

Stage post-doctoral au CEA

Simulation de l'endommagement des verres sous choc par dynamique moléculaire classique.

Ce stage post-doctoral de 18 mois s'inscrit dans le cadre du projet ANR GLASS relatif à l'endommagement des verres sous choc. Ce projet combine des études expérimentales et des travaux théoriques et numériques pour améliorer notre connaissance des processus consécutifs à un impact dans un verre ; il aura de multiples retombées tant sur le plan purement scientifique qu'industriel.

Parmi les quatre laboratoires impliqués, le rôle du CEA est de simuler le comportement d'un verre sous choc à l'échelle atomique : l'objectif est de mettre à jour les mécanismes intimes de l'endommagement et de calculer un certain nombre de paramètres physiques. Ces données seront ensuite utilisées par des méthodes travaillant à des échelles spatiales supérieures (Méthodes des Elements Discrets ou DEM) et mise en œuvre par le laboratoire I2M (ENSAM, Bordeaux).

La méthode de calcul utilisée au cours de ce stage sera la dynamique moléculaire classique (DMC) étendue, si besoin est, à des techniques mésoscopiques de type Dissipative Particles Dynamics. Le travail consistera à choisir dans la littérature une fonction d'énergie potentielle adaptée au matériau et au domaine thermodynamique abordé, puis à l'implanter dans le code massivement parallèle Stamp développé au CEA. Dans une deuxième étape, des simulations de choc seront menées sur les calculateurs pétaflopiques du CEA puis analysées en détail pour en extraire les informations pertinentes pour la DEM (une connaissance des principes de base de la DEM devra être acquise au cours de ce stage). Une évaluation de la qualité des résultats sera enfin menée par comparaison avec les données expérimentales obtenues par la composante expérimentale de ce projet.

Le candidat retenu travaillera au sein d'une équipe menant à la fois des calculs et des expériences de choc laser. Il bénéficiera de l'aide des informaticiens du CEA pour mener à bien ce projet. Il devra posséder une parfaite maîtrise des techniques de DMC ainsi que de solides connaissances en programmation (C/C++ requis, MPI fortement souhaité). Le CEA assurera la formation en physique des chocs.

Lieu de travail : CEA-DAM Ile-de-France, Arpajon (91).

Date : à partir de mi-2015.

Rémunération : de l'ordre de 2000 euros net / mois.

Contact : CV + lettre de motivation à laurent.soulard@cea.fr