

Méthodes numériques pour la simulation moléculaire

Guillaume DUJARDIN, Equipe SIMPAF, INRIA Lille

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

L'objectif de ce mini-symposium est de présenter des avancées récentes en simulation moléculaire, c'est-à-dire en physique statistique computationnelle (à l'équilibre ou hors d'équilibre) et en physique quantique numérique. Ce sont des champs scientifiques passionnants, à l'interface de nombreuses disciplines scientifiques (par exemple, la chimie, la biologie, la physique, ou encore l'informatique scientifique), et également à l'interface de plusieurs domaines des mathématiques appliquées (étude des équations aux dérivées partielles, théorie spectrale, intégration numérique des équations différentielles ordinaires et des équations différentielles stochastiques, méthodes de Monte-Carlo, etc).

Nous faisons parler de jeunes chercheurs en thèse, afin de montrer que ce domaine est très vivant et en plein essor ! Plus précisément, nous entendrons :

- Séverine Paul (Université de Cergy), dont l'exposé portera sur le modèle de Hartree-fock-Bogoliubov pour les étoiles à neutrons ;
- Nicolas Perrin (Equipe TOSCA, INRIA Sophia-Antipolis), qui présentera des résultats nouveaux sur l'interprétation probabiliste de l'équation de Poisson-Boltzmann (utilisée pour décrire des systèmes chargés) ;
- Rémi Joubaud (CERMICS), qui nous parlera de méthodes hors d'équilibre pour le calcul de viscosité à l'échelle atomique dans les fluides simples ;
- Alessandra Iacobucci (CEREMADE), qui évoquera le calcul de la conductivité thermique dans les chaînes d'atomes unidimensionnelles.

Pour ceux qui voudraient se préparer activement à entendre les exposés ci-dessus, nous proposons une liste de quelques ouvrages permettant d'entrer dans le domaine.

Références

- [1] R. BALIAN, *From Microphysics to Macrophysics. Methods and Applications of Statistical Physics*, volume I - II (Springer, 2007).
- [2] E. CANCÈS, M. DEFRANCESCHI, W. KUTZELNIGG, C. LE BRIS, AND Y. MADAY, Computational quantum chemistry: A primer, In *Handbook of Numerical Analysis (Special volume on computational chemistry)*, P. CIARLET AND C. LE BRIS (Eds.), volume X (Elsevier, 2003), pp. 3-270.
- [3] D. FRENKEL AND B. SMIT, *Understanding Molecular Simulation, From Algorithms to Applications (2nd ed.)*(Academic Press, 2002).
- [4] E. HAIRER, C. LUBICH, AND G. WANNER, *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, volume 31 of *Springer Series in Computational Mathematics* (Springer-Verlag, 2006).
- [5] M. REED AND B. SIMON, *Methods of Modern Mathematical Physics. I-IV* (Elsevier, 1975-1979)
- [6] J.N. ROUX, S. RODTS ET G. STOLTZ, *Introduction la physique statistique et la physique quantique*, cours de l'Ecole des Ponts (2009)
(http://cermics.enpc.fr/~stoltz/poly_phys_stat_quantique.pdf)
- [7] T. LELIÈVRE, M. ROUSSET AND G. STOLTZ, *Free-energy Computations: A Mathematical Perspective* (Imperial College Press, 2010)
- [8] M. TUCKERMAN, *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation* (Oxford Graduate Texts, 2010)

Guillaume DUJARDIN, Equipe SIMPAF, INRIA Lille - Nord Europe, Parc Scientifique de la Haute Borne,
40 avenue Halley, Bt.A Park Plaza, 59650 Villeneuve d'Ascq, France
guillaume.dujardin@inria.fr

Gabriel STOLTZ, Université Paris Est, CERMICS et INRIA, équipe-projet MICMAC, Ecole des Ponts Paris-
Tech, 6 & 8 Av. Pascal, 77455 Marne-la-Vallée, France
stoltz@cermics.enpc.fr