

Echantillonnage de mesures de probabilité avec contraintes fixées en moyenne – application à la simulation moléculaire

Gabriel STOLTZ, CERMICS, Ecole des Ponts et équipe MICMAC, INRIA Rocquencourt

Je présente une manière d'échantillonner des configurations microscopiques d'un système physique selon une mesure de Boltzmann-Gibbs dépendant d'un paramètre extérieur, qui doit être choisi de telle sorte qu'une contrainte soit satisfaite en moyenne. La méthode repose sur une équation différentielle stochastique non-linéaire, et sa convergence peut être analysée par des méthodes d'entropie. Je discute également un schéma numérique, ainsi que des résultats de simulation sur le cas test qui a motivé le travail suite à une question de mes collègues du CEA/DAM : le calcul de la courbe d'Hugoniot d'un fluide (qui permet de déterminer les propriétés sous choc d'un matériau), et son isentrope.

Références

- [1] J.-B. MAILLET ET G. STOLTZ, Sampling constraints in average: The example of Hugoniot curves, *Appl. Math. Res. Express* **2008**, abn:004 (2009)
- [2] J.-B. MAILLET, E. BOURASSEAU, L. SOULARD, J. CLEROUIN ET G. STOLTZ, Constant entropy sampling and release waves of shock compressions, *Phys. Rev. E* **80**, 021135 (2009)