

*Projet Micmac**Méthodes et Ingénierie du Calcul pour les  
systèmes Multiéchelles : de l'Atome au  
Continuum**Rocquencourt*

THÈME 4B

*R* *apport  
d'Activité*

2002



# Table des matières

<b>1. Composition de l'équipe</b>	<b>1</b>
<b>2. Présentation et objectifs généraux</b>	<b>1</b>
<b>3. Fondements scientifiques</b>	<b>1</b>
<b>4. Domaines d'application</b>	<b>2</b>
4.1. Simulation des gros systèmes	2
4.2. Contrôle par laser	3
<b>5. Logiciels</b>	<b>4</b>
<b>6. Résultats nouveaux</b>	<b>5</b>
6.1. Algorithmes pour la chimie quantique moléculaire	5
6.2. Contrôle par laser	5
6.3. Modélisation micro-macro des solides	5
6.4. Modélisation micro-macro de fluides polymériques	6
6.5. Modélisation micro-macro de boues	6
6.6. Simulation de flot MHD	6
<b>7. Contrats industriels</b>	<b>7</b>
<b>8. Actions régionales, nationales et internationales</b>	<b>7</b>
8.1. Actions régionales	7
8.2. Actions nationales	7
8.3. Actions financées par la Communauté Européenne	7
8.4. Relations bilatérales internationales	7
8.4.1. Amériques	7
<b>9. Diffusion des résultats</b>	<b>7</b>
9.1. Animation de la communauté scientifique	7
9.2. Actions d'enseignement	7
9.3. Autres enseignements	8
9.4. Participation à des colloques	8
<b>10. Bibliographie</b>	<b>8</b>



# 1. Composition de l'équipe

## Responsable scientifique

Claude Le Bris [Ingénieur en chef des Ponts et Chaussées, ENPC]

## Personnel Inria

Gabriel Turinici [CR]

## Collaborateurs extérieurs

Mireille Defranceschi [Directeur de Recherche, Commissariat à l'Energie Atomique]

Yvon Maday [Professeur, Université de Paris VI]

Marc Schoenauer [DR Inria, FRACTALES]

## Personnel Ministère de l'Équipement

Eric Cancès [Ingénieur des Ponts et Chaussées, ENPC]

Frédéric Legoll [Ingénieur des Ponts et Chaussées, EDF, en thèse]

Tony Lelièvre [Ingénieur des Ponts et Chaussées, ENPC, en thèse]

## Chercheur post-doctorant

Claude Dion [Bourse EGIDE]

## Doctorants

Anne Auger [Bourse Université Paris 6]

Maxime Barrault [CIFRE Electricité de France]

Yousra Gati [Bourse Ecole Nationale des Ponts et Chaussées]

François Lodier [Bourse Ecole Nationale des Ponts et Chaussées]

# 2. Présentation et objectifs généraux

Le projet MICMAC est commun à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (ENPC) et à l'INRIA. Il a été créé en octobre 2002 à partir d'une action ayant seulement existé quelques mois. Il est localisé majoritairement au CERMICS (Centre d'Enseignement et de Recherches en Mathématiques, Informatique et Calcul Scientifique) de l'ENPC. Son objectif est d'analyser et d'améliorer les algorithmes numériques utilisés dans les simulations en chimie quantique moléculaire à l'échelle microscopique, ainsi que dans les simulations couplant cette échelle microscopique avec des échelles plus grandes, macroscopiques.

Il s'agit notamment, pour le premier aspect, de transformer un succès d'estime auprès de la communauté des chimistes (des mathématiciens appliqués s'intéressent aux modèles manipulés et les techniques utilisées, avec quelques réussites ponctuelles réelles au premier rang desquelles l'implémentation dans le code Gaussian d'une méthode développée par Eric Cancès pour la simulation de la phase liquide) en une action scientifique ayant un véritable impact sur la communauté des chimistes, et une authentique reconnaissance pratique par l'emploi des outils construits.

# 3. Fondements scientifiques

La simulation numérique en chimie est née il y a une quarantaine d'années. Elle a pour objet la simulation 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 (sauf dans le cas de l'atome d'hydrogène), il y a eu très vite un réel engouement pour les calculs sur ordinateur. Historiquement, le premier type de calcul a été la résolution de gros systèmes aux valeurs propres (l'équation d'Euler-Lagrange du problème de minimisation modélisant l'état fondamental d'un système quantique est une équation aux valeurs propres). On pouvait aisément vérifier

la validité du calcul car les valeurs propres calculées pouvaient être comparées aux énergies d'ionisation, expérimentalement mesurables. Aujourd'hui la chimie numérique n'est pas seulement la résolution de problèmes aux valeurs propres, mais des algorithmes d'optimisation, des équations d'évolution, etc...

