

# Application BASTRI

## Fiches Equipes

### IPSO (SR0125NR)

Méthodes numériques préservant les invariants  
ALADIN (SR0198FR) □ IPSO □ MINGUS (SR0813MR)

**Statut:** Terminée

**Responsable :** Philippe Chartier

**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 :** Schémas et simulations numériques

**Période :** 06/12/2004 -> 31/12/2017  
**Dates d'évaluation :** 17/03/2009 , 27/03/2013 , 15/03/2017

**Etablissement(s) de rattachement :** U. RENNES 1, CNRS, ENS RENNES  
**Laboratoire(s) partenaire(s) :** IRMAR (UMR6625)

**CRI :** Centre Inria de l'Université de Rennes  
**Localisation :** Centre Inria de l'Université de Rennes  
**Code structure Inria :** 031015-0

**Numéro RNSR :** 200418360U  
**N° de structure Inria:** SR0125NR

### Présentation

Au cours des vingt dernières années, la recherche dans le domaine de l'intégration géométrique a connu de nombreux succès qui ont contribué à élargir la diffusion des idées géométriques dans la communauté des analystes numériques. La nécessité de préserver des caractéristiques structurelles telles que la symplecticité ou la réversibilité est aujourd'hui très largement reconnue parmi les physiciens ou les chimistes (qui utilisent certains schémas symplectiques comme Verlet depuis de nombreuses années). Cependant, la complexité, la taille et la diversité croissantes des modèles rendent le développement de nouvelles méthodes indispensable.

### Axes de recherche

Le projet IPSO a pour objectif principal de développer de nouvelles méthodes d'intégration numérique préservant la structure géométrique du système résolu (et d'en expliquer le comportement favorable le cas échéant). On s'intéresse en particulier aux problèmes relevant d'une des classes suivantes:

- équations différentielles posées sur une variété,
- équations algébro-différentielles d'indice 2 ou 3, pour lesquelles les contraintes font partie des équations,
- systèmes hamiltoniens (avec ou sans contraintes),
- systèmes différentiels avec fortes oscillations (avec une attention particulière portée à l'équation de Schrödinger).

### Relations industrielles et internationales

L'équipe-projet IPSO privilégie deux domaines d'application: la simulation moléculaire de processus chimiques, d'une part, et la simulation des interactions laser-matière, d'autre part. Ces deux thèmes nous amènent à collaborer plus ou moins étroitement avec les équipes et individus suivants:

- l'équipe-projet MICMAC (INRIA Paris - Rocquencourt/ENPC), C. Chipot (CNRS Nancy), O. Coulaud (équipe ScAlAplix, INRIA-Bordeaux), E. Darve (Stanford University, USA), B. Leimkuhler (Leicester University, Angleterre), G. Zerach (CEA), sur le premier thème;
- D. Bayart, F. Leplingard, C. Martinelli (Département Transmissions d'Alcatel, Marcoussis), Th. Colin et G. Métivier (MAB, Université de Bordeaux I et II) sur le second thème.

### Contact

- **Responsable :** Philippe Chartier
- **Tél :** 02.99.84.74.00
- **Secrétariat Tél :** 02.99.84.74.84

### En savoir plus

- Site sur [inria.fr](http://inria.fr)
- Derniers Rapports d'Activité : 2015 , 2016 , 2017

### Documents sur la structure

- [Intranet](#)
- [Privés](#)

### Décisions

- **4410** (18/04/2005) : création
- **7008** (16/12/2009) : prolongation
- **9851** (13/01/2014) : prolongation

### Localisation

- **Adresse postale :** Centre Inria de l'Université de Rennes 263, avenue du Général Leclerc Campus universitaire de Beaulieu 35042 Rennes Cedex France
- **Coordonnées GPS :** 48.116, - 1.64

