

HPC et sciences des matériaux

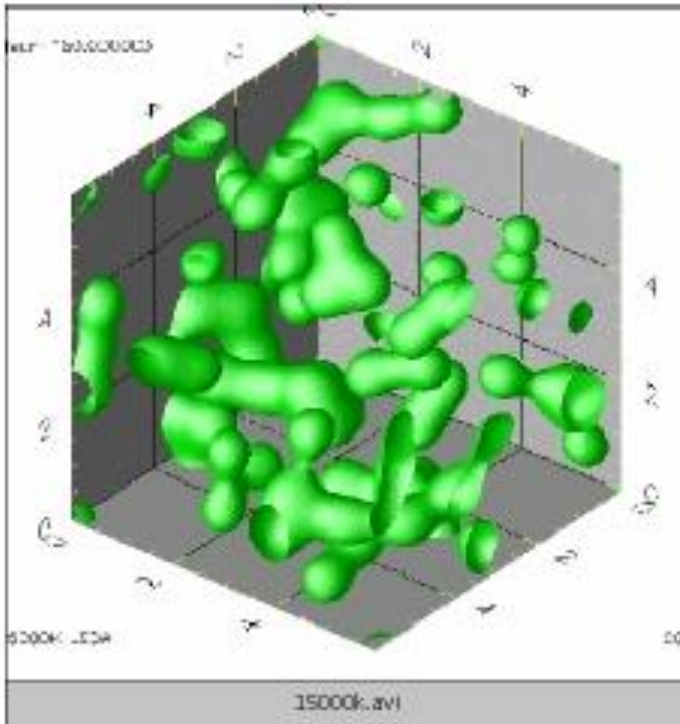
Un mariage heureux...

G Zérah

- Recherche et innovation
- Formation et diffusion du savoir
- Composante industrielle

Simulations quantiques

- Equation de Schrödinger



$$H\Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i$$

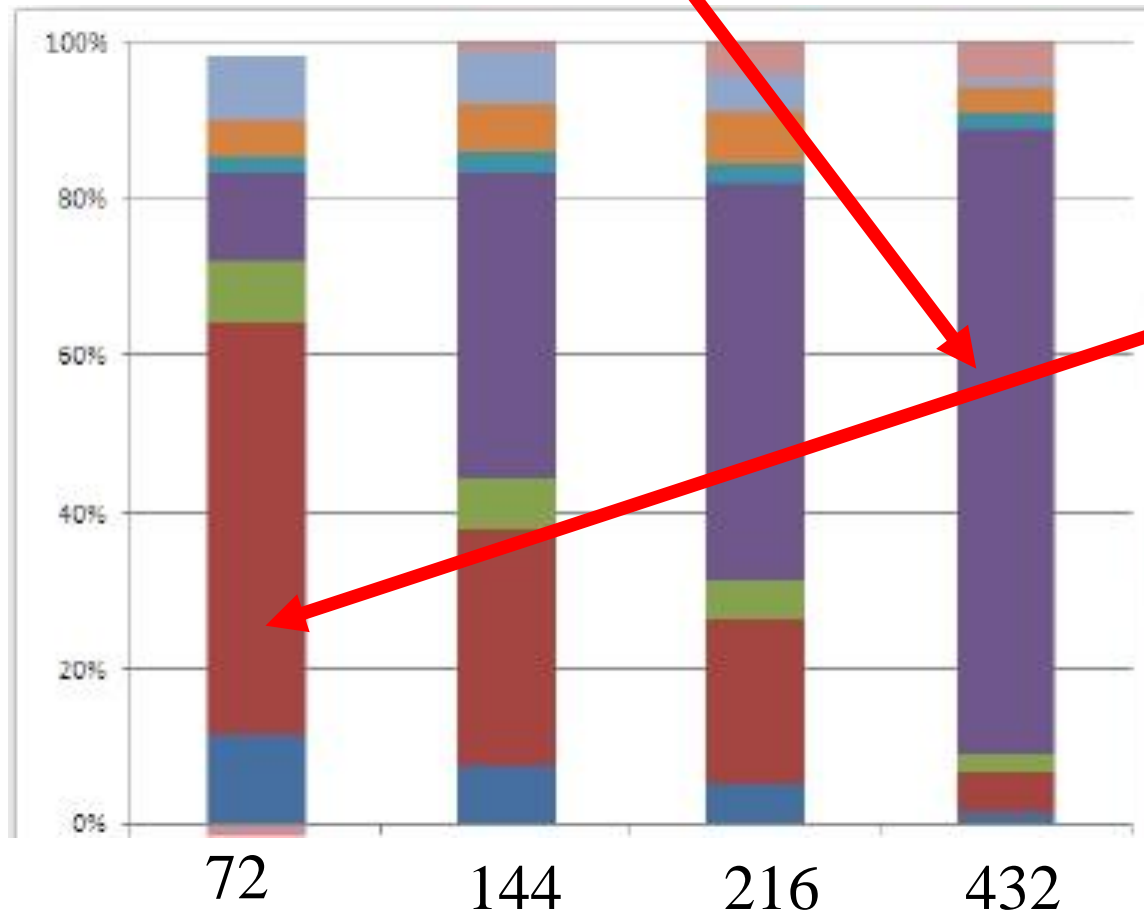
$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{i,j}$$

