



# Materia condensada computacional a las escalas microscópica y macroscópica

Alejandro B. Kolton

Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro,  
Comisión Nacional de Energía Atómica, Bariloche, Argentina  
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

# Charla

- ¿Quiénes somos y qué hacemos?
- ¿Qué aplicación o impacto tiene lo que hacemos?
- ¿Qué métodos y herramientas numéricas usamos?
- ¿Qué infraestructura computacional tenemos?
- ¿Qué podemos hacer hoy y qué podríamos hacer con una TOP500? [dos ejemplos breves, y muy distintos]
- Un punto de vista (personal)

# Grupo de Teoría de la Materia Condensada

## Teoría de la Materia Condensada



[Inicio](#) [Investigación](#) [Gente](#) [Calendario](#) [Becas](#) [Publicaciones](#) [Práctico](#) [Fotos](#) [Enlaces](#)

***Bienvenid@***

**al Grupo de Teoría de la Materia Condensada del Centro Atómico Bariloche**

[Inicio](#)

[Investigación](#)

[Gente](#)

[Destacado](#)

[Como llegar](#)

[Contacto](#)

[Calendario](#)

[Eventos](#)

[Financiamiento](#)

[Fotos](#)

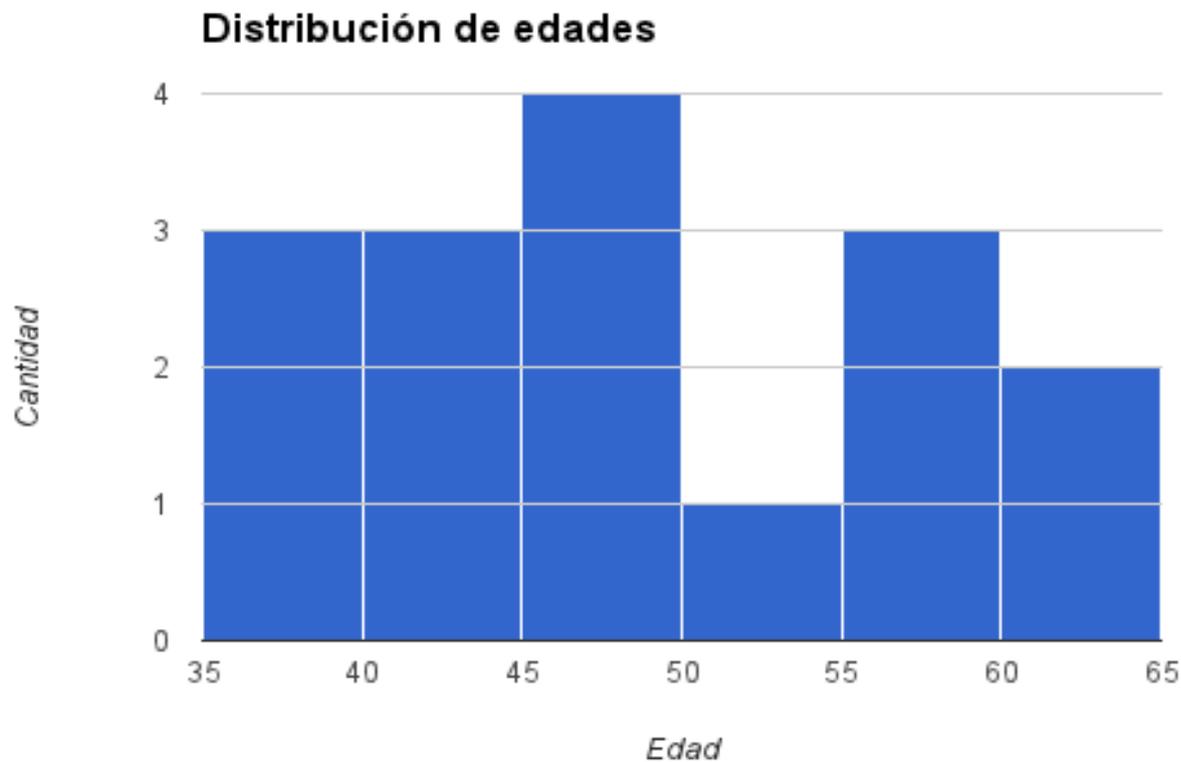


San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina

<http://fisica.cab.cnea.gov.ar/solidos>

# El grupo

16 Investigadores permanentes  
(CONICET y/o CNEA)



Edad promedio: ~ 49 años

# El grupo

- 1 postdoctorando
- 14 estudiantes graduados (3 maestría, 11 doctorado)
  - 1 venezolano
  - 1 peruano
  - 3 cubanos
  - 3 colombianos
  - 6 argentinos

Hacemos llamados regulares para recibir estudiantes graduados.  
Flujo bajo de estudiantes de la carrera de grado del Instituto Balseiro

# Algunas estadísticas

- Más de 40 tesis de doctorado realizadas en el grupo.
- Más de 50 tesis de maestría.
- ~ 35 publicaciones por año
- ...

# Un poco de historia ...

- (años 70) Primeras publicaciones en el grupo de Blas Alascio y Arturo López Dávalos. Tesis doctoral de Horacio Wio, Carlos Balseiro
- (ppios. de los años 80) cálculos numéricos usando la VAX. Tesis doctoral de Armando Aligia.
- (mediados de los 80) Comienza la *física computacional* en el grupo con los cálculos de Lanczos de Eduardo Gagliano. Se compra una MicroVAX.
- Tesis de Daniel Dominguez → Dinámica de junturas Josephson → Simulaciones
- Tesis de Karen Hallberg → Grupo de renormalización
- En los últimos 15 años, crecimiento sostenido del cluster y expansión de las dos líneas de trabajo numérico: electrones correlacionados y física estadística.
- Más recientemente:
  - Cálculos ab initio de DFT: Alexander Hernández
  - Problemas de una partícula (grafeno): Gonzalo Usaj
  - Dinámica temporal (Floquet): Daniel Domínguez, Majo Sánchez
  - Desarrollo de códigos usando **GPGPU**: ABK

# Líneas de trabajo actuales

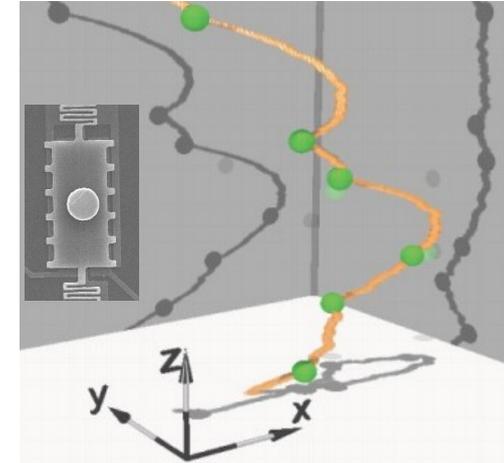
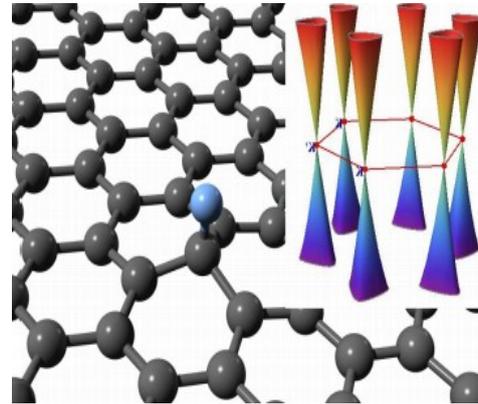
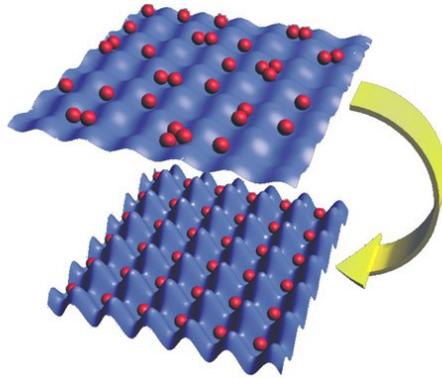
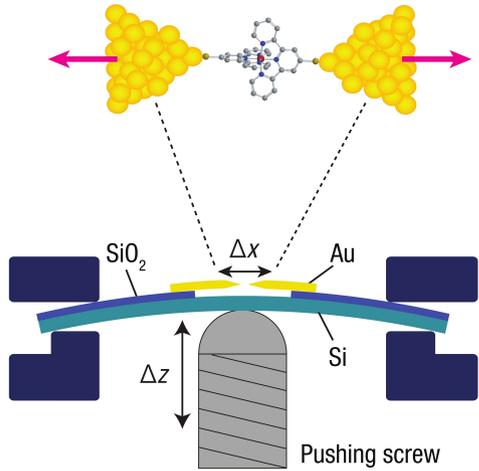
- **Sistemas electrónicos nanoestructurados:** qubits superconductores, grafeno, propiedades de transporte de carga y espín, transistores moleculares y gases de electrones bidimensionales acoplados.
- **Física estadística aplicada a la materia condensada:** interfaces, dominios y paredes de dominio en materiales ferróicos, vórtices superconductores, termodinámica estocástica, terremotos y fricción, sistemas vítreos.
- **Dispositivos y aplicaciones:** memorias resistivas, dispositivos semiconductores.
- **Modelización realista de materiales:** sistemas fuertemente correlacionados, teoría de funcional densidad. Ciencia de materiales computacional: Calculos ab-initio (DFT), campo medio dinámico (DMFT), renormalización numérica (NRG, DMRG)