Il convient de souligner plusieurs points sur la signification de ce mot « chimie » dans ce contexte :

- « chimie » ne veut pas dire « équations de la cinétique chimique » (constantes de réactions, gros systèmes d'EDO compétitives, réduction de systèmes,...). Il s'agit de chimie quantique, à l'échelle microscopique ( $10^{-10}$  m),

- le projet est plus axé sur le niveau quantique que sur le niveau « dynamique moléculaire », même s'il comporte aussi de tels aspects (la dynamique moléculaire est incontournable quand on veut passer à des échelles supérieures, mais il faut la nourrir à partir du niveau quantique, *via* par exemple le calcul de potentiels d'interaction entre les atomes),

- cette chimie est une chimie théorique, qui connaît depuis quelques années un essor important comme en témoigne l'attribution du prix Nobel de chimie 1998 à deux de ses promoteurs (John Pople et Walter Kohn) ; si une infime part des millions de chercheurs en chimie contribue à leur développement, le nombre d'utilisateurs de codes de simulation moléculaire est en croissance rapide (un article sur dix paraissant aujourd'hui dans des revues de chimie physique comporte des simulations numériques au niveau moléculaire).

Une caractéristique de cette chimie numérique est que, produit de l'histoire, elle a été mise en oeuvre par des chimistes, qui n'étaient pas des professionnels du calcul scientifique, et qui ont appris sur le tas. Basés sur une intuition impressionnante, les algorithmes ainsi développés sont très efficaces, mais encore largement perfectibles par une approche de mathématicien professionnel (ce n'est pas seulement un pari sur l'avenir, le passé récent l'a montré).

Nous sommes maintenant à un point où de nouvelles questions, jusqu'alors hors de portée, se posent. Parmi ces nouvelles questions et donc ces nouveaux enjeux sur lesquels il est scientifiquement crucial de se positionner, on peut citer : la simulation des très gros systèmes, et le contrôle par laser.

## 4. Domaines d'application

### 4.1. Simulation des gros systèmes

Pour la simulation des gros systèmes, la taille croissante des systèmes qu'on veut modéliser nécessite des techniques de plus en plus pointues, qui risquent d'échapper à une communauté non formée pour cela. Le scaling d'une méthode de chimie est largement supérieur à  $N^3$ ,  $N$  étant par exemple le nombre d'électrons. Aller vers le scaling linéaire coûte très cher en matière grise. Ici, les codes sont nombreux, et la compétition est forte. Comme alternative et complément à cette approche consistant à traiter efficacement et explicitement tout le système à l'échelle quantique, on a la possibilité d'insérer le calcul quantique dans un calcul à une échelle supérieure, ou de le coupler avec un modèle à une échelle supérieure. Le premier cas est celui typiquement de la dynamique moléculaire : le second membre des équations de Newton décrivant la dynamique des noyaux est un champ de forces « moyen » calculé à l'échelle quantique et incluant l'effet des électrons. Le second cas est celui des calculs dits micro-macro, qui sont menés aussi bien en phase liquide (modélisation de la solvation où on plonge le système moléculaire dans un continuum (là l'intérêt est sur le système micro), modélisation des fluides à microstructures où on couple avec les équations de la mécanique des fluides (là l'intérêt est sur le système macro), qu'en phase solide (couplage avec des modèles d'élasticité). Dans ce second cas, les codes sont beaucoup moins nombreux.

Pour aborder les problèmes de grande taille nécessaires à la simulation des gros systèmes, il est clair qu'il faut à la fois développer des méthodes nouvelles et revisiter les méthodes existantes pour en tirer le meilleur parti et les pousser au delà de leurs limites.

Citons quelques problématiques :

- la construction d'itérations SCF (« itérations sur la non linéarité ») efficaces pour la résolution du problème aux valeurs propres *non linéaire*,

- la résolution du problème *linéaire* ( de nombreuses approches existent, comme les méthodes diagonalization-free), il n'est pas question d'améliorer ces méthodes en elles-mêmes (ce qui a largement été fait par des groupes très avancés dans le monde), mais plutôt de voir l'interaction de telles approches avec d'autres parties de la chaîne de calcul ;

- un choix astucieux de la base sur laquelle la discrétisation est faite. Des méthodes nouvelles de bases réduites fondées sur des estimateurs d'erreur *a posteriori* de la qualité de l'approximation peuvent être adaptées aux cas pertinents en chimie. Ceci peut s'avérer utile aussi bien dans une modélisation stationnaire que dans une modélisation d'évolution.

