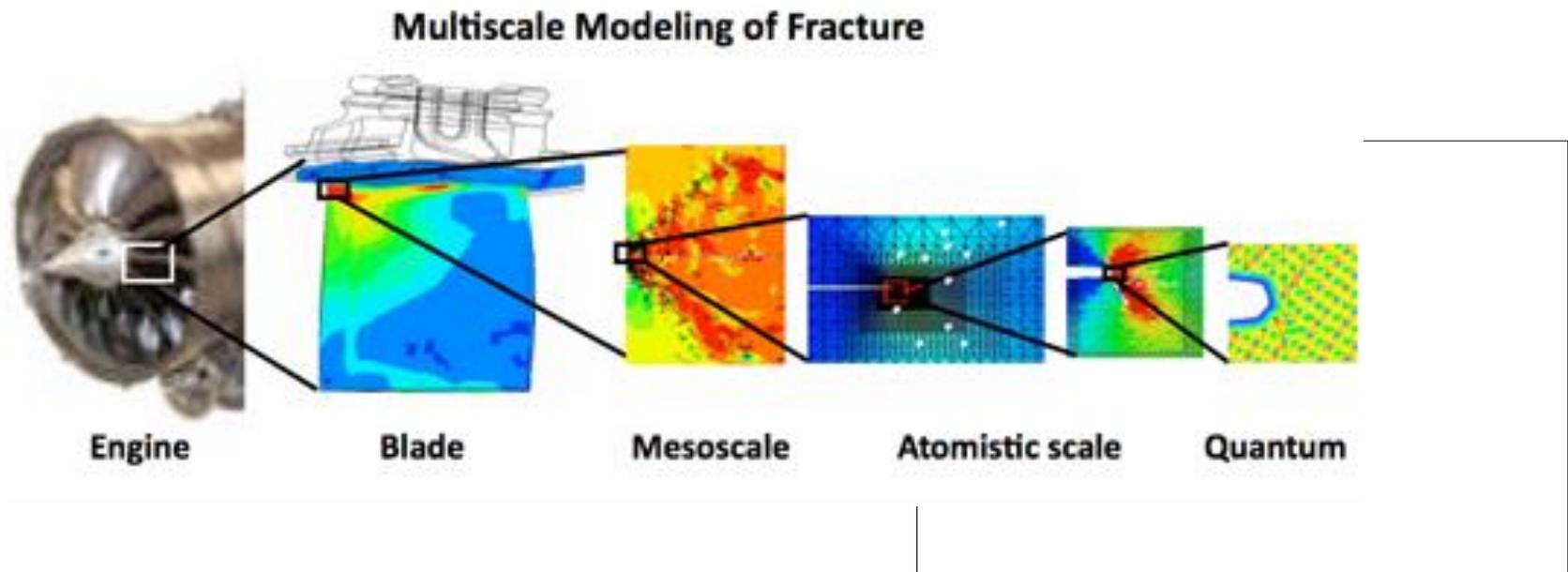


Nouvelles architectures et simulation des matériaux

G Zérah
CEA Bruyères

Modélisation prédictive des matériaux

- Défi HPC: une grande partie de l'information provient de l'échelle microscopique
- Grand nombre de degrés de liberté

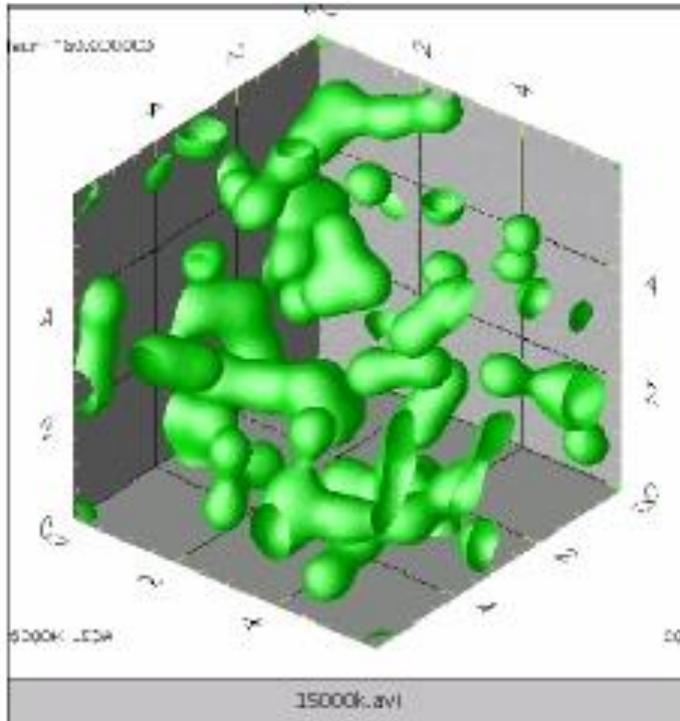


Bill Curtin EPFL

« Chemo-mechanics »

