

# Application BASTRI

## Fiches Equipes

### MATERIALS (SR0696JR)

MATHeMatics for MATERIALS  
MATERIALS (SR0625SR) □ MATERIALS

**Statut:** Décision signée

**Responsable :** Claude Le Bris

**Mots-clés de "A - Thèmes de recherche en Sciences du numérique - 2023" :** A6.1.1. Modélisation continue (EDP, EDO) , A6.1.2. Modélisation stochastique , A6.1.4. Modélisation multiéchelle , A6.1.5. Modélisation multiphysique , A6.2.1. Analyse numérique des EDP et des EDO , A6.2.2. Probabilités numériques , A6.2.3. Méthodes probabilistes , A6.2.4. Méthodes statistiques , A6.2.7. HPC , A6.3.1. Problèmes inverses , A6.3.4. Réduction de modèles , A6.4.1. Contrôle déterministe

**Mots-clés de "B - Autres sciences et domaines d'application - 2023" :** B1.1.2. Biologie moléculaire et cellulaire , B4.3.4. Energie solaire , B5.3. Nanotechnologies , B5.5. Matériaux , B9.5.2. Mathématiques , B9.5.3. Physique , B9.5.4. Chimie

**Domaine :** Mathématiques appliquées, calcul et simulation

**Thème :** Schémas et simulations numériques

**Période :** 01/04/2015 -> 31/12/2026

**Dates d'évaluation :** 15/03/2017 , 12/01/2022

**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 :** 021130-1

**Numéro RNSR :** 201421206U

**N° de structure Inria:** SR0696JR

### Présentation

L'équipe MATERIALS a pour objectif de mettre au point des méthodes numériques performantes et rigoureusement fondées pour la simulation des matériaux à toutes les échelles (depuis l'échelle microscopique --chimie quantique moléculaire, dynamique moléculaire, physique statistique, atomistique-- jusqu'à l'échelle macroscopique -mécanique des milieux continus-). Les aspects théoriques, comme ceux liés à la construction et à l'analyse numérique des méthodes de simulation, sont au centre de l'activité. Un effort particulier de recherche porte sur la modélisation et la simulation des systèmes réalistes non idéaux: matériaux avec défauts, effets de température, dynamiques hors équilibre, etc.

### Axes de recherche

simulation multi-échelle calcul de structures électroniques physique et chimie quantique physique statistique numérique mécanique numérique méthodes d'homogénéisation déterministes et stochastiques méthodes d'homogénéisation numérique méthodes variationnelles algorithmes stochastiques EDP

### Relations industrielles et internationales

- INRIA : IPSO, NANO-D,ASPI,TOSCA, ALEA,MATH-RISK, QUANTIC, POMDAPI - Commissariat à l'Energie Atomique, CEA - CEREMADE, Université Paris-Dauphine - Université de Besancon - Université de Cergy - CAS, Ecole des Mines de Paris - Laboratoire de Chimie Théorique, University Paris 6 - Laboratoire Jacques-Louis Lions, University Paris 6 - DCCI, University of Pisa, Italy - Electricité de France - Laboratoire International Associé, CNRS Nancy et Beckman Research Institute Urbana-Champaign - Los Alamos National Laboratory

### Contact

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

### En savoir plus

- Site de l'équipe
- Site sur [inria.fr](http://inria.fr)
- Site du responsable
- Derniers Rapports d'Activité : 2015 , 2016 , 2017 , 2018 , 2019 , 2020 , 2021 , 2022 , 2023

### Documents sur la structure

- Intranet
- Privés

### Décisions

- 10932 (11/05/2015) : création
- 12548 (11/12/2017) : prolongation
- 15187 (14/12/2021) : prolongation
- 15855 (14/12/2022) : prolongation
- 16224 (02/06/2023) : prolongation

### 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

