




énergie atomique • énergies alternatives

A visualization of a multi-scale simulation. It shows a central perspective view of a material structure, with a fine-scale atomic lattice on the left and a coarser-scale network of fibers or beams on the right. The background is a blurred image of a modern building with a complex, white, lattice-like facade.

Simulation des matériaux en conditions extrêmes: l'approche multi-échelles, du microscopique à la simulation des procédés

Maîtriser le comportement des matériaux en conditions extrêmes

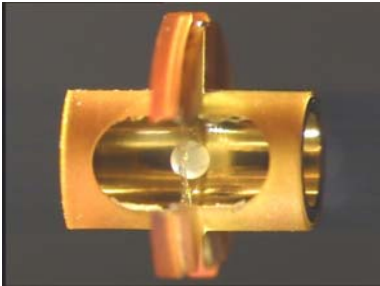
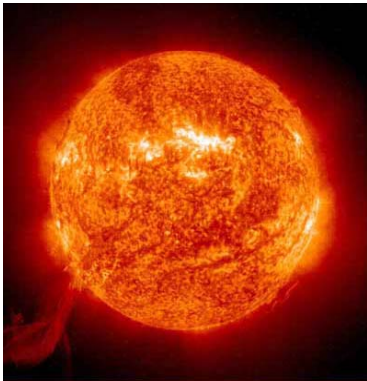


energie atomique - energies alternatives



Des pressions gigantesques

Des températures astronomiques



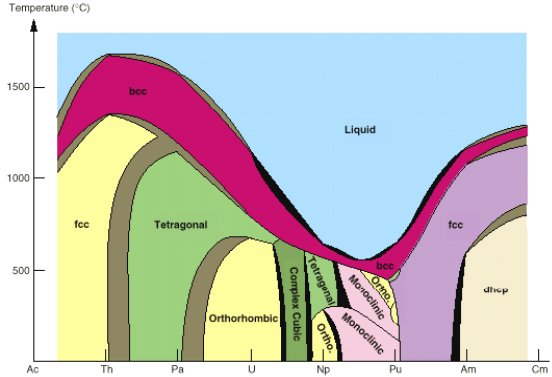
Des sollicitations rapides

Des matériaux complexes

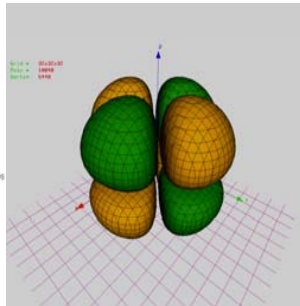


Validation expérimentale difficile

Simulation prédictive TERA



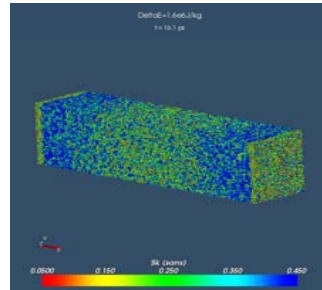
La stratégie multi-échelles: co-développer un panel de codes de simulation adapté au HPC



Échelle quantique

nm, ps

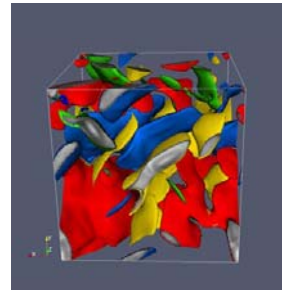
Ab initio



Échelle atomique

μm , ns

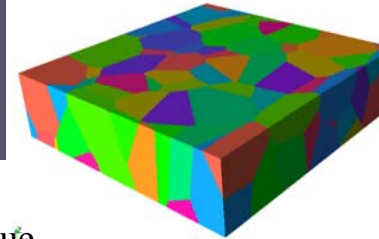
Dynamique moléculaire



Échelle mésoscopique

10 μm , ns-s

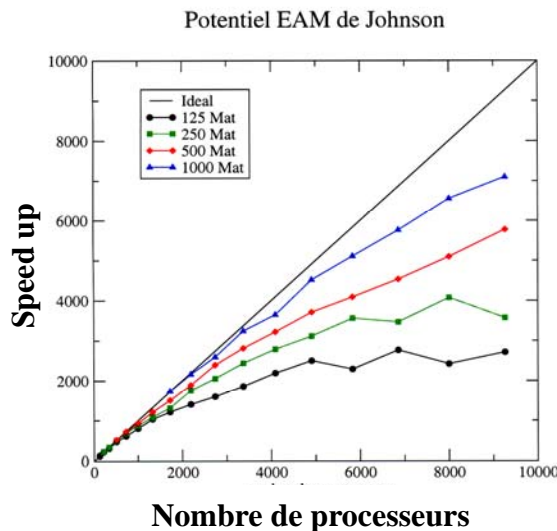
Champ de Phase



Échelle macroscopique

10 cm

Mécanique des milieux continus



Exploiter au mieux le HPC:
10 000 procs 1 milliard d'atomes



Computational Materials Science 25 (2002) 478-492

COMPUTATIONAL
MATERIALS
SCIENCE

www.elsevier.com/locate/commatsci

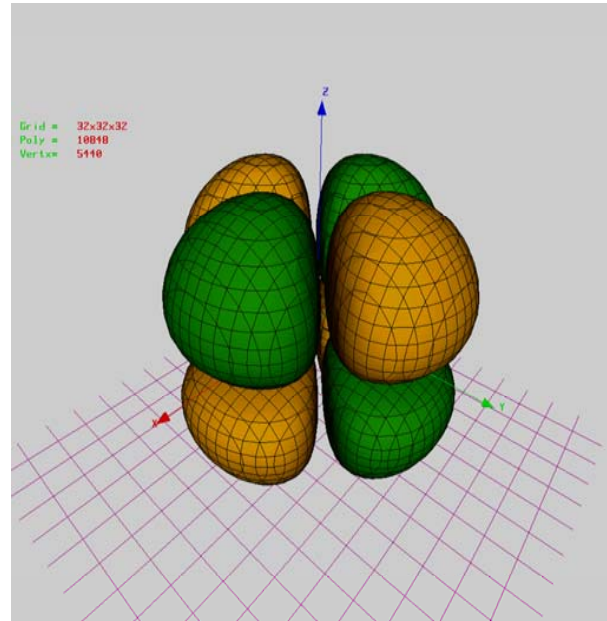
First-principles computation of material properties:
the ABINIT software project