# De lo micro a lo macro

Atomos, moléculas

Angstroms, nanómetros

Vórtices en superconductores



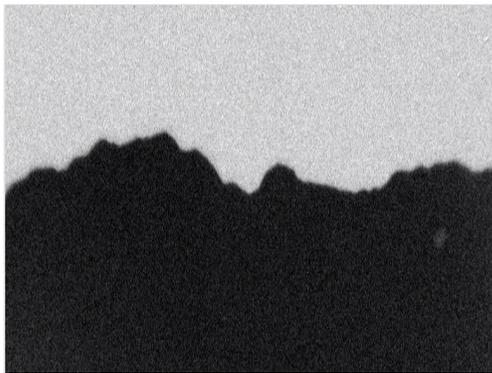
micrómetros

Milímetros

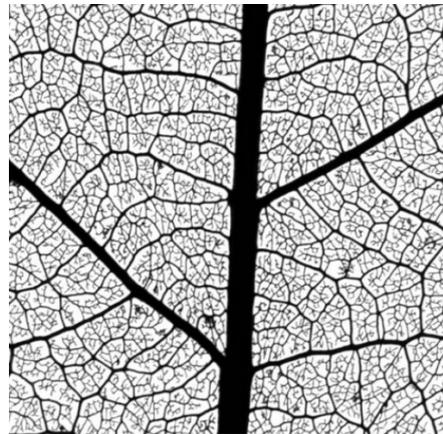
metros a kilómetros

terremotos

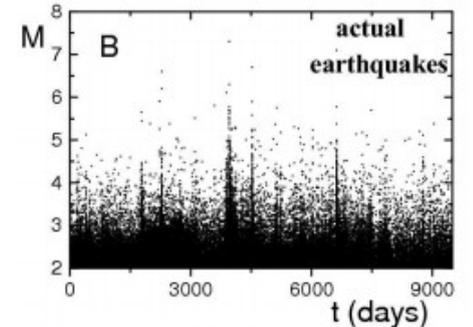
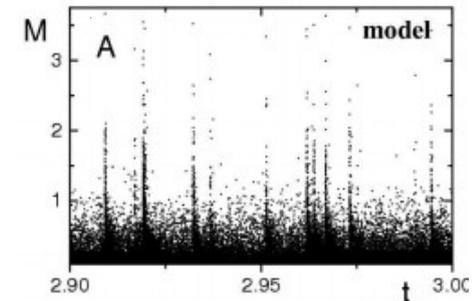
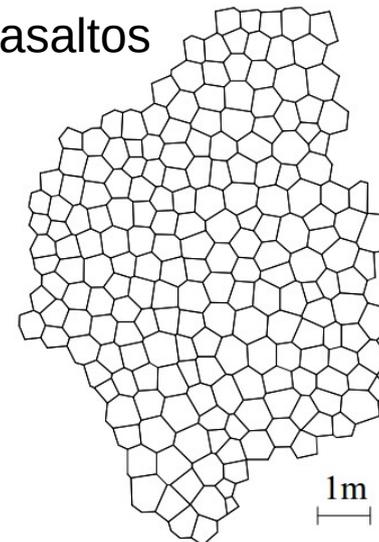
Dominios magnéticos



hojas



basaltos



*Figuras extraídas de publicaciones del grupo*

# Métodos y herramientas numéricas

- **Electrones correlacionados**

- Diagonalización exacta
- Grupo de Renormalización Numérica (NRG).
- Renormalización numérica de matriz densidad (DMRG)
- Campo medio dinámico
- Monte Carlo cuántico
- Polinomios de Chebyshev
- Hartree-Fock
- Métodos basados en DFT

- **Física estadística**

- Monte Carlo clásico
- Kinetic Monte Carlo
- Dinámica molecular
- *Variantes y algoritmos especiales ...*

- blas, lapack, subplex, quadpack
- MKL, ACML, fftw, gsl, octave
- boost c++, blitz++, armadillo
- TRIQS (Toolbox for Research on Interacting Quantum Systems)
- ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations)
- Ab initio:
  - Wien2k
  - Quantum espresso
  - VASP
- **GPGPU**: thrust, magma, cusp, cublas, cusparse, cufft, random123

# GPGPU en el Centro Atómico Bariloche (CAB)

- **GPGPU@CAB:** comunidad creciente de físicos, químicos, ingenieros, biólogos. Grupo impulsado fuertemente por Eze Ferrero con mucho apoyo de GPGPU@FAMAF.
  - Dos Academic partnerships NVIDIA (2012) [F. Colavechia-ABK] → donación de GPUs.
  - Instituto Balseiro → Introducción al cálculo numérico en procesadores gráficos (2012,2013,2014). Alumnos del Instituto Balseiro, Universidad de Rio Negro, INVAP, CNEA y CONICET. Científicos e ingenieros.
  - Instituto Balseiro → Cuda Teaching Center NVIDIA (2013) → Donación de GPUs
  - Montado de un cluster de GPUs para educación e investigación en GPGPU [12 placas]. En expansión gracias a SNCAD y Gerencia de Física-CNEA.
  - Organización de la Tercer Escuela Argentina de GPGPU Computing para Aplicaciones Científicas (Mayo 2014) [[fisica.cab.cnea.gov.ar/gpgpu](http://fisica.cab.cnea.gov.ar/gpgpu)]
    - ~**130** participantes
    - Expertos internacionales [EEUU, Italia, Uruguay] y nacionales
    - Financiación SNCAD, CONICET, Instituto Balseiro, CNEA, NVIDIA
    - Competencia con premio (GPU K40) a Universidad Nacional Argentina

# Nuevos algoritmos para acelerar simulaciones

## Parallel kinetic Monte Carlo simulation of Coulomb glasses

E.E. Ferrero<sup>\*,†</sup>, A.B. Kolton<sup>\*</sup> and M. Palassini<sup>\*\*,‡</sup>

<sup>\*</sup>CONICET, Centro Atómico Bariloche, 8400 Bariloche, Argentina

<sup>†</sup>Current address: LIPhy, Université Joseph Fourier, UMR 5588, F-38402 Saint Martin d'Hères, France

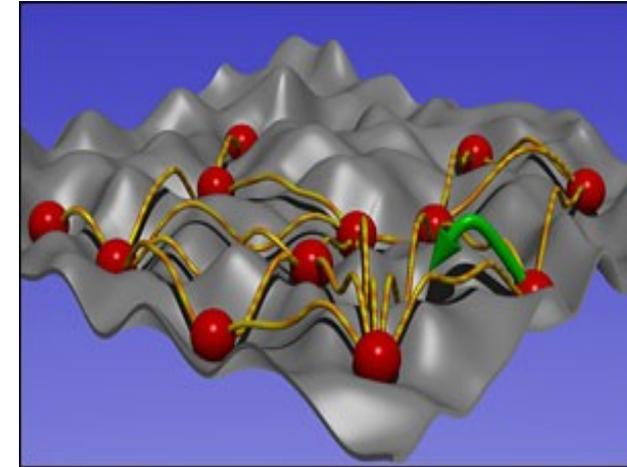
<sup>\*\*</sup>Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, 08028 Barcelona, Spain

