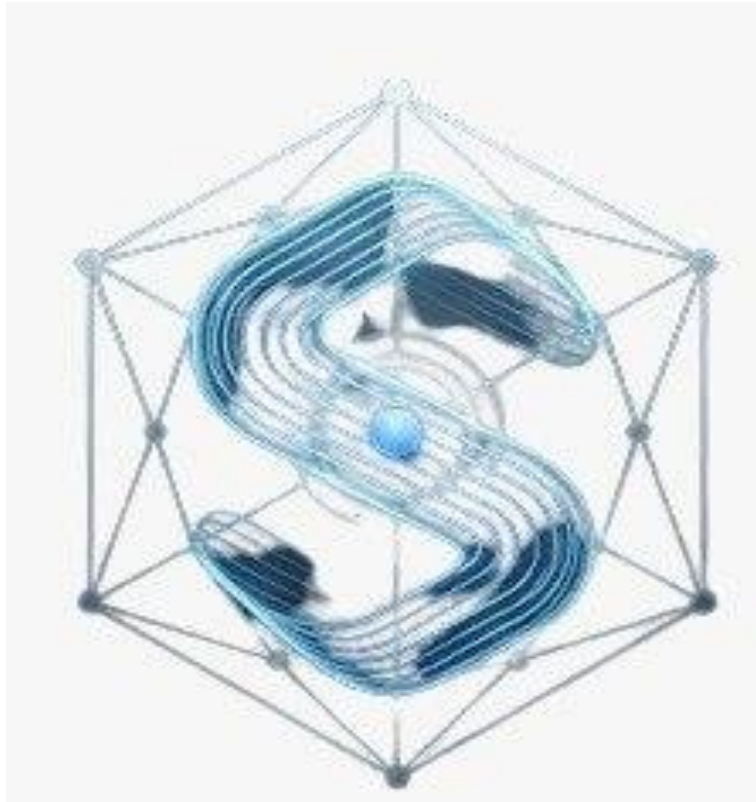




SPARC

Semiconductor Physics Analysis and
Research Code

Table of Contents

Table des matières de la documentation	23
Organisation de la documentation.....	23
1. Installation et démarrage.....	23
2. Utilisation CLI	23
3. Guides de simulation A-Z	23
4. Fonctionnalités du mode Web.....	24
5. Référence technique.....	25
6. Annexes	25
Parcours recommandés.....	25
Parcours débutant	25
Parcours intermédiaire.....	25
Parcours avancé	26
Recherche rapide	26
Par objectif.....	26
Par type de simulation	26
Par problème	26
Contribution.....	26
Signalement de problèmes.....	27
Installation d’SPARC.....	27
Table des matières	27
Prérequis.....	27
Systèmes d’exploitation supportés	27
Prérequis communs	27
Pour Docker	28

Pour installation locale	28
Méthode 1 : Installation avec Docker (recommandée)	28
1.1 Installation de Docker	28
1.2 Clonage du dépôt	29
1.3 Configuration des variables d'environnement	29
1.4 Lancement des services	30
1.5 Vérification de l'installation	30
1.6 Arrêt des services	31
Méthode 2 : Installation locale (Python)	31
2.1 Prérequis Python	31
2.2 Création de l'environnement virtuel	31
2.3 Mise à jour de pip	32
2.4 Installation de Sesame	32
2.5 Installation des dépendances SPARC	32
2.6 Configuration des variables d'environnement	32
2.7 Lancement de l'interface web	33
2.8 Arrêt de l'interface	33
Installation des composants optionnels	33
Optimisation avancée (BoTorch + PyTorch)	33
Assistant LLM local (Ollama)	33
Materials Project API	34
Worker asynchrone (optionnel)	34
Vérification de l'installation	35
Test rapide avec une simulation	35
Test de l'interface web	35
Test de l'API	35
Dépannage	35
Problèmes Docker courants	35
Problèmes Python courants	36
Problèmes de performance	37
Obtenir de l'aide	38
Vérification de l'installation	38
Vérification du mode Web	38
Vérification du mode CLI	38

