

## Physique Chimie et Simulations Numériques

*Germain Salvato Vallverdu*

*germain.vallverdu@univ-pau.fr*

**Germain Salvato Vallverdu**

Institut des Sciences Analytiques et de Physico-Chimie  
pour l'Environnement et les Matériaux

14 Juin 2022



# PLAN

- 1 **Chimie théorique et simulations numériques**
- 2 **Trajectoire d'un projectile**
  - Modèle sans frottements - Chute libre
  - Modèle avec frottements - cas simple
  - Modèle avec force de traînée - cas turbulent
  - Résolution numérique du problème
- 3 **Simulations numériques du Méthane**
  - Thermodynamique Statistique
  - Le modèle
  - Quelques résultats
- 4 **High Performance Computing**
- 5 **Simulations numériques de systèmes complexes**
- 6 **Simulations de modèles réactifs (ReaxFF)**



# PLAN

- 1 Chimie théorique et simulations numériques
- 2 Trajectoire d'un projectile
- 3 Simulations numériques du Méthane
- 4 High Performance Computing
- 5 Simulations numériques de systèmes complexes
- 6 Simulations de modèles réactifs (ReaxFF)



# Chimie Théorique et Simulations Numériques

*Du multi-disciplinaire dans une discipline*

o Contents

● CTh SiNum

o Baseball

Chute libre

Stockes

Turbulent

App. Numérique

o Méthane

Stat.Mech.

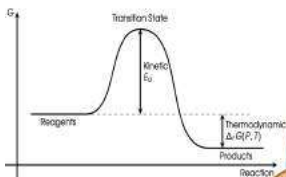
Modèle

Résultats

o HPC

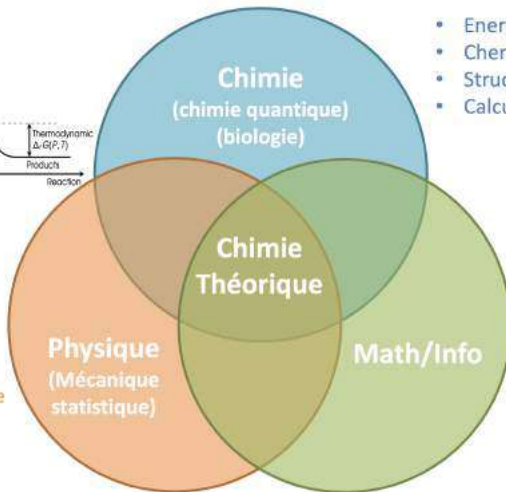
o Asphaltènes

o Reax



- Energie d'activation
- Chemin de réaction
- Structure électronique
- Calculs de références

- Moyenne d'ensemble
- Entropie
- Thermodynamique



- Analyse de données
- Modèles
- Paramètres

# Chimie Théorique et Simulations Numériques

*Du multi-disciplinaire dans une discipline*

o Contents

● CTh SiNum

o Baseball

Chute libre

Stockes

Turbulent

App. Numérique

o Méthane

Stat.Mech.

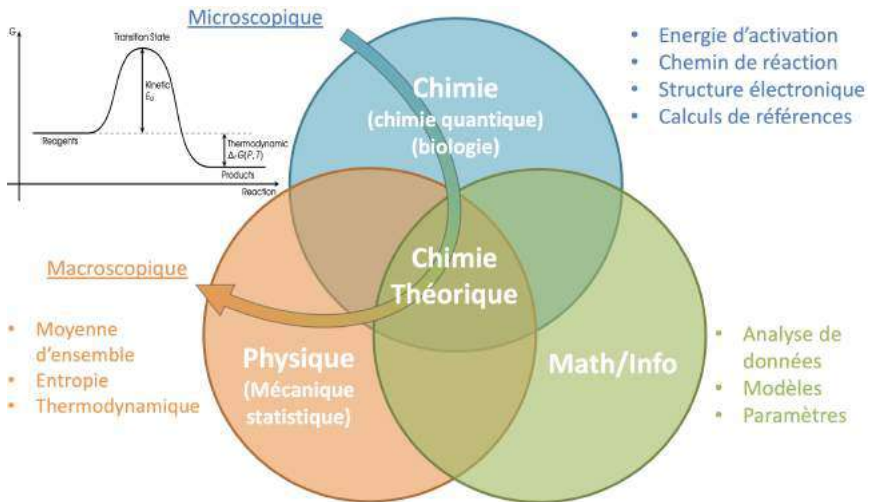
Modèle

Résultats

o HPC

o Asphaltènes

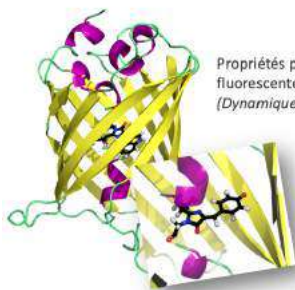
o Reax



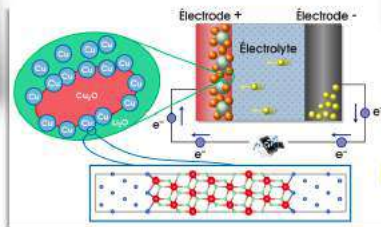
# Exemples de sujet de recherche

Concerne de nombreux champs disciplinaires

- o Contents
- CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltènes
- o Reax

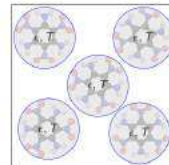


Propriétés photophysiques de protéines fluorescentes  
(Dynamique, photochimie, spectre UV-visible)



Développement et implémentation de la méthode DPDE (TGCC Curie)

Propagation d'ondes de choc réactives



$$m \, dv = -\nabla U(x^n) dt - \xi v dt + \sigma dW$$

Matériaux pour les batteries Li-ion  
(couplage expérience théorie)



## Domaines variés

- Molécules, matériaux
- Biologie, batterie lithium, matériaux énergétiques, fluides pétroliers
- Chimie quantique, mécanique moléculaire, modèles mésoscopiques

Simulation numériques

Germain Salvato Vallverdu, IPREM

14 Juin 2022

# PLAN

- ① Chimie théorique et simulations numériques
- ② **Trajectoire d'un projectile**
  - Modèle sans frottements - Chute libre
  - Modèle avec frottements - cas simple
  - Modèle avec force de traînée - cas turbulent
  - Résolution numérique du problème
- ③ Simulations numériques du Méthane
- ④ High Performance Computing
- ⑤ Simulations numériques de systèmes complexes
- ⑥ Simulations de modèles réactifs (ReaxFF)



