

## 1 Effectifs

Le CERMICS (Centre d'Enseignement et de Recherche en Mathématiques et Calcul Scientifique) est composé de 19 chercheurs permanents (17 ENPC et 2 CR INRIA, dont 14 HDR, deux arrivées en 2015) et 2 personnels administratifs (dont 1 sur ressources propres). En outre, le laboratoire accueille 3 chercheurs en délégation INRIA, 4 chercheurs associés ; 3 chercheurs invités ont également séjourné au CERMICS en 2015 (pour une durée de 1 mois, chacun). En 2015, le laboratoire a accueilli 8 post-doctorants, 10 thèses ont été soutenues et 32 thèses sont en cours au 31/12/2015 dont 11 qui ont débuté en 2015.

## 2 Cadre institutionnel

Le CERMICS est un laboratoire de l'École des Ponts ParisTech (ENPC) créé en 1990, localisé à Marne-La-Vallée. Les chercheurs signent les articles au nom de la communauté d'universités et d'établissements Université Paris-Est (UPE). Le CERMICS est actuellement dirigé par J.-F. Delmas (Directeur) et A. Ern (Directeur-Adjoint).

Le CERMICS a plusieurs partenaires institutionnels :

- Il participe depuis 2011 au LabEx Bézout à l'interface des mathématiques et de l'informatique qui regroupe le LAMA (UMR CNRS-UPEC-UPEM) et le LIGM (UMR CNRS-ENPC-ESIEE-UPEM) ainsi qu'à la Fédération de recherche Bézout du CNRS (FR3522), créée en 2012, qui regroupe les trois laboratoires. Le LabEx Bézout participe depuis 2012 au Réseau de Recherche Doctoral en Mathématiques de l'Île de France.
- Depuis 2012, le CERMICS participe également au LabEx Modélisation & Expérimentation pour la Construction Durable (MMCD) qui regroupe l'ICMPE (UMR CNRS-UPEC), le laboratoire MSME (UMR CNRS-UPEC-UPEM) et le Laboratoire Navier (UMR CNRS-ENPC-IFSTTAR).
- Le CERMICS a été laboratoire commun avec INRIA jusqu'en 2004 ; il garde depuis des liens privilégiés avec INRIA et participe à deux équipes-projet communes du Centre de Recherche INRIA Paris.
- Le CERMICS est membre du Laboratoire International Associé (LIA) CNRS / University of Illinois at Urbana-Champaign, ainsi que l'Université de Nancy, l'Université de Lyon et INRIA Rennes. Les thématiques du LIA sont la modélisation et la simulation haute performance des systèmes biologiques complexes.
- Le CERMICS participe à la Chaire "Risques Financiers" de la Fondation du Risque, dont les partenaires sont la Société Générale, l'École Polytechnique et l'Université Pierre et Marie Curie (UPMC).

### 3 Présentation du laboratoire

Le laboratoire s'intéresse à un spectre large d'activités en mathématiques appliquées dont l'originalité thématique est l'étude combinée de modèles déterministes et stochastiques ainsi que leurs aspects théoriques et numériques. Le laboratoire est organisé en trois pôles : "Modélisation, analyse et simulation" (resp. G. Stoltz) sur les méthodes mathématiques pour la science des matériaux et la mécanique ; "Optimisation et systèmes" (resp. F. Meunier) sur l'optimisation stochastique et la recherche opérationnelle ; "Probabilités appliquées" (resp. A. Alfonsi) sur la modélisation du risque et les méthodes numériques.

Le comité d'expert de l'AERES pour l'évaluation du CERMICS sur la période 01/2008-12/2012 « est unanime pour reconnaître l'excellence du CERMICS ».

#### 3.1 Résumé exécutif

Bien que de petite taille, le CERMICS est un laboratoire très actif, comme l'atteste le bilan quantitatif, avec une production scientifique au plus haut niveau international : 3 livres dont 1 de vulgarisation, 1 article de vulgarisation et 62 publications parues en 2015, une forte activité de recherche partenariale générant un volume d'environ 730k€ de ressources propres (contrats industriels, projets ANR, etc.) et une très forte implication dans la formation doctorale et l'enseignement en école d'ingénieur et master M2 recherche.

#### Faits marquants de l'année

- A. Levitt, CR2 INRIA, a rejoint le pôle "Modélisation, analyse et simulation". Il a préparé sa thèse, soutenue à l'Université Paris-Dauphine en 2013, sous la direction d'E. Séré, puis a effectué des post-doctorats au CEA/DAM sous la direction de M. Torrent et au laboratoire Jacques-Louis Lions de l'UPMC sous la direction d'Y. Maday. Ses recherches portent sur les méthodes numériques pour la simulation moléculaire, et en particulier l'étude de modèles de mécanique quantique.
- J. Reygner a rejoint le pôle "Probabilités appliquées". Il a préparé sa thèse, soutenue à l'UPMC en 2014, sous la direction de B. Jourdain et L. Zambotti, puis a effectué un post-doctorat au laboratoire de physique de l'ENS Lyon sous la direction de F. Bouchet. Son domaine de recherche se situe à l'interface entre les probabilités, l'analyse et la physique statistique, et s'oriente actuellement vers l'étude des événements rares et de la quantification de l'incertitude dans des problèmes industriels.
- L'équipe-projet commune Matherials (INRIA-ENPC), créée en 2015 et pilotée par C. Le Bris, est hébergée par le CERMICS. Elle fait suite à l'équipe-projet MicMAc (INRIA-ENPC, 2002-2014). Ses domaines scientifiques couvrent l'analyse mathématique et le développement de méthodes numériques pour les matériaux à différentes échelles – d'une description microscopique fondée sur des modèles de physique quantique ou de physique statistique, à une description mésoscopique ou macroscopique utilisant les équations de la mécanique des milieux continus.
- J. Reygner est lauréat du Prix de thèse Jacques Neveu de la SMAI pour sa thèse soutenue en 2014.
- J. Bonelle est lauréat du Prix de thèse de l'École des Ponts ParisTech pour sa thèse soutenue en 2014.

- B. Jourdain, avec B. Bouchard et E. Gobet, organise le semestre thématique de l’Institut Louis Bachelier sur les méthodes de Monte-Carlo (10/2015-07/2016).

### 3.2 Contribution aux enseignements

- **Écoles d’ingénieur** : 14 cours à l’ENPC, 6 professeurs chargés de cours à l’École polytechnique, 2 cours à l’ENSTA et 1 cours à l’ENSMP
- **Masters de recherche coopérés par l’ENPC** : Master Mathématiques et Applications (UPEM) avec 5 cours dans le parcours mathématiques financières; Master Mathématiques & Applications (UPMC) avec 4 cours dans le parcours ANEDP (Analyse Numérique et Équations aux Dérivées Partielles) et 1 cours dans le parcours OJD (Optimisation, Théorie des Jeux et Dynamiques); Master Parisien de Recherche Opérationnelle (CNAM) avec 4 cours.
- 5 cours dans d’autres M2R et 8 cours invités dans des colloques et écoles

### 3.3 Équipes scientifiques

#### Modélisation, analyse et simulation

Les thématiques scientifiques du pôle “Modélisation, analyse et simulation” sont concentrées autour de l’étude mathématique, l’analyse numérique et la simulation des équations de la mécanique et de la physique.

Une composante importante de l’activité scientifique du pôle concerne la simulation moléculaire et multi-échelles, avec notamment le couplage entre les modèles à l’échelle microscopique (physique quantique et statistique) et les modèles à l’échelle macroscopique. Les outils mathématiques utilisés sont variés : analyse des équations aux dérivées partielles, analyse spectrale, analyse des processus stochastiques (en collaboration avec le pôle “Probabilités appliquées”), méthodes variationnelles, etc. Cette activité est représentée au sein du pôle par E. Cancès, V. Ehrlacher, C. Le Bris, T. Lelièvre, M. Rousset et G. Stoltz.

Ces chercheurs entretiennent des collaborations fortes avec des scientifiques d’autres disciplines, où ces modèles sont utilisés, notamment en chimie, physique du solide, biologie moléculaire et sciences des matériaux. De nombreuses activités de recherche impliquent donc des partenaires industriels ou académiques : CEA, SANOFI, ERAMET, IRDEP, EADS, *Office of Naval Research* et *European Office of Aerospace Research and Development*. Il faut également souligner de nombreuses collaborations avec le laboratoire Navier (laboratoire de mécanique) de l’ENPC, et notamment avec F. Legoll. Enfin, le pôle bénéficie d’un partenariat privilégié avec INRIA, la majorité de ses membres permanents faisant partie de l’équipe-projet commune Matherials (2015-), dirigée par C. Le Bris.

L’analyse des modèles mathématiques utilisés pour le calcul de structure électronique est le sujet qui a permis l’émergence de cette thématique au sein du pôle au début des années 2000, avec les travaux d’E. Cancès et C. Le Bris. Parmi les contributions majeures, on notera la mise au point de nouveaux algorithmes pour le calcul de valeurs propres dans des problèmes non-linéaires, qui sont maintenant implémentés dans des codes de chimie quantique distribués à grande échelle, ainsi que le développement de nouveaux modèles pour la solvatation. Les efforts de E. Cancès, V. Ehrlacher et G. Stoltz portent désormais sur l’analyse des modèles et des méthodes numériques efficaces pour des grands systèmes quantiques : défauts dans

les métaux et semi-conducteurs, couplage dynamique moléculaire et mécanique quantique, systèmes quantiques ouverts, etc.

