

3PN1040 - Modélisation et simulation numérique

Responsables : **Hichem DAMMAK**

Langues d'enseignement : **FRANCAIS**

Campus où le cours est proposé : **CAMPUS DE PARIS - SACLAY**

Nombre d'heures d'études élèves (HEE) : **45**

Nombre d'heures présentielles d'enseignement (HPE) : **27**

Année académique : **2024-2025**

Niveau avancé : **non**

Présentation, objectifs généraux du cours :

La simulation sur ordinateur est actuellement un outil indispensable de la recherche en physique. Elle est considérée comme une troisième voie scientifique, complémentaire des approches théoriques et expérimentales. L'objectif du cours est d'initier les élèves aux méthodes les plus courantes en simulation : dynamique moléculaire et Monte Carlo.

Période(s) du cours (n° de séquence ou hors séquence) :

SD9

Prérequis :

Physique quantique
Physique Statistique
Mécanique du point
Transformée de Fourier

Plan détaillé du cours (contenu) :

- Potentiels d'interactions atomiques et introduction à la méthode de DFT
- Introduction de l'intégrale de configuration et équipartition généralisée.
- Méthode de Monte Carlo Metropolis (MC)
- Méthode de la Dynamique Moléculaire et comparaison avec la méthode MC
- Méthodes de calcul des propriétés physiques : chaleur spécifique, fonction de distribution radiale, coefficient de diffusion, paramètres d'ordre, énergie de surface, polarisabilité en fonction de la fréquence ...

Les élèves mettront en pratique les connaissances acquises en réalisant des mini-projets de simulation numérique en partant de codes de calcul fournis ou en écrivant un programme complet. Exemples : 1) Étude d'une transition ordre-désordre. 2) Détermination du coefficient d'autodiffusion. 3) Reconstruction de surface. 4) Etude de l'influence de la taille de nanoparticules sur les propriétés optiques. 5) Détermination de la constante diélectrique et de la densité d'états de phonons dans un ferroélectrique. 6) Transition ferromagnétique et anti-ferromagnétique par MC ...

Déroulement, organisation du cours :

Quatre séances de cours (12h) :

- C1) Méthode de la dynamique moléculaire et potentiels interatomiques phénoménologiques
- C2) Méthode de Monte Carlo Metropolis
- C3) Thermostats et prise en compte des effets quantique dans la méthode de DM
- C4) Introduction à la méthode de DFT

Quatre séances de TD (12h) :

Chaque binôme d'élève choisit un projet, et le traite pendant les séances de TD en réalisant les simulations nécessaires pour répondre à l'objectif visé. En fonction de leur formation, les étudiants seront invités à (i) rédiger un programme ou un sous-programme, (ii) modifier un programme existant, ou (iii) utiliser un programme existant pour générer des simulations et expliquer leurs résultats

Organisation de l'évaluation :

- Trois ou quatre tests de 10 minutes chacun au début de chaque cours magistral
- Rapport de 10 pages qui résume le travail effectué pendant les séances de TD
- Présentation orale des résultats du projet.

Le note finale : [(moyenne des tests) + note du rapport et investissement durant les TD + note de l'oral] /3

Moyens :

- Mésocentre Moulon (CentraleSupélec & ENS-Saclay)
- Equipe enseignante :
 - Hichem Dammak (Cours en français et TD)
 - Igor Kornev (Cours et TD en Anglais)
 - Yann Chalopin (TD)
 - Gregory Geneste (TD)
 - Mehdi Ayouz (TD)
 - Fabien Briec (TD)
 - Pauline Richard (TD)
 - Nathalie Saouli (TD)

Acquis d'apprentissage visés dans le cours :

Etre capable de choisir et d'appliquer la méthode de résolution numérique ou de simulation qui s'adapte à un problème rencontré dans plusieurs domaines de la physique de la matière condensée.

Description des compétences acquises à l'issue du cours :

- Selecting the appropriate interaction potential to describe the properties of a system according to the nature of the atomic bonds
- Applying Verlet's algorithm to solve equilibrium atom dynamics equations in the microcanonical ensemble
- Using the Metropolis Monte Carlo algorithm to determine the equilibrium configurations in the canonical ensemble

Bibliographie :

Polycopié fourni en langue Française
Notes de cours (diapositives) en langue française et anglaise
Chapitres de livres en anglais