# Trajectoire d'un projectile

Exemple sur un sujet "classique" de Terminale

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

## Résolution : Version simple

On considère

- un point de masse  $m$
- un référentiel terrestre  $\mathcal{R}$ , supposé Galiléen.
- le système n'est soumis qu'à la force de pesanteur  $\vec{P} = m\vec{g}$ .

$$m\vec{a} = \vec{P} = m\vec{g}$$

$$\begin{cases} a_x = 0 \\ a_z = -g \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = 0 \\ \frac{dv_z}{dt} = -g \end{cases}$$

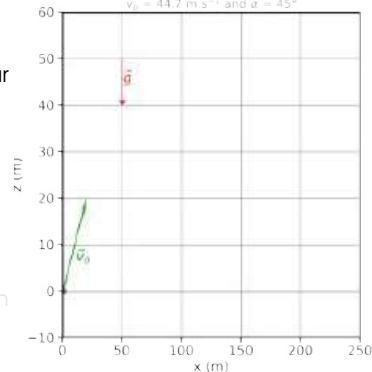
Avec  $\alpha$  l'angle entre la vitesse initiale et l'axe (Ox). En posant  $x_0 = 0$ , on obtient :

$$z = -\frac{gx^2}{2v_0^2 \cos^2 \alpha} + X \tan \alpha + z_0$$

## Schéma

Baseball Home Run

$v_0 = 44.7 \text{ m.s}^{-1}$  and  $\alpha = 45^\circ$





# Trajectoire d'un projectile

Exemple sur un sujet "classique" de Terminale

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

## Résolution : Version simple

On considère

- un point de masse  $m$
- un référentiel terrestre  $\mathcal{R}$ , supposé Galiléen.
- le système n'est soumis qu'à la force de pesanteur  $\vec{P} = m\vec{g}$ .

$$m\vec{a} = \vec{P} = m\vec{g}$$

$$\begin{cases} a_x = 0 \\ a_z = -g \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = 0 \\ \frac{dv_z}{dt} = -g \end{cases}$$

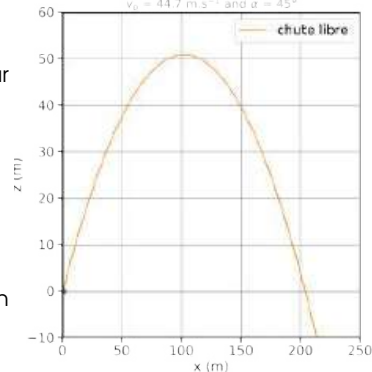
Avec  $\alpha$  l'angle entre la vitesse initiale et l'axe (Ox). En posant  $x_0 = 0$ , on obtient :

$$z = -\frac{gx^2}{2v_0^2 \cos^2 \alpha} + x \tan \alpha + z_0$$

## Schéma

Baseball Home Run

$v_0 = 44.7 \text{ m s}^{-1}$  and  $\alpha = 45^\circ$



# Trajectoire d'un projectile

Exemple sur un sujet "classique" de Terminale

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

## Résolution : Avec résistance de l'air

On considère

- une sphère de masse  $m$  et de diamètre  $D$
- un référentiel terrestre  $\mathcal{R}$ , supposé Galiléen.
- le système est soumis
  - à la force de pesanteur  $\vec{P} = m\vec{g}$
  - à une force de traînée  $\vec{F}_T = -k\vec{v}$   
 $k = 3\pi\eta D$

$$m\vec{a} = \vec{P} + \vec{F}_T = m\vec{g} - k\vec{v}$$

$$\begin{cases} a_x = -\frac{k}{m}v_x & \begin{cases} \frac{dv_x}{dt} + \frac{k}{m}v_x = 0 \\ \frac{dv_z}{dt} + \frac{k}{m}v_z = -g \end{cases} \\ a_z = -g - \frac{k}{m}v_z \end{cases}$$

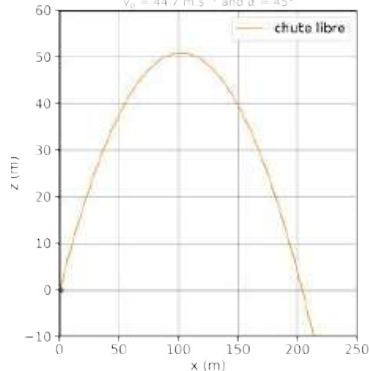
Solution :

$$\begin{cases} x(t) = \frac{m}{k}v_x^{(0)} \left(1 - \exp\left(-\frac{k}{m}t\right)\right) \\ y(t) = -\frac{mg}{k}t + \frac{m}{k} \left(v_y^{(0)} + \frac{mg}{k}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{k}{m}t\right)\right) \end{cases}$$

## Schéma

Baseball Home Run

$v_0 = 44.7 \text{ m s}^{-1}$  and  $\alpha = 45^\circ$



Cas d'un écoulement de Stokes  
 $Re \ll 1$

# Trajectoire d'un projectile

Exemple sur un sujet "classique" de Terminale

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

## Résolution : Avec résistance de l'air

On considère

- une sphère de masse  $m$  et de diamètre  $D$
- un référentiel terrestre  $\mathcal{R}$ , supposé Galiléen.
- le système est soumis
  - à la force de pesanteur  $\vec{P} = m\vec{g}$
  - à une force de traînée  $\vec{F}_T = -k\vec{v}$   
 $k = 3\pi\eta D$

$$m\vec{a} = \vec{P} + \vec{F}_T = m\vec{g} - k\vec{v}$$

$$\begin{cases} a_x = -\frac{k}{m}v_x & \left\{ \begin{array}{l} \frac{dv_x}{dt} + \frac{k}{m}v_x = 0 \\ \frac{dv_z}{dt} + \frac{k}{m}v_z = -g \end{array} \right. \\ a_z = -g - \frac{k}{m}v_z \end{cases}$$

