

Projet d'Action de Recherche Collaborative :

HYBRID

Méthodes Hybrides et simulation moléculaire

1 Résumé

Le but de ce projet est d'analyser et de développer des méthodes numériques utilisant à la fois les techniques déterministes (simulation de systèmes hamiltoniens) et probabilistes (discrétisation d'équations différentielles stochastiques), avec une application privilégiée à la simulation moléculaire.

La motivation essentielle provient du constat que *les modèles utilisés en simulation moléculaire sont par nature hybrides*, c'est-à-dire mêlent par leur définition même des effets déterministes (dynamique hamiltonienne des atomes) et stochastiques (collision, interaction d'un système avec son environnement). Ce caractère mixte rend **absolument nécessaire** l'emploi de méthodes numériques hybrides, qui permettent de simuler de manière optimale ces systèmes, en s'appuyant le plus possible sur des techniques spécifiques employées dans des champs traditionnellement disjoints : méthodes symplectiques pour l'intégration temporelle de systèmes mécaniques déterministes, et méthodes probabilistes pour approcher une réalisation d'une équation différentielle stochastique et/ou calculer la loi invariante correspondante.

Nous proposons ici de regrouper des spécialistes des méthodes numériques probabilistes (équipes TOSCA, MICMAC) et des spécialistes des techniques déterministes d'approximation des systèmes hamiltoniens (équipes IPSO, MICMAC). Un troisième interlocuteur indispensable est C. Chipot, directeur de recherche CNRS dans un laboratoire de chimie de l'Université de Nancy. C. Chipot est un collaborateur de longue date des projets MICMAC et IPSO, et est le maillon indispensable pour faire le lien entre les techniques numériques que nous proposons, et les applications "en grandeur nature" qui sont la meilleure publicité qu'il soit à nos travaux. Le thème fédérateur commun à tous les participants de cette demande est la simulation moléculaire, que l'on peut voir comme le pendant numérique de la physique statistique et de la physique quantique (voire le "bras armé", tant la simulation numérique occupe un espace de plus en plus important dans la production scientifique actuelle).

L'équipe **TOSCA** (Sophia Antipolis) est constituée de spécialistes de l'approximation numérique de problèmes stochastiques et probabilistes. L'équipe **IPSO** présente un caractère plus mixte : si la majorité de ses membres sont des spécialistes

des méthodes déterministes pour les équations différentielles (EDOs et EDPs), ce projet compte aussi des membres spécialistes des EDP stochastiques (A. Debussche), ou des méthodes hybrides (E. Faou). L'équipe **MICMAC** comporte de son côté des spécialistes des méthodes numériques probabilistes et des méthodes d'approximation en physique et chimie quantiques. Enfin, C. Chipot de l'**eDAM** est un chimiste spécialiste de la simulation moléculaire des molécules biologiques.

Pour ces quatre interlocuteurs principaux, la simulation moléculaire est au centre des thèmes étudiés. Outre les aspects de simulation immédiatement liés aux applications, le projet plus général de cette ARC est d'utiliser de manière plus systématique la complémentarité entre méthodes probabilistes et méthodes déterministes. S'il est bien admis que les méthodes déterministes sont imbattables dès lors qu'elles peuvent être mises en oeuvre (ce qui nécessite déjà une connaissance approfondie du problème et de sa modélisation), les méthodes probabilistes sont incontournables dès lors qu'il y a des incertitudes inhérentes à la modélisation du phénomène en question – termes de forçage aléatoires, conditions initiales incertaines, etc. Nous pensons que la mise en commun de ces deux points de vue ne peut que déboucher sur des méthodes mixtes qui seraient alors particulièrement performantes. Chacune des trois équipes participant au projet (plus l'équipe SIMPAF à travers la présence d'un CR, Mathias Rousset) a déjà amorcé ce mouvement, mais il nous semble qu'il serait profitable à tous de mettre nos expériences en commun.

2 Porteur de la demande :

Erwan Faou
INRIA, Projet IPSO,
Ecole Normale Supérieure de Cachan Bretagne,
Avenue Robert Schumann, 35170 Bruz, France.
Phone : +33 299 05 52 81,
Fax : +33 299 84 71 71.
Email : Erwan.Faou@inria.fr
Web-page : <http://www.irisa.fr/ipso/perso/faou/>

3 Participants

Notre projet vise essentiellement à rapprocher trois EPIs :

- **IPSO** (ENS Cachan Bretagne) ;
- **MICMAC** (ENPC) ;
- **TOSCA** (Sophi-Antipolis).