Simulations quantiques

- Equation de Schrödinger



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

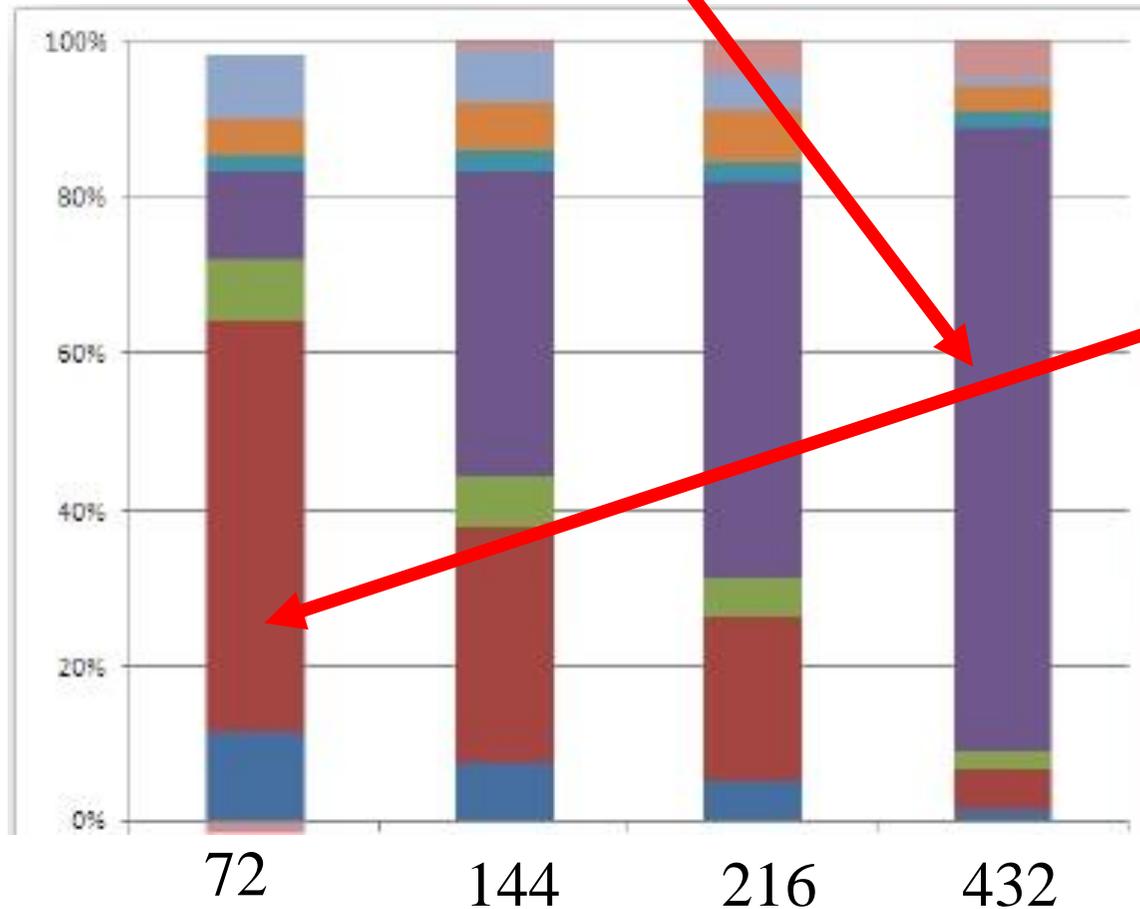
$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{i,j}$$

- Description de la matière sans paramètres

Scalabilité des calculs de structure électronique

Diagonalisation

Abinit développeurs' wks



Hamiltonien

La diagonalisation devient le point de contention

« Loi de Moore des algorithmes »

- **1995: gradient conjugué. Nprocs <10**
- 1 application du Hamiltonien par itération ; 3 itérations en moyenne
- Orthogonalisation complète à chaque itération, orthogonalisation complète à la fin
- **2007: gradient conjugué par blocs: nprocs < 300**
- L'application du Hamiltonien par itération ; 5 itérations en moyenne
- Orthogonalisation partielle à chaque itération, orthogonalisation complète à la fin
- **2014: Filtres de Chebychev nprocs < 15000**
- 5 à 10 applications du Hamiltonien
- Pas d'orthogonalisation (projections), Orthogonalisation à la fin

