

# Profil pour un postdoctorat au CEA

**Résumé :** Les simulations gros grains sont d'un grand intérêt pour les systèmes complexes, comme les polymères, parce qu'elles permettent de reproduire assez bien les propriétés macroscopiques du matériau tout en intégrant les degrés de liberté non pertinents, réduisant ainsi beaucoup les temps de calcul. Une question qui se pose dans ce contexte est la suivante : « Quel est le bon chemin d'intégration à adopter pour reproduire correctement les propriétés macroscopiques ? ». La réponse à cette question dépend du matériau, des propriétés macroscopiques à reproduire ainsi que du degré de précision avec lequel ces propriétés doivent être reproduites. Cette question est toujours non résolue dans le cas des polymères dont à la fois les propriétés structurales et dynamiques doivent être reproduites quantitativement, ce qui est le cas pour leurs applications dans l'industrie.

Les simulations de type « Dissipative Particle Dynamics » (DPD) sont des simulations gros grains où une particule représente quelques ou quelques dizaines d'atomes le long de la chaîne de polymère. Pour prendre en compte effectivement les degrés de liberté manquant, les simulations DPD sont fondées sur une équation de Langevin généralisée et utilisent des forces conservatives, dissipatives et aléatoires. Sous une approximation assez grossière, les forces conservatives contrôlent les propriétés structurales et les forces dissipatives les propriétés dynamiques.

Le premier but du postdoctorant est de déduire à la fois les forces conservatives et dissipatives à utiliser en DPD à partir de simulation de Dynamique Moléculaire (DM) à l'échelle atomique afin de reproduire correctement les propriétés dynamiques et structurales du polymère. Cela pourra être fait dans l'esprit de l'approche proposée par Higon *et al* [Faraday Discussions **144**, 301 (2010)]. L'accent sera mis sur la possibilité que les billes gros grains soient anisotropes. Le deuxième but du postdoctorant sera d'intégrer l'utilisation des forces conservatives et dissipatives déduites de DM dans le code ExaStamp, qui est très parallélisé et adapté au calculateur du CEA. Ce calculateur a actuellement un vitesse ce calcul allant jusqu'aux teraflops. Un algorithme de DPD classique est déjà présent dans le code ExaStamp. Un but final du postdoctorant pourra être de pousser l'approche multi-échelles un cran plus loin en considérant des simulations avec « slip-links ». Dans ce type de simulations, on ne considère plus des systèmes particuliers mais on représente la chaîne de polymère par un tube avec des enchevêtrements explicites. Le lien entre les paramètres de l'approche « slip-link » et ceux des simulations de DM et DPD pourra être raffiné.

Le postdoctorat aura lieu au CEA/DAM/DIF. Il est d'une durée de un an, renouvelable un an. Ce postdoctorat est ouvert dans le cadre du Plan d'Investissement d'Avenir (PIA) « Simulation de Matériaux pour l'Industrie par Calcul Exaflop » (SMICE).

**Candidat :** La/Le candidat(e) a idéalement un thèse en physique théorique, informatique ou chimie théorique. Elle/Il est sérieux(x)/(se) et motivé(e) par la compréhension théorique de phénomènes scientifiques. Elle/Il est intéressé(e) par les problématiques de parallélisation en informatique.

## Prérequis :

- Avoir modifié/créé un code de dynamique moléculaire
- Connaître les langages C/C++
- Avoir des connaissances en parallélisation (vectorisation, OpenMP et/ou MPI)

## Contacts :

Laurent Soulard ([laurent.soulard@cea.fr](mailto:laurent.soulard@cea.fr)) et Claire Lemarchand ([claire.lemarchand@cea.fr](mailto:claire.lemarchand@cea.fr))

**Summary :** Coarse-grained simulations are of huge interest to model complex systems, like polymers, because they allow to reproduce decently the macroscopic properties of the material while they integrate out the irrelevant degrees of freedom and thus reduce a lot the computational time. A question which needs to be answered in this context is: « What is the correct coarse-graining route to adopt to reproduce the desired macroscopic properties correctly? » The answer to this question can depend on the material, on the desired macroscopic properties, and on the degree of accuracy with which the properties should be reproduced. This question is still unresolved for polymers if both the structural and the dynamical properties, like the rheological properties, needs to be reproduced quantitatively, which is the case for applications in the industry.

Dissipative Particle Dynamics (DPD) simulations are coarse-grained simulations where a particle represents a few to a few dozens atoms along the polymer chain. To take into account effectively the missing degrees of freedom, DPD simulations are based on a generalized Langevin equation and use conservative, dissipative, and random forces. Under a crude approximation, the conservative forces control mainly the structural properties while the dissipative forces control mainly the dynamical properties.

The first aim of the postdoctorant is to deduce both the conservative and dissipative forces to be used in DPD simulations from Molecular Dynamics (MD) simulations at the atomic scale to reproduce the structural and dynamical properties of the polymer. This can be done in the spirit of the approach proposed by Hijo *et al* [Faraday Discussions **144**, 301 (2010)]. A specific focus will be put on the possible anisotropy of the DPD coarse grains. The second aim of the postdoctorant is to implement the use of the conservative and dissipative forces deduced from MD in the ExaStamp code, which is highly parallelized and optimized to work on the CEA computer cluster. The cluster can currently reach teraflops in computing power. A classical DPD algorithm is already implemented in the ExaStamp code. A final aim of the postdoctoral position could be to push the bottom-up approach one step further and consider a slip-link simulations. These are no longer particle simulations. Polymer chains are considered as tubes and entanglements are explicitly added. The link between the parameters used in slip-link simulations and those used in MD and DPD simulations should be refined.

The postdoctoral position will take place at CEA/DAM/DIF. It will last one year, renewable one year. This position is opened in the framework of the Plan d'Investissement d'Avenir (PIA) « Simulation de Matériaux pour l'Industrie par Calcul Exaflop » (SMICE).

**Applicant :** The applicant has ideally a PhD in theoretical physics, computer science, or theoretical chemistry. She/He is serious and enthusiastic about the theoretical understanding of scientific phenomena. She/He is interested in parallelization in computer science.

**Qualifications :**

- Have modified/created a molecular dynamics code
- Know the languages C/C++
- Have knowledge in parallelization (vectorization, OpenMP or MPI)

**Contacts :**

Laurent Soulard ([laurent.soulard@cea.fr](mailto:laurent.soulard@cea.fr)) and Claire Lemarchand ([claire.lemarchand@cea.fr](mailto:claire.lemarchand@cea.fr))