La plupart des participants ci-dessous travaillent d'ailleurs au sein de ces EPIs, mais sont également associés à ce projet un chargé de recherche de l'EPI **SIMPAF** (M. Rousset), ainsi qu'un chercheur spécialisé en simulation moléculaire (C. Chipot, **eDAM** Nancy).

Positionnement scientifique

Les thèmes de recherche traditionnels de l'équipe IPSO concernent l'approximation numérique *géométrique* de systèmes différentiels, c'est-à-dire la recherche de méthodes numériques d'intégration en temps qui préservent les propriétés qualitatives de la solution, plutôt que de tenter d'approcher finement une trajectoire individuelle. Ainsi, pour un système hamiltonien, l'utilisation de schémas *symplectiques* permet-elle de conserver l'énergie (donnée au travers du Hamiltonien) sur des temps très longs, ce qui forme les fondements mêmes de tous les codes actuels de dynamique moléculaire.

Historiquement, c'est cette spécialité qui a rapproché IPSO de l'équipe MICMAC, dont la chimie quantique est une des spécialités depuis sa création. Dans le but de "monter en échelle" et passer de l'échelle quantique à l'échelle de la simulation moléculaire, ces deux équipes collaborent depuis 2002-2003 ; en particulier, l'ARC **Prestissimo** entre 2003 et 2004 a été un moteur important de cette collaboration soutenue. C'est également par cette ARC que nous sommes entrés en contact avec Christophe Chipot, chimiste dans un laboratoire commun CNRS/Université de Nancy, qui est devenu un de nos interlocuteurs privilégiés dans le monde des applications.

Au cours de nos travaux communs, il est vite apparu qu'il n'était plus possible de se limiter aux seules dynamiques déterministes en simulation moléculaire, et qu'il fallait traiter explicitement les aspects stochastiques des systèmes, qui sont un ingrédient essentiel de la modélisation. Dans le cadre d'applications "réelles", il est en effet fructueux de considérer un système dynamique comme un assemblage de termes ayant chacun une justification physique, chacun de ces termes pouvant par ailleurs être déterministe ou stochastique, en fonction des connaissances actuelles et du niveau de description recherché. Par exemple, il pourra être commode de remplacer les nombreuses molécules d'eau entourant une protéine par une interaction effective avec un solvant implicite, ce qui se traduit par des termes supplémentaires dans le champ de forces, mais également par des forces aléatoires pour les atomes qui seraient autrement en contact avec les molécules non explicitement représentées. Ainsi, au delà de tout choix possible lié aux méthodes numériques employées, on ne peut faire l'impasse ni sur les aspects "hamiltoniens" des systèmes de la dynamique moléculaire, ni sur leurs aspects "probabilistes".

Dans cette optique, l'équipe TOSCA est un troisième interlocuteur incontournable au sein de l'INRIA : spécialiste de longue date des équations stochastiques en lien avec les EDPs, ainsi que des méthodes probabilistes en général, cette équipe s'oriente par

ailleurs de plus en plus vers la simulation moléculaire (démarrage d'une thèse sur le sujet, dépôt d'un projet COLOR "Walk on M.A.R.S." sur la résolution de l'équation de Poisson-Boltzmann en simulation moléculaire). Enfin, cette équipe est un partenaire régulier de l'équipe MICMAC sur ces thématiques. Par ailleurs, le déménagement sur le site de l'ENS Cachan Bretagne a vu l'arrivée d'Arnaud Debussche dans le projet IPSO, spécialiste des EDPs stochastiques au sein de l'équipe; ce qui renforce naturellement les collaborations potentielles entre TOSCA et IPSO.

Outre les aspects simulation moléculaire, ces trois équipes partagent de nombreuses problématiques communes et d'ordre "géométriques" si l'on peut dire : après tout, le calcul d'une mesure invariante d'une EDS peut s'interpréter comme une approximation *en temps long* d'une EDP dont on connaît une représentation probabiliste. Nous sommes persuadés qu'au delà des aspects directement liés à la simulation moléculaire, cette collaboration débouchera sur des problématiques nouvelles ou renouvelées dans d'autres domaines, du fait de l'interdisciplinarité de ce projet.

