

Hasard contrôlé : les techniques Monte Carlo au service de la cinétique chimique

Les
Zooms
de la SFGP

Webinaire de lancement du *Groupe Thématique 'Cinétique Avancée' - Pôle Fondamentaux*

À l'échelle moléculaire, la chimie ne suit pas toujours une trajectoire lisse : elle fluctue, hésite, bifurque. Les méthodes de Monte Carlo offrent un regard privilégié sur cette dimension stochastique de la cinétique chimique. Dans ce webinaire, nous verrons comment des approches, telles que la reconstitution stochastique, la maximisation d'entropie, l'algorithme de Gillespie, ou la méthode de Monte Carlo à formulation intégrale, permettent de simuler finement des réseaux réactionnels complexes et de dépasser les limites des modèles déterministes classiques. L'objectif : illustrer, exemples à l'appui, tout l'intérêt de ces outils dans une démarche moderne de modélisation et de conception en chimie.

22
juin
2026

14:30
16:30

- 14:30 **Introduction**
Pascal Fongarland, animateur du GT Cinétique Avancée
Damien Hubedine, co- animateur du GT Cinétique Avancée
Eric Schaer, vice-président académique de la SFGP
- 14:40 **Le groupe thématique Cinétique Avancée :
les objectifs du groupe et les membres du bureau**
Marion Carrier, RAPSODEE - IMT Mines Albi • Pascal Fongarland, IRCELYon
Geert Haarlemmer, CEA • Damien Hudebine, IFPEN • Carine Julcour, LGC - INP Toulouse
Sébastien Leveueur, IRCELYon • Arnaud Travert, Univ. Caen Normandie
- 15:10 **Modélisation compositionnelle et réactionnelle : application d'algorithmes
stochastiques à l'hydroconversion de matières premières complexes**
Jan Verstraete, IFPEN
- 15:50 **Monte Carlo intégral : chimie et couplage**
Marion Carrier, RAPSODEE, IMT Mines Albi • Abderrahim Sahim, IFPEN
- 16:30 **Conclusion**
Pascal Fongarland, IRCELYon

INSCRIPTION

Gratuite et obligatoire

Contact

pascal.fongarland@univ-lyon1.fr
damien.hubedine@ifpen.fr
martine.poux@toulouse-inp.fr



Société Française de
Génie des Procédés
www.sfgp.asso.fr