Tout ceci peut contribuer à construire des algorithmes ayant une complexité inférieure à ceux classiquement utilisés.

Comme alternative/complément, il y a, on l'a dit, la possibilité de coupler avec les modélisations à des échelles supérieures

Il est certes clair que les modèles quantiques ont un intérêt pour eux-mêmes. En effet, même si beaucoup de systèmes d'intérêt pratique sont très gros, et donc hors de portée d'une modélisation tout entière au niveau quantique, il reste encore beaucoup de situations où les systèmes petits à calculer très précisément interviennent.

Mais ces modèles quantiques peuvent aussi être nécessaires pour « irriguer » des modèles plus grossiers, au sein de la modélisation de gros systèmes. Ceci peut se faire de manière séquentielle ou parallèle.

Par « manière séquentielle » nous entendons par exemple le calcul de champs de forces dans la dynamique moléculaire. Ces champs de force sont précalculés par des modèles quantiques, puis « fittés » et injectés dans les calculs de dynamique moléculaire newtonienne.

On peut aussi citer l'exemple des pseudos-potentiels pour les solides : on ne modélise pas tous les électrons du système (il y en a trop), et on préfère agréger l'effet de la plupart des électrons sous l'aspect d'un potentiel effectif, dans lequel les derniers électrons, traités eux explicitement, évolueront.

Dans ces deux champs, on peut faire du travail numérique (assimilation de données, calage de paramètres, ....)

Par « manière parallèle » nous entendons les calculs couplés où plusieurs échelles sont conjointement gérées (contrairement au paragraphe précédent où on fait du passage d'information). Comme exemple, indiquons les couplages QM/MM/CM (mécanique quantique, mécanique moléculaire, modèle de continuum) en phase liquide par exemple, ou les calculs micro-macro (pour les solides et les équations de l'élasticité, ou pour les polymères et les équations de la mécanique des fluides). Dans tous ces problèmes se posent des questions intéressantes et difficiles de « joints » entre les différentes phases. C'est une problématique très actuelle.

## 4.2. Contrôle par laser

Pour le contrôle des évolutions, la situation est différente de celle décrite ci-dessus. Le sujet est nouveau, les codes sont moins diffusés et plus le fait d'équipes isolées ; ils sont probablement plus « problème-dependant ». Schématiquement, on peut distinguer les approches suivantes :

- l'approche « intuition physique » qui consiste à modéliser le système par un petit nombre d'états quantiques représentatifs ; les calculs peuvent quasiment être faits à la main pour l'optimisation du champ laser, et on insère ensuite ce champ dans une simulation plus lourde d'un système modélisé de façon plus sophistiquée ; les tenants de cette approche sont Brumer (Canada), Shapiro (Israël), et Bandrauk (Canada) quand le système à modéliser est tout petit et que les champs sont très intenses,

- l'approche « optimisation numérique » dans laquelle l'optimisation du champ laser est réalisée informatiquement, l'intégration des équations d'évolution directes à champ donné peut être soit simulée numériquement, soit faite expérimentalement (boucle expérience/calcul) ; les tenants de cette approche sont Rabitz (Princeton), et Atabek (Orsay)

Tout ceci forme aujourd'hui un but très raisonnable à court terme, à condition de limiter ses ambitions. Typiquement, l'objectif du contrôle n'est pas d'amener exactement le système dans un état donné, ce qui est d'une part trop exigeant et d'autre part probablement inutile. Ce qu'on peut plutôt espérer est un

objectif qualitatif, comme par exemple aligner et orienter une molécule dans l'espace, pour qu'elle soit bien préconditionnée pour ensuite faire quelque chose. Des expériences ont montré la faisabilité de ce programme.

Côté mathématique, ce type de contrôle « flou » pose des questions fondamentales théoriques (quelle notion de contrôlabilité ?), des questions pratiques (quel modèle prendre ? quel objectif demander ?, comment mesurer le succès ?), et des questions numériques (comment corroborer l'expérience par le calcul, comment aider l'expérimentateur dans son choix de laser ?, comment interpréter les résultats ?...). Un gros travail de débroussaillage a déjà été fait, sur le plan théorique et sur le plan numérique. Dans le futur, il faut poursuivre sur les deux plans à la fois. On continuera notamment à s'intéresser à la comparaison d'algorithmes d'optimisation déterministes et d'algorithmes de nature stochastique. Au sein de chaque groupe, on essaiera de tester les meilleures stratégies : comment calculer le gradient ? (différentiation automatique, ...), quel algorithme de robustesse prendre ?, ou bien quels opérateurs de mutation et croisement prendre dans le génétique ?,...