Résumé des points principaux.

Points communs.

- La simulation moléculaire fait partie des thèmes d'application des trois projets.
- Nous avons à coeur d'étudier des problèmes d'évolution mêlant des aspects et/ou termes déterministes et stochastiques (EDPs et EDPS).

Complémentarité.

- Compétences sur les aspects déterministes au sein de IPSO et MICMAC (systèmes hamiltoniens, dynamique quantique).
- Compétences dans le domaine des probabilités chez TOSCA et MICMAC (systèmes hybrides de la dynamique moléculaire, équations différentielles stochastiques).
- Contact avec des chercheurs des domaines applicatifs par C. Chipot.

Composition

La liste complète des participants est donnée ci-dessous, en italique figurent les spécialités des membres en lien avec cette ARC. En dehors des étudiants en thèse, les personnels les plus impliqués dans ce projets seront A. Debussche et E. Faou (IPSO), N. Champagnat et D. Talay (TOSCA), F. Legoll, T. Lelièvre et G. Stoltz (MICMAC).

- Equipe **IPSO**
 - François Castella [PR Univ. Rennes 1]
EDP et analyse numérique des systèmes hamiltoniens
 - Philippe Chartier [Chef de projet, DR INRIA]
EDP et analyse numérique des systèmes hamiltoniens
 - Eric Darrigrand [MCF Univ. Rennes 1]
Méthodes multipôles rapides (calcul du potentiel électrostatique)
 - Arnaud Debussche [PR ENS Cachan Bretagne]
EDP stochastiques
 - Erwan Faou [CR INRIA]
EDP et analyse numérique des systèmes hamiltoniens, Méthodes hybrides
 - Julia Charrier [Doctorante ENS]
EDP à coefficients aléatoires
 - Ludovic Goudenège [Doctorant ENS]
EDP stochastiques
- Equipe Projet Inria **TOSCA** :
 - Mireille Bossy [CR INRIA]
EDS et méthodes particulières
 - Nicolas Champagnat [CR INRIA]
EDS et méthodes probabilistes en simulation moléculaire
 - Denis Talay [DR INRIA]
EDS et méthodes probabilistes pour les EDPs
 - Sylvain Maire [MCF Univ. Toulon] (collaborateur extérieur)
EDS et méthodes probabilistes pour les EDPs
 - Pierre-Emmanuel Jabin [PR Univ. Nice-Sophia-Antipolis]
EDP et analyse numérique
 - Jean-Pierre Testaud, Doctorant à partir de septembre 2009.
EDS et simulation moléculaire
- Equipe **MICMAC**
 - Eric Cancès [ICPC Cermics]
Chimie quantique, simulation moléculaire et systèmes hamiltoniens

- **Claude Le Bris** [ICPC Cermics]
Chimie quantique, simulation moléculaire et systèmes hamiltoniens
- **Frédéric Legoll** [IPC Lami]
Simulation moléculaire, systèmes hamiltoniens et méthodes hybrides
- **Tony Lelièvre** [IPC Cermics]
EDS et simulation moléculaire, méthodes hybrides
- **Kimiya Minoukadeh** [Doctorante ENPC]
Simulation moléculaire, méthodes hybrides
- **Raphaël Roux** [Doctorant ENPC]
Simulation moléculaire, méthodes hybrides
- **Gabriel Stoltz** [IPC Cermics]
EDS et simulation moléculaire, méthodes hybrides
- **Benjamin Jourdain (ENPC)**[ICPC Cermics]
EDS et simulation moléculaire, méthodes de Monte Carlo en chimie quantique
- Equipe **SIMPAF**
 - **Mathias Rousset** [CR INRIA]
EDS et simulation moléculaire, méthodes hybrides
- Laboratoire **eDAM**
 - **Christophe Chipot** [DR CNRS]
Simulation moléculaire et chimie

4 Objectifs de la collaboration

Un des principes fondamental de la dynamique moléculaire est le suivant : simuler des trajectoires de systèmes décrits à l'échelle moléculaire pour calculer des propriétés macroscopiques (thermodynamiques) en faisant la moyenne de quantités le long des trajectoires. En termes plus mathématiques, les mouvements des molécules sont régis par un système différentiel qui peut être **déterministe** et/ou **stochastique**. Le prototype d'un tel système s'écrit, dans le cas déterministe (à des constantes près) sous la forme hamiltonienne :