Prochaine étape.....	39
Premiers pas avec SPARC.....	39
Table des matières	39
1. Lancement de l'interface	39
Avec Docker	39
En local.....	39
Accès à l'interface.....	40
2. Tour d'horizon de l'interface	40
Page d'accueil	40
Navigation principale	41
3. Votre première simulation en 5 minutes.....	42
Étape 1 : Accéder au formulaire de simulation	42
Étape 2 : Configurer une simulation basique	42
Étape 3 : Générer et valider le JSON.....	45
Étape 4 : Lancer la simulation	47
Étape 5 : Suivre la progression	49
Étape 6 : Voir les résultats	49
4. Exploration des fonctionnalités.....	50
4.1 Analyse des résultats.....	50
4.2 Voir l'historique.....	52
4.3 Comparer deux simulations	53
4.4 Accéder à la base de matériaux.....	54
5. Prochaines étapes	55
Pour approfondir	55
Pour expérimenter	56
Pour contribuer	56
Besoin d'aide ?	56
Premiers pas avec le CLI	56
Étape 1 : Créer un fichier de configuration.....	56
Étape 2 : Lancer la simulation.....	57
Étape 3 : Voir les résultats.....	57
Web vs CLI	57
Utilisation de la ligne de commande (CLI).....	57
Table des matières	57

1. Introduction au mode CLI.....	58
1.1 Qu'est-ce que le mode CLI ?	58
1.2 Avantages du mode CLI.....	58
1.3 Quand utiliser CLI vs Web	58
2. Installation et configuration	58
2.1 Vérification de l'installation	58
2.2 Configuration de l'environnement.....	59
2.3 Variables d'environnement spécifiques CLI.....	59
3. Commandes de base.....	59
3.1 Aide	59
3.2 Lister les types de simulation	59
3.3 Voir un exemple de configuration.....	60
3.4 Lancer une simulation	60
3.5 Options additionnelles.....	60
4. Structure des fichiers JSON	60
4.1 Format JSON attendu.....	60
4.2 Champs obligatoires	61
4.3 Champs optionnels.....	61
4.4 Validation du JSON	61
5. Exemples d'utilisation.....	61
5.1 Simulation simple.....	61
5.2 Simulation avec paramètres.....	62
5.3 Batch processing.....	62
5.4 Profiling.....	62
6. Comparaison Web vs CLI	62
6.1 Tableau comparatif.....	62
6.2 Avantages/inconvénients.....	63
6.3 Quand choisir lequel.....	63
7. Cas d'usage avancés	63
7.1 Scripts d'automatisation	63
7.2 Intégration dans des pipelines CI/CD	64
7.3 Parallélisation	64
7.4 Traitement de données massif	65
8. Dépannage	65

8.1 Erreurs courantes.....	65
8.2 Messages d'erreur	66
8.3 Solutions.....	66
Conclusion	66
Ce que vous avez appris	67
Prochaines étapes.....	67
Guides de simulation A-Z.....	67
Guides disponibles	67
1. Homojonction Silicium.....	67
2. Hétérojonction CdTe/CdS.....	68
3. Cellule Tandem Si/Si.....	68
Progression recommandée	69
Pour les débutants.....	69
Pour les utilisateurs intermédiaires	69
Pour les utilisateurs avancés	69
Conseils pour suivre les guides	70
Avant de commencer	70
Pendant le guide	70
Mode CLI.....	70
Après le guide.....	70
Autres types de simulation	71
Besoin d'aide ?	71
Contribution.....	71
Guide complet : Simulation d'homojonction Silicium	72
Table des matières du guide.....	72
1. Introduction	72
1.1 Qu'est-ce qu'une homojonction ?	72
1.2 Pourquoi simuler une homojonction silicium ?	72
1.3 Cas d'usage typiques	72
2. Accès à l'interface de simulation.....	73
2.1 Lancement de l'interface web.....	73
2.2 Navigation vers le formulaire de simulation	73
2.3 Description de l'interface du formulaire	74
3. Configuration des paramètres	75