## 5. Logiciels

Les travaux numériques effectués par les physiciens et les chimistes dans le domaine de la simulation *ab initio* se structurent autour du développement de codes de calcul. Plusieurs stratégies coexistent.

Citons en premier lieu le cas du code Gaussian, de loin le plus diffusé à l'heure actuelle (60 % des licences). Ce code, dont le promoteur historique est le prix Nobel de Chimie John Pople, bénéficie des contributions d'une grande quantité d'équipes de renommée mondiale, parmi lesquelles les équipes de

- G. Scuseria (Rice University)
- J. Tomasi (Université de Pise)
- M. Head Gordon (Berkeley)
- J. Cioslowski (Florida State University)
- M. Challacombe (Supercomputer Institute, Minneapolis)
- Morokuma (Emory University)
- C. Adamo (Chimie Paris)
- P.M.W. Gill (Nottingham)

Dans sa version actuelle, il comporte de l'ordre de 500 000 lignes de fortran 77. Il est commercialisé par la société Gaussian Inc.

D'autres équipes ont préféré développer en interne leur propre code. Mentionnons ainsi par exemple les codes

- ADF (Amsterdam)
- VASP (Vienne)
- SIESTA (Madrid)
- CRISTAL (Turin).

Certaines équipes ont cédé leur code à une société chargée de les commercialiser. La plus importante de ces dernières est la société MSI issue de la fusion de *Molecular Simulation* et de *Biosim*. Les codes ainsi commercialisés sont alors délivrés sans les sources et fonctionnent donc en boîte noire. Beaucoup d'utilisateurs (notamment industriels), d'abord séduits par cette formule en raison de la qualité des pré et post-traitements et par une politique commerciale offensive (« on sait tout faire »), en reviennent.

Citons aussi une récente initiative de X. Gonze (Louvain-la-Neuve) tentant de fédérer plusieurs équipes autour du développement d'un code (ABINIT) sous license GNU.

Le panorama esquissé ci-dessus met en évidence le fait que la France est sous-représentée dans ce domaine scientifique ; les rares codes qui ont été développés en France dans les années 80-90 (ASTERIX à Strasbourg, par exemple) n'ont pas survécu.

Un des objectifs premiers du projet MICMAC est donc la construction d'un code de chimie numérique avec le double potentiel de servir aux mathématiciens comme laboratoire d'idées pour des tests de nouvelle

stratégies numériques et de servir à la communauté physico-chimiste pour des calculs validés contrôlés et rigoureux, menés à bien sur des cas réels.

## 6. Résultats nouveaux

### 6.1. Algorithmes pour la chimie quantique moléculaire

**Participants :** Maxime Barrault, Eric Cancès, Claude LeBris, François Lodier, Gabriel Turinici.

A l'occasion de la rédaction du livre [1] au sein du volume spécial du « Handbook of numerical analysis » consacré à la « Computational Chemistry » et édité par C. LeBris, plusieurs aspects généraux de la chimie quantique ont été passés en revue. Quelques aspects particuliers ont été de plus isolés dans [5][6].

Sur les algorithmes pour les modèles quantiques, les travaux se sont partagés entre

- les améliorations des approches non linéaires dites SCF [20][12] en collaboration avec le groupe de Gustavo Scuseria (Houston) ; on a en particulier développé des méthodes du second ordre ;
- les améliorations des techniques de diagonalisation rapides, notamment pour les métaux, dans le but de construire des algorithmes de complexité linéaire par rapport au nombre d'électrons (algorithmes de « scaling linéaire ») ; dans cet esprit, on s'est intéressé aussi bien aux techniques de déflation, qu'aux techniques de décomposition de domaine ; tout le travail a été effectué en collaboration avec Electricité de France ;
- le développement de méthodes de type bases réduites [29][13][24][25][34] en collaboration avec de nombreux autres groupes, mais surtout avec Yvon Maday (Paris 6).

La dynamique moléculaire a aussi été abordée avec l'introduction d'algorithmes nouveaux [22] et l'application des méthodes parallèles [4]. Ce volet devrait largement se développer puisqu'une collaboration suivie a été amorcée avec Philippe Chartier, Erwan Faou (IRISA), et François Castella (Université de Rennes). Certaines idées visant à l'accélération des calculs de moyennes statistiques à partir de trajectoires hamiltoniennes individuelles sont en cours de tests.