- Description de la matière sans paramètres

Scalabilité des calculs de structure électronique

Diagonalisation

Abinit développeurs' wks



Hamiltonien

La diagonalisation devient le point de contention

Les codes de simulation ab initio

Plusieurs décennies de développements

--1980-1990-2000-2010+

Diffèrent par les techniques de diagonalisation
(et d'orthogonalisation)

Méthodes « standard »

ABINIT, VASP, Quantum-Espresso, SIESTA, CASTEP,

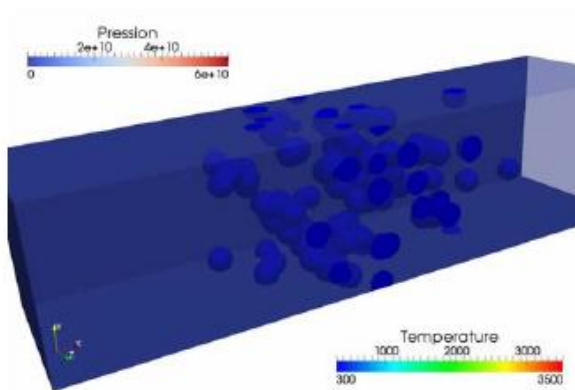
« Nouvelles » méthodologies:

OneTep, Exciting, BigDFT, GPAW,...

**Développement de méthodes de diagonalisation stables et
« scalabes »**

Dynamique moléculaire

- La matière est décrite à l'échelle de l'atome (ou de la molécule)
-
- Comme un ensemble de coordonnées et de vitesses des atomes



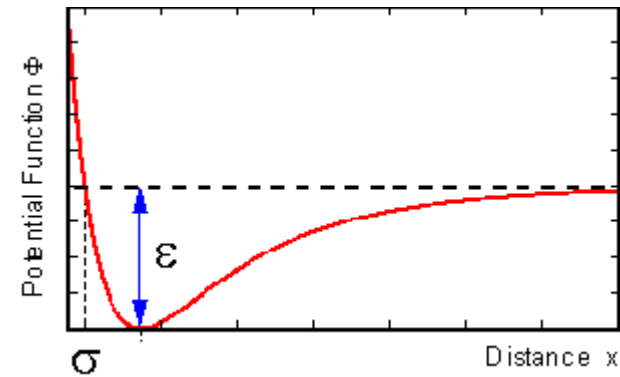
$$= (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N)$$