3.1 Informations générales	75
3.2 Sélection du matériau	75
3.3 Géométrie de la cellule	77
3.4 Dopage	78
3.5 Tension de polarisation.....	80
3.6 Illumination	81
3.7 Sorties	82
4. Génération et validation du JSON	82
4.1 Génération du JSON	82
4.2 Exemple de JSON généré.....	82
4.3 Validation du JSON	84
4.4 Sauvegarde du JSON (optionnel)	84
5. Lancement de la simulation	85
5.1 Lancement.....	85
5.2 Suivi de la progression	85
5.3 Une fois terminé.....	85
6. Analyse des résultats	85
6.1 Page de résultats.....	85
6.2 Onglet Résumé	85
6.3 Onglet Courbe I-V	86
6.4 Onglet Diagramme de bandes.....	87
6.5 Onglet Densités.....	87
7. Export des résultats	89
7.1 Export JSON.....	89
7.2 Export CSV.....	89
7.3 Génération d'un rapport PDF.....	89
7.4 Localisation des fichiers sur le disque.....	90
8. Comparaison de simulations	90
8.1 Accéder à la comparaison.....	90
8.2 Sélection des simulations	90
8.3 Onglets de comparaison.....	90
9. Bonnes pratiques	91
9.1 Paramètres recommandés pour le silicium.....	91
9.2 Erreurs courantes à éviter	91

9.3 Validation physique des résultats	92
10. Exemples de configurations	92
10.1 Configuration basique	92
10.2 Configuration haute efficacité	93
11. Dépannage.....	94
11.1 La simulation échoue.....	94
11.2 Les résultats semblent incorrects.....	94
11.3 La simulation est très lente	95
Conclusion	95
Ce que vous avez appris	95
Prochaines étapes	95
Continuez à expérimenter !.....	96
12. Version CLI.....	96
12.1 Configuration JSON pour l'homojonction	96
12.2 Lancement de la simulation	96
12.3 Résultats	97
12.4 Comparaison Web vs CLI	97
Guide complet : Simulation d'hétérojonction CdTe/CdS	97
Table des matières du guide.....	97
1. Introduction	98
1.1 Qu'est-ce qu'une hétérojonction ?.....	98
1.2 Pourquoi simuler une hétérojonction CdTe/CdS ?.....	98
1.3 Cas d'usage typiques	98
2. Accès à l'interface de simulation.....	98
2.1 Lancement de l'interface web	98
2.2 Navigation vers le formulaire de simulation	98
3. Configuration des paramètres	100
3.1 Informations générales	100
3.2 Sélection des matériaux	100
3.3 Géométrie de la cellule	102
3.4 Dopage	103
3.5 Contacts	103
3.6 Tension de polarisation.....	104
3.7 Illumination	104

3.8 Sorties	104
4. Génération et validation du JSON	105
4.1 Génération du JSON	105
4.2 Exemple de JSON généré.....	105
5. Lancement de la simulation	106
6. Analyse des résultats	107
6.1 Résumé	107
6.2 Diagramme de bandes	107
6.3 Courbe I-V.....	108
6.4 Profils de densité	108
7. Export des résultats	108
8. Comparaison avec l'homojonction	108
8.1 Pourquoi comparer ?.....	108
8.2 Procédure	109
8.3 Différences typiques.....	109
9. Bonnes pratiques	109
9.1 Paramètres recommandés pour CdTe/CdS.....	109
9.2 Erreurs courantes.....	109
10. Exemples de configurations	110
10.1 Configuration standard.....	110
11. Dépannage.....	110
11.1 Simulation échoue	110
11.2 Voc anormalement bas	111
Conclusion	111
Ce que vous avez appris	111
Prochaines étapes.....	111
12. Version CLI.....	111
12.1 Configuration JSON pour l'hétérojonction	111
12.2 Lancement de la simulation.....	112
12.3 Résultats	112
12.4 Comparaison Web vs CLI	112
Guide complet : Simulation de cellule tandem Si/Si	113
Table des matières du guide.....	113
1. Introduction	113