Enfin, sur un tout autre problème, lié à l'interprétation et la visualisation des résultats d'un calcul de chimie quantique, des méthodes de lignes de niveau ont été développées, en collaboration avec Andreas Savin (Chimie théorique, Paris 6). Il s'agit là de fournir au chimiste peu familier avec les calculs une façon intuitive d'interpréter les résultats de structure électronique : on trace dans l'espace les zones où la densité électronique est importante, de manière à visualiser les liaisons entre atomes et identifier leur nature.

### 6.2. Contrôle par laser

**Participants :** Anne Auger, Adel BenHajYedder, Eric Cancès, Claude Dion, Claude LeBris, Gabriel Turinici.

Beaucoup de travaux ont été effectués pour l'optimisation numérique en jeu pour la détermination du bon champ laser à appliquer au système moléculaire pour atteindre le but recherché. Celui ci consiste, dans la plupart des situations étudiées, à aligner et orienter la molécule avec l'axe de polarisation du laser. Cependant d'autres situations où l'on veut amener le système dans un état de population choisi ont aussi été examinées. L'utilisation d'algorithmes de type évolutionnaire (en collaboration avec Marc Schoenauer (FRACTALES)) a amené de très bons résultats physiques (obtenus en collaboration avec Osman Atabek (CNRS Orsay)) [2][16][15][3][31]. L'analyse numérique de formes simples de ces algorithmes, ainsi que de nouveaux développements, sur d'autres cas physiques, sont en cours, notamment en collaboration avec Herschel Rabitz (Princeton), voir [23].

Par ailleurs, l'application des algorithmes de type parallèle sur des problèmes de contrôle optimal a été développée [35][26][28], et des études ont été menées sur d'autres types d'algorithmes [27].

### 6.3. Modélisation micro-macro des solides

**Participants :** Claude LeBris, Frédéric Legoll.

Des aspects théoriques variés pour le passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique ont été étudiés en collaboration avec Xavier Blanc (Paris 6) et Pierre-Louis Lions (Collège de France). De nombreuses publications relatent les résultats : [7][8][9][11][10]. Il s'agit essentiellement de bâtir un bon modèle d'état fondamental à l'échelle atomique pour une infinité de particules ( $10^{23}$  en fait). Ceci étant fait, on se pose la question du changement d'échelle et on cherche si on peut obtenir, par passage à la limite, des formes explicites de fonctionnelles de densité d'énergie mécanique pour la mécanique macroscopique. Cette démarche de passage d'une échelle à l'autre peut se décliner aussi bien sous sa forme séquentielle (on déduit du modèle atomique le modèle macroscopique), que sous sa forme parallèle (on couple les deux échelles).

Du point de vue numérique, l'analyse numérique de la méthode dite de Quasicontinuum et sa programmation sont en cours. Ces travaux numériques sont réalisés en collaboration avec Electricité de France.

## 6.4. Modélisation micro-macro de fluides polymériques

**Participants :** Eric Cancès, Claude LeBris, Tony Lelièvre.

On s'intéresse à la modélisation des fluides polymériques. En collaboration avec Benjamin Jourdain (ENPC-MATHFI), ainsi que Denis Talay et Mireille Bossy (OMEGA), on a présenté dans [19] l'analyse mathématique et numérique de certains systèmes couplés EDP-EDS mis en jeu dans les simulations numériques. On travaille sur ce sujet en contact avec Roland Keunings (Université Louvain la Neuve, Belgique) et Hans-Christian Ottinger (ETH, Zurich, Suisse).

Sur le plan mathématique, un théorème d'existence de solution pour le système couplé a été prouvé, dans le cas simple d'un écoulement de Couette, avec deux modèles différents pour la dynamique des chaînes polymériques. Un des deux modèles, dit FENE (pour finite extensibility) fait intervenir une EDS « explosive », et pose donc des questions non triviales d'existence de solution. Pour préparer des cas d'écoulements plus complexes, en dimensions 2 et 3, une théorie d'existence et d'unicité pour une large catégorie d'EDS a été mise au point dans [21].

Sur le plan de l'analyse numérique, un théorème de convergence du schéma a été démontré, et des questions de réduction de variance (pour affiner les résultats numériques) sont en cours d'étude.

## 6.5. Modélisation micro-macro de boues

**Participants :** Eric Cancès, Yousra Gati, Claude LeBris.

Dans la famille des fluides complexes, et en plus des fluides polymériques, on s'intéresse aussi à la modélisation des boues argileuses, en collaboration avec Philippe Coussot (LCPC) pour les aspects expérimentaux et Isabelle Catto (Paris 9) pour les aspects théoriques. Une preuve d'existence de solutions est en cours. Des simulations numériques sont aussi effectuées en une dimension, en comparant des techniques de simulation stochastique avec des techniques déterministes (en d'autres termes, la résolution des EDS avec la résolution des équations de Fokker-Planck). L'objectif à très court terme est de comparer les résultats des simulations numériques avec les mesures expérimentales effectuées sur un rhéomètre couplé avec un dispositif IRM.