X. Gonze ^{a,*}, J.-M. Beuken ^a, R. Caracas ^a, F. Detraux ^a, M. Fuchs ^a,
G.-M. Rignanese ^a, L. Sindic ^a, M. Verstraete ^a, G. Zerah ^b, F. Jollet ^b,
M. Torrent ^b, A. Roy ^b, M. Mikami ^c, Ph. Ghosez ^d, J.-Y. Raty ^d, D.C. Allan ^e

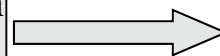
^a Unité PCPM, Université Catholique de Louvain, B-1348 Louvain-la-Neuve, Belgium
^b Commissariat à l'énergie atomique, F-91680 Bruyères-le-Châtel, France
^c Mitsubishi Chemical Corp., 1000 Kamoshida-cho Aoba-Ku, Yokohama, 227-8502 Japan
^d Département de Physique, U. de Liège, B-4000 Sart Tilman, Belgium
^e Corning Inc., Corning, NY 14830 USA

Développement en collaboration

L'échelle quantique: ab initio



N électrons + noyau en interaction



N particules dans un champ moyen

+

Fonctionnelle Echange/Corrélation

Théorie de la Fonctionnelle Densité (DFT)

de TERA 1 à TERA 10, équation d'état et courbe de fusion

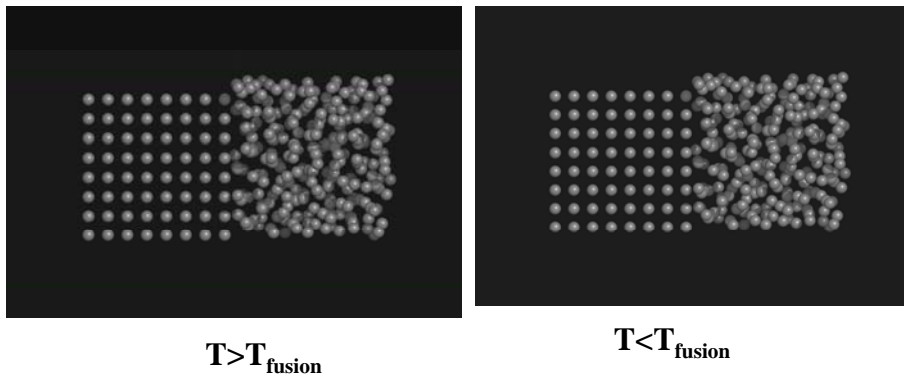


Sur TERA 1: qq 10 atomes-qq 10 heures qq PROCS

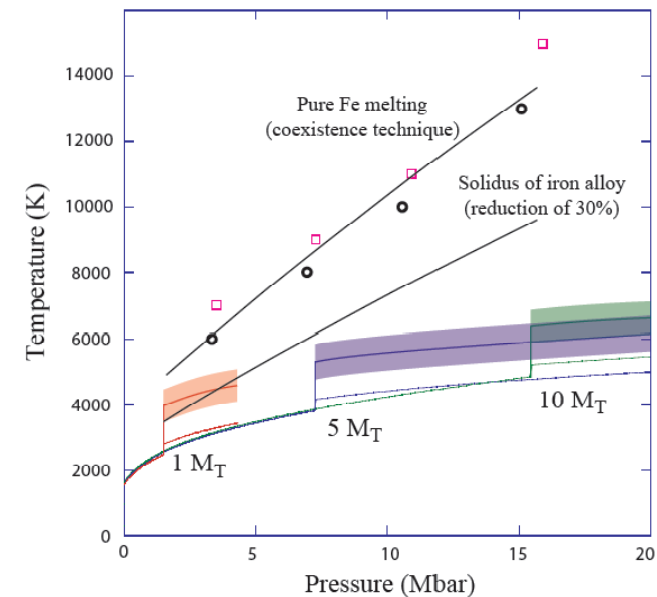
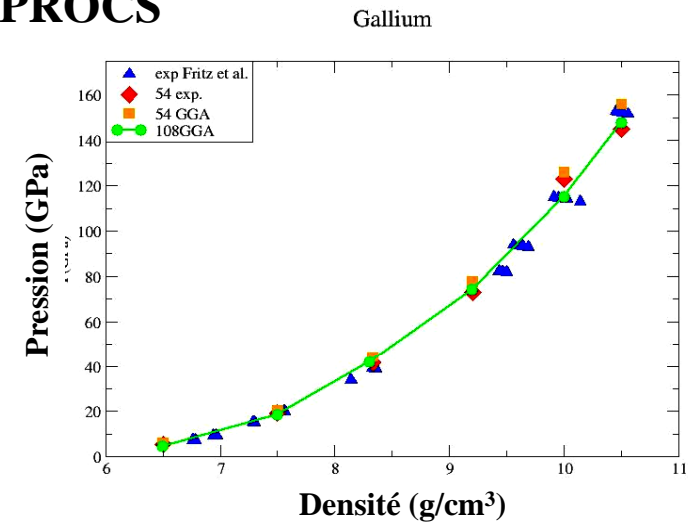
L'EOS ne dépend que de l'environnement atomique local: quelques atomes

Sur TERA 10: qq 100 atomes- qq 100 procs pour simuler la fusion du fer sous pression

Géophysique: connaître précisément l'interface solide-liquide du manteau terrestre: Fer + impuretés à 3 Mb et qq 1000 K



ANR Séchel (CEA, LULI, IPG)



Sur TERA 100, on simule la réactivité de surfaces de matériaux complexes



Stockage et retraitement des déchets nucléaires:

Comprendre la réactivité des combustibles nucléaires (PuO_2 ou UO_2) avec l'eau

- Restituer les propriétés des oxydes d'actinides, matériaux corrélés: **L'approche standard ne suffit plus**
- Simuler **l'adsorption** de l'eau sur les différents sites avec ou sans dissociation

=> Énergies de liaison pour différentes configurations

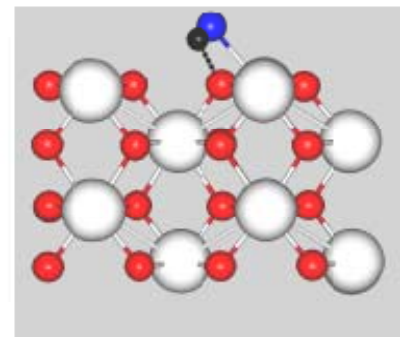
Simulation Abinit: 100 atomes

1 calcul = 200 P x 10 h = 2000 h.PROC

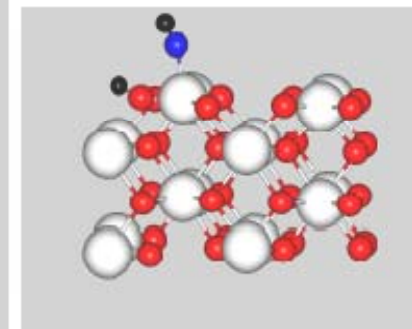
25 sites/config x 2 (H_2O dissocié ou non)