1.1 Qu'est-ce qu'une cellule tandem ?	113
1.2 Pourquoi simuler une cellule tandem Si/Si ?	113
1.3 Cas d'usage typiques	113
2. Accès à l'interface de simulation	114
2.1 Lancement de l'interface web	114
2.2 Navigation vers le formulaire de simulation	114
3. Configuration des paramètres	115
3.1 Informations générales	115
3.2 Configuration de la Top Cell	115
3.3 Configuration de la Bottom Cell	116
3.4 Couplage optique	117
3.5 Tension de polarisation	118
3.6 Illumination	120
3.7 Sorties	120
4. Génération et validation du JSON	120
4.1 Génération du JSON	120
4.2 Exemple de JSON généré	121
5. Lancement de la simulation	122
6. Analyse des résultats	122
6.1 Résumé	122
6.2 Courbe I-V	123
6.3 Réponse spectrale	123
6.4 Courant matching	123
7. Export des résultats	123
8. Optimisation du courant matching	123
8.1 Pourquoi le courant matching est important	123
8.2 Comment optimiser le courant matching	124
9. Bonnes pratiques	124
9.1 Paramètres recommandés pour tandem Si/Si	124
9.2 Erreurs courantes	124
10. Exemples de configurations	125
10.1 Configuration standard	125
10.2 Configuration optimisée courant matching	125
11. Dépannage	126

11.1 Simulation échoue	126
11.2 Jsc très bas	126
Conclusion	126
Ce que vous avez appris	127
Prochaines étapes	127
12. Version CLI	127
12.1 Configuration JSON pour le tandem	127
12.2 Lancement de la simulation	128
12.3 Résultats	128
12.4 Comparaison Web vs CLI	128
Guide de simulation Multilayers	128
Table des matières	128
1. Introduction	129
1.1 Qu'est-ce qu'une structure multicouche ?	129
1.2 Avantages des structures multicouches	129
1.3 Applications courantes	129
2. Accès à l'interface	129
2.1 Navigation vers le formulaire de simulation	129
2.2 Vue d'ensemble du formulaire	130
3. Configuration des paramètres	131
3.1 Informations générales	131
3.2 Configuration des couches	132
3.3 Géométrie	133
3.4 Dopage	133
3.5 Contacts	134
3.6 Tension	134
3.7 Illumination	134
3.8 Sorties	135
4. Génération et validation du JSON	135
4.1 Génération du JSON	135
4.2 Validation du JSON	136
4.3 Exemple de JSON généré	136
5. Lancement de la simulation	138
5.1 Démarrage de la simulation	138

5.2 Suivi de la progression	138
5.3 Notification de fin	138
6. Analyse des résultats	139
6.1 Résumé des résultats	139
6.2 Courbe I-V	139
6.3 Diagramme de bandes	140
6.4 Densité d'électrons.....	140
6.5 Densité de trous	141
6.6 Profil de génération	141
7. Export des résultats	141
7.1 Export JSON.....	141
7.2 Export CSV	141
7.3 Export PDF	141
7.4 Export PNG.....	142
8. Comparaison avec d'autres structures	142
8.1 Sélection des simulations	142
8.2 Comparaison des courbes I-V	142
8.3 Comparaison des métriques.....	143
8.4 Analyse des différences.....	143
9. Bonnes pratiques	143
9.1 Choix des matériaux	143
9.2 Épaisseurs des couches	143
9.3 Dopage	144
9.4 Maillage	144
9.5 Nommage des simulations.....	144
10. Exemples de configurations	144
10.1 Structure Si/SiGe simple	144
10.2 Structure avec couche antireflet	144
10.3 Structure avec BSF (Back Surface Field).....	145
11. Dépannage.....	146
11.1 Simulation ne converge pas	146
11.2 Résultats incohérents.....	146
11.3 Absence de photocourant	146
11.4 Tension Voc trop faible.....	146

12. Version CLI.....	146
12.1 Configuration JSON pour multilayers.....	146
12.2 Lancement de la simulation	148
12.3 Résultats	148
12.4 Comparaison Web vs CLI	148
Conclusion	148
Ce que vous avez appris	148
Prochaines étapes.....	148
Continuez à expérimenter !.....	149
Fonctionnalités du mode Web.....	149
Optimisation et analyse.....	149
Gestion des simulations	149
Données et matériaux.....	149
Assistance et validation.....	149
Parcours recommandé.....	149
Pour optimiser vos simulations	149
Pour explorer les matériaux	150
Pour analyser vos résultats.....	150
Besoin d'aide ?	150
Optimisation IA par Bayesian Optimization	150
Table des matières	150
1. Introduction	151
1.1 Principe de l'optimisation bayésienne	151
1.2 Cas d'usage	151
2. Accès à l'interface.....	151
2.1 Navigation vers l'optimisation	151
2.2 Description de l'interface	152
3. Configuration de l'optimisation.....	152
3.1 Informations générales	152
3.2 Choix du moteur	153
3.3 Définition des objectifs.....	153
3.4 Paramètres à optimiser	153
3.5 Nombre de trials	155
4. Lancement de l'optimisation	155