## 6.6. Simulation de flot MHD

**Participants :** Claude LeBris, Tony Lelièvre.

En collaboration avec Jean-Frédéric Gerbeau (M3N), et pour le compte de Aluminium Pechiney, on a continué l'étude numérique et la construction d'un code de simulation de la cuve d'électrolyse d'aluminium. Les stratégies numériques employées et les résultats des simulations ont été détaillés dans plusieurs publications [18][17][33][32]. L'approche suivie a consisté à simplifier les équations du mouvement magnétohydrodynamique bi-fluide, en prenant soin de cependant laisser tous les couplages non linéaires s'effectuer. Cette approche est complémentaire de l'approche plus classique de linéarisation des équations. On a comparé, vis à vis de la question cruciale de stabilité des cuves, les conclusions et les critères de stabilité fournis par les deux approches.

## 7. Contrats industriels

Les membres du projet ont à ce jour de nombreuses collaborations industrielles : Simulations de cuve d'électrolyse pour Aluminium Pechiney, simulations en chimie moléculaire et en problèmes multiéchelles pour Electricité de France, aspects multiéchelles pour les gommages, ...

Il est prévu de continuer les collaborations existantes et d'en développer de nouvelles.

## 8. Actions régionales, nationales et internationales

### 8.1. Actions régionales

Le projet est commun INRIA-Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.

### 8.2. Actions nationales

Le projet pilote l'ACI jeunes chercheurs Contrôle par laser qui prend fin cette année. Cette action est animée par Claude Le Bris, sur le thème du contrôle par laser des réactions chimiques ; l'action fédère des mathématiciens appliqués, des physiciens théoriciens et expérimentateurs, provenant de 6 laboratoires d'Ile de France.

Il participe aussi au GDR Density Functional Theory animé par H. Dreysse (Physique, Strasbourg), sur le développement des méthodes DFT pour la simulation des matériaux et systèmes complexes et à la proposition de GDR Interaction de particules animé par Th. Goudon, sur des questions de modélisation et de simulation des suspensions, et autres fluides avec particules.

### 8.3. Actions financées par la Communauté Européenne

Certains membres du projet sont associés au Projet européen IHP « HYKE » (*Hyperbolic and kinetic equations : Asymptotics, numerics, Applications*) dont le *Scientist in charge* est Benoît Perthame (M3N), sur des aspects théoriques liés à la résolution de l'Equation de Schrödinger pour les gros systèmes et en temps long.

### 8.4. Relations bilatérales internationales

#### 8.4.1. Amériques

Des relations sont établies avec différents centres : Université de Rice (groupe de Gustavo Scuseria) pour le calcul de structure électronique et, sur le thème de contrôle en chimie quantique, Université de Sherbrooke (groupe d'André Bandrauk), département de Chimie de l'université de Princeton (groupe de Herschel Rabitz).

## 9. Diffusion des résultats

### 9.1. Animation de la communauté scientifique

Claude Le Bris est vice-président de la SMAI, chargé des relations industrielles.

### 9.2. Actions d'enseignement

- Simulation moléculaire : aspects théoriques et numériques, cours de DEA, université Paris 6 (C. LeBris).
- Simulation moléculaire, cours de DEA, université Paris 9 (E. Cancès).
- Systèmes multiéchelles, cours de la majeure SEISM, Ecole Polytechnique (C. LeBris).
- Calcul scientifique et Analyse, cours à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, (E. Cancès).
- Analyse en fréquences, cours à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, (E. Cancès).
- Modéliser, Programmer, Simuler, cours à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, (C. LeBris).

### 9.3. Autres enseignements

- - Méthodes numériques pour la chimie, Ecole d'analyse numérique, Craiova, Roumanie, mai 2002 (E. Cancès, C. Le Bris, G. Turinici)

### 9.4. Participation à des colloques

Des membres de l'équipe ont participé à des congrès, à des conférences et *workshops* :

