

# Challenge HPC en Science des Matériaux

## **Session science des matériaux**

**Président de séance: F. WILLAIME**

La très forte demande en calcul numérique intensif en physique et chimie des matériaux vient en majorité des calculs de structure électronique *ab initio*, et ceci aussi bien dans le domaine de la recherche industrielle qu'académique. Le succès de ces méthodes s'explique par le fait qu'elles permettent de prédire dans une large gamme de matériaux et avec une précision de quelques pourcents la plupart des propriétés simulables par un volume de quelques centaines d'atomes. Des développements récents visant à augmenter la taille des systèmes simulés et à améliorer l'efficacité de la parallélisation seront présentés. Les potentialités d'application seront illustrées par des exemples dans le domaine des nanosciences, de la catalyse et des défauts d'irradiation dans les matériaux du nucléaire. Par ailleurs, les phénomènes complexes impliquant plusieurs milliards d'atomes, tels que les ondes de choc, peuvent être simulés en utilisant des modèles d'interaction interatomique simplifiés mais réalistes. Enfin, à l'échelle des milieux continus, il sera montré comment les propriétés mécaniques liées à la nature polycristalline des matériaux sont étudiées par éléments finis.

François WILLAIME  
Service de Recherches de Métallurgie Physique  
Département des Matériaux pour le Nucléaire  
Direction de l'Energie Nucléaire  
CEA/Saclay  
91191 Gif-sur-Yvette

## **Méthodes ab initio pour la nanoscience : l'apport des ondelettes, par Thierry DEUTSCH.**

Pour simuler les structures et les propriétés des matériaux, molécules et nano-objets, les méthodes ab initio sont largement utilisées car elles sont sans paramètres ajustables. Elles sont basées sur des approximations des équations de la mécanique quantique telles que la théorie de la fonctionnelle de la densité.

Au cours de cet exposé, nous montrerons les potentialités de nouvelles fonctions, les ondelettes, qui sont déjà utilisées pour le traitement et la compression des images. Dans le cas de la simulation de systèmes atomiques variés, les ondelettes permettent un maillage adaptatif aboutissant à une précision de simulation pour un coût optimal en temps de calcul.

De plus, cette approche est massivement parallèle avec des efficacités proches de 85% sur plusieurs centaines de coeurs de calcul.

Nous finirons par un panorama des perspectives qu'offre l'utilisation de ces fonctions dans le cadre des nanosciences.

Thierry Deutsch

> Laboratoire de simulation atomistique (L\_Sim)

> INAC/SP2M Tél:(33) 04 38 78 34 06

> C.E.A.Grenoble Fax:(33) 04 38 78 51 97

> 17, Avenue des Martyrs \_mailto:Thierry.Deutsch@cea.fr\_

> 38054 GRENOBLE CEDEX 9 FRANCE \_http://www-inac.cea.fr/L\_Sim

> <[http://www-drfmc.cea.fr/SP2M/L\\_Sim](http://www-drfmc.cea.fr/SP2M/L_Sim)>\_

## **Le calcul atomistique ab initio intensif en catalyse hétérogène:une voie devenue incontournable du savoir comme du savoir-faire. par Hervé TOULHOAT .**

Depuis une vingtaine d'années, une communauté à l'interface entre chimie théorique et catalyse s'est fortement structurée au plan international. Aujourd'hui, un dialogue théorie-expérience très fructueux domine la littérature scientifique en catalyse hétérogène.

Les simulations numériques sont devenues prédictives, et inductives de nouvelles expériences. La conception et le développement des catalyseurs industriels, qui sont à la base des procédés de production de 75% des produits chimiques et carburants essentiels à notre civilisation, sont profondément influencés par ces apports de la modélisation moléculaire.

Cette situation nouvelle est le fruit, d'une part de la croissance exponentielle des capacités de calcul à haute performance, et d'autre part, pour une grande part, du développement simultané des techniques de résolution de l'équation de Schrödinger dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité électronique, basées sur les théorèmes de Hohenberg et Kohn et l'approche de Kohn et Sham.