4.1 Création du job	155
4.2 Lancement.....	155
4.3 Suivi en temps réel.....	155
4.4 Temps estimé	155
5. Analyse des résultats	156
5.1 Page de résultats	156
5.2 Résumé	156
5.3 Convergence	157
5.4 Heatmap de corrélation	157
5.5 Top 10	157
5.6 Importance des paramètres (Sobol)	158
5.7 Surrogate Model.....	159
6. Export des résultats	160
6.1 Export CSV des trials	160
6.2 Export PDF du rapport	160
6.3 Export du surrogate model.....	160
7. Bonnes pratiques	161
7.1 Choix des bornes.....	161
7.2 Nombre de trials	161
7.3 Choix du moteur.....	161
7.4 Interprétation des résultats.....	161
8. Exemples	161
8.1 Optimisation du dopage Si	161
8.2 Optimisation des épaisseurs	162
8.3 Optimisation multi-paramètres	162
9. API REST.....	163
9.1 Créer un job d'optimisation	163
9.2 Lancer l'optimisation	164
9.3 Suivre la progression (SSE)	164
9.4 Obtenir les résultats	164
9.5 Obtenir le rapport PDF.....	164
Conclusion	164
Ce que vous avez appris	164
Prochaines étapes.....	164

Historique et gestion des simulations	165
Table des matières	165
1. Accès à l'historique.....	165
1.1 Navigation vers l'historique	165
1.2 Description de l'interface	166
2. Fonctionnalités de l'historique	166
2.1 Liste des simulations	166
2.2 Détails d'une simulation	167
2.3 Actions disponibles.....	168
3. Gestion des simulations.....	169
3.1 Suppression	169
3.2 Archivage	169
4. Statut des simulations	170
4.1 Types de statut	170
4.2 Interprétation des statuts	170
5. Bonnes pratiques	170
5.1 Nommage cohérent.....	170
5.2 Organisation par projet.....	171
5.3 Utilisation des favoris	171
5.4 Nettoyage régulier.....	171
6. Dépannage	171
6.1 Simulation bloquée "En cours"	171
6.2 Historique vide	171
6.3 Impossible de supprimer.....	172
Conclusion	172
Ce que vous avez appris	172
Prochaines étapes	172
Base de matériaux.....	172
Table des matières	173
1. Accès à la base de matériaux	173
1.1 Navigation vers la base de matériaux.....	173
1.2 Description de l'interface	173
2. Matériaux intégrés.....	174
2.1 Liste des matériaux.....	174

2.2 Détails d'un matériau	175
3. Création d'un matériau personnalisé	175
3.1 Formulaire de création	175
3.2 Champs requis	176
3.3 Validation	176
3.4 Sauvegarde	177
4. Integration Materials Project	177
4.1 Configuration de l'API	177
4.2 Recherche en ligne	177
4.3 Import des propriétés	177
4.4 Validation	178
5. Utilisation dans une simulation	178
5.1 Sélection depuis /form	178
5.2 Sélection depuis /configure	178
5.3 Auto-complétion	178
6. Bonnes pratiques	179
6.1 Vérification des unités	179
6.2 Sources des données	179
6.3 Validation physique	179
6.4 Documentation	179
7. Dépannage	179
7.1 Matériau non trouvé dans la liste	179
7.2 Propriétés incorrectes après import	180
7.3 Simulation échoue avec nouveau matériau	180
Conclusion	180
Ce que vous avez appris	180
Prochaines étapes	180
Comparaison de simulations	180
Table des matières	181
1. Accès à la comparaison	181
1.1 Navigation vers la comparaison	181
1.2 Description de l'interface	181
2. Sélection des simulations	182
2.1 Choix des deux simulations	182