La mécanique statistique computationnelle a pour objectif de calculer des quantités macroscopiques à partir de modèles microscopiques, en intégrant sur des temps très longs des processus stochastiques en grande dimension : c'est la dynamique moléculaire. T. Lelièvre, M. Rousset et G. Stoltz se sont tout d'abord intéressés aux méthodes de calcul d'énergie libre, et ont publié de nombreuses études sur ces techniques. Plus récemment, l'effort a porté sur l'échantillonnage efficace de mesure stationnaire dans des cas non-réversibles (*non-equilibrium steady state*) et l'échantillonnage de trajectoires. Dans tous ces problèmes, la difficulté principale est liée à la méta-stabilité des dynamiques utilisées et à la très grande dimension des problèmes.

La modélisation multi-échelles des matériaux s'est imposée comme un moyen efficace pour explorer les liens entre propriétés microscopiques de la matière, et son comportement macroscopique. C. Le Bris s'est beaucoup investi dans l'analyse mathématique et la mise au point de méthodes numériques efficaces pour ces modèles. Parmi les contributions majeures, on notera le développement de nouvelles techniques d'homogénéisation, au-delà de l'homogénéisation périodique. Récemment, le pôle s'est intéressée notamment aux méthodes MsFEM, ainsi qu'à des problèmes d'optimisation des micro-structures.

Le pôle développe également des modèles mathématiques et des méthodes numériques pour la mécanique des fluides et des solides à une échelle plus macroscopique. Ces travaux sont centrés autour des activités de A. Ern et L. Monasse et sont, pour certains d'entre eux, réalisés en partenariat industriel (avec EDF et CEA). Ces travaux concernent les méthodes d'éléments finis, les méthodes de Galerkin discontinu, les méthodes hybrides d'ordre élevé, et les estimations d'erreur *a posteriori*. Plusieurs résultats ont été obtenus notamment pour les méthodes de discrétisation compatible (ou mimétiques) qui préservent au niveau discret certaines propriétés structurelles du modèle continu (conservation, noyau d'opérateurs différentiels, invariants) et qui supportent des maillages tridimensionnels généraux. Par ailleurs, plusieurs avancées ont été accomplies dans la modélisation de l'interaction entre des ondes de choc dans un gaz compressible et une structure tridimensionnelle pouvant se fragmenter ; la méthode numérique combine volumes finis d'ordre élevé pour le gaz, éléments discrets pour le solide et une méthode de frontières immergées pour le couplage. Signalons enfin les travaux en lien avec le laboratoire Navier sur la modélisation de réseaux de poutres inextensibles qui font intervenir des outils de géométrie (en lien avec les réseaux de Tchebyshev) et qui trouvent leur application dans une technique récente de construction durable, les Grid Shells.

## Optimisation et systèmes

Le pôle "Optimisation et systèmes" se consacre à l'optimisation et à ses applications ; ses spécialités sont l'optimisation dynamique stochastique et l'optimisation discrète. Tout en travaillant activement sur les fondements mathématiques de l'optimisation, le pôle se distingue par de nombreuses interactions avec le monde industriel (EDF, Air France, Eurotunnel, PME, etc.).

En optimisation stochastique, le pôle se penche sur le développement de méthodes numériques, sur l'analyse de la cohérence temporelle et sur la modélisation du risque (contraintes en probabilité, mesures de risque) pour les systèmes dynamiques stochastiques en temps discret. Les liens avec le secteur industriel portent sur l'énergie (intégration des renouvelables,

smart grids). Le pôle a une relation privilégiée avec l'ENSTA ParisTech, par la contribution à temps partiel de P. Carpentier. En optimisation discrète, le pôle travaille sur les outils fondamentaux de cette discipline, comme les graphes et les hypergraphes, et sur ses applications dans le monde industriel, en particulier dans les transports et la supply chain. Le pôle travaille également sur des questions à l'interface entre l'optimisation discrète et l'optimisation stochastique, comme la prise en compte de l'aléa dans les questions d'optimisation discrète traditionnelle. Cette interaction se renforce actuellement suite au recrutement de V. Leclère au sein du pôle.

Le pôle "Optimisation et systèmes" a organisé la semaine internationale SESO 2015 *International Thematic Week Smart Energy and Stochastic Optimization* à l'ENPC et à l'ENSTA. La conférence SESO 2015 a accueilli des industriels et des académiques intéressés par les méthodes de l'optimisation stochastique et décentralisée, particulièrement adaptées au défi d'incorporer, dans le mix énergétique, une part substantielle d'énergies renouvelables intermittentes et spatialement dispersées.

J.-Ph. Chancelier conduit le développement du logiciel scientifique "Nsp" en collaboration avec B. Pinçon (ESIAL). Avec R. Nikhoukha (ALTAIR) et P. Weis (INRIA), il continue le développement des outils de génération de code (simport, bdl) pour Scicos. Ce travail fait suite au projet FUI "Project P". Il coordonne sur ses sujets avec J.-M. Ghidaglia (ENS Cachan) un workshop international qui a lieu chaque année depuis maintenant trois ans.

M. De Lara développe une activité spécifique sur les méthodes mathématiques pour la gestion des ressources renouvelables et de la biodiversité. En 2015, une thèse s'est terminée sur le contrôle d'épisodes épidémiques de la dengue.

V. Leclère s'intéresse aux problématiques aux frontières entre l'optimisation stochastique, la recherche opérationnelle et le machine learning.

F. Meunier mène des recherches théoriques et appliquées en optimisation discrète et en recherche opérationnelle. Il développe également avec V. Leclère une activité en optimisation stochastique discrète. Cela s'est concrétisé fin 2015 avec le démarrage d'une thèse CIFRE (avec Argon Consulting) qu'ils co-encadrent sur l'arbitrage des coûts et de la flexibilité dans la supply chain.

## Probabilités appliquées

Le pôle "Probabilités appliquées" s'intéresse à la modélisation du risque, aux méthodes numériques probabilistes, à l'interprétation probabiliste des EDPs et à l'étude des structures aléatoires.

La recherche en modélisation des risques s'est longtemps concentrée sur le domaine de la finance de marché où l'activité de l'équipe est structurée par deux partenariats forts : l'équipe-projet commune INRIA-UPEM-ENPC MathRisk (2012-) et la Chaire "Risques Financiers" École Polytechnique-ENPC-UPMC-Société Générale de la Fondation du Risque (2012-2017). A. Alfonsi, B. Jourdain et B. Lapeyre s'intéressent en particulier au risque de liquidité, au risque de crédit (calcul de CVA), au risque systémique et à la modélisation de la dépendance. En parallèle, ils travaillent pour améliorer la performance des méthodes de Monte Carlo utilisées en finance en proposant des schémas de discrétisation d'ordre élevé pour les EDS, des méthodes de réduction de variance adaptatives ou des algorithmes dédiés aux architectures parallèles. Ces algorithmes sont implémentés dans la bibliothèque de routines numériques financières Premia (17ème version livrée en mars 2015), développée au sein de MathRisk et

financée par un consortium de banques (CACIB, Natixis).

Les membres du pôle s'attachent à transférer les compétences qu'ils ont développées en finance à d'autres domaines où le risque intervient : produits dérivés d'énergie, mesure du risque d'une entité en fonction de sa consommation d'énergie au sein du projet Riskergy (en collaboration avec le pôle "Optimisation et systèmes"), partenariats publics privés, choix rationnels de projets de transport à long terme, modélisation de la dépendance entre des variables aléatoires ordonnées avec EDF.

B. Jourdain entretient également une collaboration fructueuse avec le pôle "Modélisation, analyse et simulation" sur les méthodes numériques probabilistes utilisées en simulation moléculaire. Ces travaux motivent une recherche plus amont sur le comportement en temps long des processus de Markov avec des outils comme les inégalités fonctionnelles et la théorie du transport optimal.

J. Reygner a rejoint le pôle "Probabilités appliquées" en septembre 2015. Son recrutement renforce l'équipe autour de l'interprétation probabiliste d'EDP et de l'étude de systèmes aléatoires en temps long. En particulier, il s'intéresse aux questions liées à la propagation d'incertitudes et à leurs applications dans le domaine de l'industrie.

Enfin, J.-F. Delmas travaille sur les structures aléatoires et en particulier sur les arbres aléatoires et leurs applications en biologie et en informatique. Il s'intéresse à des modèles discrets et continus en génétique des populations tenant compte de mutations non-neutres ou de recombinaisons.