FILTRE DE CHEBYSHEV - PERFORMANCES

Medium+ -sized system

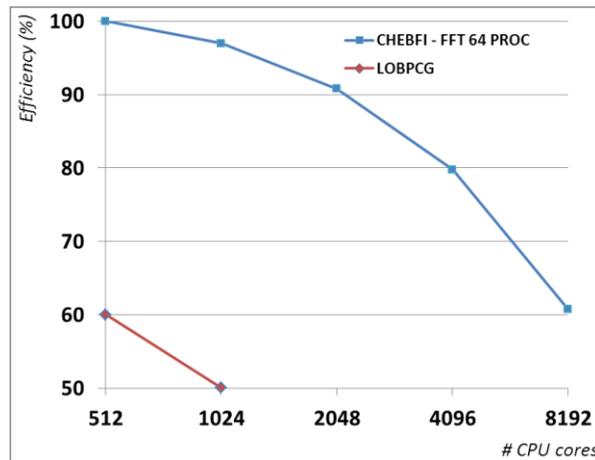
Ti crystal

512 atoms, **4096 bands**

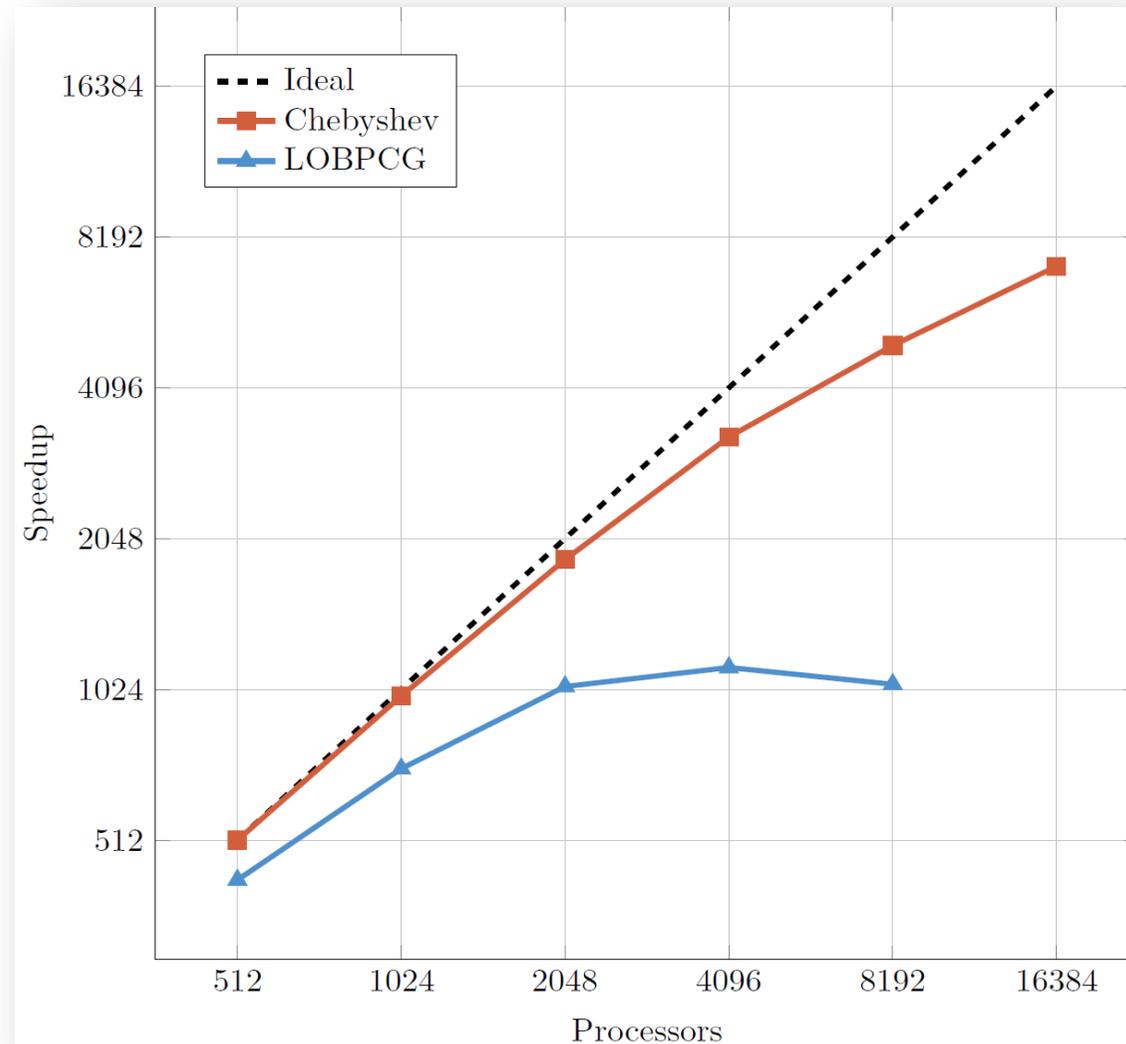
64 plane-wave procs

Varying band procs

TGCC-Curie, Intel Westmere



CHEBFI vs BLOCK CG



Décomposition du coût

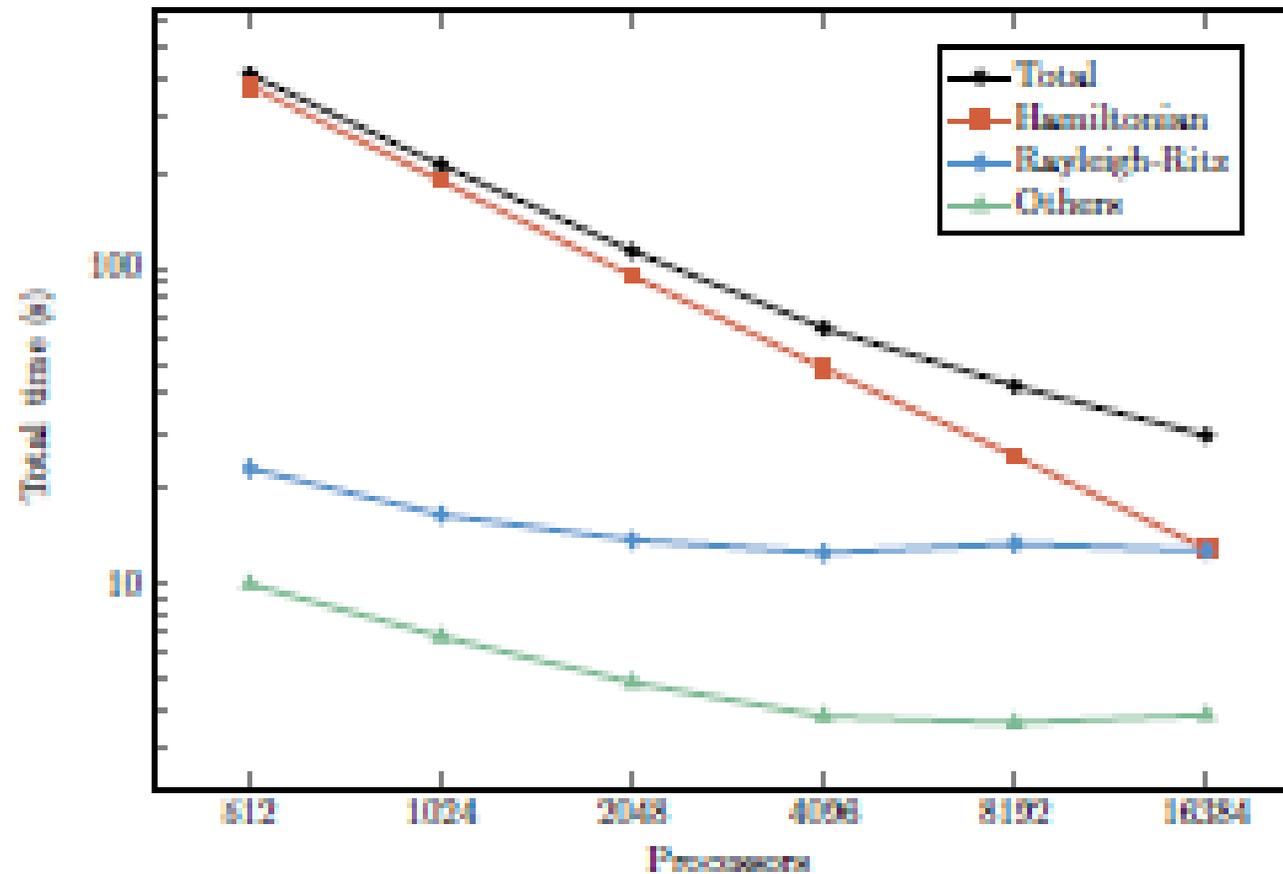


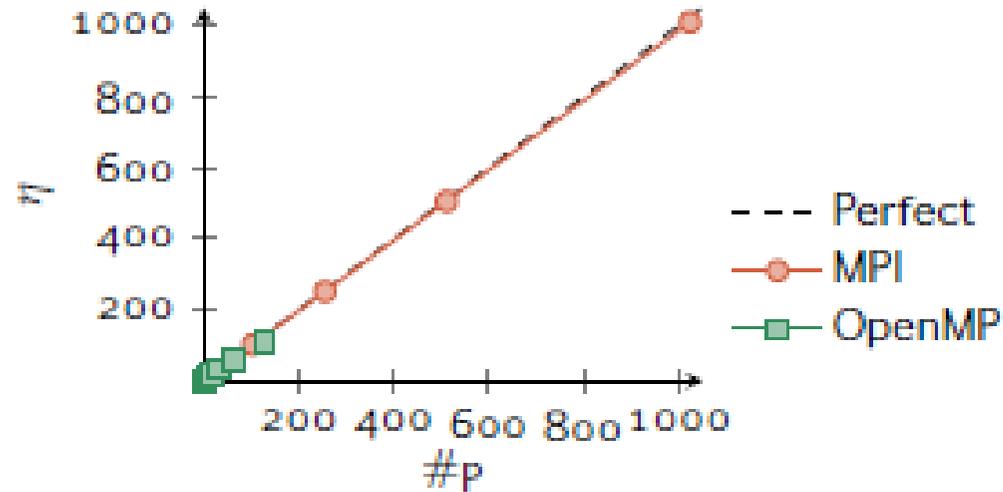
Figure 9: Breakdown of one step of the Chebyshev method, T_{512} .

Méthode de Monte Carlo