2.2 Aperçu rapide.....	182
2.3 Lancement de la comparaison.....	182
3. Onglets de comparaison	182
3.1 Onglet J-V	182
3.2 Onglet P-V	183
3.3 Onglet EQE.....	184
3.4 Onglet Radar	185
3.5 Onglet Tableau	185
3.6 Onglet Diff config	186
4. Export de la comparaison.....	187
4.1 Screenshot.....	187
4.2 Export PDF	187
4.3 Export CSV des différences	187
5. Cas d'usage.....	187
5.1 Comparaison avant/après optimisation.....	187
5.2 Comparaison de matériaux.....	188
5.3 Comparaison de géométries.....	188
5.4 Comparaison de dopages.....	188
6. Bonnes pratiques	188
6.1 Simulations comparables	188
6.2 Interprétation des différences.....	189
6.3 Documentation	189
7. Dépannage	189
7.1 Simulations incompatibles.....	189
7.2 Graphiques vides	189
Conclusion	189
Ce que vous avez appris	189
Prochaines étapes.....	190
Statistiques globales.....	190
Table des matières	190
1. Accès aux statistiques.....	190
1.1 Navigation vers les statistiques	190
1.2 Description de l'interface	191
2. Métriques affichées	192

2.1 Distribution des efficacités	192
2.2 Statistiques par type.....	193
2.3 Évolution temporelle.....	193
2.4 Matériaux les utilisés.....	193
3. Filtres.....	194
3.1 Filtre par période.....	194
3.2 Filtre par type.....	194
3.3 Filtre par matériau	194
3.4 Filtre par statut.....	194
4. Export	195
4.1 Export CSV des données.....	195
4.2 Export PNG des graphiques	195
4.3 Export PDF du rapport	195
5. Interprétation.....	195
5.1 Identifier les tendances	195
5.2 Détecter les anomalies.....	196
5.3 Suivre les progrès	196
6. Cas d'usage.....	196
6.1 Suivi de projet	196
6.2 Rapport d'activité	196
6.3 Analyse de performance	196
7. Dépannage	196
7.1 Données vides	196
7.2 Graphiques incorrects.....	197
Conclusion	197
Ce que vous avez appris	197
Prochaines étapes.....	197
Assistant IA conversationnel	197
Table des matières	197
1. Accès à l'assistant.....	198
1.1 Navigation vers l'assistant	198
1.2 Description de l'interface	198
2. Configuration de l'assistant.....	198
2.1 Choix du provider	198

2.2 Installation d'Ollama	199
2.3 Téléchargement des modèles	199
3. Utilisation de l'assistant	199
3.1 Envoi d'un message	199
3.2 Contexte SPARC.....	199
3.3 Exemples d'utilisation.....	199
4. Types de questions	200
4.1 Questions recommandées	200
4.2 Questions hors domaine	200
5. Historique des conversations.....	201
5.1 Sauvegarde automatique	201
5.2 Navigation dans l'historique	201
5.3 Recherche	201
5.4 Suppression	201
6. Limitations.....	201
6.1 Connaissance limitée.....	201
6.2 Pas d'exécution de code	201
6.3 Vérification recommandée.....	202
7. Bonnes pratiques	202
7.1 Questions précises.....	202
7.2 Contexte fourni	202
7.3 Vérification croisée	202
8. Dépannage	202
8.1 Assistant non répondant.....	202
8.2 Réponses incohérentes.....	203
8.3 Modèle non chargé	203
Conclusion	203
Ce que vous avez appris	203
Prochaines étapes.....	203
Validation IEEE/ASTM	203
Table des matières	204
1. Introduction aux standards.....	204
1.1 IEEE Standards	204
1.2 ASTM Standards	204