## 4 Acronymes

- ANDRA : Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs
- ANR : Agence Nationale de la Recherche
- BRGM : Bureau de Recherches Géologiques et Minières
- CEA : Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
- CNAM : Conservatoire National des Arts et Métiers
- CNRS : Centre National de Recherche Scientifique
- EADS : European Aeronautic Defence and Space company
- EDF : Électricité de France
- ENPC : École des Ponts ParisTech
- ENSMP : Mines ParisTech
- ENSTA : École Nationale Supérieure des Techniques Avancées, ParisTech
- ERC : European Research Council
- ESIEE : École d'Ingénieurs de la Chambre de commerce et d'industrie de région Paris Île-de-France
- ICMPE : Institut de Chimie et des Matériaux de Paris-Est
- IFPEN : IFP Energies nouvelles
- IFSTTAR : Institut français des sciences et technologies des transports, de l'aménagement et des réseaux

- INRIA : Institut national de recherche en informatique et en automatique
- IRDEP : Institut de Recherche et Développement sur l'Énergie Photovoltaïque
- LabEx : Laboratoire d'Excellence du programme Investissements d'Avenir
- LAMA : Laboratoire d'Analyse et de Mathématiques Appliquées
- LIGM : Laboratoire d'Informatique Gaspard Monge
- MSME : Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi-Échelles
- MSTIC : (École Doctorale) Mathématiques et Sciences et Technologies de l'Information et de la Communication
- UPE : Université Paris-Est
- UPEC : Université Paris-Est Créteil
- UPEM : Université Paris-Est Marne-La-Vallée
- UPMC : Université Paris 6 Pierre et Marie Curie

# Production scientifique 2015 du CERMICS

10 mars 2016

## 1 Effectifs

### Chercheurs permanents

- ALFONSI Aurélien, Probabilités appliquées, ENPC, HdR
- CANCES Eric, Modélisation, analyse et simulation, ENPC, HdR
- CHANCELIER Jean-Philippe, Optimisation et systèmes, ENPC, HdR
- DE LARA Michel, Optimisation et systèmes, ENPC, HdR
- DELMAS Jean-François (Directeur), Probabilités appliquées, ENPC, HdR
- EHRLACHER Virginie, Modélisation, analyse et simulation, ENPC
- ERN Alexandre (Dir.-Adjoint), Modélisation, analyse et simulation, ENPC, HdR
- JOURDAIN Benjamin, Probabilités appliquées, ENPC, HdR
- LAPEYRE Bernard, Probabilités appliquées, ENPC, HdR
- LE BRIS Claude, Modélisation, analyse et simulation, ENPC, HdR
- LECLERE Vincent, Optimisation et systèmes, ENPC,
- LELIEVRE Tony, Modélisation, analyse et simulation, ENPC, HdR
- LEVITT Antoine, Modélisation, analyse et simulation, INRIA (10/2015-)
- MEUNIER Frédéric, Optimisation et systèmes, ENPC, HdR
- MONASSE Laurent, Modélisation, analyse et simulation, ENPC
- MONNEAU Régis, Modélisation, analyse et simulation, ENPC, HdR
- REYGNER, Julien, Probabilités appliquées, ENPC (09/2015-)
- ROUSSET Mathias, Modélisation, analyse et simulation, INRIA, HdR
- STOLTZ Gabriel, Modélisation, analyse et simulation, ENPC, HdR

### Personnel administratif

- ADLI Lila, (01/2015-04/2015)
- SIMUNIC Isabelle, Secrétaire Générale (01/2015-)

### Chercheurs associés ( $\geq 1$ j/sem ou $\geq 2$ mois/an)

- CARPENTIER Pierre (ENSTA), Optimisation et systèmes
- GUYADER Arnaud, professeur UPMC, Modélisation, analyse et simulation
- KEBAIER Ahmed (Univ Paris 13), Probabilités appliquées
- ZANETTE Antonino (Univ. Udine), Probabilités appliquées



## Chercheurs en délégation

- CHAMOIN L. (ENS Cachan), Modélisation, analyse et simulation
- LE PEUTREC D. (Univ. Paris 11), (01/2015-06/2015), Modélisation, analyse et simulation
- ZITT P.-A. (UPEM), depuis (09/2015-), Modélisation, analyse et simulation

## Chercheurs invités ( $\geq 2$ semaines)

- ALISHAHI Meysam (IRAN University of Shahrood), RP (1 mois, mi-août à mi-septembre 2015), Optimisation et systèmes
- De LOERA Jesus (Davis University of California), RP (1 mois, octobre 2015), Optimisation et systèmes
- GUERMOND Jean-Luc (Texas A&M Univ), RP (1 mois, mi-mai à mi-juin 2015), Modélisation, analyse et simulation

## Chercheurs émérites

- BOULEAU Nicolas, chercheur émérite ENPC
- COHEN Guy, chercheur émérite ENPC
- POMMARET Jean-François, chercheur émérite ENPC

## Post-doctorants et Doctorants

Voir la section 3.

## 2 Publications

### 2.1 Livres

- A. Alfonsi. Affine Diffusions and Related Processes : Simulation, Theory and Applications. Bocconi & Springer Series, 2015.
- P. Carpentier, J.-P. Chancelier, G. Cohen, M. De Lara. Stochastic Multi-Stage Optimization : At the Crossroads between Discrete Time Stochastic Control and Stochastic Programming, Springer-Verlag, 2015.

### 2.2 Livres de vulgarisation

- J. Boutang and M. De Lara. The Biased Mind : How Evolution Shaped our Psychology, Including Anecdotes and Tips for Making Sound Decisions, Springer-Verlag, 2015.

### 2.3 Articles dans des revues avec comité de lecture

Voir la section 8

## 2.4 Activités de vulgarisation

- J. Reygner, MATAPLI : “Merveilles du monde unidimensionnel : lois de conservation et transport optimal”, MATAPLI 108 :103-122, 2015.
- G. Stoltz est intervenu dans deux sujets de l’émission de vulgarisation scientifique « On n’est pas que des cobayes » (France 5), en avril 2015 sur le thème des ondes de pendules, et en octobre 2015 sur les trajectoires de feux d’artifice.

## 3 Formation par la recherche

### 3.1 HDR soutenues

1. Néant.

### 3.2 Thèses soutenues

1. H. Alrachid (01/09/2012 - 30/11/2015, UPE MSTIC), Analyse mathématique de méthodes numériques stochastiques en dynamique moléculaire. Direction : T. Lelièvre. Financement ENPC and CNRS Liban.
2. P. Blanc (01/11/2012 - 09/10/2015, UPE MSTIC), Effets de rétroaction en finance : applications à l’exécution optimale et aux modèles de volatilité. Direction : A. Alfonsi. Financement ENPC et Natixis.
3. D. Gontier (01/09/2012 - 31/08/2015, UPE MSTIC), Contributions mathématiques aux calculs de structures électroniques. Direction : E. Cancès. Financement Ecole Normale Supérieure.
4. W. Minvielle (01/09/2012 - 31/08/2015, UPE MSTIC), Quelques problèmes liés à l’erreur statistique en homogénéisation stochastique. Direction : C. Le Bris et F. Legoll. Financement Labex MMCD.
5. N. Mourad (01/09/2011 - 28/08/2015, UPE MSTIC), A mathematical and numerical analysis of the pseudopotential method. Direction : E. Cancès. Financement ENPC et CNRS Liban.
6. E. Palidda (01/09/2010- 29/05/2015), Managing Interest Rates derivatives with stochastic variance-covariance. Direction : A. Alfonsi et B. Lapeyre. Financement Crédit Agricole puis Citibank.
7. P. Sarrabezolles (01/10/2012 - 2015, UPE MSTIC), Colorful linear programming. Direction : F. Meunier. Financement : Ecole Polytechnique.
8. C. Rey (01/10/2012 - 04/12/2015, UPE MSTIC), Etude et modélisation d’équations différentielles stochastiques. Direction : A. Alfonsi et V. Bally. Financement ENPC.
9. L. Sepulveda (16/12/2010 - 20/08/2015, UPE MSTIC, cotutelle avec Univ. Nacional de Colombia), Mathematical viability methods for supervision and control of endemic diseases of South-West Colombia. Direction : M. De Lara et O. Vasilieva. Financement : Colombie.
10. C. Smadi Lasserre (01/09/2011 - 05/03/2015, UPE MSTIC), Population extinction in random environment and genetic hitchhiking, Direction : J.-F. Delmas et S. Méléard. IPEF.

### 3.3 Thèses en cours

1. A. Al Gerbi (01/11/2013 - 2016, UPE MSTIC), Modeling and simulation of systemic risk in finance. Direction : E. Clément et B. Jourdain. Financement ENPC et Chaire “Risques Financiers”.
2. A. Bakhta (01/11/2014 - 2017, UPE MSTIC), Méthodes numériques déterministes et stochastiques pour la simulation de cellules photovoltaïques. Direction : E. Cancès, T. Lelièvre et V. Ehrlacher. Financement ENPC et ressources propres.
3. E. Bernard (01/09/2013 - 2016, UPE Science Ingénierie et Environnement), Interactions molécule-surface : physisorption et chimisorption sur une surface métallique, énergétique et dynamique. Direction : G. Chambaud et E. Cancès. Financement Labex MMCD.
4. P. Cantin (04/11/2013 - 2016, UPE MSTIC), Compatible Discrete Operator Schemes for Unsteady and Variable-Density Navier–Stokes Equations. Direction : A. Ern. Financement EDF.
5. K. Cascavita (01/10/2015 - 2018, UPE MSTIC), Hybrid High-Order methods for yield fluids. Direction : X. Chateau and A. Ern. Financement Labex MMCD.
6. L. Daudet (01/10/2014 - 2017, UPE MSTIC), Ordonnancement des trains et des navettes dans le tunnel sous la Manche. Direction : F. Meunier. Financement Chaire “Eurotunnel”.
7. G. Emprin (01/10/2015 - 2018, UPE MSTIC), Étude de la recombinaison sur les arbres aléatoires continus. Direction : R. Abraham et J.-F. Delmas. Financement : École Normale Supérieure.
8. G. Faure (03/11/2014 - 2017, UPE MSTIC), Méthodes multi-échelles pour la simulation d’ondes de choc et de détonation. Direction : J.-B. Maillet et G. Stoltz. Financement CEA/DAM.
9. J. Firozaly (15/10/2014 - 2017, UPE MSTIC), Homogénéisation de modèles de poursuite en une dimension et ondes vertes. Direction : C. Imbert et R. Monneau. Financement ENPC et Labex Bézout.
10. R. Fischer (01/05/2013 - 2016, UPE MSITC), Modélisation de la dépendance sous contraintes. Direction : C. Butucea, J.-F. Delmas et A. Dutfoy. Financement : Cifre EDF.
11. O. Franck (01/09/2013 - 2016, UPMC Chimie physique et chimie analytique), Analyse et développement de nouvelles méthodes de calcul de structures électroniques. Direction : J. Toulouse et E. Cancès. Financement Labex Calsimlab (UPMC).
12. E. Gaillard de Saint Germain (02/11/2015 - 2018, UPE MSTIC), Arbitrer coût et flexibilité dans la supply-chain. Direction : F. Meunier. Financement : Cifre Argon-Consulting.
13. H. Gérard (01/11/2015 - 2018, UPE MSTIC), Décomposition de problèmes d’optimisation stochastique de grande dimension, avec mesure de risque. Direction : M. De Lara et J.-C. Pesquet. Financement : ENPC et Labex Bézout.
14. H. Guo (08/09/2014 - 24/08/2015, Univ. Beijing, 1 year visit), Large multi-type Galton-Watson trees. Direction : M. Zhang (main director) et J.-F. Delmas. Financement China grant.

