

**Expériences de Dynamique Moléculaire
ab initio
sur le mésocentre Phynum.CIMENT**

**Alain Pasturel
(CNRS.Grenoble)**

alain.pasturel@grenoble.cnrs.fr

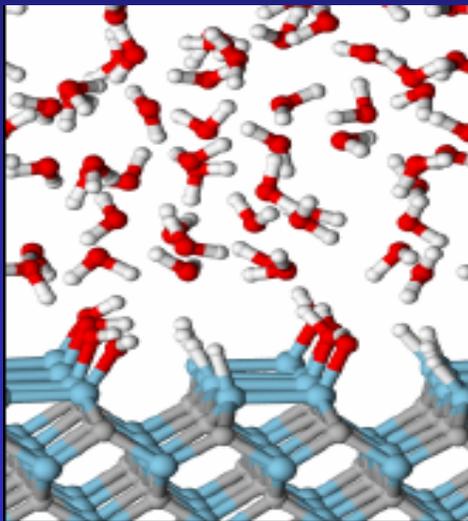
PLAN

1. **Dynamique Moléculaire ab initio: Définition et applications.**
2. **Algorithmes et parallélisation:
DFT et code ab initio VASP.**
3. **DMAI et plateforme Phynum.CIMENT:
Les clefs du succès.**

Dynamique Moléculaire ab initio

Dynamique Moléculaire: une méthode de simulation à l'échelle moléculaire

- calcule la trajectoire des atomes
- extrait l'information statistique à partir des trajectoires



les atomes obéissent à la loi de Newton:

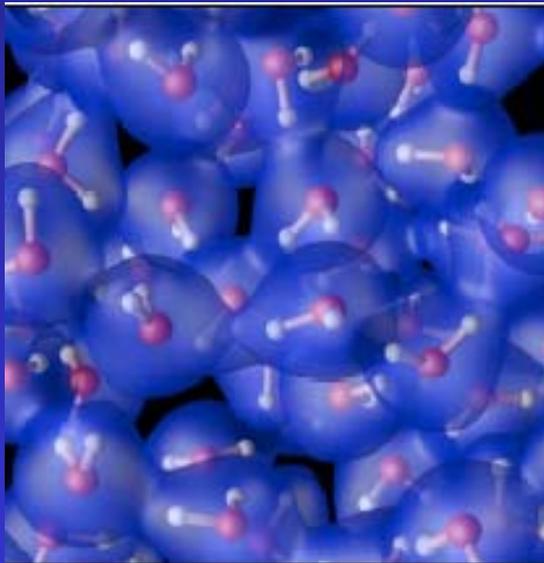
$$m_i \ddot{\mathbf{R}}_i = \mathbf{F}_i$$

Réactivité d' une surface de SiC
vis à vis de molécules d'eau

Dynamique Moléculaire ab initio

Pourquoi l' ab initio ou les Premiers Principes ???

- Evite les modèles empiriques pour le calcul des forces interatomiques
- Utilise la Mécanique Quantique (Equation de Schrödinger)
- Décrit les ions et les électrons de manière consistante et simultanément.



