, Eds : W Liu, M Ng and Z-C Shi, Science Press, Beijing, 2007, avec J.-F. Gerbeau.
9. *Some remarks on sampling methods in molecular dynamics*, ESAIM Proceedings, 22, 217-233, 2008, avec F. Legoll et G. Stoltz.
10. *Multiscale modelling of complex fluids : A mathematical initiation*, in Multiscale Modeling and Simulation in Science Series, B. Engquist, P. Lötstedt, O. Runborg, eds., Lecture Notes in Computational Science and Engineering 66, Springer, 49-138, 2009, avec C. Le Bris.

11. *Partial differential equations in finance*, in Encyclopedia of Financial Models, Ed : F.J. Fabozzi, John Wiley and Sons Inc, 2012, avec Y. Achdou et O. Bokanowski.
12. *Some remarks on free energy and coarse-graining*, in Numerical Analysis and Multiscale Computations, Lect. Notes Comput. Sci. Eng. 82, Springer, 279-329, 2012, avec F. Legoll.
13. *Micro-macro models for viscoelastic fluids : modelling, mathematics and numerics*, Science China Mathematics, 55(2), 353-384, 2012, avec C. Le Bris.
14. *Two mathematical tools to analyze metastable stochastic processes*, in Numerical Mathematics and Advanced Applications 2011, A. Cangiani, R.L. Davidchack, E. Georgoulis, A.N. Gorban, J. Levesley, M.V. Tretyakov, eds., Springer, 791-810, 2013.
15. *Greedy algorithms for high-dimensional non-symmetric linear problems*, ESAIM Proceedings, 41, 95-131, 2013, avec E. Cancès et V. Ehrlacher.
16. *Adaptive multilevel splitting in molecular dynamics simulations*, ESAIM Proceedings and Surveys, 48, 215-225, 2015, avec D. Aristoff, C.G. Mayne et I. Teo.
17. *Combining a reactive potential with a harmonic approximation for molecular dynamics simulation of failure*, J. Phys. : Conf. Ser. 574 012041, 2015, avec I. G. Tejada, L. Brochard, G. Stoltz, F. Legoll et E. Cancès.
18. *Accelerated dynamics : Mathematical foundations and algorithmic improvements*, Eur. Phys. J. Special Topics 224, 2429-2444, 2015.
19. *Adaptive Multilevel Splitting for Monte Carlo particle transport*, Eur. Phys. J. N 153, 06006, 2017, avec C.M. Diop, E. Dumonteil, H. Louvin et M. Rousset.
20. *Exit event from a metastable state and Eyring-Kramers law for the overdamped Langevin dynamics*, In : Stochastic Dynamics out of Equilibrium, G. Giacomini, S. Olla, E. Saada, H. Spohn and G. Stoltz (Eds), Springer Proceedings in Mathematics and Statistics, 2019, avec D. Le Peutrec et B. Nectoux.
21. *Statistical Estimation of the Poincaré constant and Application to Sampling Multimodal Distributions*, Proceedings of the Twenty Third International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, PMLR 108, 2753-2763, 2020, avec F. Bach, L. Pillaud-Vivien, A. Rudi et G. Stoltz.

<b>RAPPORTS DE RECHERCHE et PREPUBLICATIONS</b>
---

- *Convergence of a stochastic particle approximation of the stress tensor for the FENE-P model*, Rapport CERMICS 2004-263, avec B. Jourdain.
- *A nonintrusive method to approximate linear systems with nonlinear parameter dependence*, <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00845822>, avec F. Casenave, A. Ern et G. Sylvand.
- *On the Hill relation and the mean reaction time for metastable processes*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02921281v1>, avec M. Baudel et A. Guyader.
- *A probabilistic study of the kinetic Fokker-Planck equation in cylindrical domains*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02974421>, avec J. Reygner et M. Ramil.
- *Influence of sampling on the convergence rates of greedy algorithms for parameter-dependent random variables*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03238244>, avec M.R. Blel et V. Ehrlacher.