<sup>‡</sup>The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (ICTP), 34014 Trieste, Italy

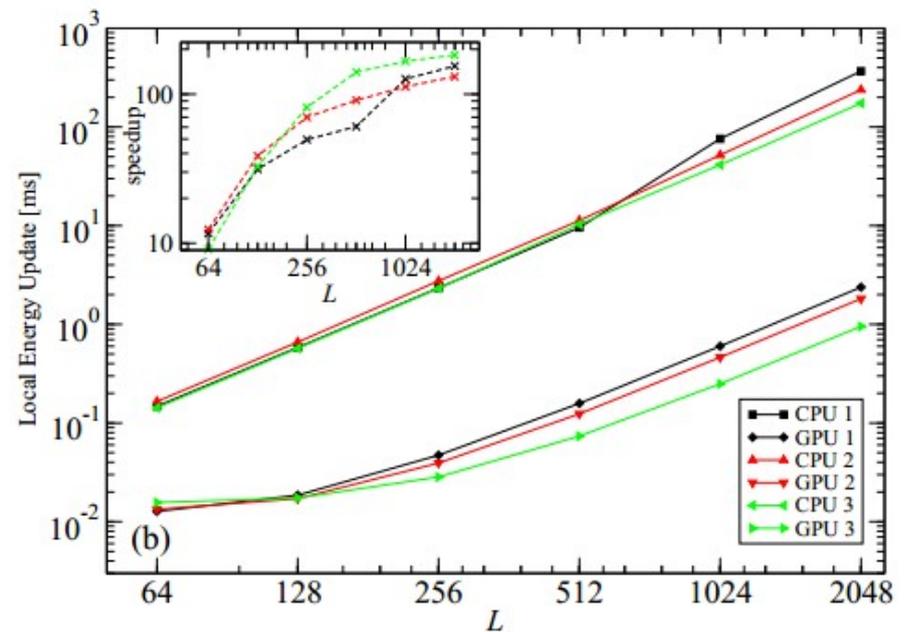
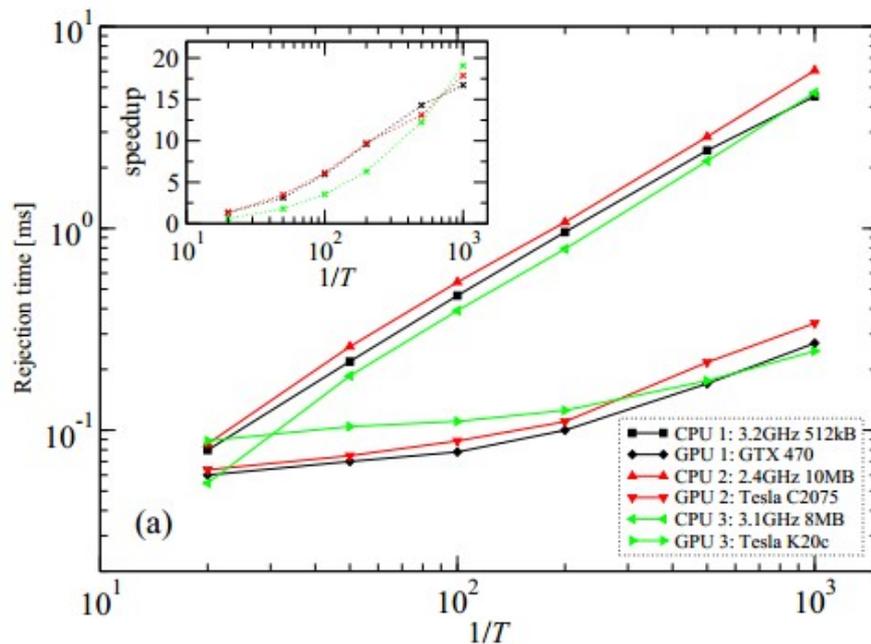
**Abstract.** We develop a parallel rejection algorithm to tackle the problem of low acceptance in Monte Carlo methods, and apply it to the simulation of the hopping conduction in Coulomb glasses using Graphics Processing Units, for which we also parallelize the update of local energies. In two dimensions, our parallel code achieves speedups of up to two orders of magnitude in computing time over an equivalent serial code. We find numerical evidence of a scaling relation for the relaxation of the conductivity at different temperatures.

**Keywords:** Monte Carlo algorithms, Hopping transport

**PACS:** 02.70.Tt, 71.23.Cq, 72.20.Ec



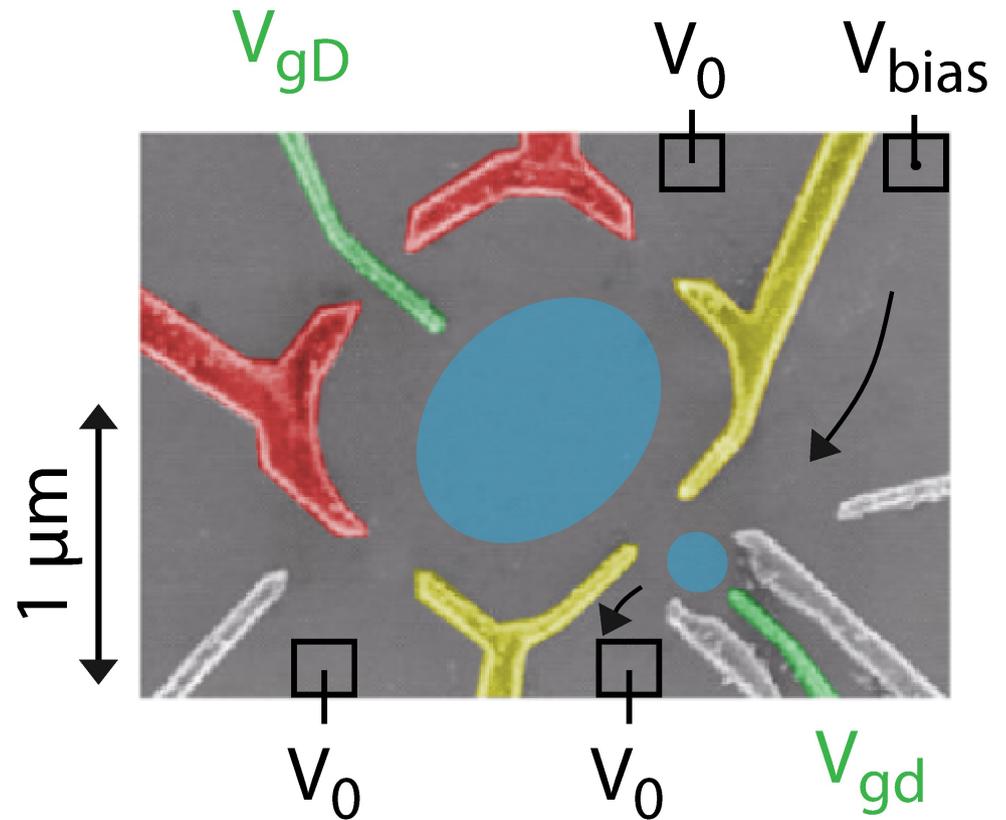
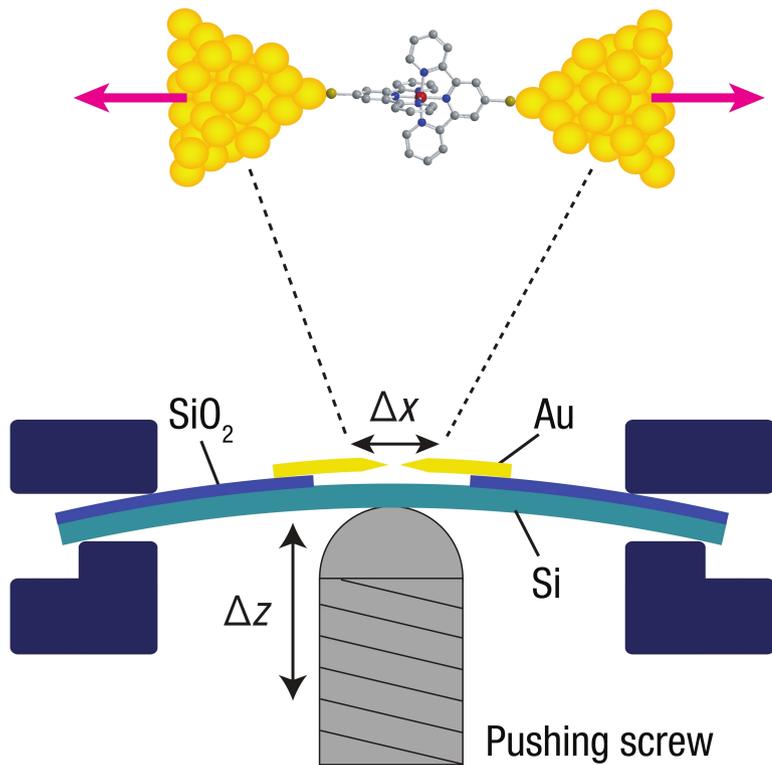
-nn] 18 Jul 2014