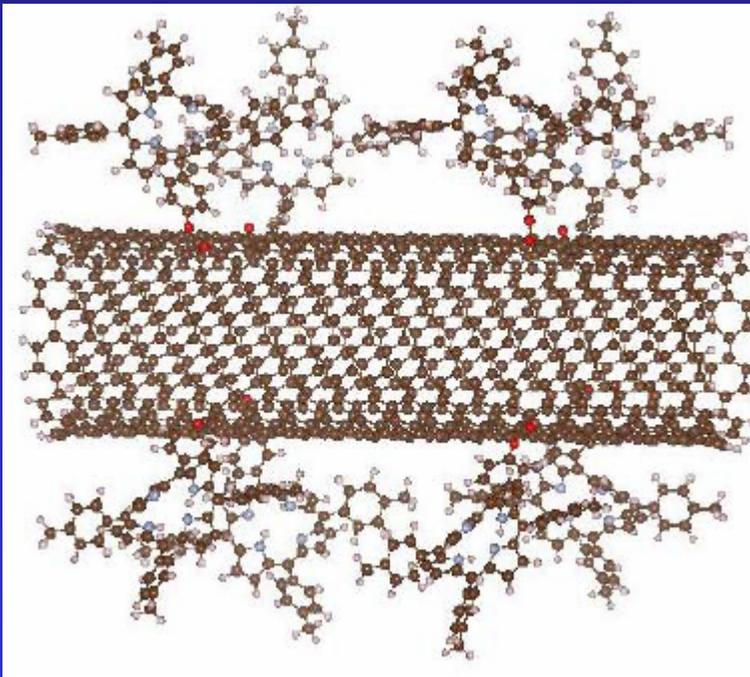
A chaque étape de temps:

- Calcule la structure électronique
- Dérive les forces interatomiques
- Déplace les atomes

DMAI : Applications

Nanosciences:

- DMAI décrit les relations complexes qui existent entre les propriétés chimiques, électroniques et optiques



projet ETSF/Nanostar:

<http://etsf.grenoble.cnrs.fr>

Ex: Applications pour l'énergie solaire:
Molécules de Porphyrine sont des
absorbeurs de lumière
Nanotube sert de conducteur.

DMAI : Applications

Matériaux sous conditions extrêmes:

- DMAI modélise les premiers stades de la solidification à partir de liquides métastables en surfusion:

Recherche de nouveaux matériaux
(Techniques expérimentales très coûteuses)



Ab Initio: Théorie de la Fonctionnelle de la Densité

- * Formalisme de Kohn-Sham pour calculer la structure électronique à partir des premiers principes (Méthode DFT: ~ 75 % des codes au CT9)
 - Implémentation la plus standard: fonction d'onde monoélectronique décrite par une base d'ondes planes.
 - Méthode utilisée dans VASP, CASTEP, Ab Init, CPMD, QE, ...

* Etapes importantes d'un algorithme d'ondes planes DFT:

- 3D FFT:

complexité: $O(N_{\text{atomes}}^2)$

- Diagonalisation dans un sous-espace:

complexité: $O(N_{\text{atomes}}^3)$

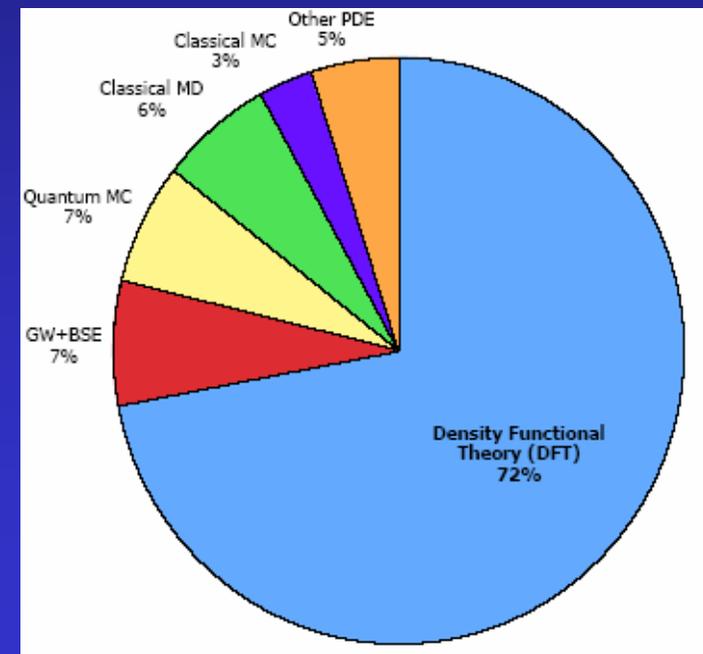
- Orthogonalisation

dominé par BLAS3

complexité: $O(N_{\text{atomes}}^3)$

- Non localité du Pseudopotentiel

complexité: $O(N_{\text{atomes}}^3)$



Code DFT standard: Caractéristiques Algorithmiques

- Petits Systèmes (600 a 1000 atomes) :
 - BLAS est le facteur limitant à faible taux de parallélisation.
 - 3D FFT devient limitant quand la parallélisation augmente
(taille du message: **solution**: augmenter la mémoire par processeur)
- Grands Systèmes (> 1000 atomes) :
 - Orthogonalisation et la non localité du pseudopotentiel deviennent le facteur limitant
- Complexité $O(N^3)$:
Passer du Teraflop au Petaflop conduit à une augmentation de la taille des systèmes de 1000 à 4000 atomes.
- Future: Réécriture complète des codes : **passage à l'ordre N**

Exemple: Code ab initio VASP <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp>

DFT selon KohnSham:

* densité électronique et l'énergie cinétique du gaz d'électrons obtenus à partir de fonctions d'onde monoélectronique:

$$\rho^{\text{tot}}(\mathbf{r}) = 2 \sum_{n=1}^{N_e/2} |\psi_n(\mathbf{r})|^2 + \rho^{\text{ion}}(\mathbf{r}), \quad N_e \text{ number of electrons}$$
$$-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m_e} 2 \sum_{n=1}^{N_e/2} \int \psi_n(\mathbf{r})^* \nabla^2 \psi_n(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}}_{\text{kinetic energy}} + \underbrace{\frac{1}{2} \int \frac{\rho^{\text{tot}}(\mathbf{r}) \rho^{\text{tot}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}'}_{\text{electrost. energy}} + \underbrace{E_{xc}[\rho(\mathbf{r})]}_{\text{LDA/GGA}}$$

La Fonctionnelle de KS présente un minimum pour l'état fondamental électronique

Détermination de l'état fondamental de Kohn Sham

- Minimisation directe de la Fonctionnelle (Car Parrinello):

Choix d'un jeu de fonctions d'ondes $\{\psi_n(\mathbf{r}) | n = 1, \dots, N_e/2\}$ et on minimise la valeur de la fonctionnelle :

$$\text{Gradient: } F_n(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V^{\text{eff}}(\mathbf{r}, \{\psi_n(\mathbf{r}')\}) - \varepsilon_n \right) \psi_n(\mathbf{r})$$