Configurations des voisins

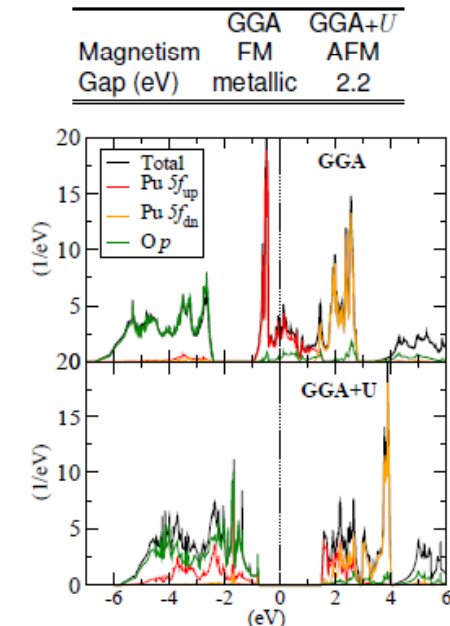
=> 1 Megah.Proc



$E_{\text{ads}} = 0.90 \text{ eV}$



$E_{\text{ads}} = 1.12 \text{ eV}$

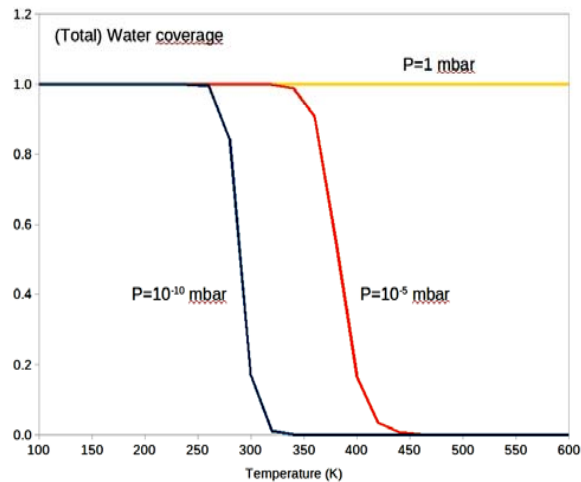
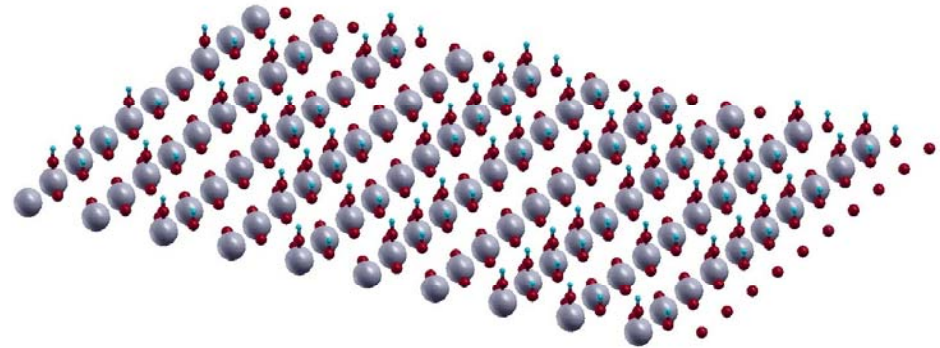


Collaboration ITU Karlsruhe

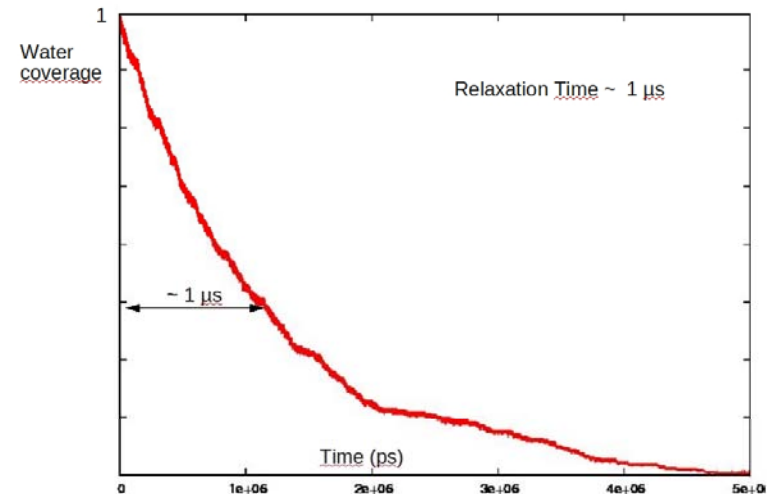
Couplage d'échelle: le Monte Carlo Cinétique permet l'accès aux échelles mésoscopiques

On simule directement
l'adsorption-désorption des
molécules d'H₂O

- **Ab initio** => énergies de liaison sur le réseau et les fréquences des transitions
- Transitions thermiquement activées: désorption à haute température d'autant plus facile que la pression partielle est faible



Cinétique de désorption:
chauffage à 600K et p= 10⁻¹⁰ mbar



Les calculs de structure électronique doivent relever les challenges du passage à l'échelle et du traitement des corrélations



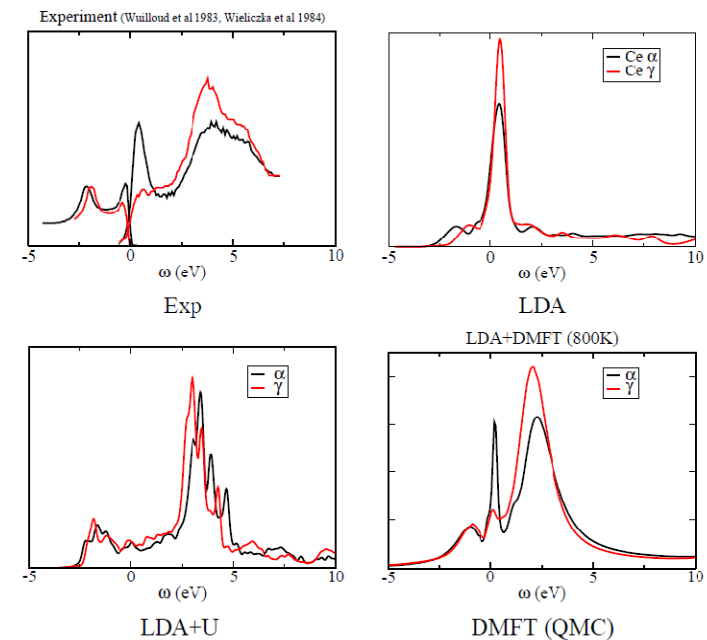
Challenge informatique: l'approche en ondes planes (TF) limite la scalabilité à qq 1000 PROCS

