

# Stage post-doctoral CEA/MICHELIN

---

## Implantation et évaluation de la méthode Slip-Links dans le code ExaStamp

Les polymères jouent un rôle central dans de nombreux secteurs industriels, et le calcul de leurs propriétés est aujourd'hui crucial pour compléter et interpréter les mesures expérimentales, aborder des grandeurs inaccessibles à l'expérience, et prévoir, avant synthèse, les caractéristiques d'un matériau polymérique. Selon l'information recherchée, l'ingénieur optera soit pour le calcul atomistique, via les outils de la dynamique moléculaire classique, pour l'échelle la plus petite, soit sur des méthodes mésoscopiques dites « gros grains », comme la DPD, pour les échelles intermédiaires, soit sur des techniques « à très gros grains », pour les échelles les plus grandes. Le point commun de ces méthodes est de faire appel à la résolution d'une équation du mouvement de type newtonienne entre les particules correspondant à l'échelle de travail choisie. En conséquence, un code de calcul est à même à lui seul de traiter ces différentes échelles.

Dans le cadre du Plan d'Investissement d'Avenir SMICE (Simulation Matériaux Industrie Calcul Exaflop), le CEA et la société MICHELIN travaillent au développement du code particulière ExaStamp, spécialement conçu pour les futurs calculateurs de classe exaflopique qui devraient entrer en service d'ici quelques années. L'implantation dans ExaStamp des structures informatiques et des champs de force permettant des simulations aux échelles atomistiques et « gros grains » est en bonne voie. L'objet de ce stage post-doctoral est de programmer dans ExaStamp la méthode « à très gros grains » retenue (Slip-Links), d'en tester les performances sur des machines préfigurant les machines exaflopiques puis de réaliser quelques tests pour évaluer les résultats obtenus vis-à-vis de données expérimentales ou issues de calculs réalisés aux échelles inférieures.

Compte tenu de la complexité de la programmation du code ExaStamp, le ou la candidat(e) devra posséder des bases solides en C++ et avoir une bonne connaissance des concepts de vectorisation et du multithreading. Une expérience en dynamique moléculaire classique, en DPD ou sur la méthode Slip-Links sera aussi un atout.

Durée : 12 mois.

Lieu de travail : CESIMAT, Campus Tera@tec, Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon, France.

Contact : [laurent.soulard@cea.fr](mailto:laurent.soulard@cea.fr) ou [laurent.colombet@cea.fr](mailto:laurent.colombet@cea.fr) (les candidatures sont à envoyer obligatoirement à ces deux adresses).