## EXPOSES DANS DES CONFERENCES

- Probabilistic Methods in Fluids, University of Wales, Swansea, Avril 2002.
- AMIF 2002, Lisbon (Portugal), Avril 2002.
- Journées MAS, Grenoble, Septembre 2002.
- Numerical methods for multiscale problems, Leipzig (Germany), Novembre 2002.
- SDEs and SPDEs : Numerical Methods and Applications, Edinburgh (Scotland), Avril 2003.
- Analysis and Numerics of Non-Newtonian Fluids, Kirchzarten (Germany), Avril 2003.
- Journées scientifiques MoMas, Lyon, Septembre 2003.
- EPM 2003, 4th international conference electromagnetic processing of materials, Lyon, Octobre 2003.
- Workshop computation for multiscale problems in physics, Warwick, Avril 2004.
- SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science (MS04), Los Angeles, Mai 2004.
- MC2QMC 2004 conference, Juan-les-Pins, Juin 2004.
- Atelier sur les modèles rhéologiques multiéchelles pour les fluides, Montréal, Novembre 2004.
- Les journées montréalaises de calcul scientifique, Février 2005.
- Conférence SIAM Dynamical System 2005, Snowbird, Mai 2005.
- Computational stochastic differential equations, Bedlewo, Septembre 2005.
- SCPDE 2005 Conference, Hong Kong, Décembre 2005.
- Workshop on Numerics for SDEs with applications, Florida State University, Février 2006.
- CANUM 2006, Guidel, Juin 2006.
- AIMS conference, Poitiers, Juin 2006.
- Workshop CERMICS / PKU, Pekin, Juillet 2006.
- ECCOMAS conference, Hollande, Septembre 2006.
- SimBioMa Conference, Paris, Novembre 2006.
- Workshop Polymer models and related topics, Nice, Février 2007.
- SMAI 2007, Juin 2007.
- Workshop New directions in Monte Carlo methods, Fleurance, Juin 2007
- SciCADE 2007, Saint-Malo, Juillet 2007.
- ICIAM07, Zurich, Juillet 2007.
- IMA summer program on Classical and Quantum Approaches in Molecular Modeling, Minneapolis, Juillet 2007.
- Workshop on Mathematical Issues in Complex Fluids, Pekin, Octobre 2007.
- Workshop on particle systems, nonlinear diffusions, and equilibration, Bonn, Novembre 2007.
- Workshop on adaptive Markov chain Monte Carlo methods, ADAPSKI, Bormio, Janvier 2008.
- Workshop GREFI-MEFI 2008, Stochastic dynamics and probability, Marseille, Mars 2008.
- CANUM 2008, co-organisateur d'un mini-symposium sur le thème : méthodes hybrides, Mai 2008.
- Workshop BIRS on Mathematical and Numerical Methods for Free Energy Calculations, Banff, Juin 2008.

- lations in Molecular Systems, Banff, Juin 2008.
- Workshop DqF Stochastic Differential Equations : Models and Numerics, Stockholm, Octobre 2008.
  - Workshop Molecular Dynamics, Thermostats and Convergence to Equilibrium, Edinburgh, Novembre 2008.
  - Workshop Adaptivity, robustness and complexity of multiscale algorithms, ICMS, Edinburg, Avril 2009
  - Third Conference on Numerical Methods in Finance, Ecole des Ponts, Paris, Avril 2009.
  - IMA Tutorial : Methods of Molecular Simulation, Minneapolis, Mai 2009.
  - Meeting on PDEs, Stochastic Analysis and Simulation of Processes, Sophia-Antipolis, Juin 2009.
  - **Plenary speaker at the EPSRC Symposium Capstone Conference**, Warwick, Juin 2009.
  - Workshop Theory and Numerics for Kinetic Equations, Saarbrücken, Novembre 2009.
  - Workshop BIRS on Numerical Analysis of Multiscale Computations, Banff, Décembre 2009.
  - Workshop on Mathematical problems of computational chemistry, Pekin, Janvier 2010.
  - European Conference on Computational Mechanics (ECCM 2010), Paris, Mai 2010.
  - Workshop Multiscale Molecular Modelling, Edinburgh, Juin 2010.
  - Journées MAS, Bordeaux, organisateur d'un mini-symposium sur le thème : propagation d'incertitudes, Septembre 2010.
  - Journées scientifiques CSMA, Nantes, Septembre 2010.
  - ESF conference on Highly Oscillatory Problems : From Theory to Applications, Cambridge, Septembre 2010.
  - Workshop on Large Scale Stochastic Dynamics, Oberwolfach, Novembre 2010.
  - Meeting on Computational Challenges in Partial Differential Equations, Swansea University, Avril 2011.
  - Workshop on complexity and computational methods in statistics, Sante Fe, Avril 2011.
  - Workshop on Macroscopic Modeling of Materials with Fine Structure, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, Mai 2011.
  - Workshop Coarse-graining of many-body systems : analysis, computations and applications, University of Crete, Greece, Juin 2011.
  - ICIAM 2011, Vancouver, Juillet 2011.
  - **Plenary speaker at the ENUMATH conference, University of Leicester, Septembre 2011.**
  - Minisymposium on Mathematics in Materials Science, Pekin, Septembre 2011.
  - Workshop on Nucleation and Rare Events, Pekin, Septembre 2011.
  - Journées scientifiques MoMaS, Marseille, Novembre 2011.
  - Workshop “Reduced Basis, POD or PGD-Based Model Reduction Techniques : a Breakthrough in Computational Engineering?”, Cachan, Novembre 2011.
  - Workshop “Interactions EDPs/Probas : modèles probabilistes pour la simulation moléculaire”, GDR CHANT, Grenoble, Novembre 2011.
  - Workshop on Multiscale Systems : Theory and Applications, Warwick, Décembre 2011.