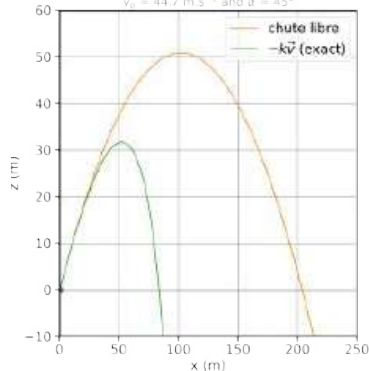
Solution :

$$\begin{cases} x(t) = \frac{m}{k}v_x^{(0)} \left( 1 - \exp\left(-\frac{k}{m}t\right) \right) \\ y(t) = -\frac{mg}{k}t + \frac{m}{k} \left( v_y^{(0)} + \frac{mg}{k} \right) \left( 1 - \exp\left(-\frac{k}{m}t\right) \right) \end{cases}$$

## Schéma

Baseball Home Run

$v_0 = 44.7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  and  $\alpha = 45^\circ$



Cas d'un écoulement de Stokes  
 $Re \ll 1$

# Trajectoire d'un projectile

Exemple sur un sujet "classique" de Terminale

- o Contents
- o CTH SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

## Résolution : Avec résistance de l'air

On considère

- une sphère de masse  $m$  et diamètre  $D$
- un référentiel terrestre  $\mathcal{R}$ , supposé Galiléen.
- le système est soumis à

- la force de pesanteur  $\vec{P} = m\vec{g}$
- une force de traînée  $\vec{F}_T = -\frac{1}{2}\rho S C_x v\vec{v}$
- la poussée d'Archimède  $\vec{\Pi} = -\rho V\vec{g}$

$$m\vec{a} = \vec{P} + \vec{F}_T + \vec{\Pi} = m\vec{g} - \frac{1}{2}\rho S C_x v\vec{v} - \rho V\vec{g}$$

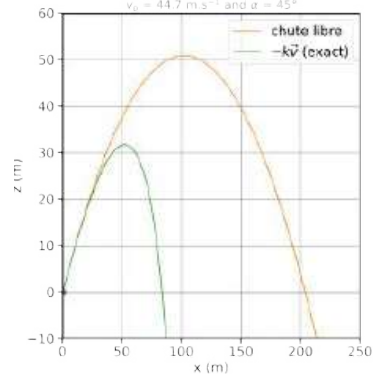
$$\begin{cases} a_x = \frac{dv_x}{dt} = -\frac{\rho S C_x}{2m} v v_x \\ a_z = \frac{dv_z}{dt} = -g + \frac{\rho V g}{m} - \frac{\rho S C_x}{2m} v v_y \end{cases}$$

Pas de solution analytique

## Schéma

Baseball Home Run

$v_0 = 44.7 \text{ m s}^{-1}$  and  $\alpha = 45^\circ$



Cas d'un écoulement turbulent

$$Re > 2000$$

(baseball  $Re = 2.1 \times 10^5$ )

# Trajectoire d'un projectile

Exemple sur un sujet "classique" de Terminale

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

## Résolution : Avec résistance de l'air

On considère

- une sphère de masse  $m$  et diamètre  $D$
- un référentiel terrestre  $\mathcal{R}$ , supposé Galiléen.
- le système est soumis à

- la force de pesanteur  $\vec{P} = m\vec{g}$
- une force de traînée  $\vec{F}_T = -\frac{1}{2}\rho S C_x v \vec{v}$
- la poussée d'Archimède  $\vec{\Pi} = -\rho V \vec{g}$

$$m\vec{a} = \vec{P} + \vec{F}_T + \vec{\Pi} = m\vec{g} - \frac{1}{2}\rho S C_x v \vec{v} - \rho V \vec{g}$$

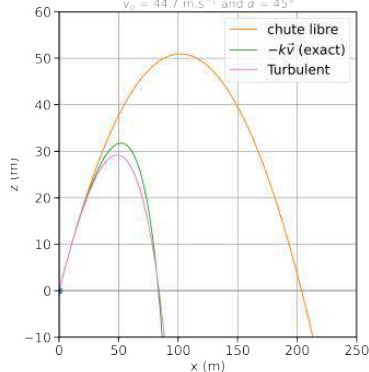
$$\begin{cases} a_x = \frac{dv_x}{dt} = -\frac{\rho S C_x}{2m} v v_x \\ a_z = \frac{dv_z}{dt} = -g + \frac{\rho V g}{m} - \frac{\rho S C_x}{2m} v v_y \end{cases}$$

Pas de solution analytique

## Schéma

Baseball Home Run

$v_0 = 44.7 \text{ m.s}^{-1}$  and  $\alpha = 45^\circ$



Cas d'un écoulement turbulent

$Re > 2000$

(baseball  $Re = 2.1 \times 10^5$ )

# Trajectoire d'un projectile

## Intégration numérique et discrétisation

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltènes
- o Reax

### Méthode d'Euler

Discrétisation du temps via un développement de Taylor.

Vitesses :

$$v_x(t + \delta t) = v_x(t) + \frac{dv_x}{dt} \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$v_x(t + \delta t) = v_x(t) + a_x(t) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$v_z(t + \delta t) = v_z(t) + \frac{dv_z}{dt} \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$v_z(t + \delta t) = v_z(t) + a_z(t) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

Positions :

$$x(t + \delta t) = x(t) + \frac{dx}{dt} \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$x(t + \delta t) = x(t) + v_x(t) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$z(t + \delta t) = z(t) + \frac{dz}{dt} \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$z(t + \delta t) = z(t) + v_z(t) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$



# Trajectoire d'un projectile

## Implémentation et algorithme

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

### Conditions initiales (initialisation)

- Positions initial
- Vitesses

### Intégration de la trajectoire (boucle)

Vitesses :

$$v_z(t + \delta t) = v_z(t) + \frac{f_z(t)}{m} \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

$$z(t + \delta t) = z(t) + v_z(t) \delta t + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

À chaque pas de temps :

- 1 Calcul des forces (dépend en général des positions)
  - 2 mise à jour des vitesses
  - 3 mise à jour des positions
- Paramètres (physique) importants :  $\delta t$ , les forces (le modèle)

# Trajectoire d'un projectile

Intégration numérique - programme python

## Python

- Syntaxe simple, lisible, facile d'utilisation, multiplateforme
- Langage de haut niveau
- Immense bibliothèque, communauté très active, de nombreuses ressources dans tous les domaines.
- Open source et gratuit.