$$m\mathbf{a}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i E_i$$

Systèmes typiques

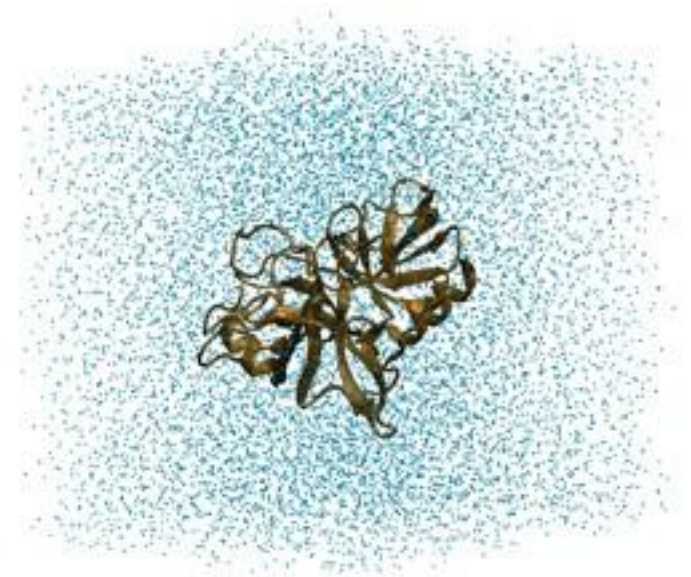
- Toute la physique réside dans la description des forces
- Systèmes génériques



- Systèmes réactifs (modification des structures moléculaires)

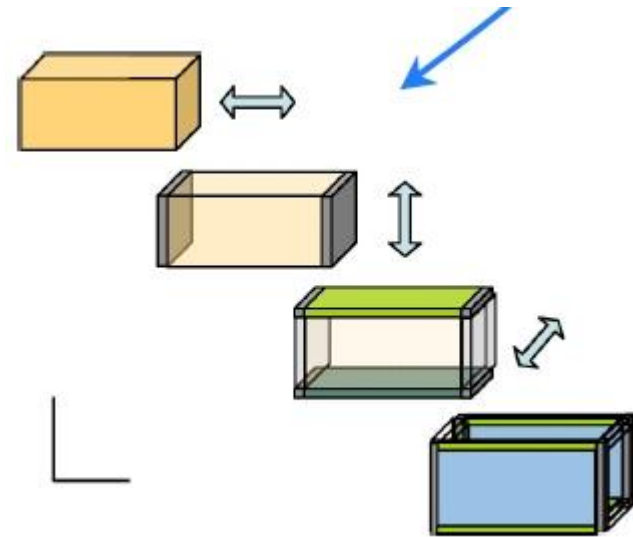
$$E(\mathbf{r}_{ij}) = E_r(\mathbf{r}_{ij}) - b_{ij}E_a(\mathbf{r}_{ij})$$

Systèmes biologiques (molécules dans un solvant)