=> Algorithme d'ordre N (*ANR Newcastle, collaboration LABRI*)

Challenge physique:

Développer une approche unifiée pour tous les niveaux de corrélation

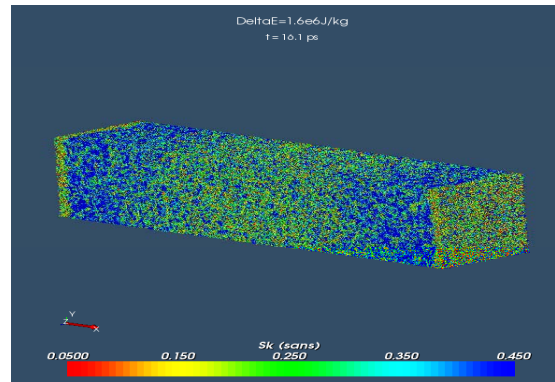
=> Champ Moyen Dynamique (DMFT)





energie atomique • energies alternatives

L'échelle atomique: Dynamique moléculaire



- 1/ Définir le potentiel d'interaction classique entre les atomes à partir de l'échelle quantique ou à partir de résultats expérimentaux
- 2/ Résoudre l'équation de la dynamique: $F = \text{grad } V = m\ddot{y}$

Simuler à l'échelle « hydrodynamiques » et à l'échelle de l'expérience



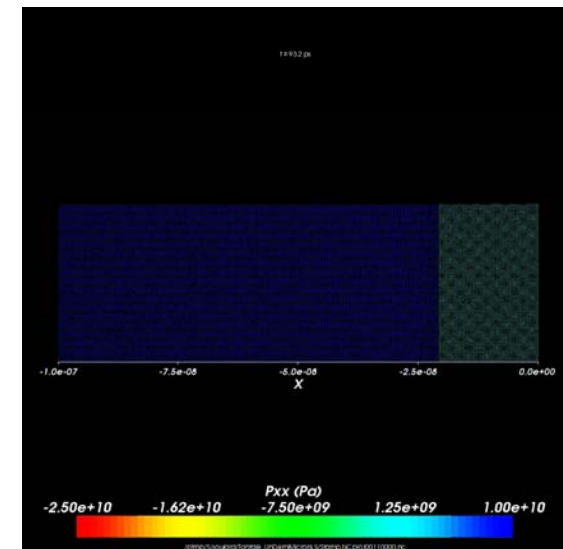
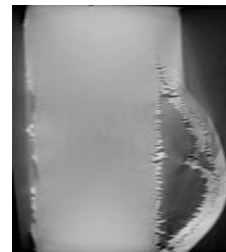
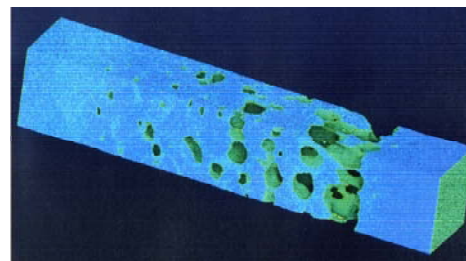
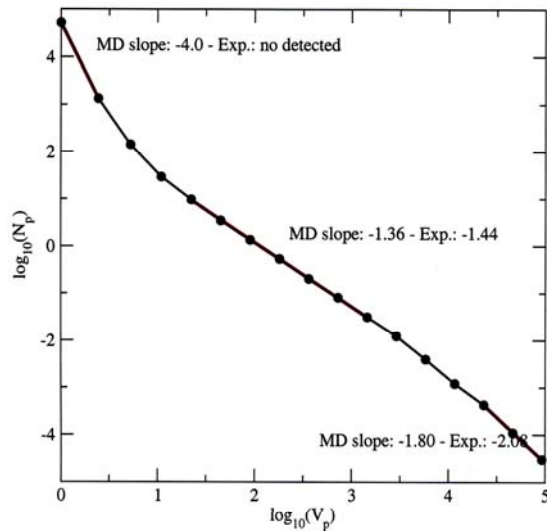
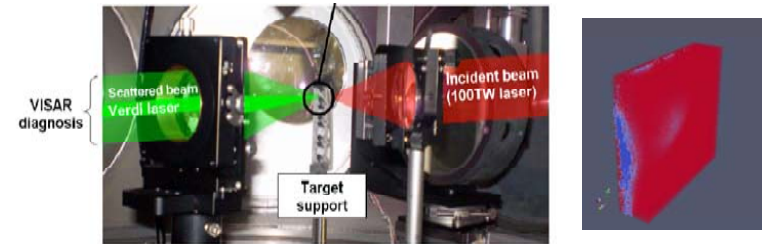
Endommagement des matériaux ductiles sous choc :

Modèle empirique ajusté sur des expériences

Simuler en DM classique

Valider directement sur des expériences à la même échelle (laser ultra court)

=> “mesure” numérique de coefficients pour les modèles phénoménologiques



Simulation de l'endommagement:
calcul STAMP : 65 millions
d'atomes, 512 cœurs sur TERA-10
30 nm x 30 nm x 1 μm

Collaboration LULI, LCD Poitiers

La Dynamique Moléculaire utilisera des potentiels de plus en plus précis/coûteux sur des échantillons de plus en plus grands mais cela ne suffira pas!