A cet égard, l'usage optimal des architectures multi-processeurs massivement parallèles est à l'ordre du jour en vue d'accéder aux dizaines de TeraFlops et Petaflops en perspective. Les verrous de connaissance en catalyse hétérogène se traduisent en effet directement en limitations de taille des ensembles d'atomes modélisant les systèmes réels, et des limitations de complexité des espaces configurationnels accessibles au calcul.

La présentation de cette problématique sera illustrée par un choix d'exemples montrant des apports récents du calcul haute performance pour la connaissance de systèmes catalytiques d'une grande importance pour la production de carburants plus respectueux de l'environnement.

Hervé Toulhoat

Adjoint au Directeur Scientifique, Directeur des Formations Doctorales

Institut Français du Pétrole

Tel +33 1 47 52 73 50, Fax +33 1 47 52 70 36

e-mail: [herve.toulhoat@ifp.fr](mailto:herve.toulhoat@ifp.fr)

<http://www.ifp.fr>

## **Simulation multi échelle des matériaux de structure des centrales nucléaires par Christophe DOMAIN.**

Ces 10 dernières années, la simulation du dommage d'irradiation a fait des progrès considérable en grande partie avec la puissance croissante des calculateurs. Un programme international de simulation multi-échelle du dommage d'irradiation dans les matériaux de structure des centrales nucléaires a été mis en place. L'objectif à terme est de prédire l'évolution des propriétés des matériaux en se basant sur les mécanismes physiques élémentaires, décrit depuis l'échelle atomique. Pour cela, les résultats obtenus par différentes méthodes sont chaînées ; chaque méthode étant adaptée à décrire une échelle de temps et/ou d'espace correspondant à un phénomène particulier. Parmi ces méthodes, les plus demandeuses en temps de calculs sont les calculs ab initio et la dynamique moléculaire, et dans une moindre mesure le Monte Carlo cinétique et la dynamique des dislocations.

La démarche et l'exemple particulier d'application au vieillissement de la cuve des centrales nucléaires seront présentés en soulignant l'apport des calculs réalisés sur machine massivement parallèle.

EDF R&D, Dpt Matériaux et Mécanique des Composants Les Renardières, Moret sur Loing

[Christophe.domain@edf.fr](mailto:Christophe.domain@edf.fr)

## **Simulation des propriétés de matériaux choqués par simulations moléculaires (Monte Carlo et dynamique moléculaire).** **par Laurent SOULARD.**

L'objet de cet exposé est de présenter quelques méthodes développées au CEA-DAM pour le calcul des propriétés thermodynamiques et dynamiques résultant de la propagation d'une onde de choc dans un matériau, qu'il soit inerte ou énergétique. On rappellera le principe et les domaines d'applications des deux grands types de simulations (dynamique moléculaire et Monte Carlo), les codes utilisés ainsi qu'un certain nombre d'outils spécifiques. Des exemples d'applications seront ensuite présentés comme la propagation d'une onde de détonation, la simulation de l'écaillage, le calcul d'équation d'état, etc.

[laurent.soulard@cea.fr](mailto:laurent.soulard@cea.fr)

## **Calculs de microstructures polycristallines.** **par Georges CAILLETAUD.**

L'analyse par éléments finis de microstructures réelles ou synthétiques permet d'avoir accès aux très fortes hétérogénéités présentes au sein des matériaux, qui sont critiques pour l'écriture de modèles d'endommagement et de rupture.

Ce domaine, baptisé calcul de microstructures, se développe en fait comme une nouvelle branche de la simulation numérique.

Les calculs qui seront commentés dans l'exposé se situent à une échelle mésoscopique et concernent les agrégats polycristallins ou des éléments de volume multiphasés. Certains exemples ont des visées académiques, et, à ce titre, portent sur des matériaux dont les mécanismes de déformation et de rupture sont déjà largement caractérisés, comme le cuivre ou le magnésium pur.

D'autres font intervenir des matériaux industriels (aciers inoxydables, alliages base titane, alliage de zirconium), et ont pour but le développement de nouvelles classes de modèles d'endommagement et de rupture basés sur les mécanismes microscopiques.

Georges Cailletaud  
Centre des Matériaux, UMR 7633  
Mines-ParisTech-CNRS  
BP 87, 91003 Evry Cedex, France  
[Georges.Cailletaud@ensmp.fr](mailto:Georges.Cailletaud@ensmp.fr)