

Présentation du CT8 Chimie Quantique et Modélisation Moléculaire

Marie-Bernadette Lepetit
Institut Néel, Grenoble

Journée logiciels de chimie à l'IDRIS, Orsay 28 juin 2013

Plan de l'intervention

- Un panorama thématique du Comité Thématique 8 (CT8)
- Caractéristiques des demandes au CT8
- Spécificité des codes et méthodes
- Spécificité de la communauté
- Les avancées récentes

Un panorama du CT8

Les thématiques

Les thématiques tels que définies dans le CT8
Une vision trop restrictive par rapport à la réalité

Les objets

- Propriétés électroniques des molécules → De moins en moins
- Etat liquide → Très peu

En fait la majorité des projets

- nanoparticules, agrégats, biomolécules
- surfaces et interfaces seules ou en interaction (molécules, gaz, liquide, etc.)
- solides et matériaux

Un panorama du CT8

Les thématiques : une vision trop restrictive

Les problèmes

- Propriétés électroniques des molécules
- Structures
- Réactivité
- Solvatation → Très peu
- Diffusion moléculaire → Très peu
- Collisions (molécules-ions, électrons) → Très peu
- Dynamique quantique
- Evolution d'un paquet d'ondes → Très peu

Mais aussi

- (Ro-)vibrations et phonons
- Excitations (photochimie, photovoltaïque, etc. . .)
- Magnétisme
- Propriétés thermodynamiques (entropie)
(thermoélectricité, thermochimie, thermocinétique, etc. . .)

Un panorama du CT8

Les thématiques : une vision trop restrictive

- Calculs ab initio
- Calculs semi-empiriques
- Dynamique quantique (Car-Parinello)
- Calculs Monte-Carlo quantique (Méthodes QMC)

Les caractéristiques des demandes du CT8

- Très nombreuses, 2013 : 114 demandes
 - Ess^t sur Ada et Jade
(90% des demandes, 5% demandes prod sur Turing)

Ada	Turing	Yoda	Jade
26,5%	31,4%	1,4%	23,1%

Curie nl	Curie nf	Curie gpu	Titane	Titane gpu
2,2%	9,5%	0%	5,6%	0,3%

- De taille modérées $\sim 200\,000h$ ($\sim 15\% > 300\,000h$)
- Implique une grande majorité de la communauté française

Les caractéristiques du CT8

- Une grande diversité de thématiques
- Une grande diversité de logiciels
 - Majorité de codes faiblement parallélisés
 - Certains type de calculs : grand volume d'I/O temp.
 - Pas toujours aisés à installer
 - Importance de l'aide aux utilisateurs
 - Importance d'avoir un interlocuteur spécialisé ds les codes de chimie
- Très grande importance de la logithèque
 - ↘ des coûts des laboratoires
 - ↘ des coûts globaux au niveau national
 - Disponibilité de codes autrement inaccessibles (tests, cas particuliers,...)
 - Accessibilité à des non spécialistes

→ **Rôle clef de l'IDRIS**

Importance cruciale de la logithèque

Gratuits

- Abinit
- CHARMM
- CP2K
- CPMD
- DeMon
- GAMESS
- GROMACS
- GULP
- Lammps
- NAMD
- NWChem
- Quantum Espresso
- Siesta

Payant / gpe

- ADF 1800 €
- AMBER 400 \$
- Crystal 2000 €
- Gaussian 6900 \$
- JAGUAR
- Molcas 20 000 SEK
- Molpro 2500 £
- Suite Schrodinger
- VASP

??

- Abaqus
- Fluent
- Materials Studio
- NumPy
- OpenFOAM

Spécificités des codes et méthodes

Des spécificités

- Un grand nombre de progiciels avec des recouvrements mais des complémentarités
 - Etat fondamental / excitations
 - Gradients et dérivées secondes
 - Taille des systèmes
(petites molécules, grosses molécules, systèmes périodiques)
 - Structure électronique / dynamique
 - Accès à différentes propriétés
- Un temps d'adaptation sans commune mesure avec l'évolution matérielle
Un cas favorable (financement, ingénieurs à disposition etc.) : Gaussian
 - 40 ans de travail
 - 52 chercheurs participants
 - 79 composantes (HF, DFT, CCSD, MRCI, CASSCF, etc...)
dans le progicielet pourtant . . .

Spécificités de la communauté

Une communauté structurée

- Qq groupes de recherche internationaux dédiés au développement des codes
- Qq groupes qui développent des méthodes et les utilisent (mais pas toujours les codes)
- Une majorité de groupes uniquement utilisateurs

Des spécificités

- Peu de contrôle des utilisateurs sur les codes
(codes commerciaux, gros progiciels complexes, nombreuses fonctionnalités, sources non diffusées, etc. . .)
- Une histoire : des années de développement, anciennes routines