# Recursos computacionales

- **Grupo de Teoría de la Materia Condensada**
  - 29 hosts
  - 300 cores
- **Gerencia de Física del Centro Atómico Bariloche**
  - 4 clusters
  - 84 hosts
  - 550 cores
- **Proximamente:** Fondos del *Sistema Nacional de Computación de Alto Desempeño (SNCAD)*
  - Nuevos servidores
  - Nuevos nodos
  - InfiniBand
- **Cluster de GPUs**
  - 12 placas (10 donadas por NVIDIA)
  - 6 hosts

# Transporte electrónico a través de dispositivos nanoscópicos



J. J. Parks, *et al.*, Science **328** 1370 (2010)

David Y. Baines *et al.*, Phys. Rev. B **85** 195117 (2012)

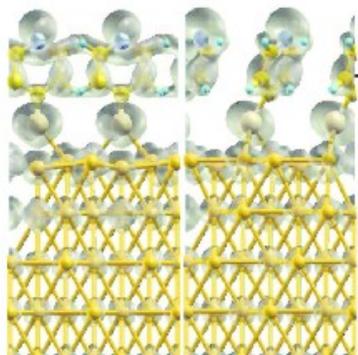
P. Cornaglia, Armando Aligia, Carlos Balseiro, Pablo Roura-Bas (CAC)

**Colaboración teórica-experimental**

# Calculos ab initio basados en DFT

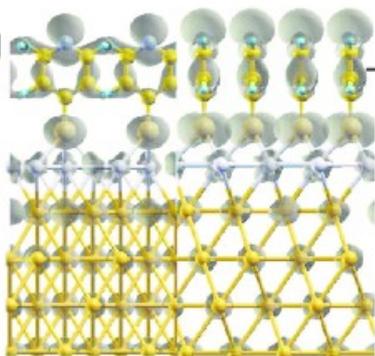
HOMO  $\rho=0.025$

Au



## From Single to Multiple Ag-Layer Modification of Au Nanocavity Substrates: A Tunable Probe of the Chemical Surface-Enhanced Raman Scattering Mechanism

Au+1Ag



Nicolás G. Tognalli,<sup>†,\*</sup> Emiliano Cortés,<sup>‡</sup> Alexander D. Hernández-Nieves,<sup>†,§</sup> Pilar Carro,<sup>‡</sup> Gonzalo Usaj,<sup>†</sup> Carlos A. Balseiro,<sup>†</sup> María E. Vela,<sup>‡</sup> Roberto C. Salvarezza,<sup>‡</sup> and Alejandro Fainstein<sup>†</sup>

<sup>†</sup>Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 S. C. de Bariloche, Río Negro, Argentina,

<sup>‡</sup>Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Universidad Nacional de La Plata—CONICET,

Sucursal 4 Casilla de Correo 16 (1900) La Plata, Argentina, <sup>§</sup>Departement Fysica, Universiteit Antwerpen, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerpen, Belgium, and

<sup>‡</sup>Departamento de Química Física, Instituto Universitario de Materiales y Nanotecnología, Universidad de La Laguna, Avda. F. Sánchez s/n, 38205-Tenerife, Spain

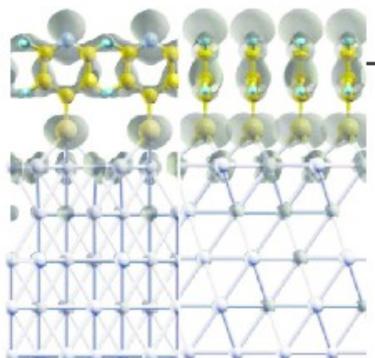


VOL. 5 ■ NO. 7 ■ 5433–5443 ■ 2011

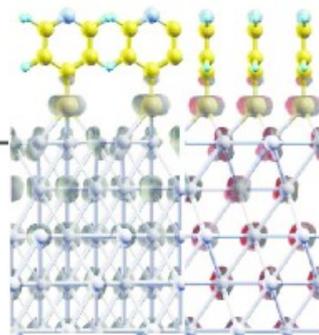
ACS NANO

www.acsnano.org

Ag



d=4.82Å



Cálculos ab initio intensivos basados en DFT usando **Quantum-Expresso**

**Colaboración teórica-experimental**



<http://www.quantum-espresso.org>

QUANTUM ESPRESSO

HOME PROJECT DOWNLOAD RESOURCES PSEUDOPOTENTIALS CONTACTS NEWS & EVENTS

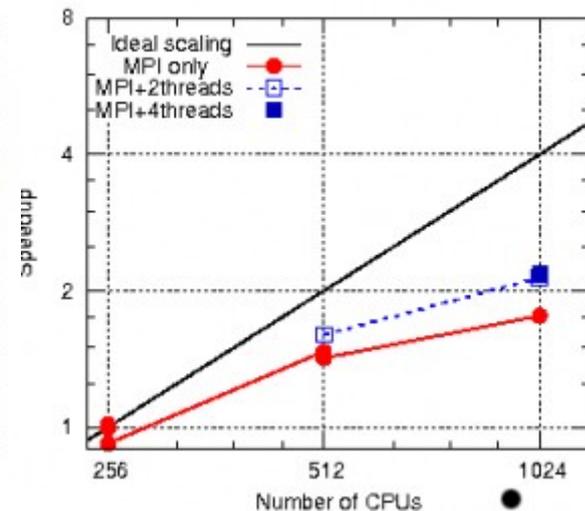
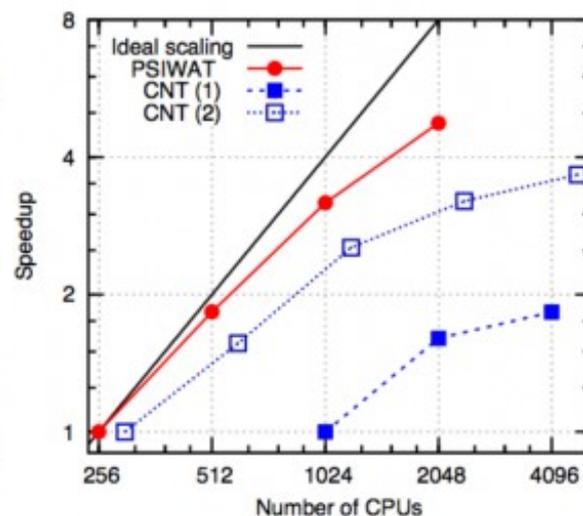
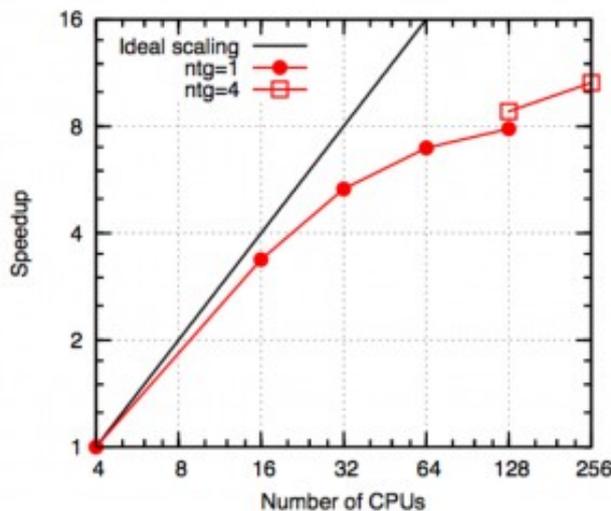
Quantum ESPRESSO is an integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale.

It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials.