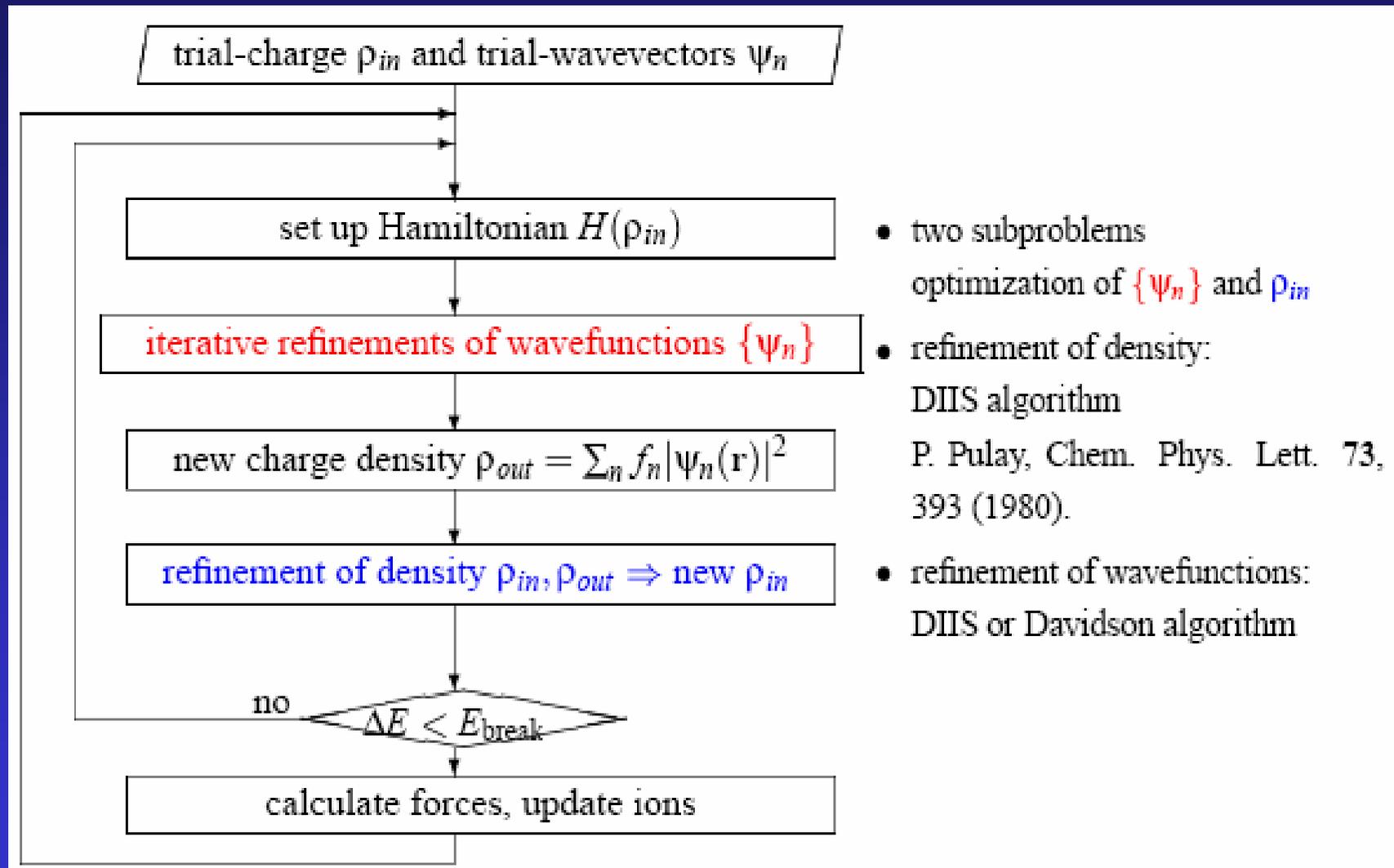
- Méthode d'itération (VASP):

Choix d'une densité de charge, résolution de l'équation de KS pour obtenir les fonctions d'onde

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V^{\text{eff}}(\mathbf{r}, \{\rho(\mathbf{r}')\}) \right) \psi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad n = 1, \dots, N_e/2$$

On obtient une nouvelle densité de charge $\rho(\mathbf{r}) = \sum_n |\psi_n(\mathbf{r})|^2$ et on itère.

Schéma de fonctionnement de VASP



Algorithme DIIS: Méthode de diagonalisation itérative

Procédure en trois étapes:

Jeu de fonctions d'ondes $\{\psi_n | n = 1, \dots, N_{\text{bands}}\}$ qui représentent les électrons

1. Optimisation de type Rayleigh Ritz dans l'espace défini par les bandes (rotation « sous espace »):

Transformation des fonctions d'onde :

$$\langle \psi_n | \mathbf{H} | \psi_m \rangle = \delta_{nm} \bar{\epsilon}_n$$

Algo: EDDIAG:

2. Optimisation de chaque vecteur individuellement :

Minimise la norme du vecteur résiduel:

$$|R(\psi_n)\rangle = (\mathbf{H} - \epsilon_{\text{app}} \mathbf{S}) |\psi_n\rangle \quad \langle R(\psi_n) | R(\psi_n) \rangle \rightarrow \text{minimal}$$

Algo: RMM DIIS:

3. Orthogonalisation des fonctions d'onde:

Méthode de Gram-Schmidt

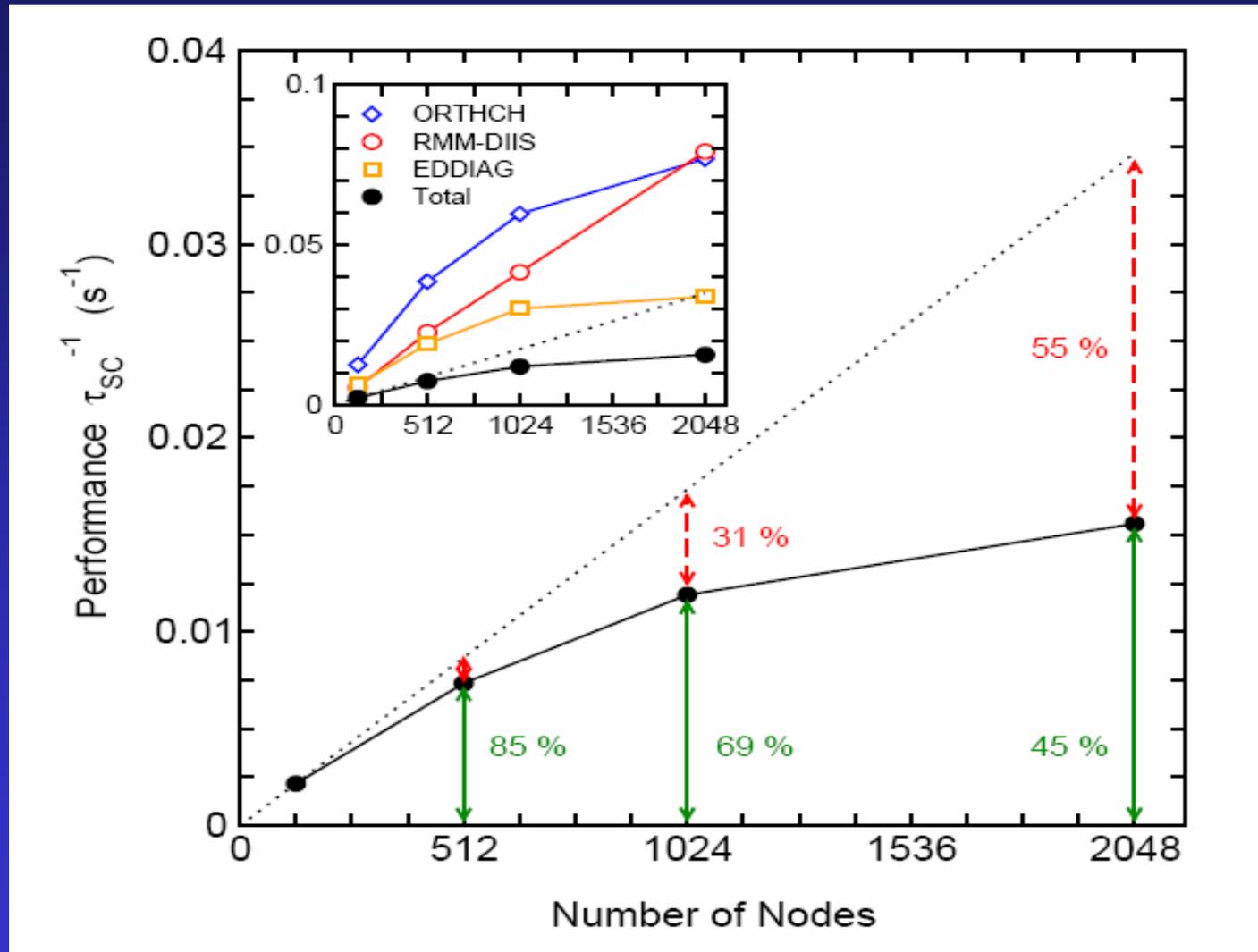
Algo: ORTHCH

Paramètres de VASP (Fortran 90, MPI)