Parallélisation

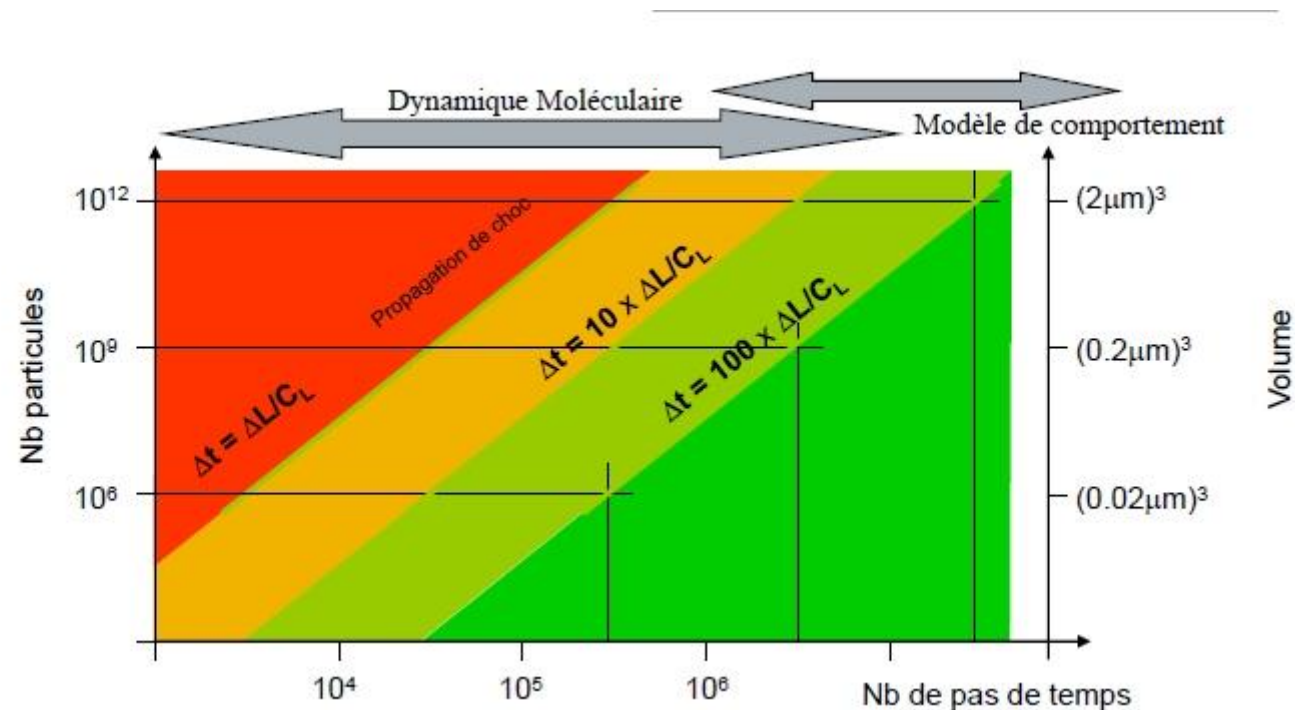
- Les forces sont à courte portée quelques couches atomiques
 - On peut donc découper en “cubes” gérés par un processeur
 - Une interface de communication (gérée par MPI_send_and_receive)
- > Cubes gèrent plusieurs threads (architecture hybride)



(Tim Germann, LANL)