15. A.-A. Homman (01/04/2013 - 2016, UPE MSTIC), Modèles réduits pour la simulation des ondes de choc. Direction : J.-B. Maillet et G. Stoltz. Financement CEA/DAM.
16. M. Iben Taarit (01/09/2013 - 2016, UPE MSTIC), A unified approach to price and hedge of financial contracts in presence of bilateral counterparty risk and funding constraints. Direction : B. Lapeyre. Financement Natixis.
17. M. Josien (01/09/2015 - 2018, UPE MSTIC), Multiscale approaches for materials science. Direction : C. Le Bris. Financement : IPEF.
18. H. Louvin (01/09/2014 - 2017, Paris-Saclay PHENIICS), Développement d'une méthode de réduction de variance fondée sur l'utilisation des systèmes de particules en interaction. Direction : C. Diop et T. Lelièvre. Financement CEA.
19. F. Madiot (07/10/2013 - 2016, UPE MSTIC), Multiscale finite element methods for advection diffusion problems. Direction : C. Le Bris et F. Legoll. Financement ENPC et *Office of Naval Research*
20. Y. Masson (01/10/2013 - 2016, UPE MSTIC), Modelling of Grid Shells. Direction : O. Baverel et A. Ern. Financement Labex MMCD.
21. B. Nectoux (01/11/2014 - 2017, UPE MSTIC), Métastabilité et distributions quasi-stationnaires. Direction : T. Lelièvre et E. Cancès. Financement ERC.
22. E. Ntovoris (01/09/2013 - 2016, UPE MSTIC), Erosion and growth of crystals. Direction : R. Monneau et M. Canone. Financement UPEM.
23. F. Pacaud (01/10/2015 - 2018, UPE MSTIC), Optimisation décentralisée pour l'efficacité énergétique. Direction : M. De Lara. Financement : ITE Efficacy.
24. A. Parmentier (01/09/2013 - 2016, UPE MSTIC), Optimization of aircraft routing and crew pairing. Direction : F. Meunier. Financement : IPEF.
25. R. Reidlbeck (01/11/2014 - 2017, Université de Montpellier, Information Structures Systèmes), Algorithmes adaptatifs pour la poromécanique et la poro-plasticité. Direction : D. Di Pietro et A. Ern. Financement EDF.
26. J. Roussel (07/09/2015 - 2018, UPE MSTIC), Variance reduction techniques for nonequilibrium systems. Direction : G. Stoltz. Financement : ANR COSMOS.
27. R. Saint (01/09/2013 - 2016, UPE MSTIC), Multiscale models for trafic. Direction : T. Lelièvre et X. Louis. Financement IPEF.
28. M. Sciauveau (01/09/2015 - 2018, UPE MSTIC), Études des fonctionnelles de coût sur les arbres aléatoires, Direction : J.-F. Delmas et J.-S. Dhersin. Financement : DIM IdF.
29. P. Terrier (01/09/2015 - 2018, UPE MSTIC), Reduced models for defect migration in metals. Direction : G. Stoltz and M. Athènes. Financement : IPEF.
30. Z. Trstanova (01/06/2013 - 2016, Grenoble MSTII), Méthodes d'échantillonnage d'importance en simulation moléculaire. Direction : S. Redon et G. Stoltz. Financement ERC de S. Redon.
31. J.-L. Vié (01/09/2013 - 2016, UPE MSTIC), Shape optimization. Direction : G. Allaire et E. Cancès. Financement IPEF.
32. Y. Xu (15/09/2015 - 2016, UPE MSTIC), Variance reduction for kinetic particle systems. Direction : M. Rousset and P.-A. Zitt. Financement : UPEM.

33. A. Zhou (01/11/2014 - 2017, UPE MSTIC), Analysis of stochastic particle methods applied to finance. Direction : B. Jourdain. Financement AMX et complément Chaire "Risques Financiers".

### 3.4 Postdoctorats

1. M. Bertin, 01/03/2015 -, Labex MMCD
2. J. Corbetta, 01/04/2015 -, chaire "Risques Financiers".
3. G. Di Gesu, 01/09/2014 -, ERC MsMaths
4. T. Hudson, 01/09/2014 -, Fondation des Sciences Mathématiques de Paris
5. S. Lemaire, 01/06/2014 - 31/12/2015 (US EOARD puis CEA/DAM)
6. H. Nassar, 01/10/2015 -, Labex MMCD
7. D.V. Nguyen, 10/12/2014 - 09/12/2015, ANR HJNET
8. A. Nguyen Huu, 01/09/2014 - 31/08/2015, FUI Riskergy.

### 3.5 Chargés d'étude et Stagiaires

#### 3.5.1 Chargés d'étude

1. A. Benaceur, 15/10/2015 -, chargée d'étude, dir. A. Ern
2. K. Cascavita, 01/01/2015 -, chargée d'étude, dir. A. Ern

#### 3.5.2 Stagiaires

1. V. Foucher, 01/04/2015-31/07/2015, stage Polytechnique, dir. M. De Lara
2. H. Gerard, 01/04/2015-30/09/2015, stage M2 MPRO et TELECOM PARISTECH, dir. M. De Lara
3. M. Khalfat, 22/10/2015-, stage Institut Galilée Université Paris 13, dir. T. Lelièvre
4. H. Li, 01/04/2015-31/07/2015, stage Polytechnique, dir. A. Alfonsi
5. S. Mehalla, 14/09/2015-, stage année de césure ENSTA/RTE, dir. B. Lapeyre
6. R. Rincon, 15/04/2015-30/09/2015, stage M2 Institut Galilée Université Paris 13, dir. B. Lapeyre
7. J. Roussel, 01/03/2015-31/06/2015, stage M2 sous la direction conjointe de C. Le Bris et P. Rouchon
8. A. Touboul, 01/07/2015-31/08/2015, stage césure ENPC, dir. B. Lapeyre
9. Y. Xu, 15/04/2015-30/09/2015, stage M2 UPEM, dir. M. Rousset et P.A. Zitt

### 3.6 Conférences et séminaires par doctorants et post-doctorants

#### Internationales

- E. Bernard, Anharmonicity in medium-sized molecules and clusters (AMOC), Madrid (Espagne), 04/2015

- P. Blanc, Global Derivatives Trading & Risk Management conference, Amsterdam (Pays-Bas), 05/2015
- P. Cantin, Variational Multiscale Workshop, Munich (Allemagne),02/2015
- P. Cantin, SIAM Conference on Computational Science & Engineering, Salt Lake City (USA), 03/2015
- P. Cantin, Finite Element Circus, Virginia (USA), 03/2015
- P. Cantin, ENUMATH, Ankara (Turquie), 09/2015
- J. Corbetta, 39th Annual Meeting of the AMASES, Padoue (Italie), 09/2015
- L. Daudet, ISMP 2015, Pittsburgh (Etats-Unis), 07/2015
- G. Di Gesu, Seminar TU Wien (Autriche) , 11/2015
- G. Faure, Discrete Simulation of Fluids Dynamics, Edimbourg (Royaume-Uni), 07/2015
- G. Faure, Mainz Materials Simulation Days, Mayence (Allemagne), 06/2015
- R. Fischer, Congres EMS, Amsterdam (Pays-Bas), 07/2015
- R. Fischer, Congres ESREL, Zürich (Suisse), 09/2015
- D. Gontier, workshop on Fundamental Aspects of DFT, Oslo (Norvege), 01/2015
- D. Gontier, workshop Mathematical Methods in Quantum Molecular Dynamics, Oberwolfach (Allemagne), 06/2015
- A.-A. Homman, DSFD 2015, Edimbourg (Royaume-Uni), 07/2015
- T. Hudson, Workshop on "Analytic approaches to scaling limits for random system", Bonn (Allemagne), 01/2015
- T. Hudson, US National Congress on Computational Mechanics, San Diego (USA), 07/2015,
- T. Hudson, ICIAM conference, Beijing (Chine), 08/2015
- M. Iben Taarit, QMF conference, Sydney (Australie), 12/2015
- S. Lemaire, Workshop on "High-order methods on polyhedral meshes", Milano (Italie), 02/2015
- S. Lemaire, PANACM conference, Buenos Aires (Argentine), 04/2015
- S. Lemaire, Seminaire interne du groupe ANMC, EPFL (Suisse), 06/2015
- S. Lemaire, Workshop on "Polytopal element methods in mathematics and engineering", Atlanta (USA), 10/2015
- S. Lemaire, Séminaire de mathématiques appliquées, Université de l'Utah, Salt Lake City (USA), 11/2015
- F. Madiot, ICIAM conference, Beijing (Chine), 08/2015,
- W. Minvielle, Workshop on "Analytic approaches to scaling limits for random system", Bonn (Allemagne), 01/2015
- W. Minvielle, International conference on Adaptive Modeling and Simulation (ADMOS), Nantes (France), 06/2015
- W. Minvielle, Equadiff Conference, Lyon (France), 07/2015