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p, \\ \dot{p} &= -\nabla U(q), \end{aligned} \tag{4.1}$$

où $q = (q_i)_{i=1,\dots,N}$ désigne les degrés de liberté configurationnels des molécules (positions, angles, etc) et $p = (p_i)_{i=1,\dots,N}$ les moments associés (c'est-à-dire les vitesses

multipliées par les masses correspondantes). Ici, N est gigantesque, souvent de l'ordre de 10^5 dans les applications courantes, et de l'ordre de plusieurs milliards pour les records. La fonction $U(q)$ est le potentiel d'interaction entre les molécules : tout l'art du chimiste ou du physicien est de déterminer une forme réaliste, mais néanmoins suffisamment peu onéreuse numériquement car le calcul des interactions atomiques est souvent le goulot d'étranglement des simulations.

La dynamique (4.1) décrit un système dans l'ensemble thermodynamique dit NVE : la solution décrit en effet le mouvements de N atomes dans un Volume fixe à Energie constante. En effet, un simple calcul montre que (4.1) possède (au moins) un invariant, son énergie

$$H(q, p) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 + U(q),$$

qui se décompose en somme d'une énergie cinétique et d'une énergie potentielle. Par ailleurs, on peut montrer que (4.1) préserve également la mesure de Lebesgue dans l'espace des phases \mathcal{E} (qui est l'ensemble des configurations (q, p) accessibles). Ceci implique que (4.1) possède une **mesure invariante** donnée par la **mesure microcanonique** qui peut se voir comme la restriction de la mesure de Lebesgue de l'espace ambiant \mathbb{R}^N à la surface d'énergie $H(q, p) = \text{cte}$.

Le principe de base de la dynamique moléculaire et plus généralement de la physique statistique consiste à postuler que le système (4.1) est *ergodique*, au sens où, pour toute fonction de la configuration microscopique $A(q, p)$ (appelée observable : par exemple une température instantanée, un moment, la pression, etc), on a

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(q(t), p(t)) dt = \langle A \rangle_{NVE}, \quad (4.2)$$

où $(q(t), p(t))$ est la solution de (4.1) partant de la condition initiale $(q(0), p(0))$, et $\langle A \rangle_{NVE}$ est la moyenne de la fonction A par rapport à la mesure microcanonique NVE. En particulier, on note donc que le résultat d'une moyenne trajectorielle ne dépend pas du point de départ de la trajectoire. L'intérêt d'une telle relation est manifeste : alors que le calcul direct du membre de droite $\langle A \rangle_{NVE}$ n'est pas possible par des techniques de quadrature standards (du fait de la très grande dimension de l'espace ambiant \mathbb{R}^N), il est en revanche possible d'estimer le membre de gauche en simulant numériquement la trajectoire $(q(t), p(t))$, quitte à respecter deux propriétés physiques garantissant que l'on échantillonne la bonne mesure : conservation du volume dans l'espace des phases, et de l'énergie. On peut ainsi espérer obtenir une relation du type (4.2) au niveau discret. Tout l'intérêt des intégrateurs symplectiques est qu'on peut montrer que, pour les systèmes (4.1), une mesure microcanonique approchée est conservée exactement (ce qui signifie que la mesure exacte est conservée de manière approchée). Ce sont

les résultats essentiels de la théorie de l'intégration géométrique, elle-même fondée sur l'analyse rétrograde des schémas symplectiques.

Le principe décrit ci-dessus est en fait très général : presque tous les systèmes issus de la dynamique moléculaire sont construits pour échantillonner (*sampling*) une certaine mesure macroscopique, donnée par la physique statistique. Or, il est à peu près acquis que, bien que les lois régissant les trajectoires des molécules soient *a priori* purement déterministes, il est tout à fait pertinent de représenter certains effets (chocs, interaction avec d'autres systèmes ou l'environnement) par des termes stochastiques. En écho à (4.1), le prototype d'un tel système est donné par l'équation de Langevin qui s'écrit

$$\begin{aligned}\dot{q} &= p, \\ \dot{p} &= -\nabla U(q) - \gamma p + \eta(t),\end{aligned}\tag{4.3}$$

où cette fois $\eta(t)$ est un terme aléatoire, modélisant par exemple les collisions des atomes représentés par les variables q et p avec le fluide environnant. Ainsi, (4.3) est une équation différentielle stochastique comportant des termes aléatoires, n'échantillonnant plus la mesure microcanonique NVE, mais la mesure dite **canonique** (NVT) représentée par la mesure de Boltzmann-Gibbs sur l'espace tout entier.