Quantum ESPRESSO is an open initiative, in collaboration with many groups world-wide, coordinated by the Quantum ESPRESSO Foundation...

## WHAT CAN QE DO

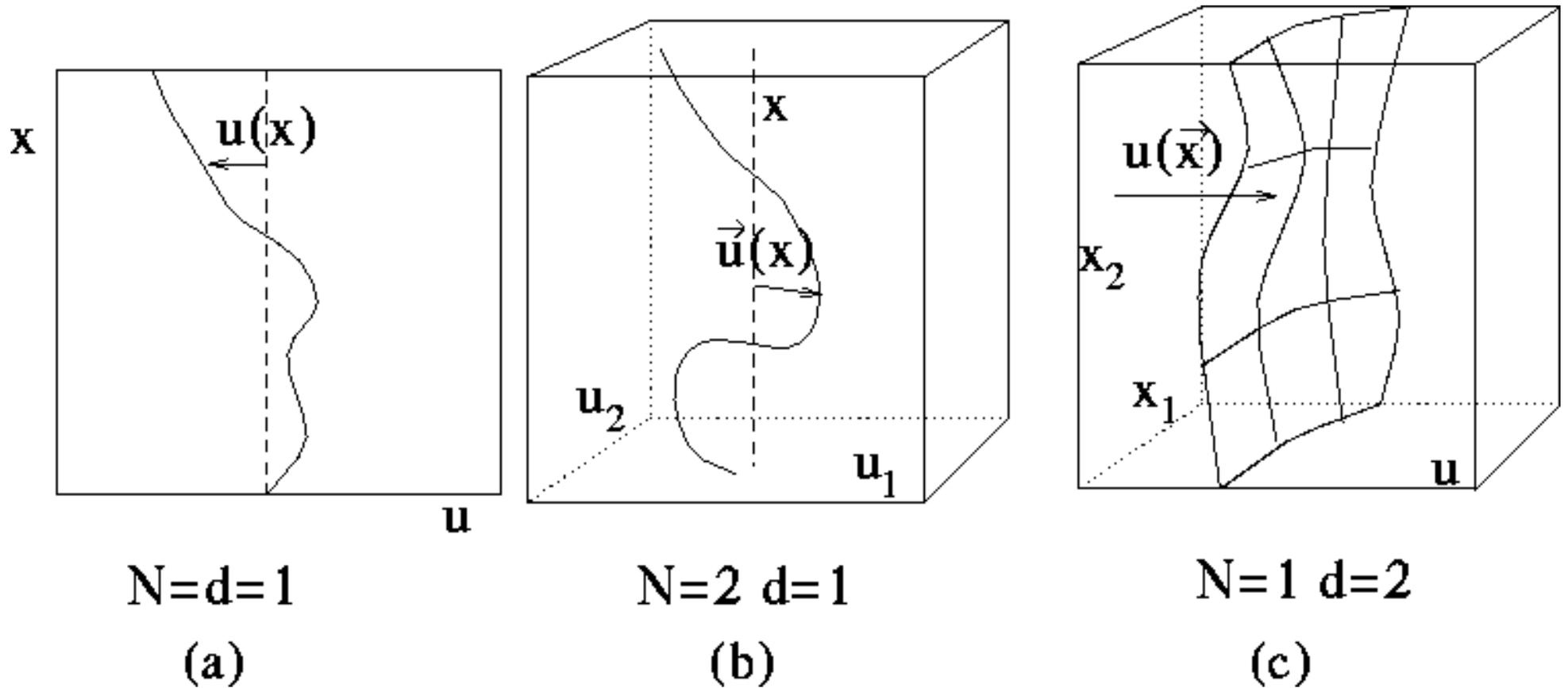
- Ground-state calculations.
- Structural Optimization.
- Transition states and minimum energy paths.
- Ab-initio molecular dynamics.
- Response properties (DFPT).
- Spectroscopic properties.
- Quantum Transport.
- Platforms.



# Que se podría hacer en cálculos ab initio si tuviera acceso a una TOP500?

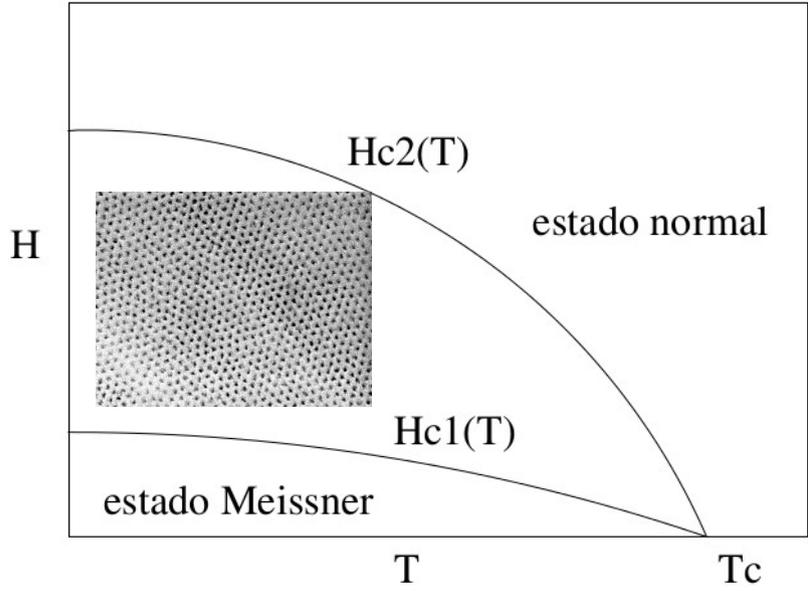
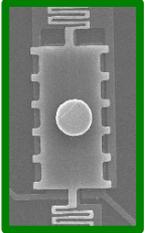
- Minimizar efectos de tamaño finito, estudiar efectos de desorden.
- Abordar situaciones más complejas o variadas (moléculas, superficies).
- Agilizar la colaboración teórica-experimental [actualmente los cálculos demoran varios meses en nuestro cluster], interpretar y predecir más.
- Aumentar el impacto de las publicaciones.

# Dinámica de objetos Elásticos en Medios desordenados

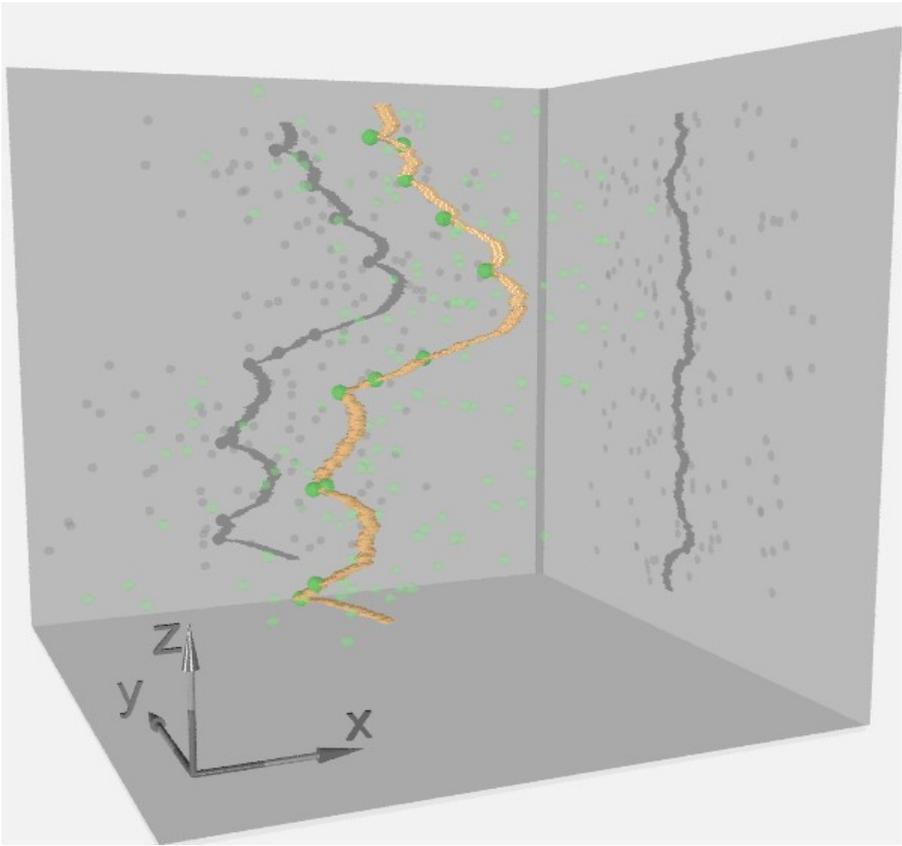


La universalidad observada en diversos fenómenos dinámicos de Materia Condensada se explica muy bien con estos modelos simples, pero difíciles de resolver.