- Matériaux exotiques, supra conducteurs, magnétiques, métaux lourds
- électrons fortement corrélés: techniques spéciales
- DMFT
- Solution par méthode de Monte Carlo
- Quasi parfaitement parallélisable
- Non totalement homogène (branchements, ...)
- Essais sur: MPI-GPU-Xeon Phi

Parallelism

▶ MPI and OpenMP



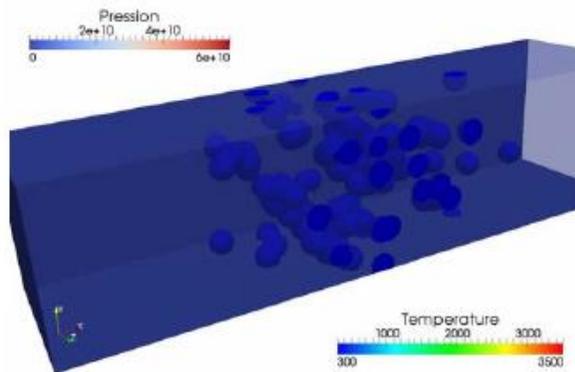
▶ Coprocessors

	Xeon®	Kepler	Xeon Phi™	Xeon Phi™
Threads	12	5096	64	1024
Type	CPU	GPU	MIC	MIC
Speed up	1	2.42	4.63	10.2

