

Projet :
Questionnement de la méthode dite de l'ensemble iso-configurationnel

Key words: Programmation Scientifique - Physique Numérique - Dynamique Moléculaire - Verres structuraux Liquides Surfondus

Contexte:

Dans le domaine de la physique fondamentale, le problème des verres structuraux, ou liquides surfondus, est un des problèmes non résolus depuis plus de 40 ans. Le prix Nobel 2021, Giorgio Parisi, y a dédié une bonne partie de sa carrière.

La question centrale de la physique des verres est de savoir si il y a oui ou non une transition de phase thermodynamique en bonne et due forme dans ces matériaux, entre la phase solide (verre) et la phase liquide. Pour répondre à cette question, une bonne part des études utilisent la Dynamique Moléculaire, c.a.d. la simulation par ordinateur de l'évolution au cours du temps d'un ensemble d'atomes ou de molécules (par intégration directe de la 2ème loi de Newton).

Un des outils plus spécifiques pour travailler sur la question du verre est la méthode dite de l'ensemble iso-configurationnel, qui permet entre autres d'estimer le degré du rôle de la structure dans le caractère solide/fluide du matériau.

Objectifs et détails du projet:

Dans ce projet, on souhaite étudier plus en détail si cette méthode est bien-fondée ou non. On résume ici la méthode et son "point faible". L'idée de la méthode est de moyenner l'effet des vitesses initiales pour estimer leur impact sur la trajectoire future. Pour faire cela, au temps t_0 à étudier, on duplique N fois le système complet de particules (position de chaque atome identique dans chaque clone) et on ré-initialise les vitesses en les tirant au hasard (vitesses différentes pour le même atome, à travers les différents clones).

L'inconvénient est que cette ré-initialisation introduit implicitement un choc sur le système. Dans ce projet on s'intéresse (1) évaluer l'importance de ce choc (2) à développer une autre méthode qui permette de différencier les vitesses dans les différents clones, mais sans que cela induise un tel choc.

L'encadrant a déjà une idée assez précise sur la façon dont on peut évaluer le choc, et comment l'éviter, mais ce serait trop long à détailler ici. Selon l'avancement du projet, et selon la teneur des résultats, il se peut que le projet conduise à la rédaction d'un petit article scientifique.

Learned Skills: À travers ce projet, l'étudiant.e sera confronté, et donc amené à maîtriser: quelques notions de physique fondamentale, le calcul par Dynamique Moléculaire (en particulier avec le package HooMD-blue), et donc des notions de HPC (high Performance Computing), en particulier calculs sur GPU, l'utilisation d'un job-scheduler (slurm), et donc aussi un petit peu de script (bash ou sh). Par ailleurs, des compétences scientifiques transversales seront développées: mener une expérience scientifique (numérique), analyser des résultats quantitatifs, rendre compte des résultats de façon synthétique, rédiger une synthèse, etc.

Expected abilities: Une bonne maîtrise du **python**(3) est **nécessaire**. Quelques **connaissances de base en physique** (atomes, 2ème loi de Newton, notion de trajectoire) sont requises, ou **à défaut, une appétence** pour la science physique. Un gros plus serait que l'étudiant.e connaisse déjà la **notion de schéma d'intégration** (Euler). La connaissance du fonctionnement d'un job scheduler (cluster de calcul) serait un plus, mais n'est pas nécessaire.

Lab: LISN, Université Paris-Saclay

Team: A & O (Algorithmes et Optimisation), INRIA team: TAU

Advisor: François Landes (francois.landés@inria.fr), Maître de Conférences.

Head of Lab: Sophie Rosset

Location: France, Gif-sur-yvette (Plateau de Saclay), Batiment 660 (Digiteo building)

Website: <http://lptms.u-psud.fr/francois-landes/internships-phd/>