- E. Ntovoris, Instytut Matematyczny, Uniwersytet Wrocławski, Wrocław (Poland), 02/2015
- E. Ntovoris, Anisotropy 2015, Warsaw (Poland), 10/2015
- A. Parmentier, ACC 2015, Chicago (USA), 06/2015
- A. Parmentier, ISMP 2015, Pittsburgh (USA), 07/2015
- R. Saint, workshop “Traffic Estimation”, IPAM, Los Angeles (USA), 10/2015
- R. Saint, IPAM culminating workshop at Lake Arrowhead (USA), 12/2015

## Nationales

- A. Al Gerbi, SMAI 2015, Les Karellis (France), 06/2015
- H. Alrachid, Séminaire au LAMA, Université de Marne la Vallée (France), 02/2015
- H. Alrachid, Seminar at University of Warwick (Royaume-Uni), 09/2015
- H. Alrachid, Séminaire au LAMA, Université de Marne la Vallée, 02/2015
- H. Alrachid, SMAI 2015, Les Karellis (France), 06/2015
- A. Bakhta, SMAI 2015, les Karrelis (France), 06/2015
- A. Bakhta, groupe de travail Paris Dauphine (France), 11/2015
- E. Bernard, Congrès 2015 de la société Chimique de France, Chimie et transition énergétique, Lille (France), 07/2015
- E. Bernard, Molecules in Motions (MOLIM), Marne-la-vallée (France), 08/2015
- J. Corbetta, Groupe de travail Méthodes Stochastiques et Finance, UPEMLV (France), 04/2015
- J. Corbetta, Groupe de travail Modèles Stochastiques en Finance , Polytechnique, (France) 06/2015
- L. Daudet, Congrès ROADEF, Marseille (France), 02/2015
- G. Di Gesu, Séminaire Université d’Orléans (France), 10/2015
- R. Fischer, Journées ENSAE-ENSAI, Paris (France), 01/2015
- R. Fischer, Séminaire APSPP d’EDF, Paris (France), 03/2015
- R. Fischer, Journées de Statistiques de la SFdS, Lille (France), 07/2015
- R. Fischer, Séminaires de l’équipe de Probabilités et Statistiques de Paris 13, Paris (France), 11/2015
- D. Gontier, Nonlinear equations seminar, University Paris 13 (France), 11/2015
- A.-A. Homman, Journées des Doctorants du CEA, Bruyères-le-Châtel (France), 06/2015
- A.-A. Homman, SMAI 2015, Les Karellis (France), 06/2015
- T. Hudson, Groupe de travail Analyse et Mathématique Physique Université Paris Sud (France), 11/2015
- T. Hudson, Séminaire Institut des Systèmes Complexes de Paris (France), 06/2015
- S. Lemaire, SMAI 2015, Les Karellis (France), 06/2015
- S. Lemaire, Séminaire de l’équipe ACSION (IMAG), Université de Montpellier (France), 12/2015

- F. Madiot, SMAI 2015, Les Karellis (France), 06/2015
- F. Madiot, Séminaire CEA GAMNI 2015, Paris (France), 02/2015
- A. Parmentier, Congrès ROADEF, Marseille (France), 02/2015
- A. Parmentier, Ma thèse en 180 seconde, UPE (France), 03/2015
- C. Rey, Groupe de travail de l'équipe de Probabilités et Statistiques, University Paris 13 (France), 05/2015
- C. Rey, Groupe de travail Méthodes Stochastiques et Finance, UPEMLV (France), 10/2015
- R. Saint, Journée des doctorants IPEF (France), 01/2015
- R. Saint, Journée des doctorants MSTIC (France), 06/2015
- R. Saint, PhD seminar series at IPAM (UCLA), 09/2015
- P. Sarrabezolles, Congrès ROADEF, Marseille (France), 02/2015
- Z. Trstanova, Congres SMAI, Les Karellis (France), 06/2015
- Z. Trstanova, NASPDE 2015 Numerical Analysis of Stochastic PDEs, Sofia-Antipolis (France), 09/2015
- J.-L. Vié, SMAI 2015, Les Karellis (France), 06/2015

## 4 Enseignement

### 4.1 Ecoles d'ingénieur (responsables de cours uniquement)

- **ENPC** : Analyse et Calcul Scientifique (G. Stoltz), Calcul scientifique (A. Ern), Probabilités et statistiques (A. Alfonsi, B. Jourdain), Modélisation pour la gestion durable des ressources naturelles (M. De Lara), Modéliser, Programmer, Simuler (A. Alfonsi, J.-F. Delmas, T. Lelièvre), Optimisation (F. Meunier), Optimisation et Contrôle (J.-Ph. Chancelier), Recherche opérationnelle (F. Meunier), Analyse spectrale (V. Ehrlacher), Outils mathématiques pour l'ingénieur (E. Cancès), Outils probabilistes pour la finance (M. Rousset), Projets de physique statistique et quantique (G. Stoltz), Modéliser l'aléa (J.-Ph. Chancelier), Finance : aspects mathématiques et numériques (B. Lapeyre).
- **Ecole polytechnique** : professeurs chargés de cours (E. Cancès, J.-F. Delmas, A. Ern, B. Jourdain), professeur chargé de cours 10 mois (A. Alfonsi, F. Meunier)
- **ENSTA** : Probabilités et statistiques (J.-F. Delmas), Calibration (A. Alfonsi).
- **ENSMF** : Introduction au calcul scientifique (G. Stoltz)

### 4.2 Masters de recherche et cours d'Ecole doctorale

- **M2R Mathématiques et Applications** (UPEM, coopéré avec l'ENPC)
  - Correspondant A. Alfonsi
  - Participation au pilotage du parcours mathématiques financières



- Parcours mathématiques financières (MAF) : 5 cours, dont 2 fondamentaux et 3 spécialisés (Modèles de taux d'intérêt, A. Alfonsi, V. Bally; Mesures de risque, A. Alfonsi, G. Pagès; Données de marché et calibration, A. Alfonsi, A. Gloter; Méthodes de Monte Carlo en finance, B. Jourdain, B. Lapeyre; Processus avec sauts et applications au marché de l'énergie, M. Bernhart, J.-F. Delmas, B. Jourdain.
- **M2R Mathématiques & Applications** (UPMC, coopéré avec l'ENPC)
  - Correspondant : E. Cancès
  - Parcours Analyse Numérique et Équations aux Dérivées Partielles (ANEDP) : 4 cours dont 1 cours fondamental et 3 cours spécialisés (Méthodes numériques probabilistes, T. Lelièvre; Méthodes variationnelles en physique quantique, E. Cancès, M. Lewin; Méthodes de Galerkin discontinues et applications, A. Ern; Introduction à la physique statistique numérique, G. Stoltz)
  - Parcours Optimisation, Théorie des Jeux et Modélisation en Économie (OJD) : 1 cours spécialisé (Combinatoire topologique : optimisation et jeux, F. Meunier)
- **Master Parisien de Recherche Opérationnelle (MPRO)** (CNAM, coopéré par l'ENPC)
  - Correspondant : F. Meunier
  - 1 cours fondamental et interventions dans un cours fondamental et deux cours spécialisés (Optimisation stochastique : M. De Lara et V. Leclère; Programmation mathématique, Graphes avancés, Réseaux et transport : F. Meunier)
- **Autres M2R** : A. Alfonsi, J.-Ph. Chancelier et M. De Lara assurent également d'autres cours dans des Masters :
  - Master Modélisation et Méthodes Mathématiques en Économie et Finance (MM-MEF), Univ. Panthéon-Sorbonne : 3 cours.
  - Master Économie du Développement Durable, de l'Environnement et de l'Énergie (EDDEE), Univ. Nanterre : 1 cours.
  - Master Renewable Energy Science & Technology (REST), ParisTech : 1 cours.

