

# SPhN - Calculs HPC

Benjamin Bally  
(représentant V. Somà)

Journée HPC - DRF - 25 Mai 2016

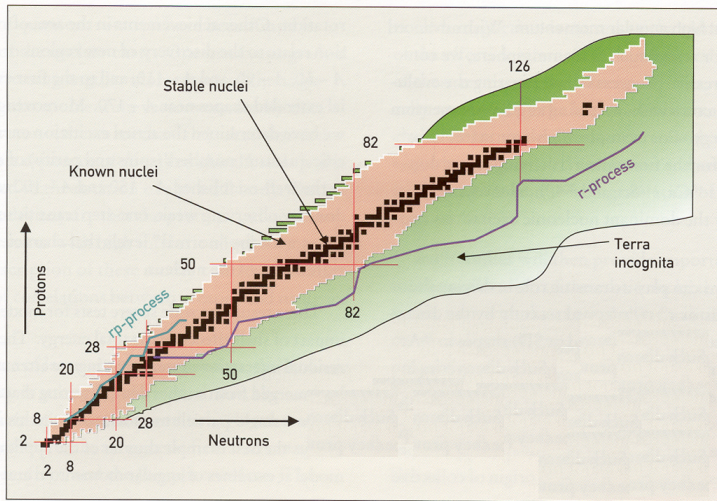


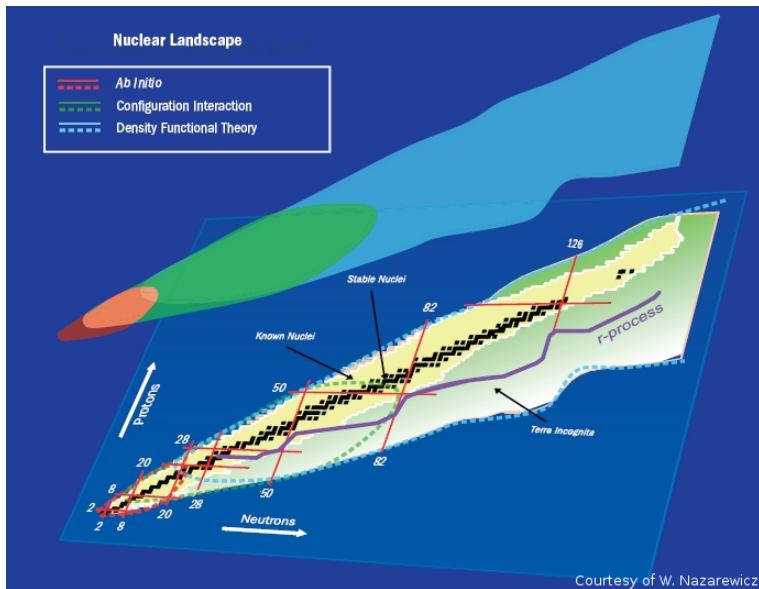
## Structure du nucléon

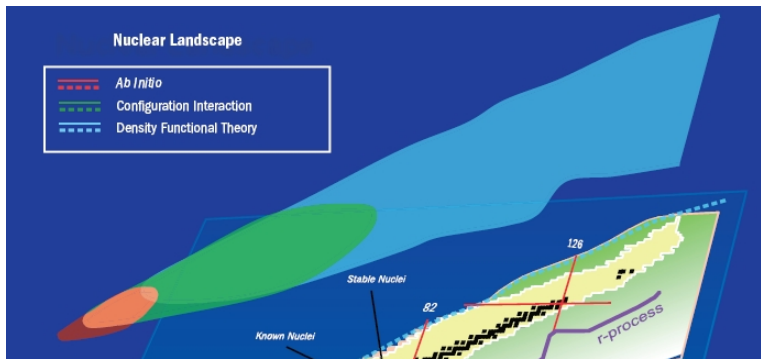
- Lattice QCD
- Présentation T. Metivet à la journée HPC DSM 2015
- P.A.M. Guichon (permanent)

## Structure nucléaire

- Problème quantique à  $N$  fermions fortement corrélés
- V. Somà (permanent)  
B. Bally & M. Martini (postdocs ESNT)  
M. Drissi & P. Arthuis (thésards)