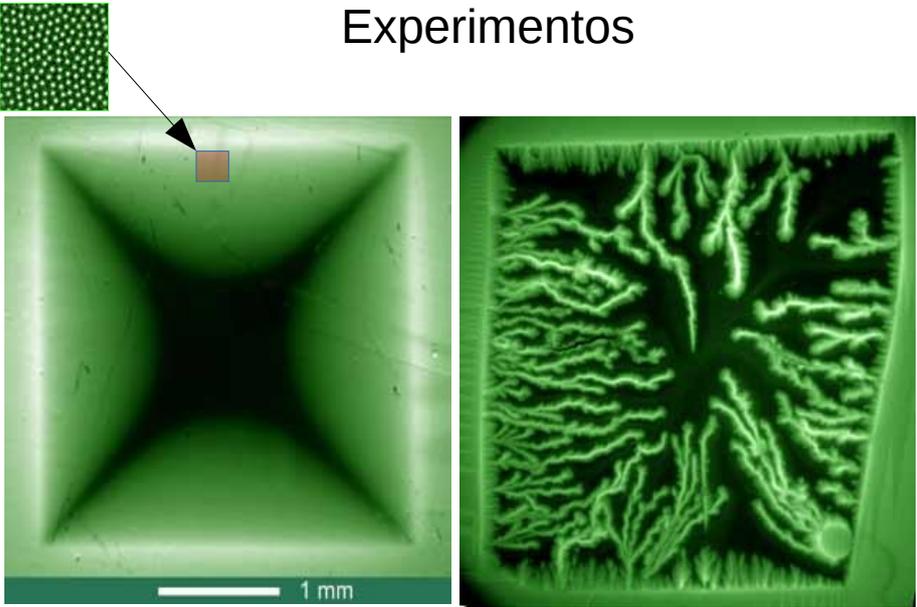
# Vórtices en Superconductores



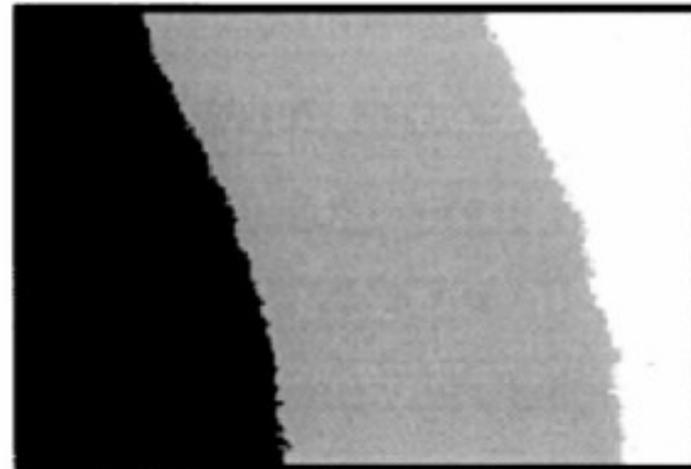
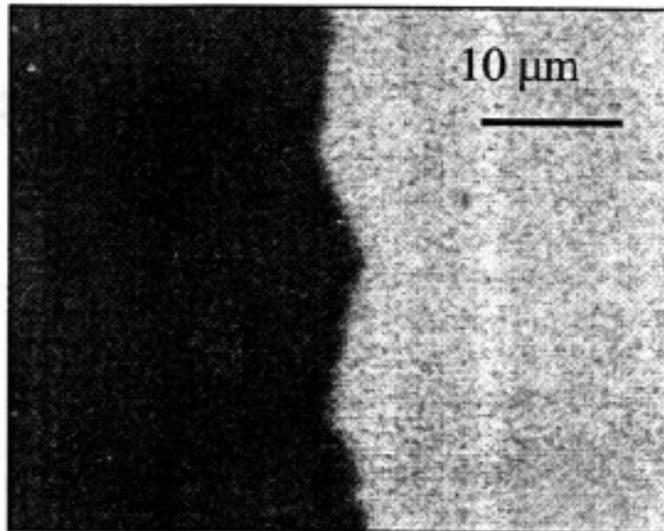
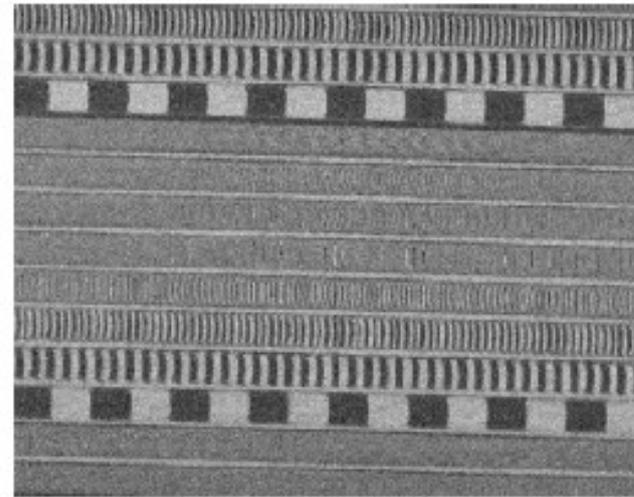
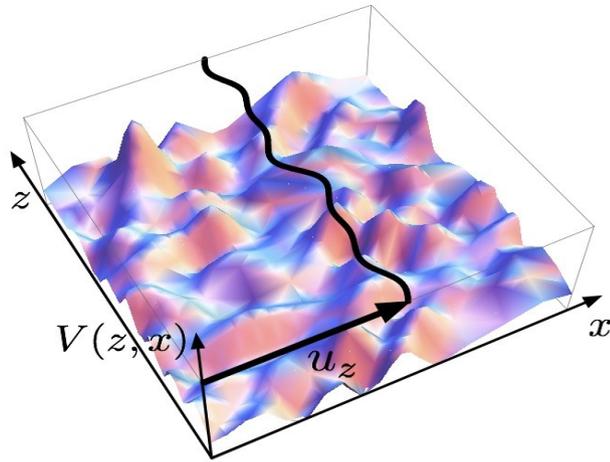
Simulación de un vórtice