### 4.3 Cours invités

- E. Cancès (4h), Winter School on Computational and Mathematical Methods for Materials Defects and Multiphase Flows, Singapore, February 2015
- E. Cancès (2h), International summer School in electronic structure Theory : electron correlation in Physics and Chemistry, Aussois, France, June 2015
- E. Cancès and T. Lelièvre (10h), ICS summer school on Computational Chemistry and Applied Mathematics, Roscoff, France, July 15-August 14, 2015
- M. De Lara (16h), Stochastic Optimization, UNAL, Bogotá, Colombia, 07/2015
- M. De Lara (16h), Stochastic Optimization, IMCA, Lima, Peru, 02/2015
- A. Ern (8h), Compatible discretization Methods, IMCA, Lima, Peru, 07/2015
- A. Ern (6h), Advanced numerical methods, University of Udine, Italie, 02/2015
- F. Meunier (6h), School on Graph Theory : topological methods in graph theory, Porquerolles, France, 05/2015

## 5 Contrats

### 5.1 Contrats institutionnels

#### 5.1.1 Contrats institutionnels : PI ou partenaire avec financement au Laboratoire

- **ERC consolidator MSMATH**, PI : T. Lelièvre, CERMICS, sur l'étude de méthodes numériques pour la physique statistique computationnelle. 01/06/2014-31/05/2019.
- **ANR COSMOS**, PI : G. Stoltz, CERMICS, sur l'analyse mathématique et numérique de modèles en simulation moléculaire et statistique computationnelle. Partenaires : Institut Mines-Telecom, Inria Rennes, IBPC, Ecole des Ponts Paristech, 01/10/2014-30/09/2018.
- **ANR HJnet**, PI : O. Ley, IRMAR, on Hamilton-Jacobi equations on heterogeneous structures and networks. Partenaires : INSA Rennes, Tours Univ., Paris 7 Univ., Ecole des Ponts Paristech (CERMICS, R. Monneau) 01/01/2013-31/07/2016.
- **ANR PANELS**, PI : X. Blase, CNRS, Approches *ab initio* innovantes pour une meilleure compréhension des systèmes photovoltaïques, Partenaires : Institut Néel de Grenoble, Université Claude Bernard - Lyon, Ecole des Ponts Paristech (CERMICS, I. Dabo) 01/11/2012-31/10/2015.
- **Centrale OO**, PI : M. Gardies. Partenaires : STEP, Nexyad, Aspectize, Mediamobile, Ecole des Ponts Paristech (CERMICS, F. Meunier).
- **PGMO-PRMO : LASON**, PI : M. De Lara, CERMICS, on Latin America Stochastic Optimization Network, Programme Gaspard Monge pour l'Optimisation et la recherche opérationnelle, 01/09/2012-31/08/2015; **PALON**, PI : JP. Chancelier, CERMICS, on Paris-London networks on stochastics and optimization in renewable energy, 01/09/2015-31/08/2017; **PLC**, PI : F. Meunier, CERMICS, sur la programmation linéaire colorée, 01/09/2012-31/08/2016; **SOSES**, PI : V. Leclere, CERMICS, on Solar Forecasting with Epi-Splines, 01/09/2015-31/08/2017; **STORY**, PI : M. De Lara, CERMICS, sur un réseau scientifique en optimisation stochastique et robuste, 01/09/2014-31/08/2017.
- **PGMO-IROE : LASON2**, PI : M. De Lara, CERMICS, sur le management des énergies centralisées *versus* décentralisées, 01/09/2014-31/08/2017; **LORI**, PI : M. De Lara, CERMICS, sur les Logiciels pour l'Optimisation des Réseaux Intelligents, 01/09/2015-31/08/2017.

#### 5.1.2 Contrats institutionnels : participation

- **ANR BECASIM**, PI : I. Danaila. Partenaires : Université de Rouen, Ecole des Ponts (CERMICS : E. Cancès), 2012 - 2016
- **ANR GRAAL**, PI : T. Duquesne. Partenaires : Université Pierre et Marie Curie, Ecole des Ponts (CERMICS : J.-F. Delmas), Université de Bordeaux, Université de Nancy, 2014-2019
- **ANR HHOMM**, PI : D. Di Pietro. Partenaires : Université de Montpellier, Monash University, Ecole des Ponts (CERMICS : A. Ern), University of Udine, 2015-2018

- **ANR STAB**, PI : I. Gentil. Partenaires : Université Lyon 1, Université Paris-Dauphine, Ecole des Ponts (CERMICS : B. Jourdain, T. Lelièvre), 2013-2016

Enfin, le CERMICS est membre des groupements de recherche (GdR) suivants :

- GdR ACO-CHOCOLAS (étude des ondes de choc par simulation ou expérience),
- GdR Calcul
- GdR CoDFT (calcul de structure électronique utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité),
- GdR correl (méthodes corrélées pour le calcul de structures électroniques),
- GdR dynamique quantique (évolutions quantiques, méthodes semi-classiques, transport électronique),
- GdR EGRIN (Ecoulements Gravitaires et Risques Naturels),
- GdR MANU (MATHématiques pour le NUcléaire)
- GdR MASCOT-NUM (méthodes stochastiques pour l'analyse des codes numériques),
- GdR Maths et entreprise,
- GdR MOA (Mathématiques de l'optimisation et applications)
- GdR Rest (Rencontres de spectroscopie théorique).

## 5.2 Contrats industriels

- Air France : Simultaneous optimization of aircraft routing and crew pairing, PI : F. Meunier (2013-2016)
- Argon Consulting : accompagnement de la thèse CIFRE d'Etienne Gaillard de Saint Germain, PI : F. Meunier (2015-2018).
- CEA/DAM : Fluid-structure interaction, exterior differential calculus, fast interaction of shock waves with rigid structures, PI : A. Ern, L. Monasse, R. Monneau (2011-2015)
- CEA/DAM : Multiscale methods for the simulation of shock waves (thèse A.-A. Homman), PI : G. Stoltz (2013-2016)
- Chaire Eurotunnel, PI : G. Foret (ENPC, Navier), (thèse L. Daudet) F. Meunier (2014-2017)
- Chair Financial Risks of the Risk Foundation, PI : N. El Karoui (UPMC), A. Alfonsi, B. Jourdain and B. Lapeyre, X-Ponts-UPMC-Société Générale (2012-2017)
- EDF : Modélisation de la dépendance sous contrainte (thèse R. Fisher), PI : J.-F. Delmas (2013-2016)
- EDF : Compatible discrete operator schemes for Unsteady and Variable-Density Navier-Stokes Equations (thesis P. Cantin), PI : A. Ern. (2013-2016)
- European Office of Aerospace Research and Development, PI : C. Le Bris, Partenaire : NAVIER (ENPC) (2012-2016)
- Fondation NATIXIS : Etude de l'impact sur les prix des ordres de marché et des ordres limites (thèse P. Blanc), PI : A. Alfonsi (2012-2015)

- Fondation NATIXIS : Couverture des produits financiers en présence du risque bilatéral de contre partie (thèse I. Taarit), PI : B. Lapeyre (2013-2016)
- OSEO : Chaîne de génération de code multi-domaine sous licence libre basée sur des standards d'interopérabilité ouverts, PI : JP. Chancelier, Partenaire ENSTA, (2011-2015)
- OSEO : Robust structural Optimization for Deseign in Industry, PI : E. Cances, Partenaire Ecole Polytechnique, (2013-2016)
- IRDEP : Méthodes numériques pour les matériaux du photovoltaïque, PI : V. Ehrlacher, E. Cancès, T. Lelièvre (2012-2015)
- Office of Naval Research, Study of random materials, PI : C. Le Bris, Partenaire : NAVIER (ENPC) (2012-2015)
- Office of Naval Research, Study of random materials, PI : C. Le Bris, Partenaire : NAVIER (ENPC) (2015-2018)
- RISKERGY : Rating the sovereign debts including criteria on energy consumption. PI : M. De Lara, A. Alfonsi (2013-2015)
- AIRD : Modèles d'optimisation et de viabilité en écologie et en économie PI : M. De Lara (2012-2015)
- SunHydrO - Sun'R Smart Energy : optimisation stochastique pour le stockage d'énergie solaire par pompage virtuel, PI : J.-P. Chancelier, Partenaire : ENSTA, (2014-2016)

## 6 Rayonnement

### 6.1 Prix

- A. Bakhta, prix du second meilleur poster du congrès de la SMAI 2015, les Karrelis (France), 06/2015
- J. Reygner a reçu le Prix de thèse Jacques Neveu du groupe MAS de la SMAI pour sa thèse soutenue en 2014.

### 6.2 Séjours à l'étranger ( $\geq 1$ mois)

- C. Le Bris is a regular Visiting Professor at the University of Chicago (U.S.A).
- V. Leclère was a visiting scholar for 10 months at UC Berkeley (U.S.A).
- E. Ntovoris was visiting Univ. of Warsow, Poland (2 months).
- R. Saint participated to the program "New Directions in Mathematical Approaches for Traffic Flow Management" at IPAM, Los Angeles, U.S.A. (3 months)

### 6.3 Comités

#### Comités éditoriaux

- E. Cancès : Mathematical Modelling and Numerical Analysis (2006-); SIAM Journal of Scientific Computing (2008-); Communications in Mathematical Sciences (2011-); SIAM Multiscale Modeling and Simulation (2012-).

- M. De Lara : Environmental Modeling and Assessment (Springer) (2007-).
- J-F. Delmas : Applied Mathematics research express (2010-).
- A. Ern : SIAM Journal of Scientific Computing (2011-), Mathematical Modelling and Numerical Analysis (2013-), Journal de l'École Polytechnique (2013-).
- B. Jourdain : ESAIM Proceedings (2012-).
- C. Le Bris : Editor-in-chief of Applied Mathematics Research Express (2013-); Managing Editor of Networks and Heterogeneous Media (2005-); Annales mathématiques du Québec (2013-); Archive for Rational Mechanics and Analysis (2004-); COCV (Control, Optimization and Calculus of Variations) (2003-); Mathematics in Action (2008-); Non-linearity (2005-); Journal de Mathématiques Pures et Appliquées (2009-); Monograph series Mathématiques et Applications, Series, Springer (2008-); Modeling, Simulations and Applications, Series, Springer (2009-).
- T. Lelièvre : co-editor in Chief of ESAIM : Proceedings (2012-).
- R. Monneau : Journal Interfaces and Free Boundaries (2012-).