- **Choix de l'algorithme :**
 - **ALGO=normal:** **Blocked Davidson**
 - **ALGO=Very_Fast:** **RMM DIIS**
 - **ALGO=Fast:** **Davdison+ RMM DIIS**
- **NPAR (couplé à RMM DIIS)**
 - Permet d'optimiser la parallélisation sur les bandes (Nband)
 - Essentiel pour RMM DIIS**
 - Valeurs optimales: ~ NP/16**
- **LscaLAPACK, LscaLU:**
(Orthogonalisation, Diagonalisation: ORTHCH, EDDIAG)
- **MPI_BLOCK:**

Exemple : Agrégat de 561 atomes de Fer sur IBM Blue Gene/L

M.E.Gruner et al. Univ. de Duisburg



VASP et la plateforme Phynum.CIMENT

Clefs du succès

Healthphy

Machine hybride SGI Altix 450

SGI ALTIX 450Partie Itanium2:

72 coeurs IA64 1,6Ghz avec 9M cache/core (18 noeuds biitanium bicore)

144 Go de RAM partagée (8 Go/noeud) réseau Numalink

Partie Xeon:

28 coeurs EM64T 3Ghz Xeon Woodcrest (7 noeuds bixeon bicore)

8Go de RAM par noeud

Stockage: 6To

Réseaux: Gigabit Ethernet et NUMALINK (partie Itanium)

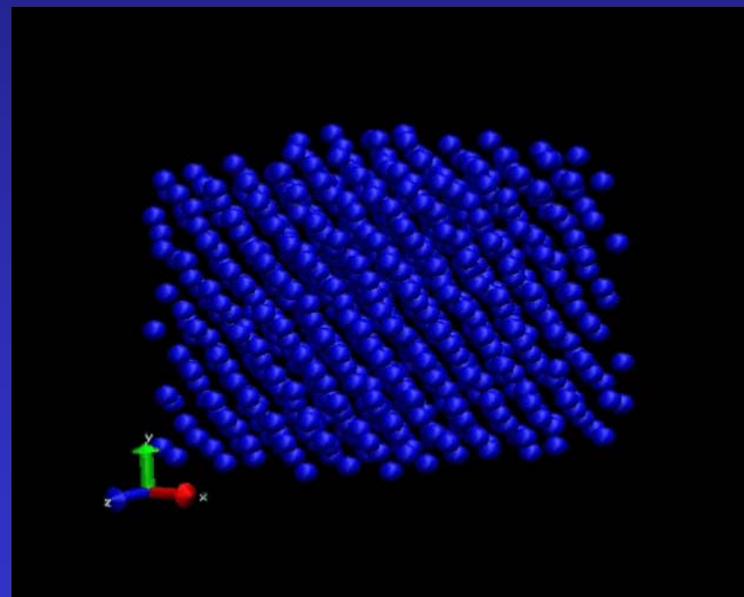
Mise en production: Janvier 2007

VASP et la plateforme Phynum.CIMENT

Clefs du succès

**DMAI à des échelles de temps important:
DFT conventionnelle encore essentielle**

- Adéquation du choix architectural et du code (AltixSGI et Vasp)
- Optimisation de la gestion de la soumission: très longs calculs
- Développement de codes :
interface DM/ DMAI (PRL 99.205702.2007)
(Force Matching, Learning on the Fly,)
- Traitement des données
en cours d'exploitation (Visualisation)



**Projet DMAI:
500 000 heures (equi. Power4) / an**

Clefs du succès : Suite

COMPETENCES et EXPERTISES LOCALES:

(Françoise Berthoud et Bruno Bzeznik)

Appel d'offres, Administration des Machines,
Gestion des Ressources ,

LE SUCCES APPELLE LE SUCCES

Structure fédérative pour la Physique Numérique
à Grenoble (Universités, CNRS)

Label RTRA > Projet Nanostar (plateforme ETSF)

Projets ANR

Projets Région (Clusters, CIRA,)