

Corso seminariale anno accademico 2022/23

Semestre: 2

TITOLO CORSO:

High Performance Computing (HPC) for Materials Science:
interatomic and machine learning modeling

DOCENTE:

Alessandro Mattoni

Corso seminariale per la laurea: magistrale

Numero CFU: 3

Inquadramento del corso:

Il calcolo numerico ad alte prestazione sta acquisendo importanza crescente in ambito scientifico e tecnologico e in particolare in scienza dei materiali. Con l'evolversi tecnologie informatiche (dal calcolo parallelo, alle gpu, ai coprocessori quantistici)

e dei metodi ad esempio legati al machine learning c'è una richiesta crescente di competenze di utilizzo e soprattutto di capacità di sviluppo e programmazione di metodi teorico-computazionali.

Il ruolo strategico del calcolo numerico HPC è riconosciuto anche a livello nazionale dalla recente creazione del centro per il calcolo numerico ad alte prestazioni (CN-HPC) in cui è coinvolto l'unità CNR-IOM di Cagliari per quanto riguarda i metodi di machine learning applicati ai modelli di forza atomica.

Il corso è finalizzato a stimolare l'interesse degli studenti per lo sviluppo del software scientifico in ambito HPC per le quali ci sono ampie prospettive di inserimento post-laurea.

Programma del corso:

Il programma consiste in una selezione di concetti ed elementi di programmazione per il calcolo numerico ad alte prestazioni applicati alla fisica dei materiali.

Organizzazione del corso:

Quattro gruppi di lezioni su (i) struttura, (ii) modelli di forze fisiche (iii) modelli di forze machine learning (iv) risposta materiale; ciascun blocco di sei ore è composto di: richiami teorici di fisica (1h); elementi di programmazione (1h); esercitazione pratica di sviluppo di strumenti informatici (2h).

Ogni blocco richiama alcuni concetti fisici centrali nella modellizzazione atomistica e svilupperà esercizi mirati fornendo una panoramica di linguaggi di programmazione.

Argomenti del corso:

- introduzione al corso (prospettive HPC, Centro Nazionale HPC)

-struttura

ordine atomistico, cristalli e superfici (bash,sed,awk,gnuplot,vmd)

- modelli fisici di forze interatomiche

interazioni locali (due e molti corpi) (python, fortran90)

interazioni a lungo raggio (C,C++, MPI)

- modelli machine learning (reti neurali e processi gaussiani) di forze interatomiche

training e dinamica (Python)

risposta materiale

esempi di applicazione (proprietà meccaniche e vibrazionali) (fortran 90, C/C++)

Modalità svolgimento corso:

esercitazioni pratiche al computer precedute da richiami di fisica ed elementi di programmazione

Testi di riferimento:

slides del corso

Modalità di svolgimento dell'esame:

presentazione di un argomento concordato