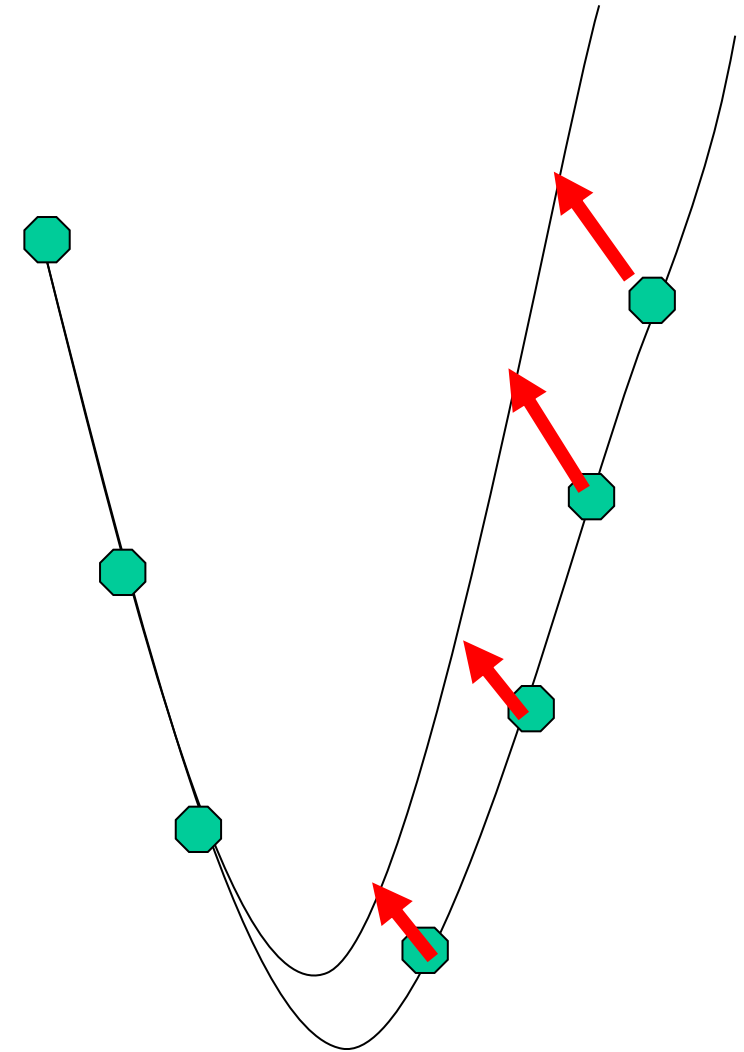
Limitation temporelle

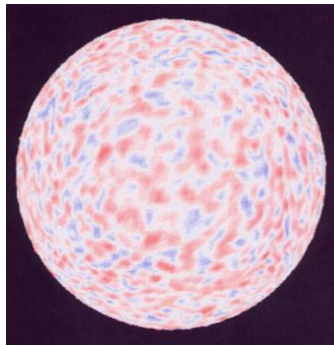
- Pour résoudre les vibrations atomiques $f=100\text{Thz}$ pas de temps: $1\text{fs}=10^{-15}\text{ s}$
- Vitesse du son $C_L=1000\text{m/s}=1\mu\text{m}/10^6\text{ fs}$



Au delà de la barrière temporelle

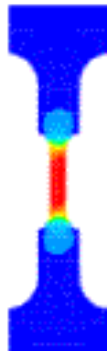
- Parallélisme en temps
- Plusieurs répliques du système en parallèle
- Algorithme parareal (Lions et al.)
- Succès limité (X5-X10)



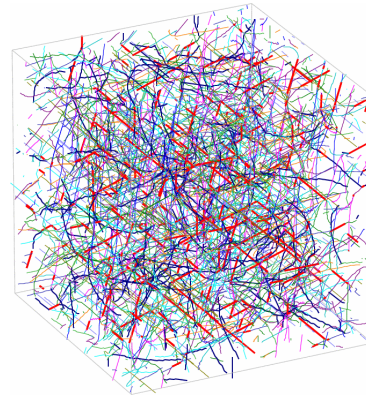


cm

polycristal

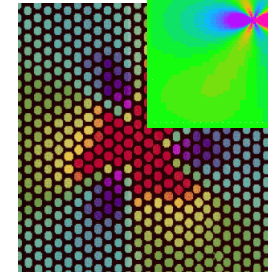


monocristal



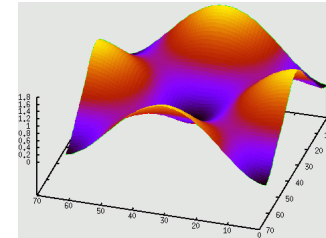
mm

mésoscopique



nm

microscopique



atomique

Effet de l'orientation des grains, de la taille des grains...

Effet du type de sollicitation, de la géométrie de l'éprouvette (rotation, courbe à 3 stades)

Microstructure, densité de dislocations, écrouissage, ... (Propriétés collectives)

Mobilité, nucléation, ... (Propriétés individuelles des dislocations, ou de paires)

potentiel atomique, constantes élastiques, ...

Construire une communauté

- La simulation numérique des matériaux est une institution européenne qui fonctionne.
- Equipes nationales solides.
- Fédérées par un réseau pérenne (depuis les années 70): le CECAM

- Diffusion des techniques
 - Workshops (~30 participants)
 - Hands on (sur des codes spécifiques)
 - Normes d'interopérabilité des données
 - Depuis 2010, structure nodale (dont 3 “noeuds” en France)

-
- Coopération physiciens/numériciens/informaticiens
 - Affermir le multi-échelle pour ouvrir sur l'industrie la plus large
 - Développer des réseaux permettant la diffusion des connaissances et des outils de simulation numériques (licences ouvertes, formation)