J. Bieber, PhD

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



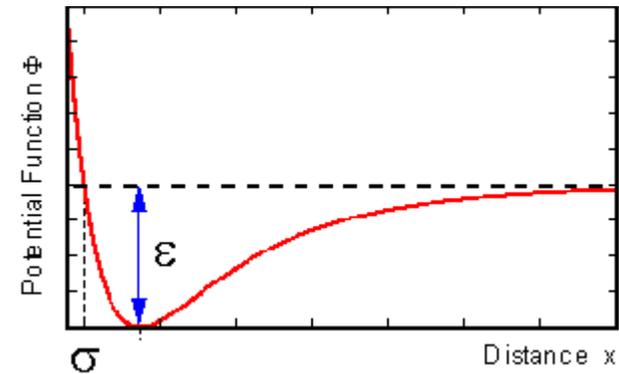
$$= (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N)$$

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

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

Systèmes typiques

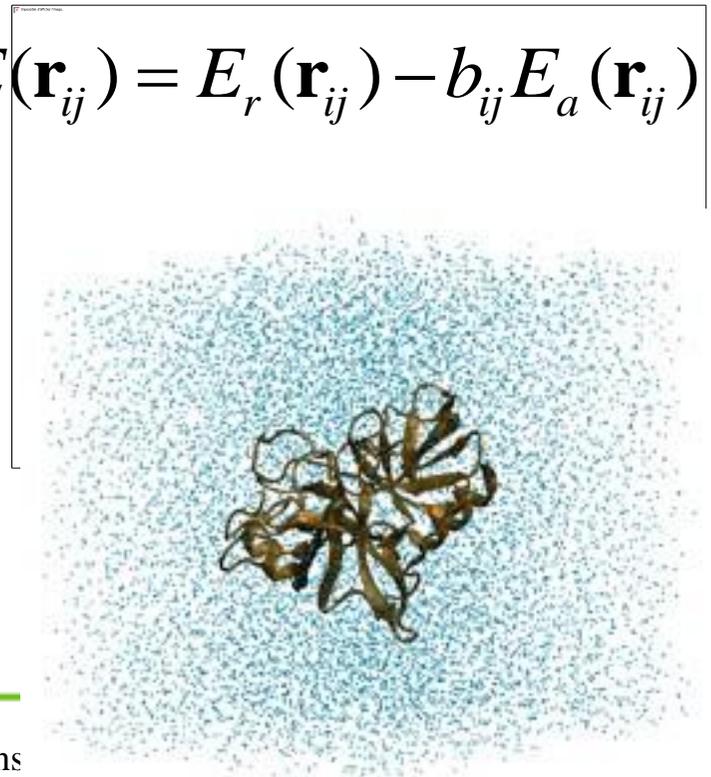
- Toute la physique réside dans la description des forces
- Systèmes génériques



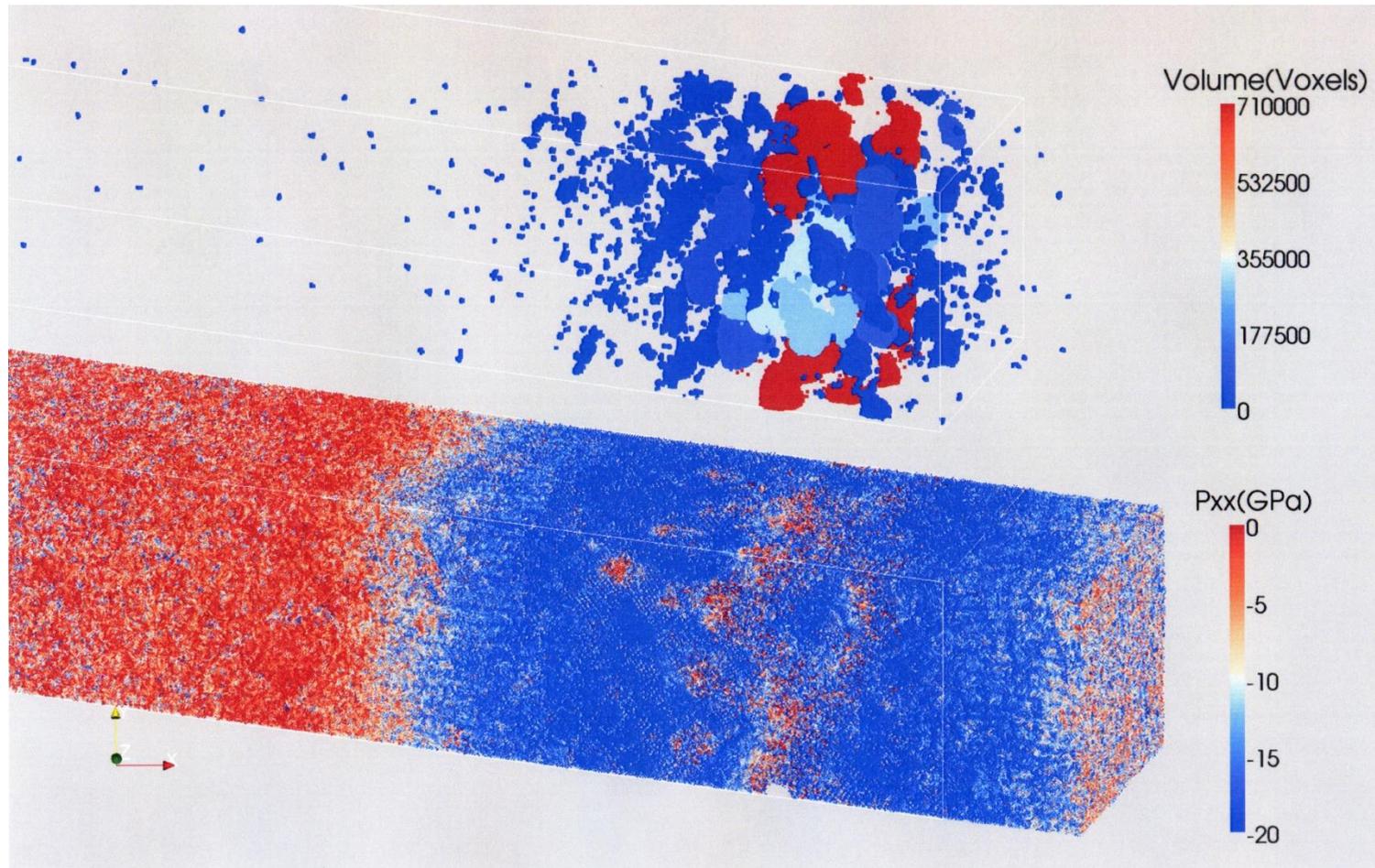
- Systèmes réactifs (modification des structures moléculaires)