## Implémentation en python

```
# initial conditions
positions = np.zeros((data.nstep, 2))
velocities = np.zeros((data.nstep, 2))
positions[0] = [0, zo]
velocities[0] = [vo * np.cos(alpha), vo * np.sin(alpha)]

# run
for step in range(1, data.nstep):
    # compute forces
    forces = compute_forces(positions[step - 1], velocities[step - 1])

    # update velocities
    velocities[step] = velocities[step - 1] + forces * data.dt / data.m

    # update positions
    positions[step] = positions[step - 1] + velocities[step] * data.dt
```



# Trajectoire d'un projectile

Intégration numérique - programme python

## Python

- Syntaxe simple, lisible, facile d'utilisation, multiplateforme
- Langage de haut niveau
- Immense bibliothèque, communauté très active, de nombreuses ressources dans tous les domaines.
- Open source et gratuit.



## Implémentation en python

```
# initial conditions
positions = np.zeros((data.nstep, 2))
velocities = np.zeros((data.nstep, 2))
positions[0] = [0, zo]
velocities[0] = [vo * np.cos(alpha), vo * np.sin(alpha)]

# run
for step in range(1, data.nstep):
    # compute forces
    forces = compute_forces(positions[step - 1], velocities[step - 1])

    # update velocities
    velocities[step] = velocities[step - 1] + forces * data.dt / data.m

    # update positions
    positions[step] = positions[step - 1] + velocities[step] * data.dt
```

# Trajectoire d'un projectile

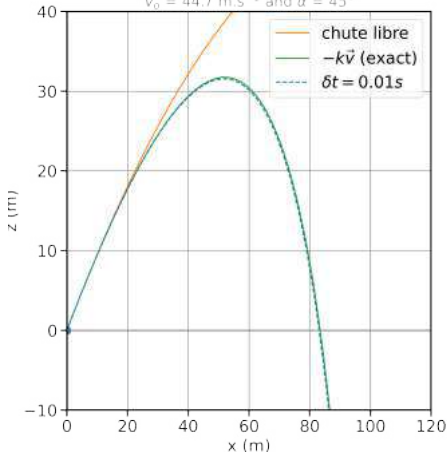
## Résultats de l'intégration numérique

- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax

### Effet du pas de temps

Baseball Home Run

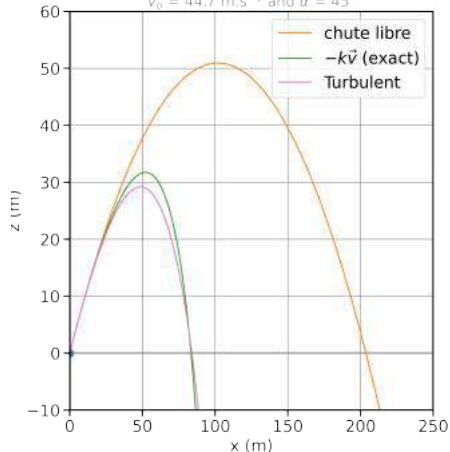
$v_0 = 44.7 \text{ m s}^{-1}$  and  $\alpha = 45^\circ$



### Comparaison

Baseball Home Run

$v_0 = 44.7 \text{ m s}^{-1}$  and  $\alpha = 45^\circ$



# PLAN

- ① Chimie théorique et simulations numériques
- ② Trajectoire d'un projectile
- ③ **Simulations numériques du Méthane**
  - Thermodynamique Statistique
  - Le modèle
  - Quelques résultats
- ④ High Performance Computing
- ⑤ Simulations numériques de systèmes complexes
- ⑥ Simulations de modèles réactifs (ReaxFF)



# Mécanique classique et mécanique statistique

Fabriquons un institut de sondage physico-chimique

- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax

## Physique (Mécanique) statistique

- Un état macroscopique correspond à un ensemble d'état microscopique
- À l'équilibre, les grandeurs thermodynamiques fluctuent autour de la valeur d'équilibre.
- Une observable se calcule comme *une moyenne d'ensemble*

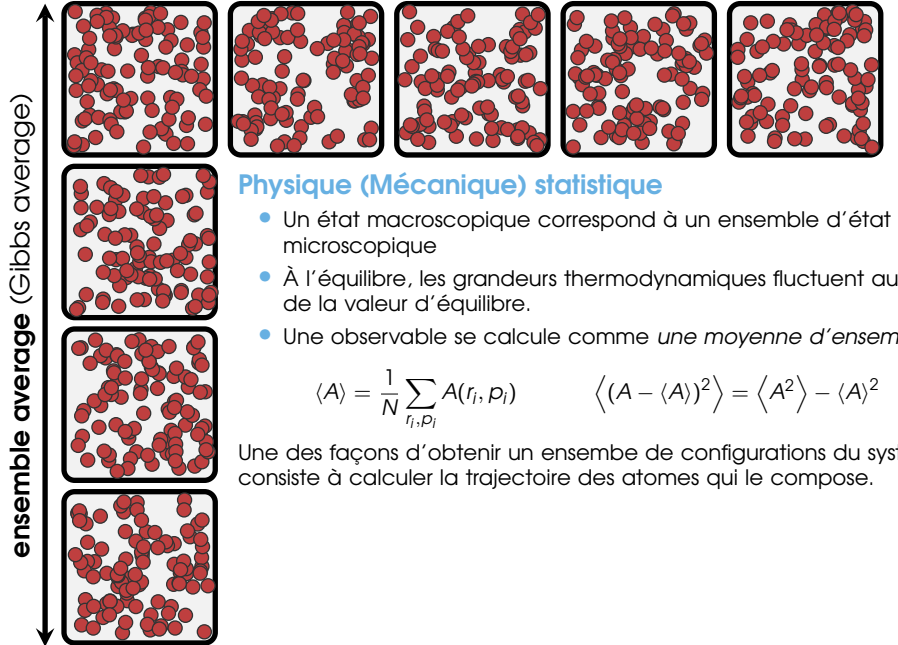
$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{r_i, p_i} A(r_i, p_i) \quad \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Une des façons d'obtenir un ensemble de configurations du système consiste à calculer la trajectoire des atomes qui le compose.