### **Comités scientifiques de programme ou d'institution**

- E. Cancès : GDR co-DFT
- M. De Lara : Labex CORAIL, Head (2012-); Gaspard Monge Program for Optimization and operations research (PGMO), Electricité de France (EDF) and the Jacques Hadamard Mathematical Foundation (FMJH) (2012-); French Economic Council for Sustainable Development (2008-); Institut national de l'environnement industriel et des risques (INERIS) (2014-); Institute for energy transition Efficacity (2014-);
- A. Ern : ANDRA (2005-2015); Institut Camille Jordan, Lyon (2012-);
- B. Jourdain : Head of the HCERES visit committee of the Laboratoire de Mathématiques Raphael Salem, Rouen, 20 november 2015
- C. Le Bris : Centre de Recherche Mathématique, Université de Montréal (2010-); DFG Cluster of Excellence Engineering of Advanced Materials, Erlangen (2010-); DFG research center Matheon, Berlin (2010-); "Conseil scientifique de la SMAI" (2014-); International Mathematical Union Circle (2014-);
- G. Stoltz : Membre du conseil scientifique de l'Université Numérique Ingénierie et Technologies (2015-);

### **Comités scientifiques de conférence**

- A. Ern : scientific committee of ENUMATH 2015, Ankara (Turkey, 09/2015)
- B. Jourdain : scientific committee of the CANUM 2016
- C. Le Bris : scientific committee of the conference "Dimension reduction : mathematical methods and Applications", Pennsylvania State University, March 21-24, 2015.
- T. Lelièvre : scientific committee of the conference MoRePaS 2015, Trieste (Italy), 10/2015

## 6.4 Organisation de conférences ou séminaires

- A. Alfonsi is a co-organizer of a weekly seminar on numerical methods and finance that takes place at Marne la Vallée, see [http://umr-math.univ-mlv.fr/evenements/seminaires/groupe\\_de\\_travail\\_modelisation\\_stochastique\\_et\\_finance](http://umr-math.univ-mlv.fr/evenements/seminaires/groupe_de_travail_modelisation_stochastique_et_finance).
- E. Cancès has co-organized the ICS summer school on Computational Chemistry and Applied Mathematics, Roscoff (France), 07-08/2015 (with Y. Maday and J.-P. Piquemal),
- E. Cancès has co-organized the MBI Workshop Mathematical Challenges in Drug and Protein Design, Columbus (Ohio, USA), 12/2015
- L. Chamoin has co-organized (with F. Chinesta) the International Conference on Adaptive Modeling and Simulation (ADMOS 2015) , Nantes (France), 06/2015
- L. Chamoin organized (with S. Prudhomme and M. Laforest) the minisymposium "Applications of error estimation and model adaptation in Computational Mechanics" at the 13th US National Congress on Computational Mechanics, San Diego (USA), 07/2015
- J.Ph. Chancelier has co-organized the 3rd Sim@SL International Workshop on Simulation at the System Level for Industrial Applications. October 14-16, 2015, ENS Cachan.
- J.Ph. Chancelier and M. De Lara have co-organized the 2d International Thematic Week on Smart Energy and Stochastic Optimization (SESO 2015), 22/06-26/06/2015, ENSTA and ENPC
- A. Ern, with J. Bonelle, has organized the CEA-EDF-INRIA School on New Trends in Compatible Discretization, 29/06-02/07/2015, Rocquencourt
- T. Hudson organized a mini-symposium "Modeling microstructure and material instabilities across a range of scales" at the 3rd ECCOMAS Young Investigator's Conference, Aachen (Germany), 07/2015 (with A. Garg)
- B. Jourdain, B. Bouchard and E.Gobet organize the 2015-2016 thematic semester on Monte Carlo methods financed by the Institute Louis Bachelier. V. Ehrlacher has co-organized the axis on propagation of uncertainties.
- C. Le Bris has co-organized the Oberwolfach Workshop *Mathematical problems in dynamical quantum chemistry*, Oberwolfach (Germany), 06/2015 (with G. Hagedorn and C. Lasser)
- C. Le Bris has co-organized the Banff Workshop *Developments in the Theory of Homogenization*, BIRS, Banff (Canada), 07/2015 (with I. Kim, Fang-Hua Lin and P. Souganidis)
- T. Lelièvre co-organizes the Journées EDP-Probab at Institut Henri Poincaré (with F. Malrieu),
- T. Lelièvre has co-organized the Workshop "Free-energy calculations : A mathematical perspective" at BIRS, Casa Matemática Oaxaca (Mexico), 07/2015 (with C. Chipot and R. Skeel),

## 6.5 Autres responsabilités collectives

- E. Cancès : Comité des écoles CEA-EDF-INRIA (2010-),

- B. Jourdain : Directeur de l'École doctorale MSTIC (16/07/2013-)
- C. Le Bris : Cabinet du Haut-commissaire à l'énergie atomique (2013-); Comité d'experts pour la Fondation de Recherche pour l'Aéronautique et l'Espace
- T. Lelièvre : Directeur du GdR MoMaS (2012-2015); membre du conseil d'administration de la SMAI (2011-); responsable du thème 4 du labex MMCD (2013-)

## 7 Logiciels

- **CELIA3d** : code de couplage fluide compressible / structure déformable par éléments discrets. Porteurs : C. Mariotti (CEA), L. Monasse (Ecole des Ponts).
- **NSP** : logiciel libre de calcul scientifique, <http://cermics.enpc.fr/nsp>. Porteurs : J.-Ph. Chancelier (Ecole des Ponts), B. Pinçon (Telecom Nancy).
- **SIMOL** : logiciel libre pour la simulation moléculaire, en cours de co-développement avec l'Inria Paris. Porteur : G. Stoltz. Membres du projet : V. Ehlacher, G. Stoltz (Ecole des Ponts), C. Doucet (Inria).
- **simport** : importeur Matlab pour Scicos et Scicos Pro. Porteurs : J.-Ph. Chancelier (Ecole des Ponts), P. Weis (INRIA) et R. Nikoukhah (Altair France).
- **PREMIA** (v.17) : bibliothèques de routines numériques financières. Porteurs : B. Lapeyre (Ecole des Ponts), G. Lelong (ENSIMAG), A. Sulem (INRIA), et A. Zanette (Udine Univ.).

## 8 Publications 2015

### Références

- [1] R. Abraham and J.-F. Delmas.  $\beta$ -coalescents and stable Galton-Watson trees. ALEA Lat. Am. J. Probab. Math. Stat., 12(1) :451–476, 2015.
- [2] R. Abraham, J.-F. Delmas, and H. He. Pruning of CRT-sub-trees. Stochastic Process. Appl., 125(4) :1569–1604, 2015.
- [3] A. Alfonsi. A simple proof for the convexity of the Choquet integral. Statistics and Probability Letters, 104 :22–25, 2015.
- [4] A. Alfonsi, B. Jourdain, and A. Kohatsu-Higa. Optimal transport bounds between the time-marginals of a multidimensional diffusion and its Euler scheme. Electron. J. Probab., 20 :no. 70, 31, 2015.
- [5] H. Alrachid and T. Lelièvre. Long-time convergence of an adaptive biasing force method : Variance reduction by Helmholtz projection. SMAI Journal of Computational Mathematics, 1 :55–82, 2015.
- [6] D. Aristoff, T. Lelièvre, C. Mayne, and I. Teo. Adaptive multilevel splitting in molecular dynamics simulations. ESAIM Proc., 48 :215–225, 2015.
- [7] N. Balin, F. Casenave, F. Dubois, E. Duceau, S. Duprey, and I. Terrasse. Boundary element and finite element coupling for aeroacoustics simulations. J. Comput. Phys., 294 :274–296, 2015.

- [8] L. Bertini and G. Di Gesu. Small noise asymptotic of the Gallavotti–Cohen functional for diffusion processes. ALEA Lat. Am. J. Probab. Math. Stat., 12 :743–763, 2015.
- [9] A. Binder, G. Simpson, and T. Lelièvre. A generalized parallel replica dynamics,. J. Comput. Phys., 284 :595–616, 2015.
- [10] X. Blanc, C. Le Bris, and P.-L. Lions. Local profiles and elliptic problems at different scales with defects. Comptes Rendus Mathématique, 353 :203–208, 2015.
- [11] X. Blanc, C. Le Bris, and P.-L. Lions. Local profiles for elliptic problems at different scales : defects in, and interfaces between periodic structures. Communications in P.D.E., 40(12) :2173–2236, 2015.
- [12] J. Bonelle, D. A. Di Pietro, and A. Ern. Low-order reconstruction operators on polyhedral meshes : Application to compatible discrete operator schemes. Computer Aided Geometric Design, 35-36 :27–41, 2015.
- [13] J. Bonelle and A. Ern. Analysis of compatible discrete operator schemes for the Stokes equations on polyhedral meshes. Ima Journal of Numerical Analysis, 35(4) :1672–1697, Oct. 2015.
- [14] Bouguet, F., Malrieu, F., Panloup, F., Poquet, C., and Reygner, J. Long time behavior of markov processes and beyond. ESAIM : Proc., 51 :193–211, 2015.
- [15] C.-E. Bréhier, T. Lelièvre, and M. Rousset. Analysis of adaptive multilevel splitting algorithms in an idealized case. ESAIM-Prob. and Stat., 19 :361–394, 2015.
- [16] C. Butucea, J.-F. Delmas, A. Dutfoy, and R. Fischer. Maximum entropy copula with given diagonal section. J. Multivariate Anal., 137 :61–81, 2015.
- [17] E. Cancès, V. Ehrlicher, F. Legoll, and B. Stamm. An embedded corrector problem to approximate the homogenized coefficients of an elliptic equation. Comptes Rendus Mathématiques, 353(9) :801–806, 2015.
- [18] F. Casenave, A. Ern, and T. Lelièvre. A nonintrusive reduced basis method applied to aeroacoustic simulations. Advances in Computational Mathematics, 41(5) :961–986, 2015.
- [19] J. Comer, J. Gumbart, J. Hénin, T. Lelièvre, A. Pohorille, and C. Chipot. The adaptive biasing force method : Everything you always wanted to know but were afraid to ask. J. Phys. Chem. B, 119(3) :1129–1151, 2015.
- [20] L. Contento, A. Ern, and R. Vermiglio. A linear-time approximate convex envelope algorithm using the double Legendre-Fenchel transform with application to phase separation. Comput. Optim. Appl., 60(1) :231–261, 2015.
- [21] G. Costeseque, J.-P. Lebacque, and R. Monneau. A convergent scheme for Hamilton-Jacobi equations on a junction : application to traffic. Numerische Mathematik, 129(3) :405–447, 2015.
- [22] M. De Lara, V. Martinet, and L. Doyen. Satisficing versus optimality : Criteria for sustainability. Bulletin of Mathematical Biology, 77(2) :281–297, 2015.
- [23] D. A. Di Pietro, J. Droniou, and A. Ern. A discontinuous-skeletal method for advection-diffusion-reaction on general meshes. SIAM Journal on Numerical Analysis, 53(5) :2135–2157, 2015.