- Workshop on Multiscale Modeling, Simulation, Analysis and Application, Singapore, Janvier 2012.
- Workshop on Interplay of Analysis and Probability in Physics, Oberwolfach, Janvier 2012.
- Workshop BEMOD12 “Beyond Molecular Dynamics : Long Time Atomic-Scale Simulations”, MPIPES, Dresden, Mars 2012.
- **Plenary speaker at the 2012 CANUM conference, Superbesse, Mai 2012.**
- Workshop “Computation of transition trajectories and rare events in non-equilibrium systems”, ENS Lyon, Juin 2012.
- Journées ERGONUM “Analyse probabiliste des systèmes en temps long”, INRIA Sophia-Antipolis, Juin 2012.
- AIMS conference, Orlando, Juillet 2012.
- **Plenary speaker at the EVOLVE 2012 conference, Mexico, Août 2012.**
- Workshop “Modelling the Dynamics of Complex Molecular Systems”, Lorentz Center, Leiden, Août 2012.
- Workshop "Quantum and Atomistic Modeling of Materials Defects", IPAM, Los Angeles, Octobre 2012.
- Workshop “Nonequilibrium Statistical Mechanics : Mathematical Understanding and Numerical Simulation” BIRS, Banff, Canada, Novembre 2012.
- Workshop “Horizon Maths 2012”, Paris, Décembre 2012.
- Workshop “Genetic models and Quasi-stationarity”, CIRM, Marseille, Mars 2013.
- Workshop "Analysis and Stochastics in Complex Physical Systems", Leipzig, Mars 2013.
- Workshop Randomness and PDE, Labex Lebesgue semester, Nantes, Avril 2013.
- IMA Chem year Summit, Chicago, Avril 2013.
- SMAI 2013, Mai 2013.
- **Plenary speaker at the SIAM conference on Mathematical Aspects of Materials Science, Philadelphia, Juin 2013.**
- Workshop Scicade 2013, Valladolid, Septembre 2013.
- Workshop on Reduced Basis, POD and PGD model, Blois, Novembre 2013.
- Workshop “Computational coarse-graining of many-body systems”, Warwick, Décembre 2013.
- Workshop on Material Theories, Oberwolfach, Décembre 2013.
- Workshop MCMSKI, Chamonix, Janvier 2014.
- Conference on Numerical Analysis and Scientific Computing, MPI Leipzig, Janvier 2014.
- CECAM workshop “Long time dynamics from short time simulations”, Lugano, Mars 2014.
- Conference MCQMC, Leuven, Avril 2014.
- ICMS lecture, "Computational methods for statistical mechanics", Edinburgh, Juin 2014.
- Conference “Numerical Analysis for Partial Differential Equations”, University of Sussex, Juin 2014.
- ICMS conference, "Multiscale Computational Methods in Materials Modelling Meeting", Edinburgh, Juin 2014.
- AIMS conference, Madrid, Juillet 2014,
- ANR Stab conference, Lyon, Septembre 2014.
- CECAM conference, “Multiscale simulation methods for soft matter systems”, Mainz,