Systèmes biologiques (molécules dans un solvant)

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



Rupture due à la réflexion d'un choc sur une surface libre



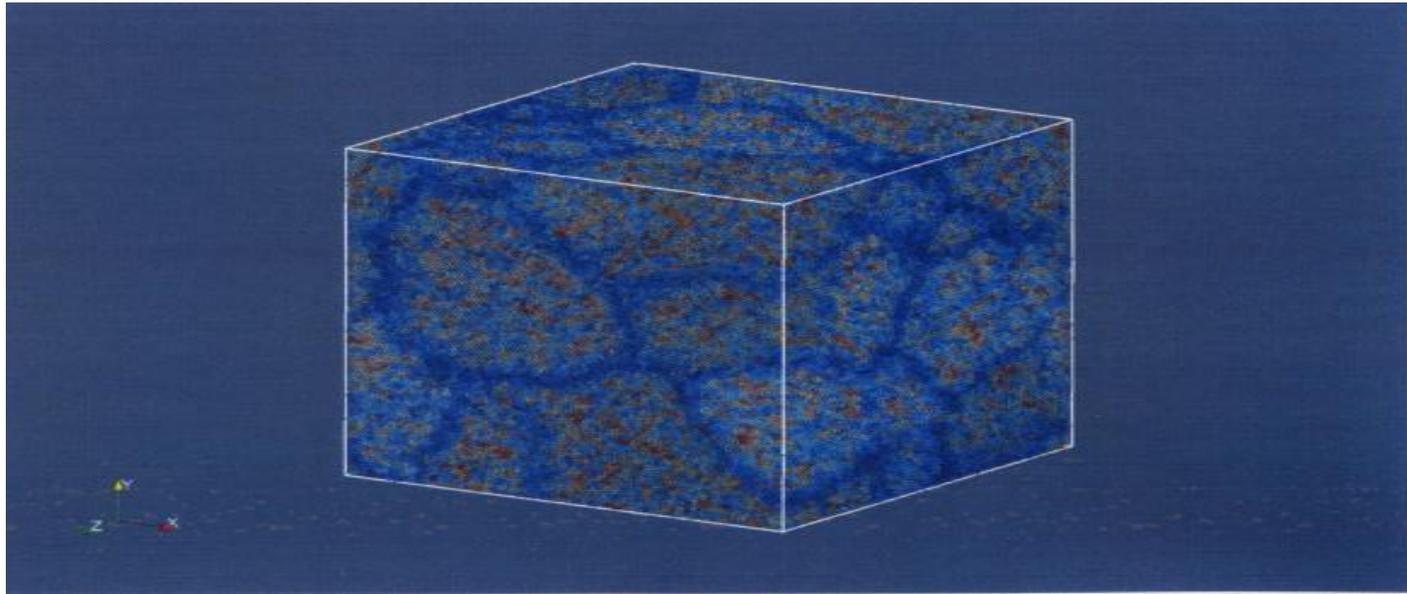
Ecaillage

Tantale monocristallin (100 millions atomes)