Experimentos



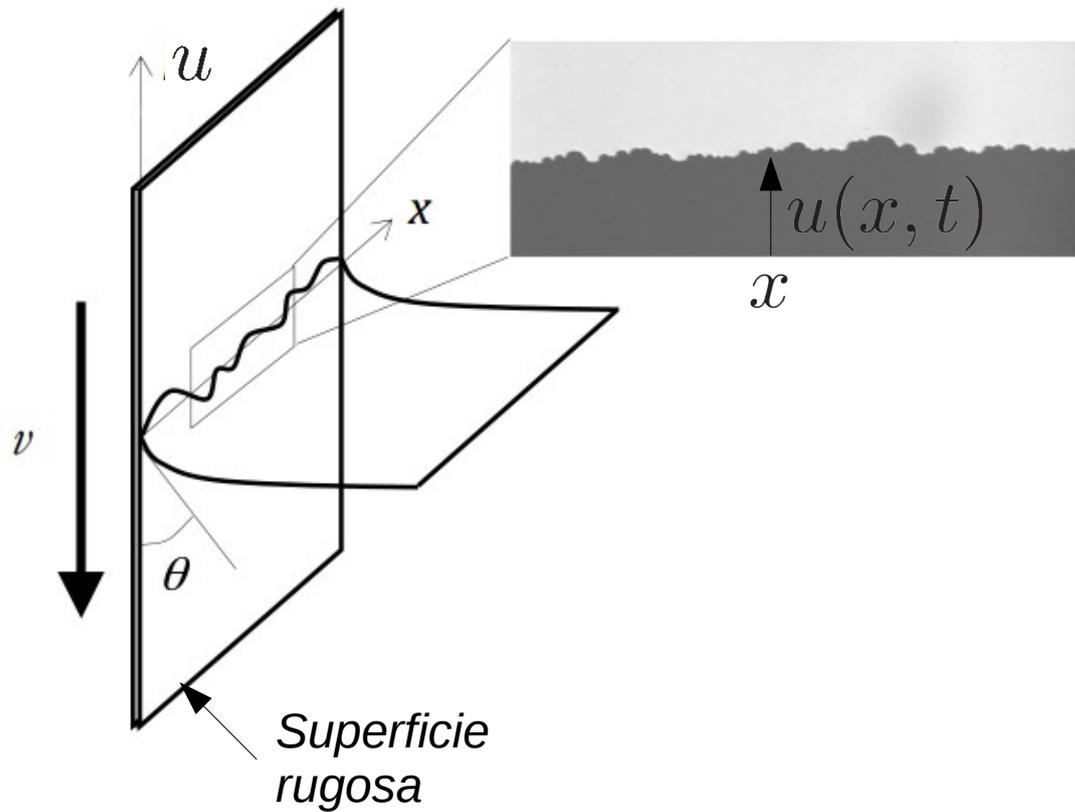
# Interfaces en medios desordenados



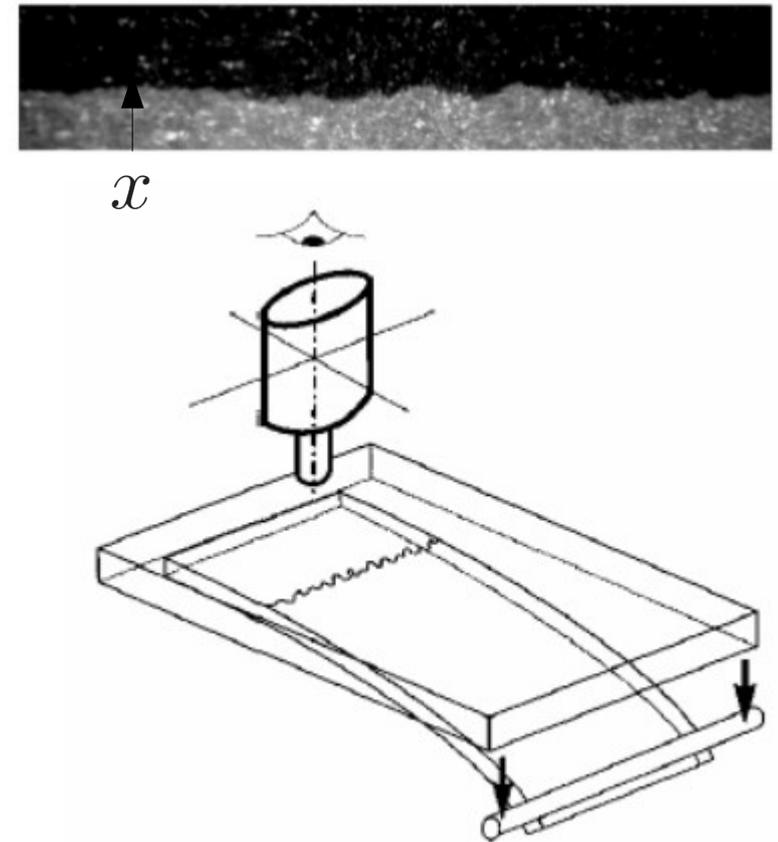
Magnetic domain wall in a Pt/Co/Pt film in the creep regime.  
Lemerle, Jamet, Ferre, et al (LPS Orsay).

# Interfaces en medios desordenados

Lineas de contacto de mojado



Fracturas



# Dinámica de objetos Elásticos en Medios desordenados

- **Experiencia en esta línea de trabajo:**
  - ♦ Desde 2000 ~40 publicaciones en el tema [11 Physical Review Letters]
  - ♦ 7 publicaciones de tipo teórico-experimental: aplicaciones a superconductividad, magnetismo, ferroelectricidad
  - ♦ 1 Patente de invención
  - ♦ Teoría basada principalmente en simulaciones numéricas, mediante métodos tradicionales, variantes, o completamente originales

# Dinámica de objetos Elásticos en Medios desordenados

Review de Métodos Numéricos



Contents lists available at [ScienceDirect](http://www.sciencedirect.com)

Comptes Rendus Physique

[www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)



Disordered systems / Systèmes désordonnés

Numerical approaches on driven elastic interfaces in random media



*Approches numériques pour les interfaces élastiques en milieu aléatoire*

Ezequiel E. Ferrero<sup>a,\*</sup>, Sebastian Bustingorry<sup>a</sup>, Alejandro B. Kolton<sup>a</sup>,  
Alberto Rosso<sup>b</sup>

<sup>a</sup> CONICET, Centro Atómico Bariloche, 8400 S. C. de Bariloche, Argentina

<sup>b</sup> Université Paris-Sud, CNRS, LPTMS, UMR 8626, 91405 Orsay, France

C. R. Physique 14 (2013) 641–650

Todos estos métodos numéricos, desarrollados *específicamente* para este tipo de problemas, fueron ya paralelizados e implementados en **GPUs**

# Nonsteady relaxation and critical exponents at the depinning transition

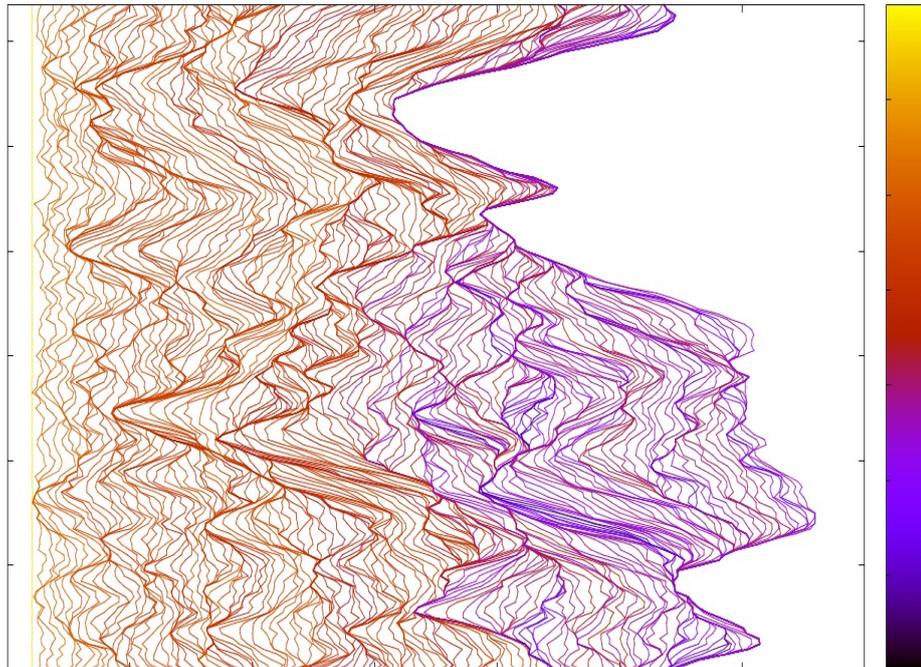
E. E. Ferrero, S. Bustingorry, and A. B. Kolton

CONICET, Centro Atómico Bariloche, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina

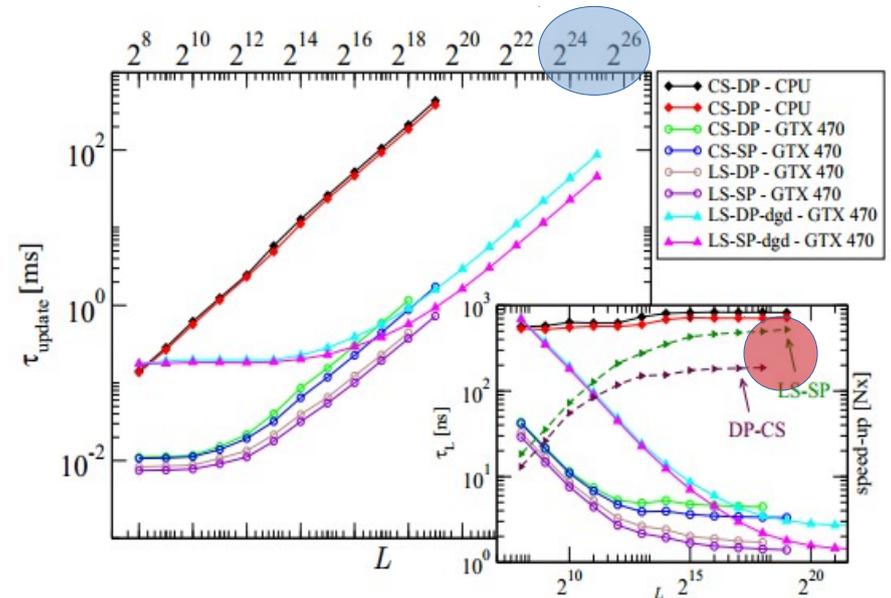
(Received 28 November 2012; revised manuscript received 4 February 2013; published 11 March 2013)

We study the nonsteady relaxation of a driven one-dimensional elastic interface at the depinning transition by extensive numerical simulations concurrently implemented on graphics processing units....