- Octobre 2014.
- Workshop "New Discretization Methods for the Numerical Approximation of PDEs", Oberwolfach, Janvier 2015.
- HIM workshop "Analytic approaches to scaling limits for random system", Bonn, Janvier 2015.
- ADMOS, Nantes, Juin 2015.
- PASC15, Zurich, Juin 2015.
- Workshop "Statistical mechanics and computation of large deviation rate functions", Lyon, Juin 2015.
- Workshop "Probabilistic numerical methods for non-linear PDEs", Imperial College London, Juillet 2015.
- **Plenary speaker at MCM 2015, Linz, Juillet 2015.**
- Workshop "Free-energy calculations : A mathematical perspective", BIRS Oaxaca, Juillet 2015.
- CRiSM Workshop "Non reversible dynamics", Warwick, Septembre 2015.
- **Plenary speaker at Scicade 2015, Potsdam, Septembre 2015.**
- Set-Oriented Numerics, Imperial College London, Septembre 2015
- Workshop "Predictive multiscale materials modelling, Cambridge, Décembre 2015.
- Workshop "Mathematical challenges in drug and protein design", MBI Columbus, Décembre 2015.
- **Plenary speaker at MCMSKI 2016, Lenzerheide, Janvier 2016.**
- Workshop "Particle methods for the management of risks", Paris, Avril 2016.
- SIAM Uncertainty Quantification, Lausanne, Avril 2016.
- Workshop "Challenges in High-Dimensional Analysis and Computation", San Servolo, Mai 2016.
- CANUM, Mai 2016.
- Workshop "Extreme events in the Earth and planetary sciences", Warwick, Juillet 2016.
- Faraday discussion "Reaction rate theory", Septembre 2016.
- Workshop MMM2016, Octobre 2016.
- Workshop "Multiscale methods for stochastic dynamics", Genève, Janvier 2017.
- CECAM workshop "Exploiting finite-size effects in simulations", UPMC, Avril 2017.
- CIRM workshop "interactions EDP/probabilités - équations cinétiques, temps long et propagation du chaos", Marseille, Avril 2017.
- IHP conference on Stochastic Dynamics Out of Equilibrium, Paris, Avril 2017.
- CECAM workshop "Beyond Kd's : New computational methods to address challenges in drug discovery", EPFL, Lausanne, Juin 2017.
- "Multiscale Theory and Computation Conference", University of Minneapolis, Septembre 2017.
- Workshop "Quasistationary Distributions : Analysis and Simulation", University of Paderborn, Septembre 2017
- Workshop "Stochastic Sampling and Accelerated Time Dynamics on Multidimensional Surfaces", IPAM, Los Angeles, Octobre 2017.
- Workshop "Bridging Scales in Molecular Biology", Mathematics & Physical Sciences conference of the Simons Foundation, New York, Novembre 2017.
- Workshop "Mathématiques pour la neutronique", GDR MANU, Paris, Novembre 2017.
- Workshop "Interplay of Analysis and Probability in Applied Mathematics", Ober-



- wolfach, Février 2018.
- Workshop "Data-driven modelling of complex systems", ATI, Londres, Mai 2018.
  - Workshop "Uncertainty quantification in materials science", IHP, Paris, Mai 2018.
  - Fields Institute, "Focus Program on Nanoscale Systems and Coupled Phenomena : Mathematical Analysis, Modeling, and Applications", Toronto, Mai 2018.
  - Workshop "Simulation and probability : recent trends", Rennes, Juin 2018.
  - Workshop "Particle based methods", ICMS, Edinburgh, Juillet 2018.
  - CECAM workshop "Frontiers of coarse graining in molecular dynamics", Berlin, Juillet 2018.
  - Franco-German Workshop on mathematical aspects in computational chemistry, Aachen, Septembre 2018.
  - Workshop "Computational Statistics and Molecular Simulation : A Practical Cross-Fertilization", Oaxaca, Novembre 2018.
  - LIA CNRS - UIUC Meeting, Hauteluce, Janvier 2019.
  - CECAM Workshop, CIB-EPFL, Lausanne, Switzerland, Mars 2019.
  - CECAM Workshop, CIB-EPFL, Lausanne, Switzerland, Mai 2019.
  - IPAM, Lake Arrowhead, USA, Juin 2019.
  - CECAM Workshop, Paris, Juillet 2019.
  - ICIAM, Valencia, Spain, Juillet 2019.
  - HetSys launch event, Warwick, England, Septembre 2019.
  - Numerical analysis in Bielefeld, Germany, Septembre 2019.
  - ANR QuAMProcs, Bordeaux, Novembre 2019.
  - Newton Institute, Cambridge, England, Novembre 2019.
  - Materials Research Society Fall Meeting, Boston, USA, Décembre 2019.
  - Bernoulli-IMS One World Symposium 2020, online, Août 2020.
  - Workshop "Multiscale Models for Complex Fluids : Modeling and Analysis", BIRS, Banff (online), Canada, Novembre 2020.
  - IMSI workshop on Mathematical and Computational Materials Science, online, Février 2021.
  - SIAM MS conference, online, Mai 2021.
  - IPAM conference, online, Juin 2021.
  - Franco-Dutch Eurandom meeting, IHP, Juillet 2021.
  - CEMRACS conference, CIRM, Juillet 2021.
  - Lorentz Center, Août 2021.
  - CECAM Workshop on Generalized Langevin Equations, Berlin, online, Septembre 2021.
  - Swiss numerics day, EPFL, Septembre 2021.
  - Neutron Transport Days of the Bath-Beijing-Paris Branching Structures Meeting, online, Septembre 2021.
  - Workshop On Future Synergies for Stochastic and Learning Algorithms, CIRM, Septembre 2021.
  - Statistical modeling for stochastic processes and related fields, ISM Japan, online, Septembre 2021.
  - CECAM discussion meeting Generalized Langevin Equations in classical and quantum simulations, Paris, Octobre 2021.
  - Materials Research Society fall meeting, online, Décembre 2021.
  - Workshop Interaction Mechanisms in Monte Carlo Beyond Resampling, Bristol, online, Décembre 2021.

