

Développement de schémas numériques d'intégration de méthodes multi-échelles

Ma présentation concerne l'analyse et le développement de schémas d'intégration numérique de la Dynamique des Particules Dissipatives (DPD), et plus précisément de sa variante conservant l'énergie, dénotée DPDE. La DPDE est un modèle multi-échelle, construit à partir de la Dynamique Moléculaire et permettant de simuler des systèmes physiques complexes faisant intervenir des phénomènes dont les échelles de temps et de longueurs sont très différentes. Après avoir présenté ce modèle, qui s'écrit sous forme d'une Équation Différentielle Stochastique (EDS), j'établirai les bases de la Dynamique Moléculaire ainsi que celles de l'intégration numérique des EDS. Je présenterai ensuite plusieurs schémas d'intégrations existant de la DPDE ainsi que deux nouveaux et prouverai leurs convergence. J'effectuerai finalement une analyse comparative de leurs résultats sur des simulations de systèmes à l'équilibre et hors-équilibre, montrant que les deux nouveaux schémas apportent une nette amélioration dans la qualité de l'intégration numérique de la DPDE par rapport aux schémas existants.

Development of new numerical integration schemes for multiscale coarse-graining methods

My presentation will be about the analysis and development of new numerical schemes for the integration of the Dissipative Particle Dynamics (DPD), more precisely its energy-conserving variant termed DPDE. The DPDE model is a multiscale model, built from Molecular Dynamics, allowing for the simulation of complex physical systems involving phenomena with very different length and time scales. After having presented this model, which writes as a Stochastic Differential Equation (SDE), I will set up the bases of Molecular Dynamics and of the numerical integration of SDEs. I will then present several existing DPD integration schemes as well as two new ones and prove their consistency. I will finally perform a comparative study of their results on equilibrium and non-equilibrium systems, showing that the two new schemes bring a clear improvement in the quality of the DPDE numerical integration compared to existing schemes.