# Mécanique classique et mécanique statistique

Fabriquons un institut de sondage physico-chimique

time average (Boltzmann average)  $\rightarrow$  t



## Physique (Mécanique) statistique

- Un état macroscopique correspond à un ensemble d'état microscopique
- À l'équilibre, les grandeurs thermodynamiques fluctuent autour de la valeur d'équilibre.
- Une observable se calcule comme *une moyenne d'ensemble*

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{r_i, p_i} A(r_i, p_i) \quad \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

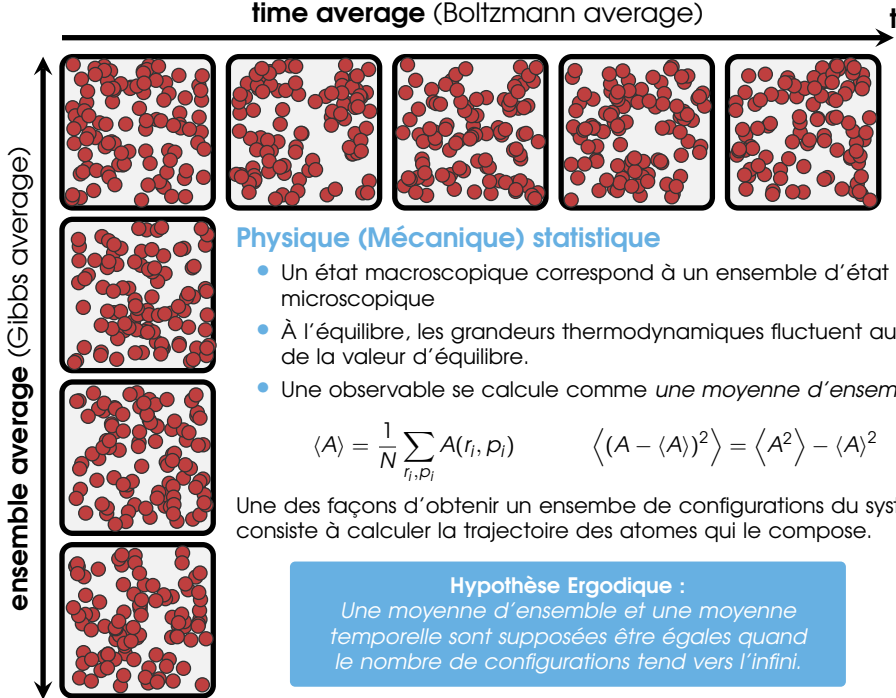
Une des façons d'obtenir un ensemble de configurations du système consiste à calculer la trajectoire des atomes qui le compose.

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltènes
- o Reax

# Mécanique classique et mécanique statistique

Fabriquons un institut de sondage physico-chimique

time average (Boltzmann average)  $\rightarrow t$



- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

# Comment simuler du méthane ?

## Quelques éléments

- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stocks
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax

## Un modèle pour les interactions

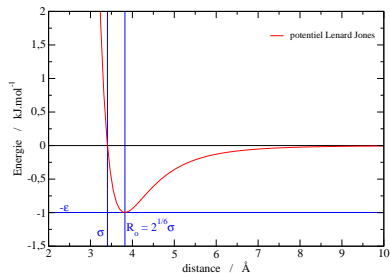
Le potentiel Lenard-Jones (6-12) :

$$E(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

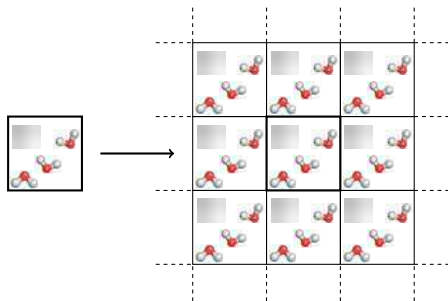
La molécule est représentée par une sphère :

Modèle avec atomes unis

- Rayon  $R = 3.73\text{\AA}$
- $\epsilon = 0.29 \text{ kcal/mol}$



## Des conditions périodiques



## Un schéma d'intégration numérique

Algorithme de Verlet :

$$\vec{r}(t + \delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \delta t) + \delta t^2 \vec{a}(t)$$

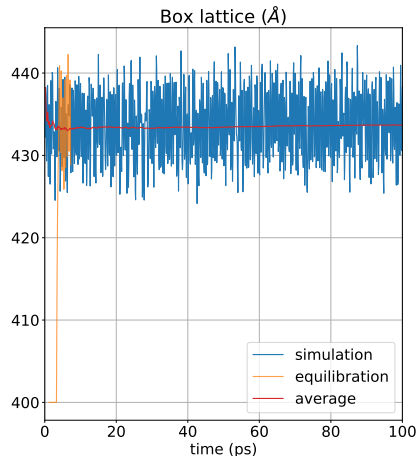
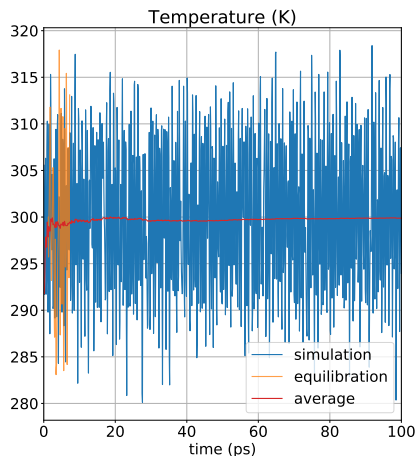
$$\vec{v}(t) = \frac{1}{2\delta t} \left( \vec{r}(t + \delta t) - \vec{r}(t - \delta t) \right)$$

l'accélération est obtenue à partir des forces et donc à partir du modèle.

# Simulations du méthane

## Quelques résultats et grandeurs thermodynamique

- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stokes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax



- Système à l'équilibre : Fluctuations autour d'une valeur d'équilibre
- $T = 300 \text{ K}$ ,  $P = 40 \text{ atm}$ .
- Simulation (NPT) : nombre d'atomes, pression et température constante.

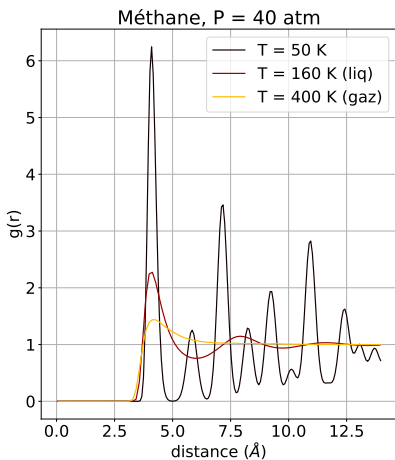


# Simulations du méthane

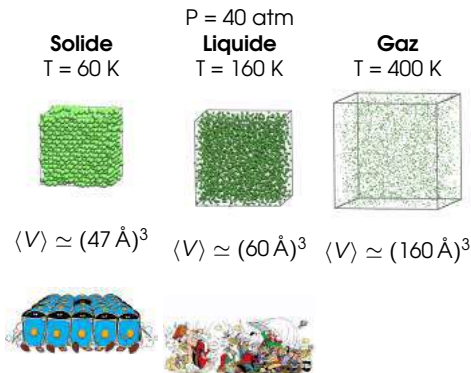
Liquide, gazeux ou super-critique ?

- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax

## Fonction de distribution de paires



## Visualisation du système

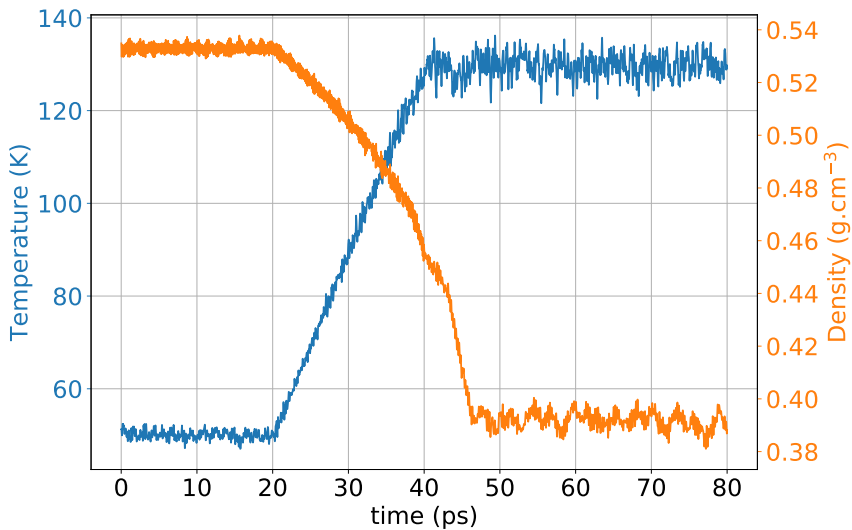


Obtention de données structurales.

# Simulations du méthane

Faisons fondre une boîte de méthane

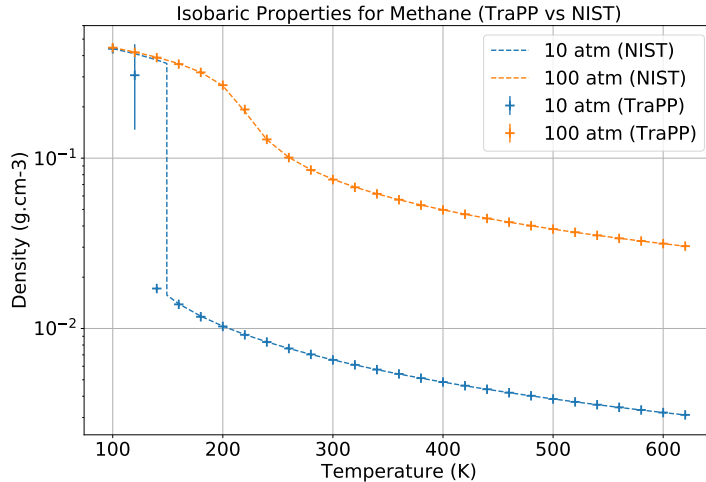
- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stocks
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltenes
- Reax



# Simulations du méthane

## Grandeurs thermodynamique

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltènes
- o Reax



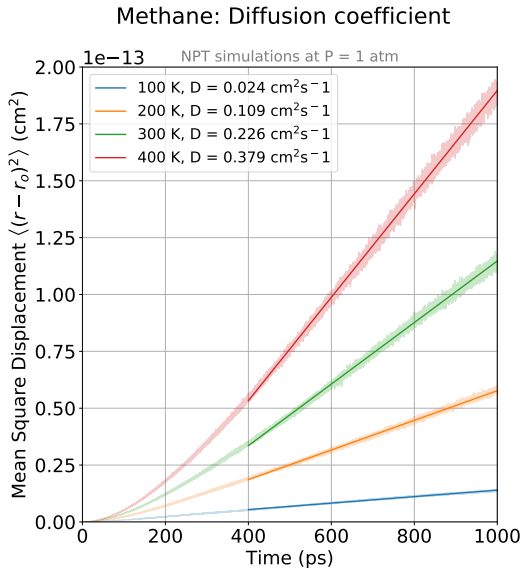
Comparaisons à des données expérimentales :

- Validation des simulations
- Production/Prédictions de données non (difficilement) accessible expérimentalement

# Simulations du méthane

## Grandeurs dynamiques

- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stocks
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax



Calcul du coefficient de diffusion, par la relation d'Einstein :

$$\delta Dt = \langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle$$

- Le coefficient de diffusion est un coefficient de transport
- Ne pas confondre avec la convection

# PLAN

---

- ① Chimie théorique et simulations numériques
- ② Trajectoire d'un projectile
- ③ Simulations numériques du Méthane
- ④ **High Performance Computing**
- ⑤ Simulations numériques de systèmes complexes
- ⑥ Simulations de modèles réactifs (ReaxFF)



# Calculs hautes performances

Les supercalculateurs mondiaux

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- o Asphaltenes
- o Reax

## Top 500



<https://www.top500.org/>

Top500 tient à jour une liste des 500 supercalculateurs les plus puissants depuis 1993

## Liste en Juin 2019 :

- 1er, Frontier TDS U.S. Dept. of Energy (19 pFlop/s, 309 kW, 120832 cores)
- 4<sup>ème</sup> Adastra (France) PangeaIII, 11<sup>ème</sup> (46.1 pFlop/s, 921 kW, 319 072 cores)
- 38<sup>ème</sup> Pangea III TotalEnergies (291024 cores, 17.86 pFlop/s, 1367 kW)