## EXPOSES DANS DES SEMINAIRES

*En France :*

- Séminaire de probabilités de Paris XIII, Octobre 2002.
- Séminaire de probabilités de l'université d'Orléans, Novembre 2002.
- GT Milieux hétérogènes, développements asymptotiques et applications, Lyon, Octobre 2003.
- Séminaire d'analyse numérique, Rennes, Novembre 2003.
- Atelier sur le suivi d'interface, CEA, Paris, Mai 2005.
- Séminaire ENS, Rennes, Décembre 2005.
- Séminaire Laboratoire Jacques-Louis Lions, Janvier 2006.
- Séminaire équipe OMEGA, INRIA Sophia-Antipolis, Mai 2006.
- Séminaire CEMRACS, Marseille, Août 2006.
- Séminaire ADAP'MC, Paris, Octobre 2006.
- Workshop calcul d'énergies libres, CERMICS, Paris, Octobre 2006.
- Séminaire du LMSGC (ENPC), Paris, Janvier 2007.
- Séminaire Analyse Numérique et EDP de l'université Paris-Sud, Mai 2007.
- Séminaire Analyse appliquée, Université Paris-Nord, Novembre 2007.
- Séminaire ENS Lyon, Janvier 2008.
- Séminaire Université Paris Dauphine, Février 2008.
- **Séminaire Equations aux dérivées partielles et applications, Collège de France, Avril 2008.**
- Séminaire MODANT, Grenoble, Avril 2008.
- Séminaire Equations aux dérivées partielles, Chambéry, Septembre 2008.
- Séminaire Equations aux dérivées partielles et analyse numérique, Lille, Octobre 2008.
- **Séminaire Equations aux dérivées partielles et applications, Collège de France, Janvier 2010.**
- Groupe de Travail Probabilités, Statistique, et applications, Université de Marne-la-Vallée, Février 2010.
- Séminaire de probabilités, Rennes, Mars 2010.
- Séminaire Equations aux dérivées partielles et applications, ENS Lyon, Mars 2010.
- Séminaire de probabilités, Nancy, Avril 2010.
- Séminaire Laboratoire Jacques-Louis Lions, Juin 2010.
- Séminaire du CMAP, Ecole Polytechnique, Mai 2011.
- Séminaire ANR BIGMC, Paris, Décembre 2011.
- Séminaire de mathématiques, Université de Marne-la-Vallée, Janvier 2012.
- Séminaire du MAPMO, Orléans, Février 2012.
- Séminaire ANR BIGMC, Paris, Février 2013.
- Séminaire Institut de Mathématiques de Toulouse, Mars 2013.
- Séminaire de la Chaire FDD, IHP, Paris, Décembre 2013.
- Séminaire Equipe INRIA TOSCA, Juillet 2014.
- ENS Cachan, Séminaire pour les nouveaux normaliens, Septembre 2014.
- Séminaire équipe INRIA POEM, Paris, Octobre 2014.
- Séminaire EDP non linéaires, Université Paris 13, Décembre 2014.
- Séminaire ENS Chimie, Paris, Décembre 2014.
- Séminaire transversal MSME, Paris, Janvier 2015.
- **Séminaire Equations aux dérivées partielles et applications, Collège de**