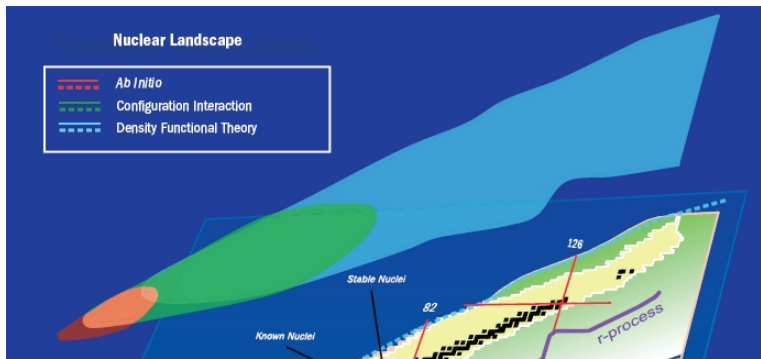






## Ab initio

- Résolution équation de Schrödinger (potentiellement) exacte
- Interaction entre nucléons ← approx. QCD
- Prédicativité et contrôle de l'erreur
- Importants développements formels et numériques



## Energy density functional (EDF)

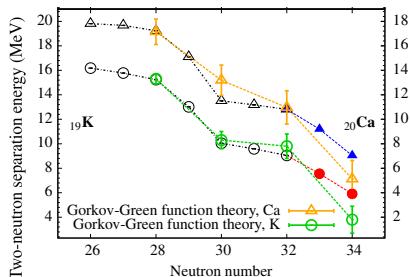
- Méthode microscopique mais effective
- Ajustement de paramètres ( $\sim 10$ ) aux données exp.
- Intégralité de la carte des noyaux
- Importants développements numériques

## Self-consistent Gorkov Green's functions (SCGGF)

- V. Somà + arrivée M. Drissi en thèse
- SPhN (avec collab. étrangers) en leader !

## Aspects numériques

- Codes Fortran et C++
- Parallélisation avec **MPI**
- 1.5 Mh sur Curie cette année



Phys. Rev. Lett. 114, 202501 (2015)

- Énergie de séparation de deux neutrons

$$S_{2n}(Z, N) = B(Z, N) - B(Z, N - 2)$$

- Estimation de l'erreur → nécessite plusieurs calculs
- Accès à des régions de masses plus importantes



## Les Hommes

- B. Bally & M. Martini (postdocs ESNT)

## Les Principes

- Modèle microscopique mais effectif
- Plus avantageux numériquement
- Large rayon d'action :
  - Intégralité de la carte des noyaux
  - Observables : masse, spectroscopie, fission, désintégration  $\beta$ , interaction neutrino-noyau ...
  - Versions dépendantes du temps  $\rightarrow$  réactions nucléaires
- Historiquement, un point fort du CEA!  
(ex-DSM et DAM)

## Problématique HPC

- Problème aux valeurs propres généralisés (hermitien)

$$Hx = eNx$$

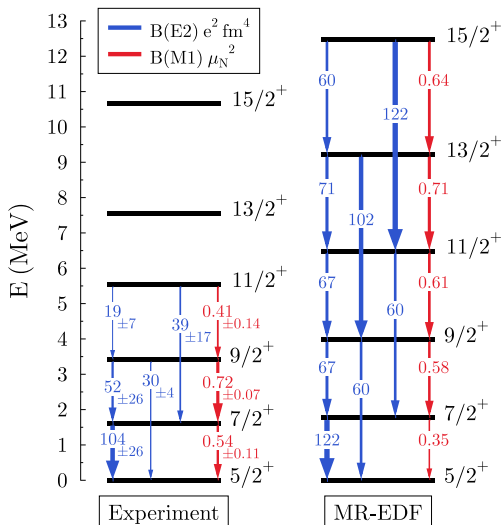
- $H_{ij}$  et  $N_{ij}$  indépendants pour  $i, j \in \llbracket 1, n \rrbracket^2$   
 $\Rightarrow$  parallélisation triviale des tâches
- Éléments de matrice de la forme

$$H_{ij} \sim \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin(\beta) \int_0^{4\pi} d\gamma \langle i | \hat{H} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j \rangle$$

$(\alpha, \beta, \gamma)$  indépendants  $\Rightarrow$  « embarrassingly parallel » **MPI**

- Temps de calcul

$$T_{total} = \underbrace{\frac{n(n+1)}{2}}_{\sim 100 - 5000} \times \underbrace{N_\alpha \times N_\beta \times N_\gamma}_{\sim 4000} \times \underbrace{T(\langle i | \hat{H} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j \rangle)}_{\sim 10 \text{ sec} - 10 \text{ heures}}$$



Phys. Rev. Lett. 113, 162501 (2014)

- Physique nucléaire théorique → domaine de recherche très actif
- Différentes méthodes pour différents objectifs : précision, prédictibilité, masse, observables ...
- Forts besoins en HPC ...
- ... et surtout en physiciens !
- Collaboration avec la DAM (surtout méthodes EDF)