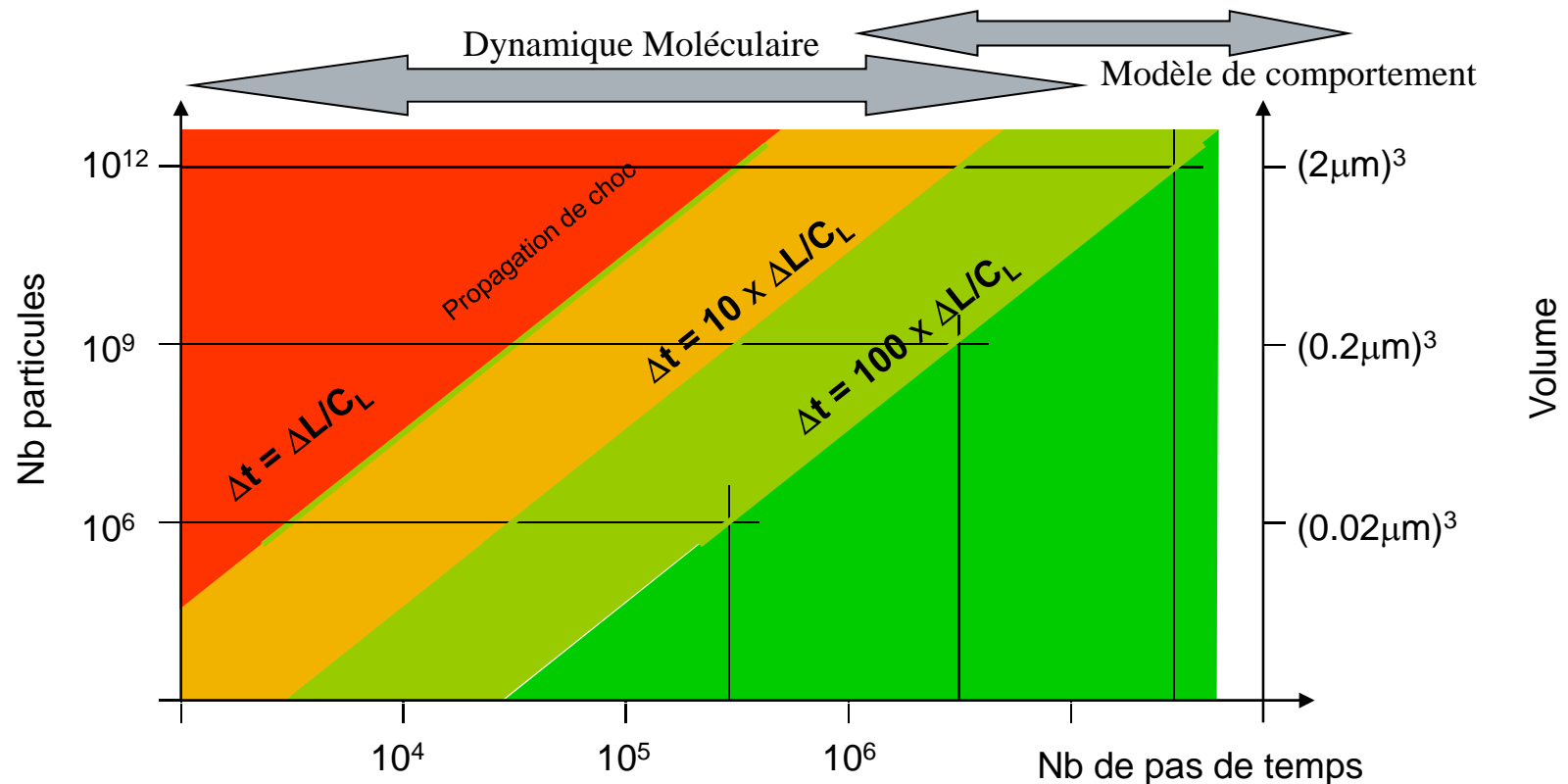


Challenges informatiques:

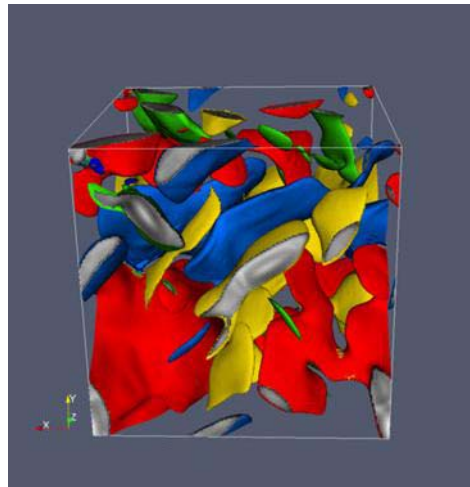
- Amélioration à prévoir pour le passage à 20 000 cœurs et plus
- Exploiter les architectures hybrides GPU?

Challenges physiques:

- Développer des potentiels classiques pour des domaines plus larges (fusion-resolidification)
- Développer les approches mésoscopiques du type « **Coarse-Graining** »



L'échelle mésoscopique



La méthode des champs de phase permet de simuler des changements de phase martensitiques

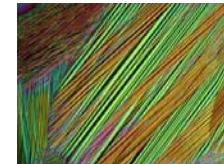
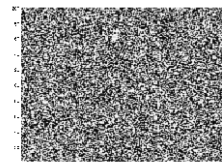


energie atomique - energies alternatives

Maîtriser les **changements de phase solide-solide** rapides: sous choc ou lors du procédé de fabrication

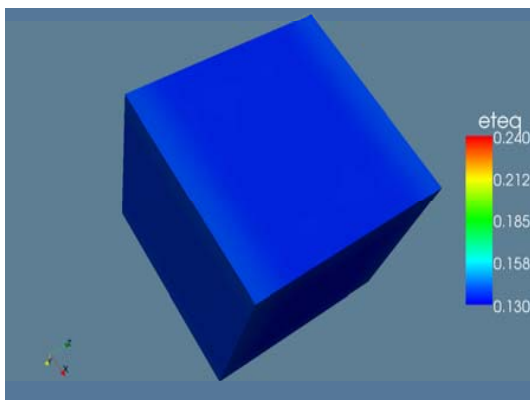
Deux types de transformations:

- spinodale: thermiquement activée, lente
- martensitique: dépendant de la contrainte, très rapide (ps), forte déformation (réversible), effets polycristallins (1 grain ~ 50 μ)