**France, Janvier 2015.**

- Séminaire de probabilités LJK, Grenoble, Novembre 2015.
- Séminaire analyse numérique, Orsay, Novembre 2015.
- Séminaire Laboratoire Jacques-Louis Lions, Février 2016.
- Séminaire "Incertitudes" à EDF, Mars 2016.
- Séminaire Institut de Biologie Physico-Chimique, Mars 2016.
- Séminaire équipe INRIA ABS, Avril 2016.
- Séminaire du laboratoire MICS à Centrale Supélec, Juin 2016.
- Séminaire du Laboratoire de Chimie Physique, Université Paris-Sud, Mars 2017.
- **Colloquium Lorrain de Mathématiques, Université de Nancy, Avril 2017.**
- Séminaire de probabilités, ENS Lyon, Juin 2017.
- **Colloquium du laboratoire Dieudonné, Université Nice Sophia Antipolis, Octobre 2017.**
- Journée de l'ANR CINE-PARA, Université Paris 13, Janvier 2018.
- Séminaire de la Maison de la Simulation, Saclay, Mars 2018.
- Séminaire du LJK, Grenoble, Mars 2018.
- Séminaire SMILE, Paris, Avril 2018.
- Séminaire MIP, Toulouse, Mai 2018.
- Séminaire "Simulation, Incertitudes et Méta-modèles", CEA Saclay, Octobre 2018.
- Groupe de travail PEIPS, Ecole Polytechnique, Décembre 2018.
- Séminaire LPCT, Nancy, Février 2019.
- Séminaire LAMA, Université Gustave Eiffel, Novembre 2021.
- Séminaire PHIMECA l'aléatoire par les chemins de traverse, Novembre 2021.
- Séminaire LAGA, Université Sorbonne Paris Nord, Novembre 2021.

*A l'étranger :*

- Séminaire de mathématiques appliquées de l'EPFL, Lausanne, Mai 2002.
- Séminaire Mécanique numérique et simulation, Ruhr Universität, Bochum, Décembre 2003.
- Applied Mathematics Seminar, MIS, Coventry University, Janvier 2004.
- CRM and McGill Applied Mathematics Seminar, Montreal, Octobre 2004.
- Courant Institute Applied Mathematics Seminar, New York, Mars 2005.
- Computational and Applied Mathematics Seminar of Penn State University, Mars 2005.
- Applied analysis and computation Seminar, Massachusetts University, Avril 2005.
- Séminaire dynamique moléculaire, Freie Universität, Berlin, Novembre 2005.
- Séminaire KTH/SU Mathematics Colloquium, Stockholm, Mai 2006.
- Séminaire de calcul scientifique, Kiel, Novembre 2006.
- Seminar über Partielle Differentialgleichungen und Numerik, Universität Zürich, Juin 2007.
- Applied Mathematics Seminar of the Hebrew University of Jerusalem, Décembre 2008.
- Mathematics seminar at the Imperial College, London, Mars 2009.
- IMA seminar on Mathematics and Chemistry, Mai 2009.
- Warwick seminar on Applied Mathematics and Statistics, Octobre 2009.
- Seminar at the Institute of Computational Mathematics (CAS), Janvier 2010.
- Seminar at Cornell University (CEE), Février 2010.
- Analysis seminar, MPI Leipzig, Octobre 2010.

- Analysis seminar, MPI Leipzig, Avril 2012.
- Arbeitsbereich Numerik Mathematisches Institut seminar, Uni Tuebingen, Mai 2012.
- Kolloquium, Institut für Mathematik, Universität Mainz, Janvier 2013.
- Math colloquium, University of Minnesota, Avril 2013.
- PDE seminar, University of Minnesota, Avril 2013.
- Séminaire du groupe de Klaus Schulten, Urbana Champaign, Janvier 2014.
- Oberseminar Analysis, Munich, Juin 2014.
- Statistics Colloquium, Chicago, Octobre 2014.
- Maxwell mini-symposium, Analysis and its applications, Avril 2015.
- Warwick Mathematics Colloquium, Juin 2016.
- Mathematisches Kolloquium RWTH Aachen University, Aachen, Décembre 2017.
- Computational and Applied Mathematics / PDE seminar, University of Chicago, Février 2019.
- CNLS Seminar, Los Alamos National Laboratory, USA, Juin 2019.
- AMMP Colloquium, Imperial College London, Novembre 2019.
- "Fluids and Materials" seminar, Bristol, England, Novembre 2019.
- Applied Mathematics seminar, Edinburgh, United Kingdom, Janvier 2020.
- Numerical Analysis seminar, Bath, United Kingdom, Février 2020.
- Statistics seminar, Bristol, United Kingdom, Février 2020.
- Analysis and probability seminar, Université Mohammed VI Polytechnique, online, Septembre 2021.
- Probability and Stochastic Processes seminar, University of Delaware, Septembre 2021.

