

Mini-Symposium 5

Simulation Moléculaire

Philippe CHARTIER, INRIA-Rennes

La modélisation en chimie traite de systèmes comme les systèmes biologiques (protéines en solution,...), les nanostructures, les solides à l'échelle quantique, etc...

Les équations de Schrödinger (ou leurs approximations) régissant l'état et l'évolution des systèmes moléculaires n'étant pas intégrables à la main, on doit avoir recours à la simulation numérique. Il s'ensuit une hiérarchie de modèles, des plus sophistiqués dits *ab initio* à l'échelle quantique à des modèles plus rudimentaires comme ceux de la dynamique moléculaire classique avec champs de force. Les premiers consistent à résoudre des problèmes de minimisation du type

$$\inf\{\langle H\phi, \phi \rangle, \langle \phi, \phi \rangle = 1\}$$

pour trouver l'état fondamental du système, ou alternativement à simuler l'évolution du système par une équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = H\phi.$$

Ils sont formidablement compliqués, nécessitent des algorithmes spécifiques, et sont génériquement restreints à des systèmes de petite taille qu'on veut connaître dans les plus grands détails. Les seconds consistent à traiter de manière classique la molécule en se focalisant sur la gestion de la position de ses noyaux (les électrons sont en quelque sorte agrégés autour de "leur" noyau, et leur présence est prise en compte via un potentiel de champ moyen qui va modifier les interactions entre noyaux). Sous la version statique (dite *mécanique moléculaire*) il s'agit de minimiser

$$\inf V(x_1, x_2, \dots, x_M)$$

pour trouver la configuration d'équilibre des noyaux. Sous la version dynamique (*dynamique moléculaire*), il s'agit de simuler les équations de Newton

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} x_i = \nabla_{x_i} V(x_1, x_2, \dots, x_M).$$

A tous les étages de cette hiérarchie se posent des problèmes mathématiques et numériques.

Les quatre orateurs de ce mini-symposium présenteront des travaux focalisés sur l'une ou l'autre des approches :

- Guillaume Dujardin est étudiant en thèse au sein de l'équipe IPSO de l'INRIA Rennes. Son thème de recherche consiste à étudier le comportement en temps long de méthodes numériques pour l'équation de Schrödinger. Son exposé aura pour but de décrire les techniques d'analyse dans le cas classique et leur application au cas quantique.
- Stéphane Le Roux est étudiant en thèse au CEA-DAM Ile-de-France, sous la direction de Gilles Zérah. Il présentera une méthode de récursion pour le calcul de densité de charge électronique.
- Tony Lelièvre est chercheur au CERMICS-ENPC. Il s'intéresse principalement à l'analyse numérique de problèmes micro-macro provenant de la simulation d'écoulements de fluides polymériques et à la simulation des instabilités dans les cuves d'électrolyse de l'aluminium. Son exposé présentera une technique de résolution numérique d'équations différentielles stochastiques avec contraintes: l'objectif est ici d'échantillonner une surface d'énergie constante afin de calculer une énergie libre.
- Frédéric Legoll est chercheur au CERMICS-ENPC. Il s'intéresse principalement aux méthodes et algorithmes pour la dynamique moléculaire et à l'analyse numérique de modèles micro-macro pour les solides. Son exposé présentera un résultat théorique relatif à la technique d'échantillonnage par bain thermostatique (équations de Nosé-Hoover).

Philippe CHARTIER – Philippe.Chartier@inria.fr
INRIA-Rennes, Campus de Beaulieu, 35042 RENNES CEDEX