Ainsi on voit qu'il existe une grande variété de systèmes dynamiques, généralement stochastiques, que l'on souhaite simuler pour échantillonner une certaine mesure via une **hypothèse ergodique** du type (4.2). A partir de là, plusieurs questions se posent :

- (a) L'hypothèse ergodique du type (4.2) est-elle vérifiée ? Posée d'une manière aussi générale, la réponse est négative, et d'ailleurs peu de résultats existent en dehors de deux cas extrêmes, celui d'un système déterministe du type (4.1) complètement intégrable (le système possède de nombreux invariants permettant de caractériser complètement la dynamique), et celui d'un système stochastique où le bruit $\eta(t)$ est suffisamment riche pour que l'équation de transport décrivant l'évolution de la loi du processus stochastique soit elliptique, ce qui permet de récupérer des propriétés d'ergodicité. En revanche, pour les systèmes hybrides qui composent une très grande partie des cas rencontrés en pratique, le bruit n'agit que sur une certaine partie du système (comme dans le cas de l'équation de Langevin), ce qui rend difficile l'analyse des propriétés globales (macroscopiques).
- (b) Comment simuler le système dynamique pour échantillonner la bonne mesure invariante ? Si dans le cas de systèmes hamiltoniens, la réponse est donnée par l'utilisation d'intégrateurs symplectiques, le cas de systèmes mixtes est moins clair et demande plus de travail.
- (c) Dans tous les cas, est-il possible d'accélérer la convergence des moyennes temporelles ? S'il est possible de répondre à ces questions pour certains type de systèmes

déterministes (systèmes intégrables), l'extension aux EDS est liée *a priori* à des problèmes de réduction de variance dans les méthodes de Monte-Carlo sous jacentes.

- (d) Enfin, est-il possible d'obtenir des estimations d'erreurs a posteriori permettant à l'utilisateur (chimiste, physicien, biologiste, etc) d'avoir une estimation de la qualité de son résultat ? C'est une question importante, qui est souvent négligée dans la communauté applicative, faute de temps.

Il apparaît donc qu'**une approche hybride mêlant les aspects déterministes et stochastiques est nécessaire** pour aborder ce type de problèmes. En particulier le point (b) ci-dessus est une source d'interaction potentiellement très fructueuse entre spécialistes de l'intégration géométrique des systèmes hamiltoniens et spécialistes de la simulation d'équation différentielles stochastiques.

5 Activités scientifiques envisagées et résultats attendus

Concrètement, nous envisageons d'aborder plus spécifiquement les thèmes suivants :

1. **Etude de convergence de schémas hybrides.** Il s'agit ici de réaliser le programme d'étude complet de schémas pour des équations du type Langevin combinant typiquement l'utilisation d'intégrateurs symplectiques pour la partie hamiltonienne et simulation probabiliste pour la partie aléatoire. Techniquement, il s'agit donc de combiner des résultats fins d'intégration géométrique (existence de champs modifiés) avec l'étude de la convergence faible de schémas probabilistes. Cette direction est en un certain sens l'extension de recherches déjà effectuées au sein de l'ARC Prestissimo. Pour les systèmes déterministes complètement intégrables, il est même possible d'accélérer la convergence (point (c) ci-dessus, travaux de E. Cancès, F. Castella, P. Chartier, E. Faou, C. Le Bris, F. Legoll, G. Turinici sur le sujet). Pour les systèmes hybrides des collaborations existent déjà sur ce sujet entre des membres de la présente demande (C. Chipot, F. Legoll, T. Lelièvre, M. Rousset, G. Stoltz).

Notons que pour certains types de dynamiques (par exemple, dans le cadre de systèmes dits NPT, pour lesquels la pression et la température sont maintenus constants), les coefficients des systèmes différentiels présentent des singularités, ce qui nécessite a priori l'utilisation de techniques très spécifiques. Dans cette direction, les récents travaux de M. Bossy et B. Jourdain apportent des réponses potentiellement applicables dans ce cadre.