*Embarasosamente paralelo pero con correlaciones no triviales...*



Velocidad media



- Código propio , librerías básicas [WHPC2013]
- Implementacion actual: una GPU
- En desarrollo: Multi-GPU + MPI

# Dinámica de objetos Elásticos en Medios desordenados

- Varias colaboraciones de tipo Experimental – Teórica
- Predicción e Interpretación de Experimentos

PRL 113, 027205 (2014)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending  
11 JULY 2014

## Pinning-Dependent Field-Driven Domain Wall Dynamics and Thermal Scaling in an Ultrathin Pt/Co/Pt Magnetic Film

J. Gorchon,<sup>1</sup> S. Bustingorry,<sup>2</sup> J. Ferré,<sup>1</sup> V. Jeudy,<sup>1,3,\*</sup> A. B. Kolton,<sup>2</sup> and T. Giamarchi<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, CNRS, UMR8502, 91405 Orsay, France

<sup>2</sup>CONICET, Centro Atómico Bariloche, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina

<sup>3</sup>Université Cergy-Pontoise, 95000 Cergy-Pontoise, France

<sup>4</sup>DPMC-MaNEP, University of Geneva, 24 Quai Ernest Ansermet, CH-1211 Geneva, Switzerland

(Received 6 December 2013; revised manuscript received 12 June 2014; published 11 July 2014)

Magnetic-field-driven domain wall motion in an ultrathin Pt/Co(0.45 nm)/Pt ferromagnetic film with perpendicular anisotropy is studied over a wide temperature range. Three different pinning dependent dynamical regimes are clearly identified: the creep, the thermally assisted flux flow, and the depinning, as well as their corresponding crossovers. The wall elastic energy and microscopic parameters characterizing the pinning are determined. Both the extracted thermal rounding exponent at the depinning transition,  $\psi = 0.15$ , and the Larkin length crossover exponent,  $\phi = 0.24$ , fit well with the numerical predictions.

Una comparación cuantitativa satisfactoria con experimentos es posible con simulaciones numéricas a gran escala

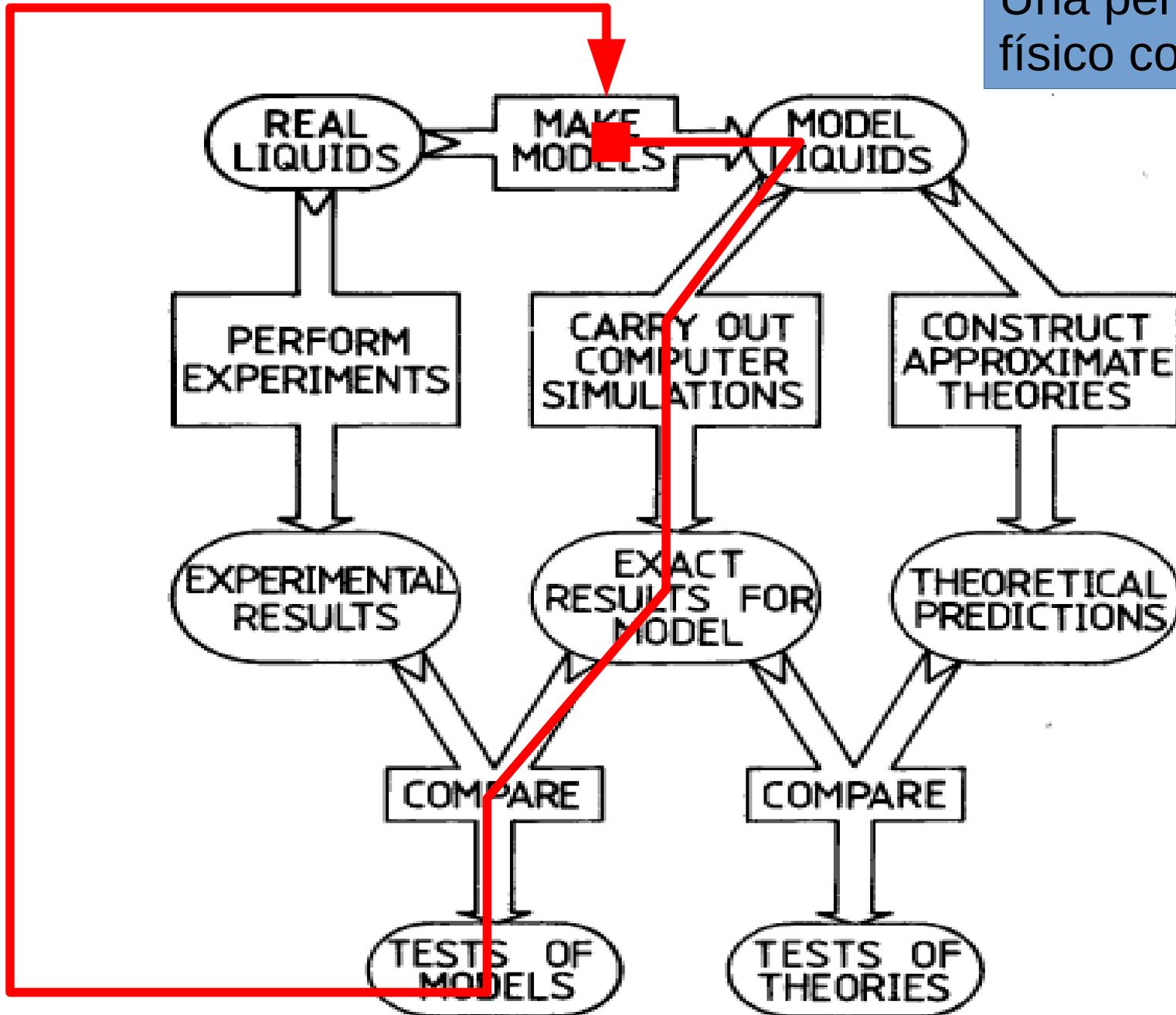
# Que se podría hacer en simulaciones de interfaces elásticas en medios desordenados si tuviera acceso a una TOP500?

- Simulaciones más realistas de situaciones experimentales concretas y de mucho interés para aplicaciones:
  - Paredes magnéticas de dimensión  $d=2$
  - Paredes de Dominio Ferroeléctricas
  - Paredes de Dominio magnéticas impulsadas por corriente [spintrónica]
  - Redes de vórtices en superconductores

*Implican extensiones sencillas de nuestros códigos masivamente paralelos para GPGPU, pero mucho más cálculo...*

*Estamos listos para dar el salto a multi-GPU , multi-nodo.*

Una perspectiva de físico computacional



N veces hasta obtener un modelo satisfactorio, simple y suficientemente **predictivo**

*Computer Simulation of Liquids*  
Allen-Tildesley (1987)

# HPC en física de la materia condensada

- En general, modelos simples pero difíciles de resolver! [número de grados de libertad, no linealidades]
- La **comparación cuantitativa con experimentos**, necesaria para poder testear el **poder de predicción de distintos modelos** [cuánticos o clásicos, microscópicos o mesoscópicos], nos obliga a menudo a implementar métodos numéricos de alta performance
  - Efectos de tamaño finito y de desorden
  - Complejidad emergente, correlaciones no triviales, etc.
  - Explorar la sensibilidad a los parámetros, la calidad de las aproximaciones, etc.

# Acceso a una TOP500

- *Resultados de alta calidad en un tiempo menor*
  - *Aspirar a journals de más alto impacto en ciencia básica.*
  - *Fomentar y agilizar la sinergia entre ciencia básica y aplicada*
  - *Poner a prueba más ideas en menos tiempo, seleccionar las buenas más rápidamente...*