L. Soulard

Fusion et resolidification

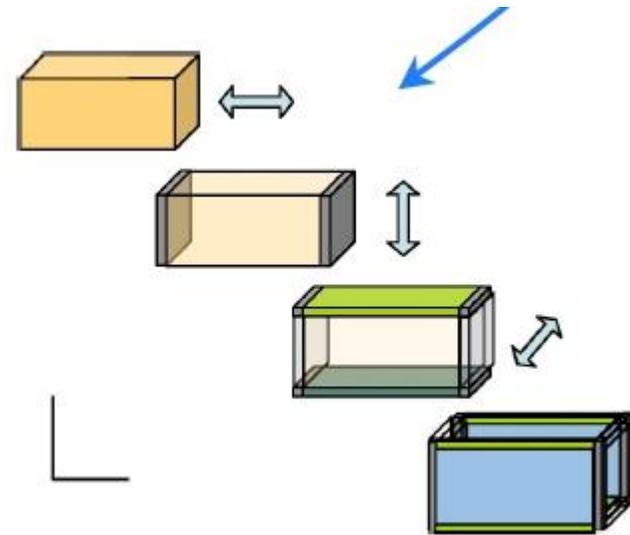
Etain



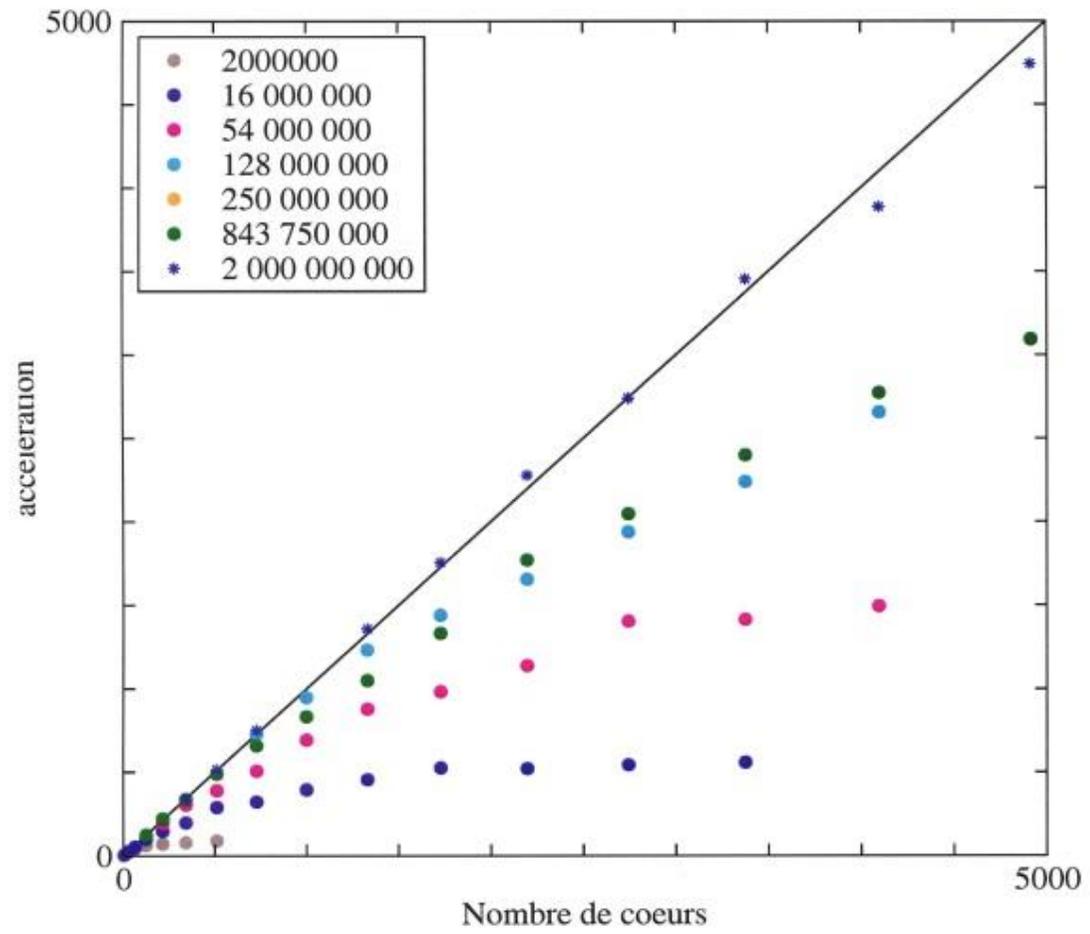
L.Soulard

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)



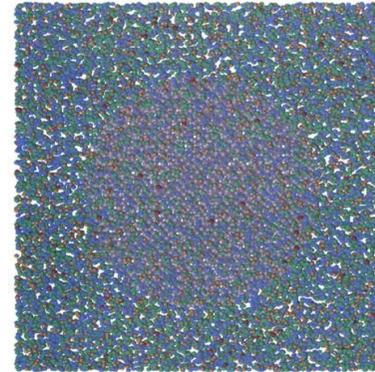
(Tim Germann, LANL)



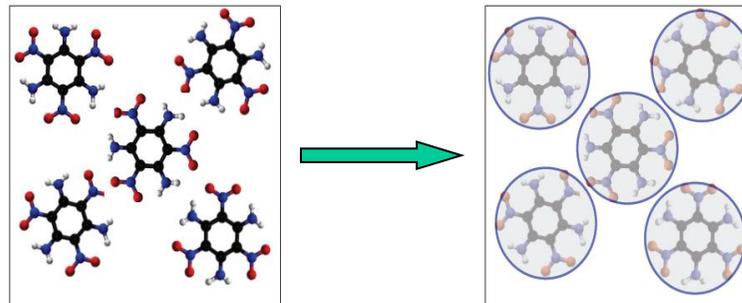
Modèles mesoscopiques

Contexte

- Evaluation des propriétés d'un matériau granulaire agrégé par un liant organique (polymère).