Un autre type de difficulté survient lorsque le bruit n’agit que sur certaines composantes du système, rendant l’équation de transport sous-jacente dégénérée. Les récents travaux de D. Talay sur l’équation de Langevin permettent d’apporter des éléments de réponses à ces situations délicates et néanmoins inévitables dans l’étude des systèmes hybrides.

D’autre part, il est à noter que les thèses de K. Minoukadeh et R. Roux s’inscrivent naturellement au coeur de cette thématique.

2. **Etude de systèmes hybrides hautement oscillants.** Dans la plupart des systèmes moléculaires, il existe des composantes rapidement oscillantes (liaisons covalentes entre deux atomes proches) qui entraînent des instabilités numériques et demandent ainsi d’utiliser des pas de temps si petits que le coût de calcul en devient déraisonnable. Les techniques traditionnelles d’homogénéisation déterministe et stochastique sont alors incontournables pour espérer trouver des schémas numériques efficaces.

Ces problèmes sont étudiés par une bonne partie des membres des projets IPSO et MICMAC (F. Castella, P. Chartier, E. Faou, C. Le Bris, F. Legoll) et intéressent fortement les membres du projet TOSCA (M. Bossy, N. Champagnat, D. Talay).

Au delà de l’application à la simulation moléculaire, ces questions d’analyse de schémas numériques pour les systèmes hautement oscillants sont également fortement reliées à l’analyse numérique d’EDP et d’EDPS, pour lesquelles les discrétisations spatiales demandent de considérer des systèmes comportant des très hautes fréquences (le laplacien discrétisé comporte des fréquences arbitrairement grandes). Ces questions sont fondamentales en analyse numérique pour les EDPs et EDPS où la préservation des effets des hautes fréquences est cruciale pour les caractéristiques du système (stabilité, ergodicité).

3. **Etudes de systèmes contraints.** Il s’agit ici de systèmes moléculaires possédant une ou plusieurs contraintes qui se traduisent par des invariants du système. L’existence de ces invariants a une influence remarquable sur la mesure invariante du système, qui se trouve portée par les variétés invariantes associées à ces contraintes. Du point de vue de l’analyse numérique, il est donc indispensable de trouver des méthodes qui préservent ces contraintes tout en ne détruisant pas les propriétés de convergence ergodique.

Ce thème est également un thème connexe à nos trois équipes (travaux de C. Le Bris, T. Lelièvre, E. Faou, D. Talay). Pour expliquer la spécificité *hybride*, il est à noter que dans le cas de systèmes hamiltoniens déterministes, la conservation de l’énergie est automatique grâce à des résultats profonds de la théorie de l’intégration géométrique. Pour des systèmes hybrides, ces résultats ne sont pas applicables et l’utilisation de projections sur les contraintes semble inévitable.

Or dans certains cas (par exemple en utilisant des schémas symétriques et/ou d'ordre élevé), les schémas sont performants même sans projection. La compréhension de tels phénomènes, extrêmement importante pour les applications (un pas de projection coûte cher numériquement), repose certainement sur la combinaison d'outils d'intégration géométrique avec l'analyse fine du comportement du schéma numérique au voisinage des surfaces invariantes associées aux contraintes.

En dehors de ces trois thèmes immédiatement abordables, les participants à ce projet ont d'autres intérêts communs :

- **Etudes de méthodes hybrides pour la résolution d'EDPs.** Il s'agit d'un thème qui intéresse la grande majorité des membres de cette demande. Pour résoudre une EDP parabolique, une méthode déterministe classique consiste à discrétiser l'EDP par une méthode de Galerkin, puis à utiliser des schémas numériques de discrétisation en temps. Si une représentation probabiliste est disponible, une alternative consiste à discrétiser l'EDS correspondante. Comme il est mentionné en introduction, ces deux techniques présentent chacune des avantages et des inconvénients. Il est donc tout à fait tentant d'essayer d'analyser et de proposer des nouveaux schémas mélangeant les deux approches, ce qui semblerait particulièrement utile pour l'approximation de systèmes d'EDPs, ou d'EDPs couplées.