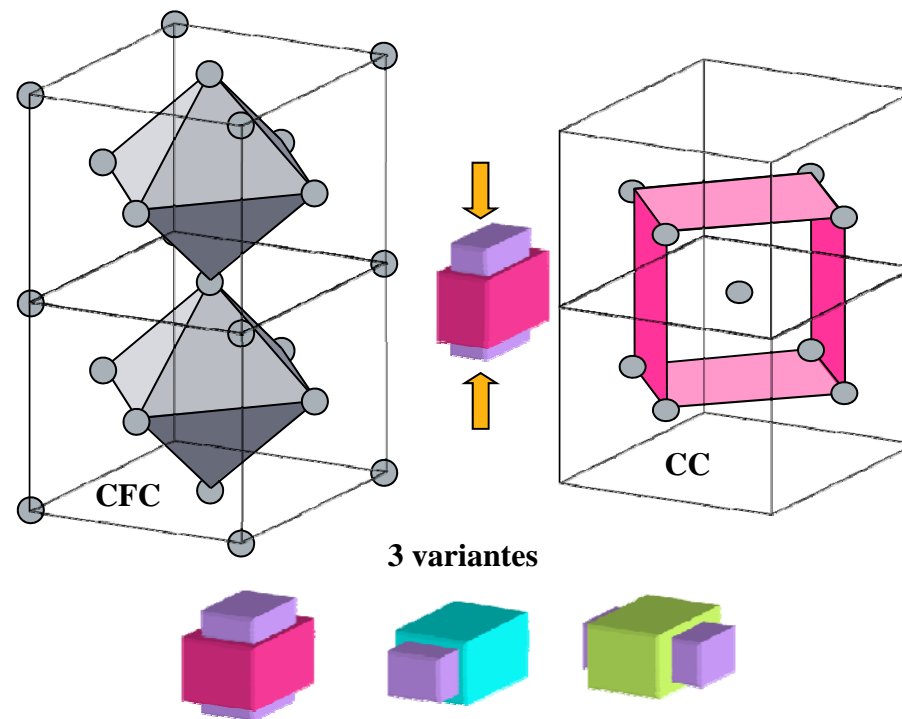


Méthode des champs de phase multi-échelles

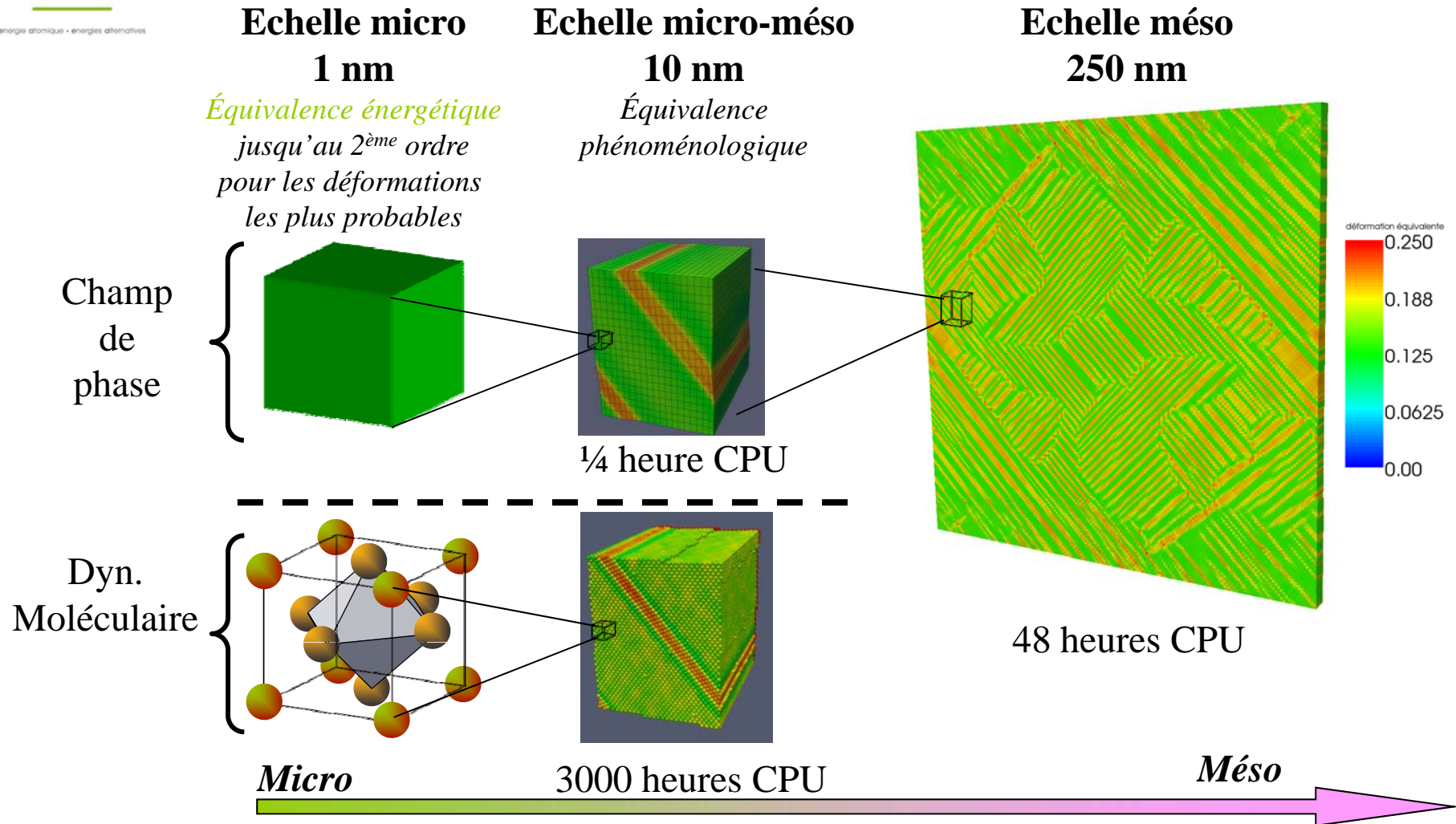
- Chaque état final est un “puits d’énergie”: le paysage énergétique est issu de calculs ab-initio
- Le chemin de réaction est décrit par un seul paramètre



polycristal d’austénite (alliage Fe-Ni) 10 μ m



La méthode approchée est validée par recouvrement en Dynamique Moléculaire



On commence à simuler le procédé, reste à ajuster la cinétique



La taille des lamelles de martensite dépend de la cinétique de la transformation qui reste un paramètre ajustable

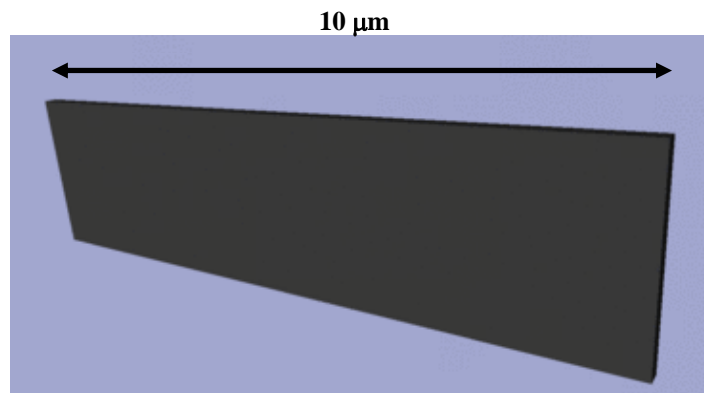
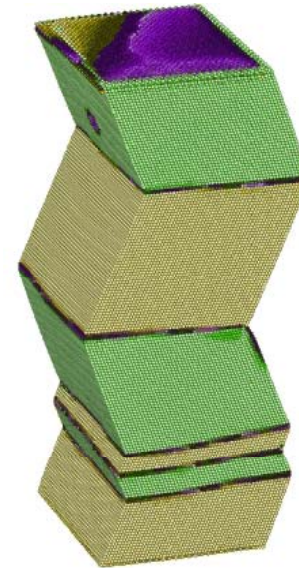
Simulation du changement induit par un indenteur (Code CODDEX)