<b>ENSEIGNEMENT</b>
---------------------

*Cours sur invitation :*

- CEMRACS 2008, cours (3h) sur le thème : Multiscale modelling of complex fluids : a mathematical initiation, Marseille, Juillet 2008.
- Ecole doctorale ECODOQUI, cours (3h) sur le thème : Méthodes stochastiques en dynamique moléculaire, Paris, Novembre 2008.
- Workshop stress tensor effects on fluid mechanics, cours (4h30) sur le thème : Multiscale modelling of complex fluids : a mathematical initiation, Morningside Institute, Pekin, Janvier 2010.
- Lectures (4h) on Free Energy Computations, Cornell University (School of Civil and Environmental Engineering), Février 2010.
- Lectures (3h) on Stochastic processes, PDEs and molecular dynamics, Université de Lille, Septembre 2010.
- Tutorial "Materials Defects" (3h), IPAM, Los Angeles, Septembre 2012.
- Lectures "Computational methods for statistical mechanics" (2h), ICMS, Edinburgh, Juin 2014.
- Lectures on "Stochastic numerical methods and molecular dynamics simulations" (15h), Ecole d'été Institut du Calcul et de la Simulation (UPMC), Roscoff, Août 2015.
- Lectures on "Numerical methods in molecular dynamics" (4h30), Winterschool Universität Basel, Engelberg, Février 2016.
- Lectures on "Model reduction techniques for stochastic dynamics" (3h) , Ecole GDR EGRIN, Mai 2016.

- Lectures on "Stochastic differential equations in large dimension and numerical methods" (4h), RICAM Winterschool, Linz, Décembre 2016.
- Lectures on "Algorithms for computational statistical physics", (3h), ICTS, Bangalore, Août 2017.
- Tutorial on "Sampling efficiently metastable dynamics : algorithms and mathematical analysis", (2h), IPAM, Los Angeles, Septembre 2017.
- Mini-school math/chemistry GDR CORREL, (9h), Avril 2018.
- Lectures on "Stochastic numerical methods and molecular dynamics simulations" (15h), Ecole d'été Institut des Sciences du Calcul et des Données (Sorbonne Université), Roscoff, Août 2018.
- Leverhulme Trust Research Lectures : Free energy adaptive biasing methods, Sampling measures supported on submanifolds, Splitting methods for rare event simulations (3h), Imperial College of London, United Kingdom, Février 2020.
- Ecole d'été de mécanique théorique, "Simulation moléculaire : modèles, calcul d'énergie libre et aspects dynamiques" (7h30), Quiberon, France, Septembre 2020.
- Hausdorff School for Advanced Studies in Mathematics, "Sampling problems in computational statistical physics" (3h45), Bonn (online), Germany, Septembre 2020.
- Brummer & Partners MathDataLab, "Sampling problems in computational statistical physics" (3h), KTH (online), Sweden, Janvier 2021.
- Lecture Series in Probability Theory, "Jump Markov models and transition state theory : the quasi-stationary distribution approach", Seoul National University, South Korea (online), Août 2021 (avec D. Le Peutrec and B. Nectoux).
- Constructing collective variables using Machine Learning and free energy biased simulations, AlgoSB Winter school 2021, CIRM, France, Novembre 2021 (avec T. Pigeon and G. Stoltz).

*Cours dispensés durant l'année universitaire 2021-2022 :*

- Professeur à l'Ecole des Ponts ParisTech :
  - Projets Modéliser Programmer Simuler.
- Université Pierre et Marie Curie (M2 Mathématiques et Applications) :
  - Méthodes numériques probabilistes.
- Ecole Polytechnique :
  - MODAL en mathématiques appliquées.
  - Aléatoire.
  - Modélisation de phénomènes aléatoires.
  - Gestion des incertitudes et analyse de risque.

<b>ENCADREMENTS DE THESES</b>
-------------------------------

- Antonin Orriols, thèse ayant pour titre *Algorithmes d'optimisation et de contrôle d'interface libre. Application à la production industrielle d'aluminium* (soutenue le 15 décembre 2006, directeur de thèse : C. Le Bris).
- Gabriel Stoltz, thèse ayant pour titre *Quelques méthodes mathématiques pour la simulation moléculaire et multiéchelle* (soutenue le 14 juin 2007, directeur de thèse : E. Cancès).
- Sébastien Boyaval, thèse ayant pour titre *Modélisation et simulation des fluides complexes pour le génie civil* (soutenue le 16 décembre 2009, directeurs de thèse : C. Le Bris et T. Lelièvre).
- Raphaël Roux, thèse ayant pour titre *Etude probabiliste de systèmes de particules*