2. Accès à la validation	204
2.1 Navigation vers la validation.....	204
2.2 Sélection de la simulation.....	205
3. Tests de conformité.....	205
3.1 Test des conditions STC	205
3.2 Test de la courbe I-V	205
3.3 Test des métriques.....	205
3.4 Test de recombinaison	206
4. Interprétation des résultats	206
4.1 Rapport de validation	206
4.2 Statut global.....	206
4.3 Score de conformité.....	206
5. Export du rapport	206
5.1 Export PDF	206
5.2 Export JSON.....	207
5.3 Export pour publication.....	207
6. Bonnes pratiques	207
6.1 Validation avant publication	207
6.2 Correction des problèmes	207
6.3 Documentation	208
7. Dépannage	208
7.1 Validation échoue systématiquement	208
7.2 Avertissements persistants	208
Conclusion	208
Ce que vous avez appris	208
Prochaines étapes.....	209
Documentation de référence.....	209
Contenu de la référence	209
Paramètres de simulation.....	209
Types de simulation.....	209
API REST.....	209
Fichiers de configuration	209
Commandes CLI.....	209
Pour qui est cette section ?	210

Parcours recommandé.....	210
Pour les développeurs.....	210
Pour les chercheurs.....	210
Pour les ingénieurs.....	210
Besoin d'aide ?	210
Référence des commandes CLI.....	210
Table des matières	210
1. Commande principale	211
1.1 Syntaxe.....	211
1.2 Description	211
1.3 Arguments obligatoires	211
1.4 Arguments optionnels	211
2. Options et flags.....	211
2.1 -config.....	211
2.2 -output.....	212
2.3 -type	212
2.4 -profile.....	212
2.5 -verbose	213
2.6 -quiet.....	213
2.7 -list-types	213
2.8 -show-example.....	213
3. Types de simulation disponibles.....	214
3.1 Liste complète	214
3.2 Description détaillée	214
4. Format de sortie	215
4.1 Structure des fichiers de sortie	215
4.2 Noms de fichiers générés.....	215
4.3 Formats disponibles	215
5. Codes de retour.....	216
5.1 Codes de retour standard	216
5.2 Messages d'erreur	216
6. Exemples de configurations.....	216
6.1 Homojonction.....	216
6.2 Hétérojonction.....	217

6.3 Tandem	218
Conclusion	219
Annexes	219
Contenu des annexes	219
Théorie physique	219
Glossaire	219
FAQ	219
Exemples de scripts CLI	219
Pour qui est cette section ?	219
Parcours recommandé	220
Pour les débutants	220
Pour les utilisateurs intermédiaires	220
Pour les utilisateurs avancés	220
Besoin d'aide ?	220
Exemples de scripts CLI	220
Table des matières	220
1. Script simple	221
1.1 Script Bash	221
1.2 Utilisation	221
2. Script batch processing	221
2.1 Script Bash pour plusieurs configurations	221
2.2 Script Bash pour traitement parallèle	222
2.3 Utilisation	223
3. Script avec paramètres variables	223
3.1 Script Python pour modifier des paramètres	223
3.2 Script Python pour balayage paramétrique	224
3.3 Utilisation	226
4. Script d'automatisation	226
4.1 Script pour Cron (Linux)	226
4.2 Script pour Windows Task Scheduler	226
4.3 Script Python pour monitoring	227
5. Script de comparaison	228
5.1 Script Python pour comparer les résultats	228
5.2 Script pour générer un rapport de comparaison	230

6. Script d'optimisation	231
6.1 Script Python pour optimisation simple (grid search)	231
6.2 Script pour sauvegarder les résultats d'optimisation	233
Conclusion	234

Table des matières de la documentation

Cette page répertorie l'ensemble de la documentation SPARC pour le mode Web.

Organisation de la documentation

1. Installation et démarrage

Guides pour installer SPARC et effectuer vos premières simulations.

- [Installation](#) - Guide d'installation Docker et local
- [Premiers pas](#) - Démarrage rapide et première simulation

2. Utilisation CLI

Guide pour l'utilisation en ligne de commande d'SPARC.

- [Guide d'utilisation CLI](#) - Introduction au mode CLI, commandes de base, structure des fichiers JSON, exemples d'utilisation, comparaison Web vs CLI, cas d'usage avancés (automatisation, batch processing, CI/CD), dépannage
- **Durée** : 30 minutes
- **Niveau** : Intermédiaire
- **Prérequis** : Installation d'SPARC terminée

3. Guides de simulation A-Z

Guides pas à pas pour créer, lancer et analyser des simulations photovoltaïques.