Alliage à mémoire de forme (Nickel-Titane)

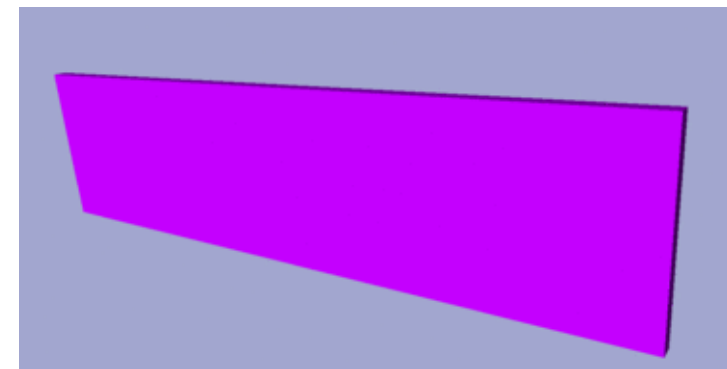
Cinétique rapide



Cinétique lente

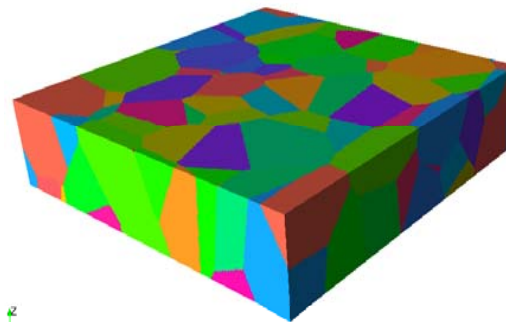


Déformation faible (noir)- 20% déformation (clair)



Un exemple de chaîne aboutie jusqu'à l'échelle macroscopique:

Endommagement par fragmentation d'un
métal et plasticité polycristalline

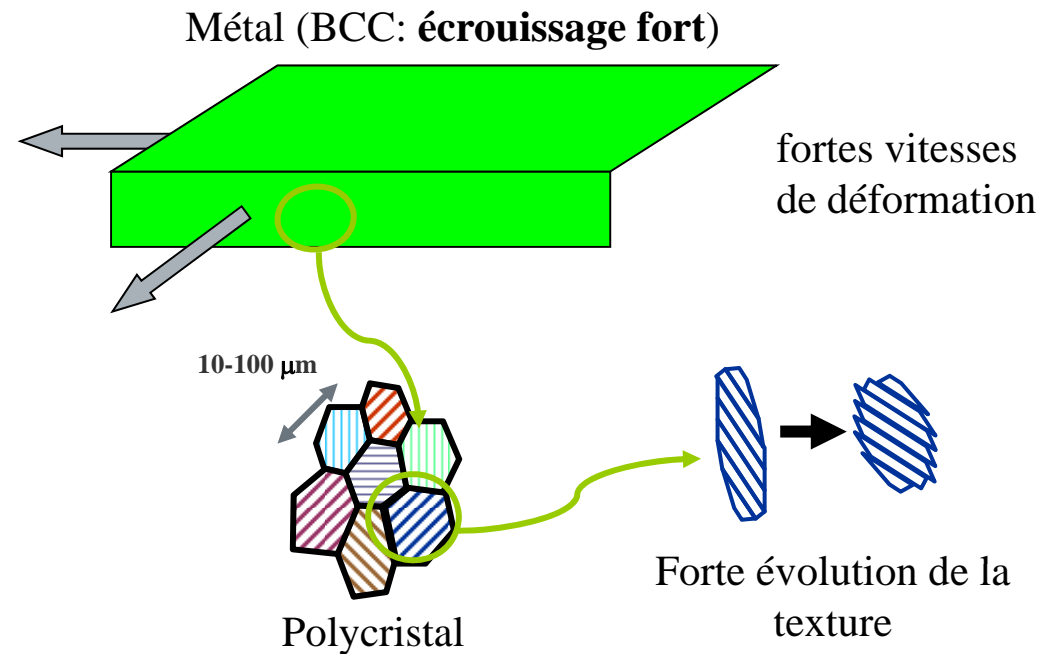


La modélisation de la plasticité implique de prendre en compte la nuance



Les modèles phénoménologiques nécessitent un jeu de paramètres par nuance, donc par mode d'élaboration

=> Il faut inclure l'orientation cristalline dans le modèle, donc inclure la présence de systèmes de glissement dans chaque cristal



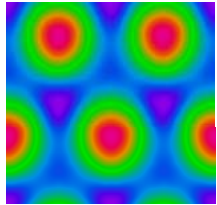
L'effet important sur l'hétérogénéité de la déformation suffit-il à expliquer la localisation de la striction et/ou la fragmentation?



L'information remonte les échelles à travers des descriptions différentes



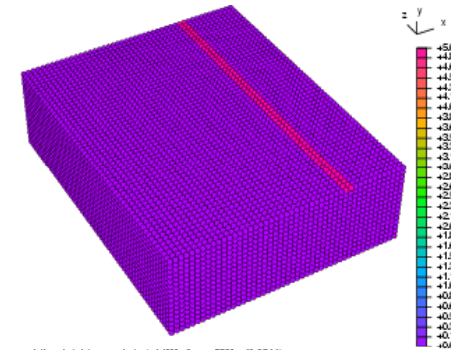
Contrainte de Peierls



atomique



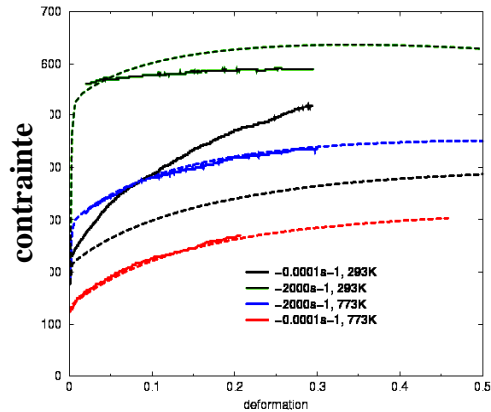
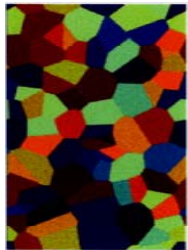
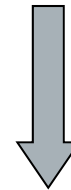
micro-més
(atomes -> dislocations individuelles)



