



Fiche de poste

Métier ou emploi type* :

* REME, REFERENS, BIBLIOPHILE

Fonctions : Chercheur ou chercheuse postdoctoral(e) – 12 mois (avec possibilité extension 6 mois)

Catégorie :

Corps :

BAP (si ITRF) :

Les activités qui composent la fiche de poste sont appelées à évoluer en fonction des connaissances du métier et des nécessités de service.

Présentation de Sorbonne Université

Pour transmettre les connaissances, comprendre le monde et relever les défis du 21^e siècle, une nouvelle université est née le 1^{er} janvier 2018, issue de la fusion entre les universités Paris-Sorbonne et Pierre et Marie Curie. Sorbonne Université est une université pluridisciplinaire, de recherche intensive et de rang mondial. Ancrée au cœur de Paris, présente en région, elle est engagée pour la réussite de ses étudiants et s'attache à répondre aux enjeux scientifiques du 21^e siècle. www.sorbonne-universite.fr

Présentation de la structure (laboratoire, département de formation, service central...)

Description (missions, équipe,...) : L'institut des Sciences du Calcul et des Données (ISCD, <https://iscd.sorbonne-universite.fr/>) se consacre à l'exploration et au développement d'approches orientées-données et computationnelles pour la recherche à Sorbonne Université, en sciences, en humanités, ou en médecine. Nos équipes de recherche développent et utilisent des algorithmes et des méthodes de visualisation pour résoudre des problèmes en biologie, chimie, mathématiques, informatique, médecine et humanités numériques. L'ISCD a été créé il y a plus de dix ans, pour soutenir les domaines où les méthodes et les moyens d'aborder les défis qui dépassent les disciplines et transforment profondément la recherche. Le ou la candidat(e) fera partie de l'équipe interdisciplinaire MAESTRO, qui inclut chimistes, physiciens, et mathématiciens. Son objectif à long terme est d'étudier les propriétés des matériaux par échantillonnage stochastique et par calcul haute performance.

Localisation : bâtiment Esclangon, Campus Pierre et Marie Curie, 5 place Jussieu, 75005 Paris

Missions et activités principales

Mission (raison d'être du poste) :

Scientific context. Molecular dynamics has been very successful at predicting static thermodynamic properties of materials (equations of states, heat capacities, etc), which depend only on the Boltzmann-Gibbs measure to sample. On the other hand, the computation of transport coefficients such as mobility, shear viscosity, thermal conductivity, etc., still remains computationally challenging. The most standard methods to this end are based on the nonequilibrium molecular dynamics (NEMD) framework, and on Green-Kubo formulas.

Scientific environment. The post-doctoral project is part of the MAESTRO interdisciplinary team, within the Institute for Computing and Data Sciences (ISCD) in Sorbonne Université. By joining forces between mathematicians, physicists and physical chemists, the long-term goal of the team is to investigate materials for energy through stochastic sampling and high-performance computing.

Scientific objectives. The aim of the postdoctoral work is to further develop and transfer to realistic systems new mathematical algorithms for a more efficient computation of transport coefficients. A typical test case to consider are electrolytes, whose properties will be studied by considering aqueous solutions of simple salts (such as NaCl) at various concentrations, and room temperature ionic liquids. These systems evolve in time according to overdamped or underdamped Langevin dynamics, for which relevant transport coefficients are the self-diffusion constant and the electrical conductivity, as well as the shear viscosity and the thermal conductivity.

For NEMD, several options can be considered. A first one is the use of coupling methods to correlate systems at equilibrium and systems slightly off equilibrium, in an attempt to substantially increase the signal-to-noise ratio of the response to the external forcing applied on the system. A second one is the use of so-called synthetic forcings, which are numerical forcings (not necessarily realizable in actual physical experiments) leading to the same linear response as for physical forcings, but whose response curves remain linear for a wider range of forcings, hence allowing for the use of strong forcings for which the convergence of the response is faster.

For Green-Kubo formulas, the aim will be to compare the efficiency of usual estimators of the transport coefficient based on the time integral of correlation functions, and newly developed estimators based on a fluctuation identity corresponding to a sensitivity analysis, and tested only on toy systems at this stage.

Activités principales (10 maximum) :

- Implementation of numerical methods in molecular dynamics packages such as LAMMPS
- Running molecular dynamics simulations and postprocessing them
- Writing scientific articles
- Participating to scientific conferences and workshops

Encadrement : NON

Nb agents encadrés par catégorie : ... A - ... B - ... C

Connaissances et Compétences*

Connaissances transversales requises : Applicants must have a recent Ph.D. in Applied mathematics, Chemistry, Physics or Materials science

Savoir-faire : Expertise in molecular dynamics, with track record of implementation/development of numerical methods in large scale simulation codes such as LAMMPS. This position involves a significant amount of numerical code development. Therefore the candidate will have prior scientific programming experience.

Savoir-faire transversaux : Applicants should have excellent writing and communication skills necessary to author technical and scientific reports, publications, and deliver scientific presentations, seminars, meetings and/or teaching lectures.

Savoir être (3 maximum) : Experience of effective collaborations with a team of scientists of diverse backgrounds.

Conditions particulières d'exercice : /

* Conformément à l'annexe de l'arrêté du 18 mars 2013 (NOR : MENH130559A)