Spécificités de la communauté

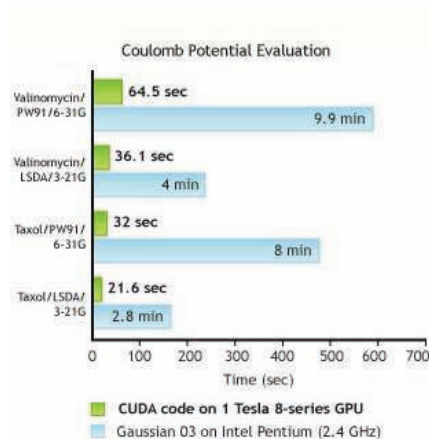
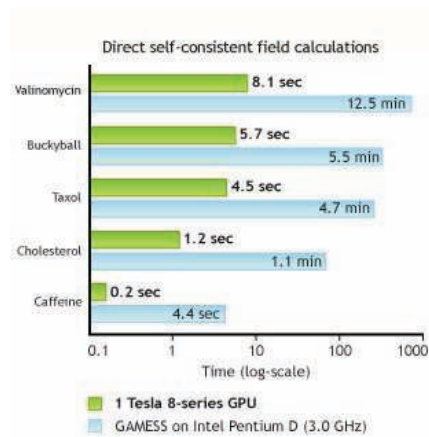
- Peu d'implication de la communauté française de chimie dans le développement des codes
- Plus d'implication des physiciens mais
 - pas de codes en fonction d'onde
 - pas de dynamique
 - essentiellement codes périodiques
 - manque des fonctionnalités nécessaires aux chimistes

Un besoin d'investissement de la communauté dans le développement de nouveaux codes ?

Les avancées récentes

Vers les GPU

- Nvidia porte un certain nombre de codes de chimie quantique sur GPU
 - Gaussian
 - Gamess

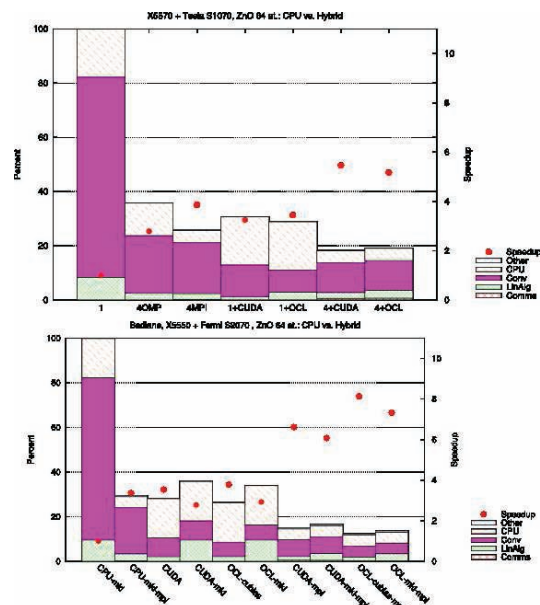


Les avancées récentes

Vers les GPU

- Big DFT¹

- Ondelettes
- 0D, 1D, 2D, 3D
- Opt. géom
- Vibrations



1. L. Genovese *et al.*, Comptes Rendus Mécanique, Vol. 339, p. 149-164 (2011)

MB Lepetit *et al*

CT8

Les avancées récentes

Vers le massivement parallèle

- Version MPP de CRYSTAL (DFT) (BlueGene)²
 - 100 000 orbitales atomiques
 - 8000 atomes
 - 2048 cœurs
 - sans symétrie

2. R. Orlando *et al.*, J. Comp. Chem. **33**, 2276(2012)

MB Lepetit *et al*

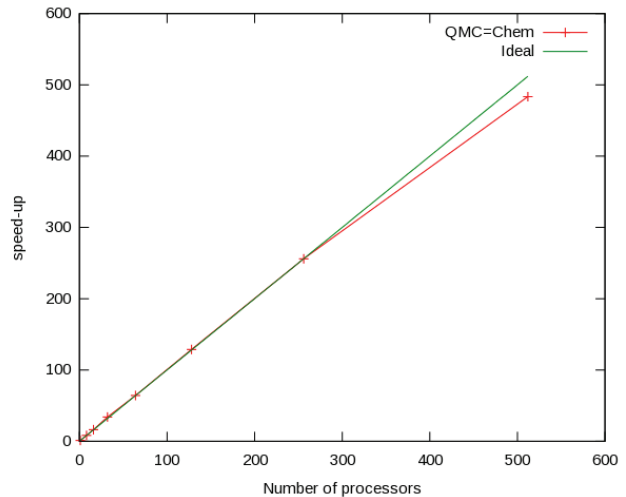
CT8

Les avancées récentes

Vers le massivement parallèle

- Monte-Carlo Quantique : QMCCChem

- 10 000 cœurs
- Etat fond.



Les avancées récentes

Vers le massivement parallèle

- Un changement de paradigme pour les IC³
 - Méthodes stochastiques pour les diagonalisation
 - FCI implémenté dans MOLPRO (FCIQMC)
 - Petites et moyennes molécules
 - 10¹⁵ déterminants
 - Erreurs stat. < 1mH \simeq 30meV

3. G. H. Booth *et al.*, J. Chem. Phys. **131**, 054106 (2009) ;
D. M. Cleland *et al.*, J. Chem. Phys. **134**, 024112 (2011) ;
G. H. Booth *et al.*, J. Chem. Phys. **135**, 084104 (2011).