

Stages de M2 au CERMICS: Méthodes numériques en physique statistique

2018-2019

La simulation moléculaire consiste à décrire la matière à l'échelle des atomes. Les atomes interagissent au travers d'un potentiel, et évoluent suivant une dynamique associée à ce potentiel.

La difficulté principale est que ces dynamiques sont *métastables*: le système reste coincé pendant très longtemps autour d'une configuration avant de sauter vers une autre configuration. Ce problème est à l'origine des difficultés pour obtenir à partir de simulations à l'échelle moléculaire des informations intéressantes au niveau macroscopique. Il faut en effet simuler le système sur des temps extrêmement long pour voir des changements conformationnels intéressants à l'échelle macroscopique, et pour converger des moyennes trajectorielles permettant d'obtenir des quantités thermodynamiques. Par exemple, pour observer le repliement d'une protéine, il faut simuler le système sur des temps de l'ordre de la milliseconde voire de la seconde, alors que le pas de temps à l'échelle microscopique est la femtoseconde ($10^{-15}s$).

Nous avons développé au CERMICS une activité en mathématiques appliquées autour des méthodes numériques utilisées pour contourner ces difficultés. En particulier, nous étudions les méthodes mathématiques pour le calcul d'énergie libre [3, 4], et des algorithmes permettant d'échantillonner des trajectoires métastables [1, 2]. Ces travaux sont pour beaucoup d'entre eux effectués en collaboration avec des praticiens (biologiste, physicien ou chimiste).

Venez nous voir pour définir ensemble des sujets qui vous intéressent:

- Frédéric Legoll, legoll@lami.enpc.fr
- Tony Lelièvre, lelievre@cermics.enpc.fr
- Gabriel Stoltz, stoltz@cermics.enpc.fr

Lieu: CERMICS, Ecole des Ponts ParisTech.

Financement: Ce stage sera indemnisé.

Thèse: Ce stage pourra être poursuivi par une thèse (financement par une bourse Ecole des Ponts ou Paris 6).

References

- [1] F. Cérou, A. Guyader, T. Lelièvre, and D. Pommier. A multiple replica approach to simulate reactive trajectories. *J. Chem. Phys.*, 134:054108, 2011.
- [2] C. Le Bris, T. Lelièvre, M. Luskin, and D. Perez. A mathematical formalization of the parallel replica dynamics. *Monte Carlo Methods Appl.*, 18(2):119–146, 2012.

- [3] T. Lelièvre, M. Rousset, and G. Stoltz. *Free energy computations: A mathematical perspective*. Imperial College Press, 2010.
- [4] T. Lelièvre and G. Stoltz. Partial differential equations and stochastic methods in molecular dynamics. *Acta Numerica*, 25:681–880, 2016.