- Journées Calcul scientifique pour les sciences de l'ingénieur, Université de Limoges (C. Le Bris)
- Séminaire du département de mathématiques Université de Chicago (C. Le Bris)
- Workshop Efficient algorithms for multiscale dynamics, Berlin (C. Le Bris, G. Turinici, F. Legoll)
- Congrès international Quantum control : mathematical and numerical challenges, Montreal (C. Le Bris(co-organisateur), G. Turinici, A. Auger, C. Dion, A. Ben Haj Yedder)
- Third AMIF international conference, Lisbonne (C. Le Bris (conférencier plénier), T. Lelièvre)
- International conference on nonlinear PDEs, Hong-Kong (C. Le Bris, conférencier plénier)
- 41<sup>st</sup> IEEE Conference on Decision and Control, Las Vegas, Nevada, USA (Adel Ben Haj Yedder, Gabriel Turinici)
- 8èmes Rencontres des chimistes théoriciens français, Strasbourg, septembre 2002 (E. Cancès)
- Rencontres du Groupement de Recherche DFT, Dinar, mai 2002 (E. Cancès)
- Sixth Workshop on Dynamics and Computation : From robotics to quantum control Royal Academy of Sciences, Bruxelles, 1-2 juillet 2002 (G.Turinici)

## 10. Bibliographie

### Livres et monographies

- [1] E. CANCÈS, M. DEFRANCESCHI, W. KUTZELNIGG, C. LEBRIS, Y. MADAY. *Computational chemistry : a primer*. North Holland, 2002, à paraître.

### Thèses et habilitations à diriger des recherche

- [2] A. B. H. YEDDER. *Optimisation numérique et Contrôle optimal : (applications en chimie moléculaire)*. thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2002.

### Articles et chapitres de livre

- [3] A. AUGER, A. B. H. YEDDER, E. CANCÈS, C. LEBRIS, C. M. DION, A. KELLER, O. ATABEK. *Optimal laser control of molecular systems : methodology and results*. in « Mathematical Models and Methods in Applied Sciences », numéro 9, volume 12, 2002, pages 1281-1315.
- [4] L. BAFFICO, S. BENARD, Y. MADAY, G. TURINICI, G. ZÉRAH. *Parallel in time molecular dynamics simulations*. in « Phys. Rev. E. », volume 66, 2002, pages 057701.
- [5] G. BERTHIER, M. DEFRANCESCHI, C. LEBRIS. *Revival of parameterized theoretical methods for applied sciences studies*. in « Int. J. Quantum Chem. », 2002, à paraître.
- [6] G. BERTHIER, M. DEFRANCESCHI, C. LEBRIS. *Shortcomings in computational chemistry*. in « Int. J. Quantum Chem. », 2002, à paraître.

- 
- [7] X. BLANC, C. LEBRIS. *Crystalline order in one dimensional Thomas-Fermi type models*. in « Contemporary Mathematics », 2002.
- [8] X. BLANC, C. LEBRIS. *Periodicity of the infinite volume ground state of a one dimensional quantum model*. numéro 6, volume 48, 2002, pages 791-803.
- [9] X. BLANC, C. LEBRIS, P.-L. LIONS. *A definition of ground state energies for systems composed of infinitely many particles*. in « Comm. PDE. », 2002, à paraître.
- [10] X. BLANC, C. LEBRIS, P.-L. LIONS. *Caractérisation des fonctions de  $R^3$  à potentiel newtonien borné*. in « C.R. Acad. Sc. », volume 334, 2002, pages 15-21.
- [11] X. BLANC, C. LEBRIS, P.-L. LIONS. *From molecular models to continuum mechanics*. in « Arch. Rat. Mech. Analysis », volume 164, 2002, pages 341-381.
- [12] E. CANCÈS, K. N. KUDIN, G. E. SCUSERIA, G. TURINICI. *Quadratically convergent algorithm for fractional occupation numbers*. in « J. Chem. Phys. », 2002, submitted.
- [13] E. CANCES, C. LEBRIS, Y. MADAY, G. TURINICI. *Towards Reduced Basis Approaches in ab initio Electronic Structure Computations*. in « Journal of Scientific Computing », numéro 1-4, volume 17, 2002, pages 461-469.
- [14] I. CATTO, C. LEBRIS, P.-L. LIONS. *On some periodic Hartree-type models for crystals*. in « Annales de l'IHP », numéro 2, volume 19, 2002, pages 143-190.
- [15] C. M. DION, A. AUGER, A. B. H. YEDDER, E. CANCÈS, A. KELLER, C. LEBRIS, O. ATABEK. *Numerical optimization of laser fields to control molecular orientation*. in « Phys. Rev. A », volume 66, 2002, pages 063401.
- [16] C. M. DION, A. B. H. YEDDER, E. CANCÈS, A. KELLER, C. L. BRIS, O. ATABEK. *Optimal Laser Control of Orientation : The Kicked Molecule*. in « Phys. Rev. A », volume 65, 2002, pages 063408.
- [17] J. GERBEAU, C. LEBRIS, T. LELIEVRE. *Modelling and simulation of the industrial production of aluminium : the nonlinear approach*. in « Computers and Fluids », 2002, à paraître.
- [18] J. GERBEAU, C. LEBRIS, T. LELIEVRE. *Simulations of MHD flows with moving interfaces*. in « J. Comp. Phys. », 2002, à paraître.
- [19] B. JOURDAIN, T. LELIEVRE, C. LEBRIS. *Numerical analysis of micro-macro simulations of polymeric fluid flows*. in « Math. Model. and Meth. in Appl. Sc. », numéro 9, volume 12, 2002, pages 1205-1243, à paraître.
- [20] K. KUDIN, G. SCUSERIA, E. CANCÈS. *A black box self-consistent field convergence algorithm : One step closer*. in « J. Chem. Phys. », numéro 19, volume 116, 2002, pages 8255-8261.
- [21] C. LEBRIS, P.-L. LIONS. *Renormalized solutions of some transport equations with partially  $W^{1,1}$  velocities. Applications*. in « Annali di Mat. Pura Appl. », 2002, submitted.