On mentionnera également les travaux de l'équipe TOSCA sur l'équation de Poisson-Boltzmann, qui visent à calculer le potentiel électrostatique (obtenu par la méthode dite du "solvant implicite") en utilisant une méthode de Monte Carlo basée sur une interprétation probabiliste d'une EDP elliptique. Ce travail se traduit par une demande de COLOR (Walk on M.A.R.S.) impliquant TOSCA (M. Bossy, D. Talay, S. Maire, P.-E. Jabin, N. Champagnat).

- **EDPs aléatoires.** Deux types de problématiques se dégagent ici : EDPs à coefficients aléatoires et EDPs stochastiques. Ces deux thématiques intéressent particulièrement les projets IPSO (A. Debussche, E. Faou) et TOSCA (M. Bossy, D. Talay). Deux doctorants, J. Charrier et L. Goudenège, travaillent d'ailleurs sur ce sujet.

Il s'agit ici de deux domaines particulièrement actifs et prometteurs. Concernant les EDP à coefficients aléatoires, il s'agit par nature de problèmes de type hybrides, où les effets stochastiques sont vus comme des paramètres aléatoires d'un problème purement déterministe. A l'heure actuelle, deux approches peuvent être envisagées : une vision purement Monte-Carlo (on tire un jeu de coefficients, on résout le problème déterministe correspondant, et on fait la moyenne) ou une approche résolument déterministe (on discrétise à la fois l'espace probabilisé ET l'espace déterministe sur lequel l'EDP agit). L'analyse et la compréhension de

ces méthodes devraient permettre, pour certaines applications tout du moins, de trouver des méthodes qui tirent partie de ces deux approches (sans nécessairement choisir un camp!).

Concernant la discrétisation d'EDPs stochastiques, et malgré des progrès récents, peu de résultats existent. En particulier, il est extrêmement important de comprendre comment développer des schémas efficaces et performants pour simuler les solutions de ces équations ou leurs lois, en utilisant une approche mixte déterministe/stochastique pour traiter les différents termes de l'EDPS. Cette problématique intéresse vivement les projets IPSO et TOSCA.

- **Réduction de variance et accélération de convergence.** Pour accélérer les convergences dans des méthodes de Monte-Carlo, une technique traditionnellement employée est celle de la réduction de variance. La mise en oeuvre de tels procédés dans un cadre hybride est une source potentielle de travaux novateurs (en particulier en lien avec les items précédents). Cette thématique intéresse fortement de nombreux membres des trois équipes concernées (B. Jourdain, T. Lelièvre, M. Rousset, G. Stoltz, S. Maire, D. Talay, M. Bossy, A. Debussche et E. Faou).
- **Méthodes probabilistes pour le calcul du champ électrostatique.** Dans un récent travail commun, N. Champagnat, C. Chipot et E. Faou on mis au point une méthode probabiliste pour résoudre des problèmes aux moindres carrés en grande dimension. Cette technique est un prolongement de la méthode SADM mise au point par le second auteur qui se généralise à grand nombre de problèmes de ce type. Cette problématique, directement issue d'un problème de simulation moléculaire, est une piste de recherche très prometteuse.

Conclusion. Le but de cette collaboration est donc de

- **Renforcer les contacts** entre les membres de nos trois équipes – en particulier en faisant voyager les doctorants entre les sites.
- **Développer la visibilité internationale** de nos équipes sur ces sujets. S'il est clair que nos trois équipes bénéficient de nombreux contacts internationaux dans leurs domaines respectifs, nous souhaitons d'une part inviter des spécialistes des domaines concernés dans les centres, et organiser des rencontres (workshop, conférence) sur les thématiques correspondantes, en mélangeant en particulier des membres des trois communautés scientifique concernées : intégration géométrique, analyse numérique stochastique, et simulation moléculaire.

6 Demande de crédits

Voici la destination des crédits que nous demandons :

- missions Rennes/Nice/Paris/Lille/Nancy (40 000 euros) ;
- missions vers l'extérieur des membres de l'ARC (15 000 euros) ;
- invitation de conférenciers étrangers dans un des centres (10 000 euros) ;
- Organisation d'un workshop à mi-parcours (2 jours avec invités internationaux, 10 000 euros) ;
- Organisation d'une conférence finale (3 jours, 15 000 euros).

Soit, au total, **90 000 euros**.