- [24] D. A. Di Pietro and A. Ern. Equilibrated tractions for the Hybrid High-Order method. Comptes Rendus Mathématique, 353(3) :279–282, 2015.
- [25] D. A. Di Pietro and A. Ern. A hybrid high-order locking-free method for linear elasticity on general meshes. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 283 :1–21, 2015.
- [26] D. A. Di Pietro and A. Ern. Hybrid high-order methods for variable-diffusion problems on general meshes. Comptes Rendus Mathématique, 353(1) :31–34, 2015.
- [27] A. Ern and M. Vohralík. Polynomial-degree-robust a posteriori estimates in a unified setting for conforming, nonconforming, discontinuous Galerkin, and mixed discretizations. SIAM Journal on Numerical Analysis, 53(2) :1058–1081, 2015.
- [28] G. Ferré, J.-B. Maillat, and G. Stoltz. Permutation-invariant distance between atomic configurations. J. Chem. Phys., 143(10), 2015.
- [29] N. Forcadel, C. Imbert, and R. Monneau. Steady state and long time convergence of spirals moving by forced mean curvature motion. Communications in Partial Differential Equations, 40(6) :1137–1181, 2015.
- [30] G. Fort, B. Jourdain, E. Kuhn, T. Lelièvre, and G. Stoltz. Convergence of the Wang-Landau algorithm. Math. Comp., 84(295) :2297–2327, 2015.
- [31] G. Fort, B. Jourdain, T. Lelièvre, and G. Stoltz. Self-healing umbrella sampling : convergence and efficiency. Stat. Comput., 2015.
- [32] B. Gacias and F. Meunier. Design and operation for an electric taxi fleet. Operations Research Spectrum, 37 :171–194, 2015.
- [33] P. Girardeau, V. Leclere, and A. Philpott. On the convergence of decomposition methods for multistage stochastic convex programs. Mathematics of Operations Research, 40(1) :130–145, 2015.
- [34] D. Gontier. Existence of minimizers for Kohn-Sham within the local spin density approximation. Nonlinearity, 28(1) :57–76, 2015.
- [35] C. H. Hajj, M. Jazar, and R. Monneau. A priori gradient bounds for fully nonlinear parabolic equations and applications to porous medium models. Journal des Mathématiques Pures et Appliquées, 103(6) :1346–1357, 2015.
- [36] A.-A. Homman, M. Fathi, and G. Stoltz. Error analysis of the transport properties of Metropolized schemes. ESAIM Proc., 48 :341–363, 2015.
- [37] R. Joubaud, G. A. Pavliotis, and G. Stoltz. Langevin dynamics with space-time periodic nonequilibrium forcing. J. Stat. Phys., 158(1) :1–36, 2015.
- [38] B. Jourdain, T. Lelièvre, and B. Miasojedow. Optimal scaling for the transient phase of the random walk metropolis algorithm : the mean-field limit. Ann. Appl. Probab., 25(4) :2263–2300, 2015.
- [39] B. Jourdain and J. Reygner. Capital distribution and portfolio performance in the mean-field Atlas model. Ann. Finance, 11(2) :151–198, 2015.
- [40] L. Lagardère, F. Lipparini, E. Polack, B. Stamm, E. Cancès, M. Schnieders, P. Ren, Y. Maday, and J.-P. Piquemal. Scalable evaluation of polarization energy and associated forces in polarizable molecular dynamics : II. Toward massively parallel computations using smooth particle Mesh Ewald. Journal of Chemical Theory and Computation, 11(6) :2589–2599, 2015.

- [41] G. Laporte, F. Meunier, and R. Wolfler-Calvo. Shared mobility systems. *4OR*, 13 :341–360, 2015.
- [42] C. Le Bris, P. Rouchon, and J. Roussel. Adaptive low-rank approximation and denoised Monte-Carlo approach for high-dimensional Lindblad equations. *Phys. Rev. A*, 92 :062126, 2015.
- [43] F. Legoll and W. Minvielle. A control variate approach based on a defect-type theory for variance reduction in stochastic homogenization. *SIAM Multiscale Model. Sim.*, 13(2) :519–550, 2015.
- [44] F. Legoll and W. Minvielle. Variance reduction using antithetic variables for a nonlinear convex stochastic homogenization problem. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S*, 8(1) :1–27, 2015.
- [45] F. Legoll, W. Minvielle, A. Obliger, and M. Simon. A parameter identification problem in stochastic homogenization. *ESAIM Proc.*, 48 :190–214, 2015.
- [46] B. Leimkuhler, C. Matthews, and G. Stoltz. The computation of averages from equilibrium and nonequilibrium Langevin molecular dynamics. *IMA J. Numer. Anal.*, 2015.
- [47] T. Lelièvre. Accelerated dynamics : Mathematical foundations and algorithmic improvements. *Eur. Phys. J. Special Topics*, 224 :2429–2444, 2015.
- [48] T. Lelièvre and F. Nier. Low temperature asymptotics for Quasi-Stationary Distributions in a bounded domain. *Analysis & PDE*, 8(3) :561–628, 2015.
- [49] E. Lindgren and R. Monneau. Pointwise regularity of the free boundary for the parabolic obstacle problem. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations*, 54(1) :299–347, 2015.
- [50] F. Lipparini, L. Lagardère, C. Raynaud, B. Stamm, E. Cancès, B. Mennucci, M. Schnieiders, P. Ren, Y. Maday, and J.-P. Piquemal. Polarizable molecular dynamics in a polarizable continuum solvent. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 11(2) :623–634, 2015.
- [51] R. Monneau. The method of differential contractions. *Comptes Rendus Mathématique*, 353(2) :143–147, 2015.
- [52] Y. Noumir, G. A. Le, N. Lardjane, R. Monneau, and A. Sarrazin. A fast-marching like algorithm for geometrical shock dynamics. *J. Comput. Phys.*, 284 :206–229, 2015.
- [53] S. Onn and P. Sarrabezolles. Huge unimodular  $n$ -fold programs. *SIAM Journal on Discrete Mathematics*, 29 :2277–2283, 2015.
- [54] M. A. Puscas and L. Monasse. A three-dimensional conservative coupling method between an inviscid compressible flow and a moving rigid solid. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37(6) :B884–B909, 2015.
- [55] M. A. Puscas, L. Monasse, A. Ern, C. Tenaud, and C. Mariotti. A conservative immersed boundary method for an inviscid compressible flow coupled with a fragmenting structure. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 103(13) :970–995, 2015.
- [56] M. A. Puscas, L. Monasse, A. Ern, C. Tenaud, C. Mariotti, and V. Daru. A time semi-implicit scheme for the energy-balanced coupling of a shocked fluid flow with a deformable structure. *J. Comput. Phys.*, 296 :241–262, 2015.

- [57] E. Regnier and M. De Lara. Robust viable analysis of a harvested ecosystem model. Environmental Modeling & Assessment, 20(6) :687–698, 2015.
- [58] J. Reygner. Chaoticity of the stationary distribution of rank-based interacting diffusions. Electron. Commun. Probab., 20 :no. 60, 1–20, 2015.
- [59] P. Sarrabezolles. The colorful simplicial depth conjecture. Journal of Combinatorial Theory, Series A, 130 :119–128, 2015.
- [60] C. Smadi. An eco-evolutionary approach of adaptation and recombination in a large population of varying size. Stochastic Process. Appl., 125(5) :2054–2095, 2015.
- [61] H. Spohn and G. Stoltz. Nonlinear fluctuating hydrodynamics in one dimension : The case of two conserved fields. J. Stat. Phys., 160(4) :861–884, 2015.
- [62] I. G. Tejada, L. Brochard, G. Stoltz, F. Legoll, T. Lelièvre, and E. Cancès. Combining a reactive potential with a harmonic approximation for molecular dynamics simulation of fracture. IOP Journal of Physics : Conference Series, 574 :012041, 2015.