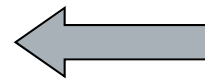
variation de laite : grad_sta (min(0) = 0, max(99) = 10,0811)
Fichier : aucun nom
Codde : (compiled on Oct 4 2002, at 10:24:44, actual time : Wed Oct 9 00:17:56 2002)

més-Més

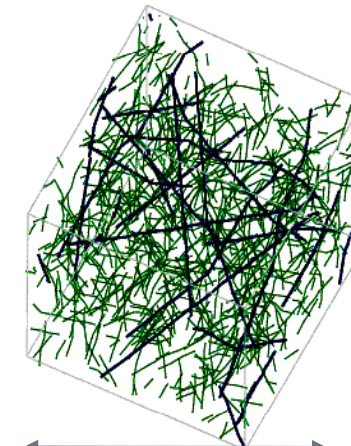
(dislocations individuelles en mouvement
-> dislocations en interaction en masse)



déformation



Més-macro
(ecrouissage -> comportement macroscopique)



10 μ m

Fragmentation et texture en traction bi-équ coastale: premiers résultats

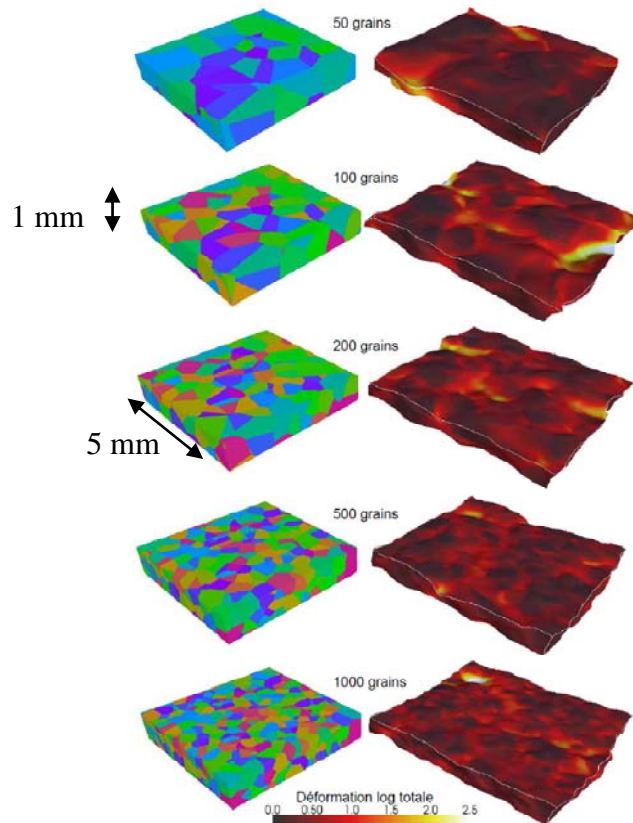


energie atomique • énergies alternatives

Effet de la taille de grains

Rupture précoce si

$$n = \text{ep plaque} / \text{dimension grain} = 1$$



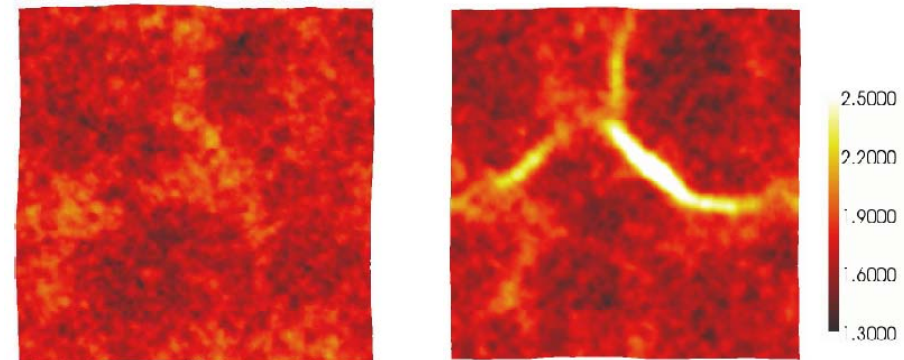
1 grain = 1 maille donc 1,6 Millions de grains

Fragmentation plus tardive (car $n \gg 1$)

texture initiale anisotrope (laminage)

=> localisation plus précoce

Le max de localisation ne correspond pas au max de contrainte!



Calcul CODDEX sur TERA 100: 100 h x 1200 Procs avec 3 grains maillés au max

=> besoin de 10 fois plus de coeurs

Collaboration ESI Group

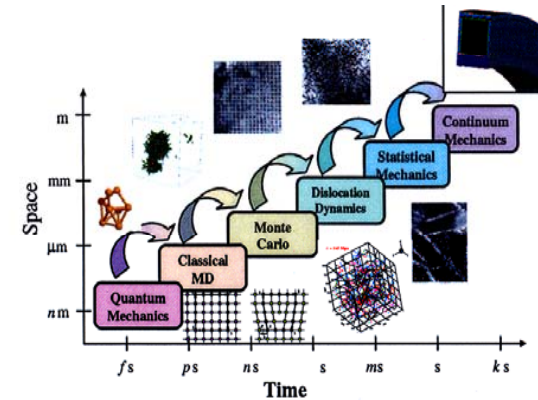
$1,6 \cdot 10^6$ mailles = Nbre de grains x nbre de mailles/grain

Des résultats très encourageants mais il reste du chemin à faire!



On dispose d'outils opérationnels et prédictifs pour toutes les échelles

- au meilleur niveau international
- approche toutes échelles unique au niveau national



Challenges informatiques:

- Exploiter les futures ressources du HPC
 - Machines Exaflopiques
 - Architectures Hybrides
- Code ab initio: alternative à FFT? QMC?
- Code de DM classique: “mur du temps”
- Dépouillement/visualisation des résultats

Challenges physiques:

- Les corrélations électroniques
- Les cinétiques des transformations:
 - réactions chimiques
 - changements de phase
- La simulation du “vrai” matériau:
 - grains, défauts, impuretés

NB: Les validations expérimentales élémentaires, sur les grands instruments: synchrotrons/laser ultra rapides et sources associées, restent nécessaires

L'orateur remercie toute l'équipe:

Le Service de Physique de la Matière Condensée du DPTA
(Département de Physique Théorique et Appliquée)

Les collaborateurs du DSSI
(Département des Sciences de la Simulation et de l'Information)

Les Supercomputers TERA 1, 10 , 100

Merci de votre attention