- en interaction : applications à la dynamique moléculaire* (soutenue le 6 décembre 2010, directeurs de thèse : B. Jourdain et T. Lelièvre).
- Kimiya Minoukadeh, thèse ayant pour titre *Méthodes numériques en dynamique moléculaire* (soutenue le 24 novembre 2010, directeurs de thèse : E. Cancès et T. Lelièvre).
  - Virginie Ehrlacher, thèse ayant pour titre *Quelques modèles mathématiques en chimie quantique et propagation d'incertitudes* (soutenue le 12 juillet 2012, Directeurs de thèse : E. Cancès et T. Lelièvre).
  - Rémi Joubaud, thèse ayant pour titre *Modélisation mathématique et numérique des fluides à l'échelle nanométrique* (soutenue le 20 novembre 2012, directeurs de thèse : A. Ern et T. Lelièvre).
  - José Infante-Acevedo, thèse ayant pour titre *Méthodes numériques et modèles pour le risque de marché et l'évaluation financière* (soutenue le 9 décembre 2013, directeurs de thèse : A. Alfonsi et T. Lelièvre).
  - Fabien Casenave, thèse *Méthodes de réduction de modèles appliquées à des problèmes d'aéroacoustique résolus par équations intégrales*, (soutenue le 5 décembre 2013, directeurs de thèse : A. Ern et T. Lelièvre).
  - David Benoit, thèse ayant pour titre *Divers problèmes théoriques et numériques liés à la simulation de fluides non newtoniens*, (soutenue le 22 janvier 2014, directeurs de thèse : C. Le Bris et T. Lelièvre).
  - Houssam Alrachid, thèse ayant pour titre *Analyse mathématique de méthodes numériques stochastiques en dynamique moléculaire*, (soutenue le 5 novembre 2015, directeur de thèse : T. Lelièvre).
  - Rémi Saint, thèse ayant pour titre *Etude des instabilités dans les modèles de trafic*, (soutenue le 22 septembre 2016, directeurs de thèse : T. Lelièvre et X. Louis).
  - Henri Louvin, thèse ayant pour titre *Développement d'une méthode de réduction de variance adaptative pour le transport Monte-Carlo de particules*, (soutenue le 12 octobre 2017, directeurs de thèse : C. Diop et T. Lelièvre)
  - Boris Nectoux, thèse ayant pour titre *Analyse spectrale et analyse semi-classique pour la métastabilité en dynamique moléculaire* (soutenue le 20 novembre 2017, directeurs de thèse : E. Cancès et T. Lelièvre).
  - Athmane Bakhta, thèse ayant pour titre *Modèles mathématiques et simulation numérique de dispositifs photovoltaïques* (soutenue le 19 décembre 2017, directeurs de thèse : E. Cancès et T. Lelièvre, encadrement : V. Ehrlacher).
  - Laura Silva Lopes, thèse ayant pour titre *Méthodes numériques pour la simulation d'évènements rares en dynamique moléculaire* (soutenue le 19 décembre 2019, directeurs de thèse : J. Hénin et T. Lelièvre).
  - Qiming Du, thèse ayant pour titre *Sequential Monte Carlo and Applications in Molecular Dynamics* (soutenue le 17 juin 2020, directeurs de thèse : A. Guyader et T. Lelièvre).
  - Mouad Ramil, thèse ayant pour titre *Processus cinétiques dans les domaines à bord et quasi-stationnarité* (soutenue le 10 décembre 2020, directeurs de thèse : T. Lelièvre, co-encadrement : J. Reygner).
  - Raed Blel, thèse sur les méthodes de Monte Carlo et la réduction de modèles, (depuis Octobre 2018, directeurs de thèse : V. Ehrlacher et T. Lelièvre).
  - Zineb Belkacemi, thèse sur les méthodes d'apprentissage pour la réduction de modèles, (depuis Octobre 2018, directeurs de thèse : T. Lelièvre et G. Stoltz).
  - Lise Maurin, thèse ayant pour titre *Adaptive biasing algorithms : mathematical*

- analysis and applications in molecular dynamics* (soutenue le 16 décembre 2021, directeurs de thèse : T. Lelièvre et J.-P. Piquemal, co-encadrement : P. Monmarché).
- Yonah Conjugo-Taumhas, thèse sur la méthode des bases réduites pour des problèmes aux valeurs propres non auto-adjoints (depuis Octobre 2020, directeurs de thèse : T. Lelièvre, co-encadrement : G. Dusson, V. Ehrlacher, F. Madiot).
  - Thomas Pigeon, thèse sur des méthodes avancées de dynamique moléculaire pour des problèmes de catalyse (depuis Octobre 2020, directeurs de thèse : T. Lelièvre et P. Raybaud, co-encadrement : G. Stoltz).
  - Régis Santet, thèse sur l'amélioration de méthodes d'échantillonnage de dynamiques réversibles et non-réversibles (depuis Octobre 2021, directeurs de thèse : T. Lelièvre et G. Stoltz).