

# Application BASTRI

## Fiches Equipes

### MICMAC (SR0087CR)

Méthodes et ingénierie du calcul multi-échelle de l'atome au continuum  
MICMAC  MATHERIALS (SR0625SR)

**Statut:** Terminée

**Responsable :** Claude Le Bris

**Mots-clés de "A - Thèmes de recherche en Sciences du numérique - 2023" :** *Aucun mot-clé.*

**Mots-clés de "B - Autres sciences et domaines d'application - 2023" :**  
*Aucun mot-clé.*

**Domaine :** Mathématiques appliquées, calcul et simulation  
**Thème :** Modélisation, simulation et analyse numérique

**Période :** 01/10/2002 -> 31/12/2013

**Dates d'évaluation :** 17/03/2009 , 27/03/2013

**Etablissement(s) de rattachement :** ECOLE DES PONTS PARISTECH (ENPC)  
**Laboratoire(s) partenaire(s) :** CERMICS

**CRI :** Centre Inria de Paris

**Localisation :** Ecole des Ponts ParisTech

**Code structure Inria :** 021029-0

**Numéro RNSR :** 2002183275

**N° de structure Inria:** SR0087CR

### Présentation

Le projet MICMAC a pour objectif de mettre au point des méthodes numériques performantes et rigoureusement fondées pour la simulation à l'échelle microscopique (chimie quantique moléculaire, dynamique moléculaire, atomistique) et son couplage avec les échelles supérieures (stratégies micro/macro pour les matériaux complexes et les fluides à microstructures). Les aspects concernant le contrôle de ces systèmes sont aussi abordés notamment le contrôle par laser des évolutions moléculaires.

### Axes de recherche

- simulation multi-échelle
- chimie moléculaire
- optimisation numérique
- contrôle optimal
- interaction laser-matière
- méthodes variationnelles
- algorithmes stochastiques
- EDP

### Relations industrielles et internationales

- Collaboration avec CEREMADE, University of Paris-Dauphine
- Projets INRIA : SCALAPPLIX, INRIA Futurs, FRACTALES, GAMMA, INRIA Rocquencourt, ALADIN, INRIA Rennes
- Commissariat à l'Energie Atomique, CEA
- University of Paris VII, University of Nantes, Pauli Institut, Vienna
- CAS, Ecole des Mines de Paris
- Laboratoire de Chimie Théorique, University of Paris 6
- Rice University, Texas
- Princeton University, New Jersey
- Sherbrooke University, Canada
- University of Louvain-La-Neuve, Belgium
- Dept. of Maths, University of Versailles
- LCT, University of Marne-la-Vallée
- Laboratoire Jacques-Louis Lions, University of Paris 6
- PPM, CNRS-University of Paris-Sud
- DCCI, University of Pisa, Italy
- Electricité de France, EDF

### Contact

- **Responsable :** Claude Le Bris
- **Tél :** 01.64.15.35.73
- **Secrétariat Tél :**  
01.39.63.53.74

### En savoir plus

- Site de l'équipe
- Site sur [inria.fr](http://inria.fr)
- Derniers Rapports d'Activité :

### Documents sur la structure

- Intranet
- Privés

### Décisions

- 3665 (01/10/2002) : création
- 4721 (01/03/2006) : prolongation
- 6583 (11/02/2009) : prolongation
- 7008 (16/12/2009) : prolongation
- 9865 (13/01/2014) : fermeture

### Localisation

- **Adresse postale :** École des Ponts ParisTech Cité Descartes  
6 et 8 avenue Blaise-Pascal  
Champs-sur-Marne 77455  
Marne-la-Vallée cedex 2  
France
- **Coordonnées GPS :**  
48.840691, 2.587752