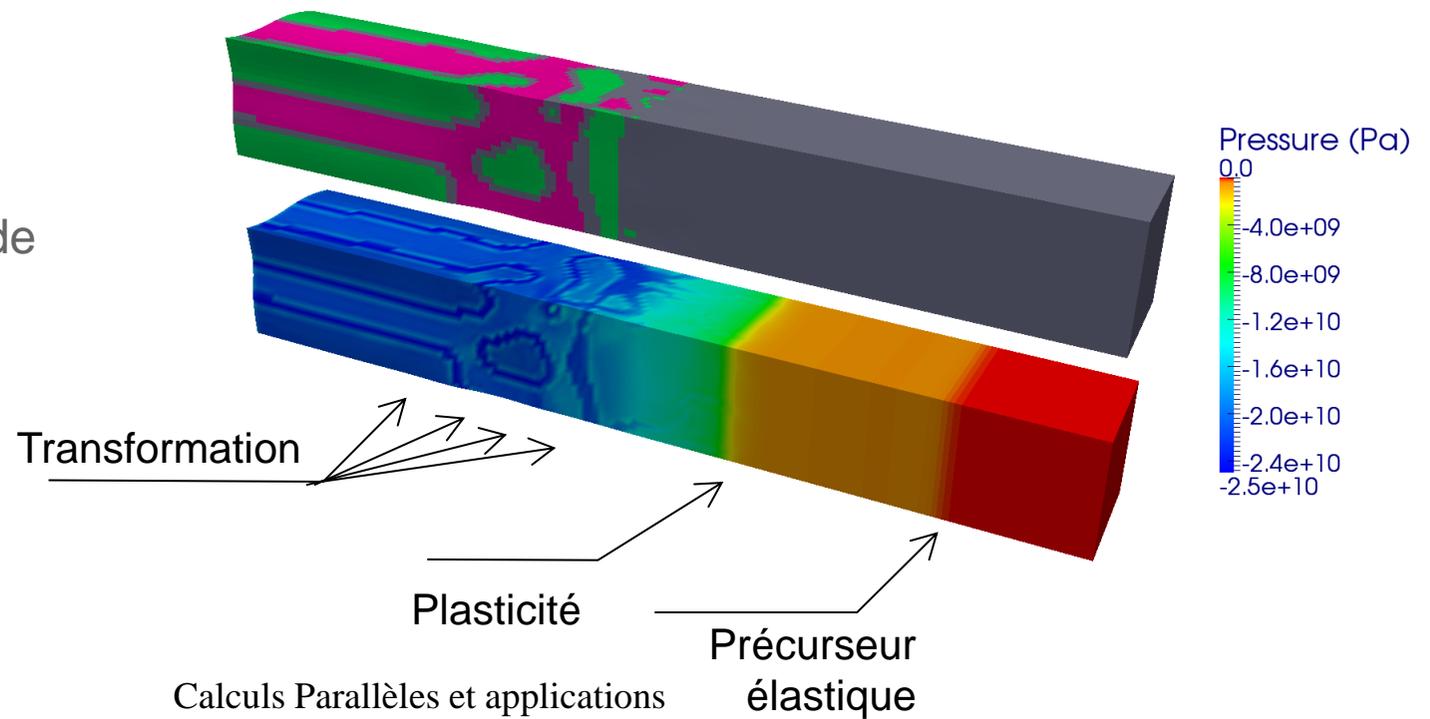


- Méthodes mésoscopiques :DPD



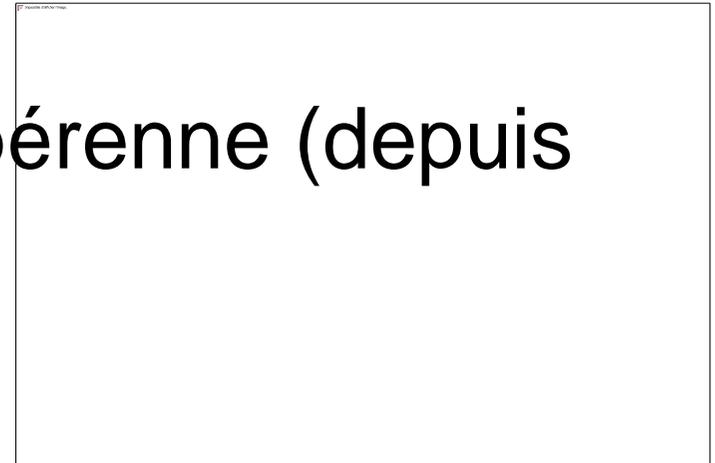
Exemple : transition Fer $\alpha \rightarrow \epsilon$ sous choc (Transition de phase+ plasticité parfaite; codes ABINIT + Coddex)

- Etude du couplage choc/plasticité/transition de phase
- Etude préliminaire sur 1024 procs



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



Viser les applications industrielles

- Recherche de prédictabilité
 - Alimentation des modèles macro par des échelles micro
 - Gestion des degrés de libertés
 - Normes d'interopérabilité des données
 - Utilisation des techniques du “Big Data” (machine learning)