- [22] F. LEGOLL, R. MONNEAU. *Designing reversible measure invariant algorithms with applications to molecular dynamics*. in « J. Chem. Phys. », numéro 23, volume 117, 2002, pages 10452-10464.
- [23] B. LI, G. TURINICI, V. RAMAKHRISHNA, H. RABITZ. *Optimal Dynamic Discrimination of Similar Molecules Through Quantum Learning Control*. in « Journal of Physical Chemistry B », numéro 33, volume 106, 2002, pages 8125-8131.
- [24] Y. MADAY, A. PATERA, G. TURINICI. *A priori Convergence Theory for Reduced-Basis Approximations of Single-Parametric Elliptic Partial Differential Equations*. in « Journal of Scientific Computing », numéro 1-4, volume 17, 2002, pages 437-446.
- [25] Y. MADAY, T. PATERA, G. TURINICI. *Global a priori convergence theory for reduced-basis approximations of single-parameter symmetric coercive elliptic partial differential equations*. in « C. R. Acad. Sci., Paris, Sér. I, Math. », volume 335, 2002, pages 289-294.
- [26] Y. MADAY, G. TURINICI. *A parareal in time procedure for the control of partial differential equations*. in « C. R. Acad. Sci., Paris, Sér. I, Math. », numéro 4, volume 335, 2002, pages 387-392.
- [27] Y. MADAY, G. TURINICI. *New formulations of monotonically convergent quantum control algorithms*. in « J. Chem. Phys. », 2002, submitted.
- [28] Y. MADAY, G. TURINICI. *Parallel in time algorithms for quantum control : the parareal time discretization scheme*. in « Int. J. Quant. Chem. », 2002, à paraître.
- [29] C. PRUD'HOMME, D. ROVAS, K. VEROY, L. MACHIELS, Y. MADAY, A. PATERA, G. TURINICI. *Reliable Real-Time Solution of Parametrized Partial Differential Equations : Reduced-Basis Output Bound Methods*. in « Journal of Fluids Engineering - Transactions of the ASME », numéro 1, volume 124, March, 2002, pages 70-80.
- [30] G. TURINICI, V. RAMAKHRISHNA, B. LI, H. RABITZ. *Optimal Discrimination of Multiple Quantum Systems : Controllability Analysis*. in « submitted to Phys. Rev. A. », 2002.

### **Communications à des congrès, colloques, etc.**

- [31] A. BENHAJYEDDER. *Optimal laser control of molecular orientation : some numerical results*. in « Proceeding of 41<sup>st</sup> IEEE Conference on Decision and Control (CDC02) », Las Vegas, Nevada, USA, 2002, (à paraître).
- [32] J. GERBEAU, C. LEBRIS, T. LELIEVRE. *Numerical simulations of two-fluis MHD flows*. in « Fundamental and applied MHD », pages 101-105, 2002.
- [33] J. GERBEAU, C. LEBRIS, T. LELIEVRE, N. LIGONESCHE. *Metal Pad Rod instabilities*. in « Light Metals », pages 483-487, 2002.
- [34] C. PRUD'HOMME, D. ROVAS, K. VEROY, L. MACHIELS, Y. MADAY, A. PATERA, G. TURINICI. *Reduced-Basis Output Bound Methods for Parametrized Partial Differential Equations*. in « Proceedings SMA Symposium », January, 2002.

- [35] G. TURINICI, Y. MADAY. *A parallel in time approach for quantum control : the parareal algorithm.* in « Proceedings of the 41th IEEE Conference on Decision and Control, Las Vegas, Nevada, USA », december, 2002.