## En Aquitaine

- pyrene, UPPA, environ 1100 cores
- curta, Centre régional, environ 11000 cores

Simulation numériques

Germain Salvato Vallverdu, IPREM

14 Juin 2022

# PLAN

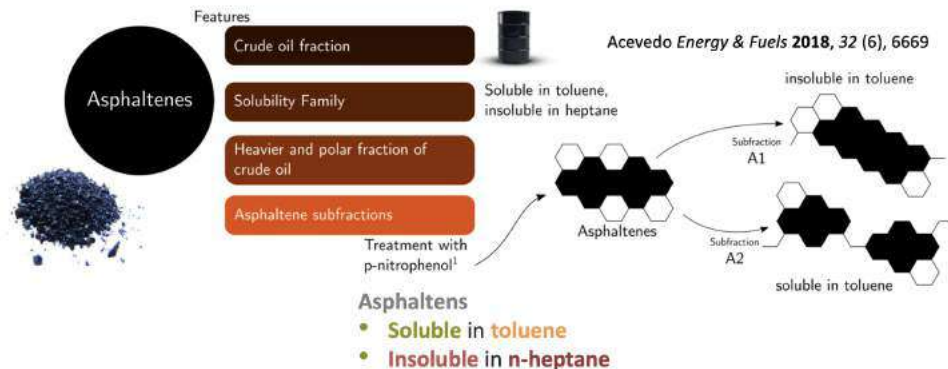
- ① Chimie théorique et simulations numériques
- ② Trajectoire d'un projectile
- ③ Simulations numériques du Méthane
- ④ High Performance Computing
- ⑤ Simulations numériques de systèmes complexes**
- ⑥ Simulations de modèles réactifs (ReaxFF)



# Les asphaltènes : exemple d'un système complexe

Composition inconnue, structure inconnue, comportement non maîtrisé

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- Asphaltènes
- o Reax

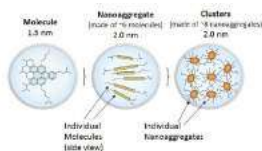
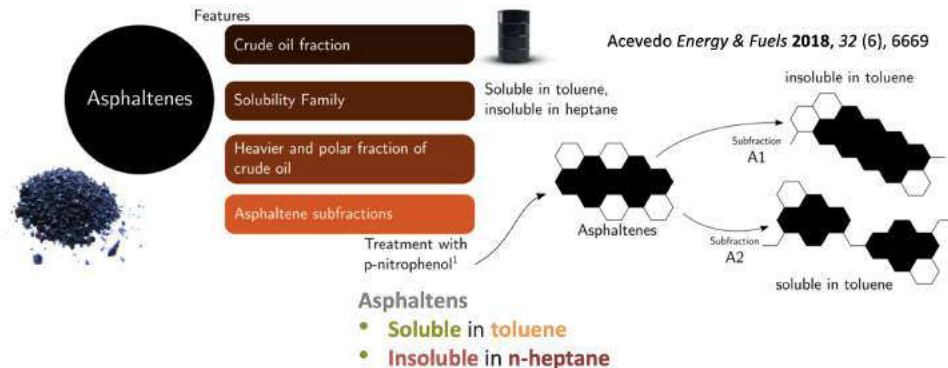




# Les asphaltènes : exemple d'un système complexe

Composition inconnue, structure inconnue, comportement non maîtrisé

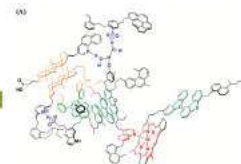
- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- Asphaltènes
- o Reax



## aggregation models

**Colloidal model**  
(Yen-Mullins)

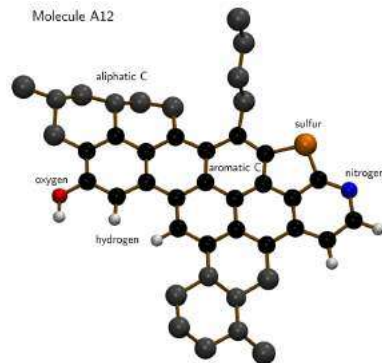
**Supramolecular model**  
(Gray)



# Simulations de systèmes modèles

*Exploration de la diversité chimique*

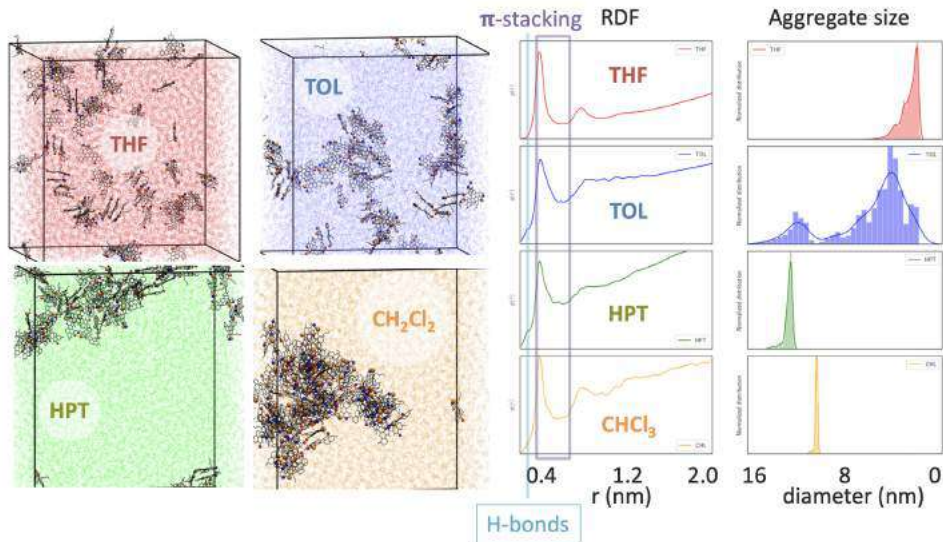
- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax



# Simulations de systèmes modèles dans différents solvants

## Structures des agrégats et mode d'agrégation

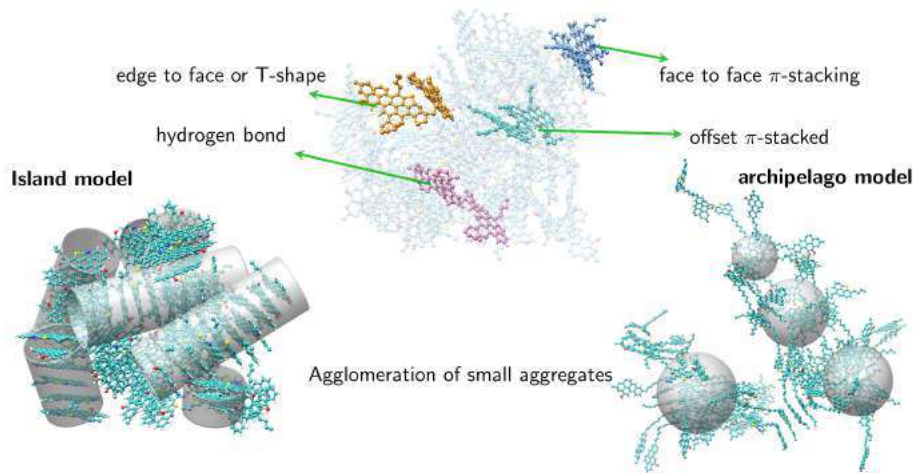
- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax



# Interactions intermoléculaires et cohésion des agrégats

## Structures des agrégats et mode d'agrégation

- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- Asphaltènes
- o Reax



# PLAN

- ① Chimie théorique et simulations numériques
- ② Trajectoire d'un projectile
- ③ Simulations numériques du Méthane
- ④ High Performance Computing
- ⑤ Simulations numériques de systèmes complexes
- ⑥ **Simulations de modèles réactifs (ReaxFF)**



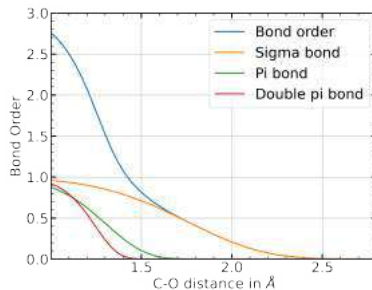
# Simulations de dynamique moléculaire réactives

Le champs de forces ReaxFF

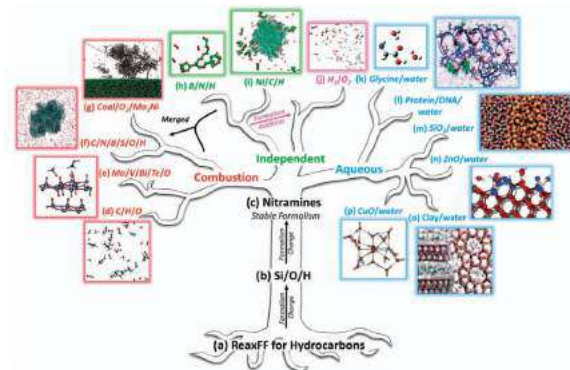
## Mécanique moléculaire et réactivité

$$E_{bond} = k(r - r_0)^2 \quad E_{bond}^{Reax} = BO(r) k(r - r_0)^2$$

- Le champs de forces réactif est basé sur l'indice de liaison (BO = bond order)
- Il contient de nombreux termes inter et intra moléculaire à 2, 3 ou 4 corps.



## Domaine principaux d'applications



- o Contents
- o CTh SiNum
- o Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- o Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- o HPC
- o Asphaltenes
- Reax

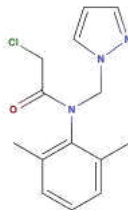
# Les contaminants émergents

Besoin de décrire de nouveaux éléments

## Quelques exemples



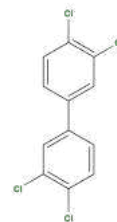
Paracétamol



metazachlor

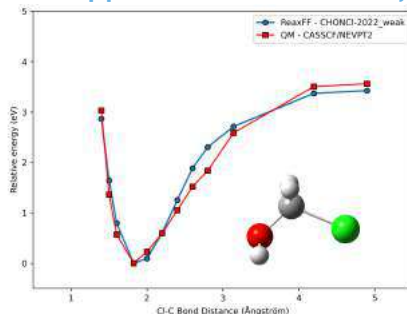


chlorobenzene



PCB-77

## Développement d'un nouveau jeu de paramètres



- 68 nouveaux paramètres à déterminer
- Processus d'optimisation complexe
- Solutions équivalentes

Simulation numériques

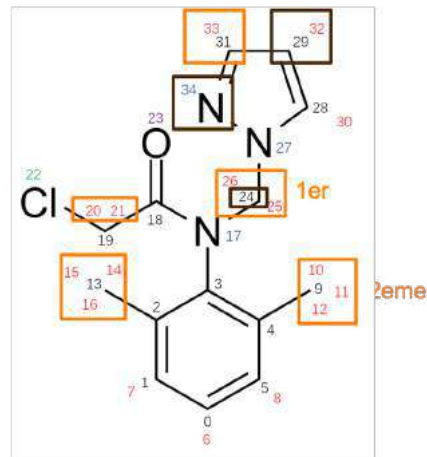
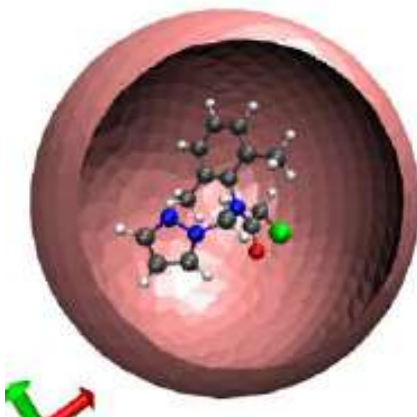
Germain Salvato Vallverdu, IPREM

14 Juin 2022

# Exemple du méta-zachlor, un herbicide

## Exploration des sites réactifs

- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax





# Conclusion

## Quelques éléments importants

- Contents
- CTh SiNum
- Baseball
  - Chute libre
  - Stockes
  - Turbulent
  - App. Numérique
- Méthane
  - Stat.Mech.
  - Modèle
  - Résultats
- HPC
- Asphaltènes
- Reax

### Chimie théorique et simulations numérique

- une discipline de chimie peu connue
- à l'interface entre chimie, physique, informatique (calcul scientifique)
- nombreux domaines d'applications

### Simulations de dynamique moléculaire

- Une application de la seconde loi de Newton et de la mécanique du point
- Facile à mettre en œuvre
- Une illustration de la notion de modèle
- Une illustration des forces intermoléculaires et des états de la matière

### Quels logiciels ?

Tous les logiciels utilisés lors de la présentation sont libres et gratuits

- VMD : Visual Molecular Dynamics <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- LAMMPS Molecular Dynamics Simulator <https://lammps.sandia.gov/>
- GROMACS <http://www.gromacs.org/>


# Merci de votre attention

## CONTACT

**Germain Salvato Vallverdu**

Institut des Sciences Analytiques et de Physico-Chimie pour l'Environnement et les Matériaux

 [germain.vallverdu@univ-pau.fr](mailto:germain.vallverdu@univ-pau.fr)

 <http://gvallver.perso.univ-pau.fr>

  [@gvallverdu](https://github.com/gvallverdu)