3.1 *Homojonction Silicium*

[Guide complet](#) →

- **Durée** : 30 minutes
- **Niveau** : Débutant
- **Contenu** : Configuration complète des paramètres (géométrie, dopage, illumination), génération et validation du JSON, lancement et suivi de la simulation, analyse

détaillée des résultats (courbe I-V, diagramme de bandes, densités), export des résultats, bonnes pratiques et dépannage

- **Prérequis** : Installation d'SPARC terminée

[3.2 Hétérojonction CdTe/CdS](#)

[Guide complet →](#)

- **Durée** : 45 minutes
- **Niveau** : Intermédiaire
- **Contenu** : Sélection et configuration de deux matériaux différents, configuration des contacts (Ohmic/Schottky), gestion des discontinuités de bandes, analyse spécifique aux hétérojonctions, comparaison avec l'homojonction
- **Prérequis** : Guide homojonction silicium complété

[3.3 Cellule Tandem Si/Si](#)

[Guide complet →](#)

- **Durée** : 60 minutes
- **Niveau** : Avancé
- **Contenu** : Configuration de deux cellules empilées, paramètres de couplage optique, courant matching entre top et bottom cell, analyse des résultats tandem, optimisation des épaisseurs relatives
- **Prérequis** : Guides homojonction et hétérojonction complétés

[Voir tous les guides →](#)

4. Fonctionnalités du mode Web

Documentation détaillée de chaque fonctionnalité accessible via l'interface web.

[4.1 Optimisation et analyse](#)

- [Optimisation IA](#) - Bayesian optimization avec Optuna et BoTorch
- [Statistiques globales](#) - Dashboard de métriques globales

[4.2 Gestion des simulations](#)

- [Historique](#) - Gestion, recherche et organisation des simulations
- [Comparaison](#) - Comparaison côte à côte de simulations

[4.3 Données et matériaux](#)

- [Base de matériaux](#) - Matériaux intégrés et personnalisés

4.4 Assistance et validation

- [Assistant IA](#) - Chatbot conversationnel (Ollama/Anthropic)
- [Validation IEEE/ASTM](#) - Conformité aux standards internationaux

Voir toutes les fonctionnalités →

5. Référence technique

Documentation de référence pour les utilisateurs avancés.

- [Paramètres de simulation](#) - Description complète de tous les paramètres
- [Types de simulation](#) - 20+ types de simulation disponibles avec descriptions
- [API REST](#) - Documentation des endpoints et exemples d'utilisation
- [Fichiers de configuration](#) - Format JSON et schémas de validation
- [Commandes CLI](#) - Documentation complète des commandes CLI

Voir toute la référence →

6. Annexes

Informations complémentaires pour approfondir votre compréhension.

- [Théorie physique](#) - Concepts photovoltaïques fondamentaux
- [Glossaire](#) - Terminologie technique et définitions
- [FAQ](#) - Questions fréquentes et solutions
- [Exemples de scripts CLI](#) - Scripts d'automatisation prêts à l'emploi

Voir toutes les annexes →

Parcours recommandés

Parcours débutant

Pour les nouveaux utilisateurs d'SPARC.

1. [Installation](#) - Installer SPARC (Docker ou local)
2. [Premiers pas](#) - Effectuer votre première simulation
3. [Guide homojonction silicium](#) - Simulation complète
4. [Historique des simulations](#) - Gérer vos simulations

Temps total estimé : 1h30

Parcours intermédiaire

Pour les utilisateurs confortables avec les concepts de base.

1. [Guide hétérojonction CdTe/CdS](#) - Simuler des interfaces
2. [Base de matériaux](#) - Explorer et créer des matériaux
3. [Comparaison de simulations](#) - Analyser les différences

4. [Optimisation IA](#) - Optimiser automatiquement

Temps total estimé : 2h30

Parcours avancé

Pour les utilisateurs expérimentés.

1. [Guide cellule tandem](#) - Simuler des multi-jonctions
2. [Optimisation IA avancée](#) - Utiliser BoTorch
3. [API REST](#) - Intégration automatisée
4. [Théorie physique](#) - Approfondir les concepts

Temps total estimé : 3h

Recherche rapide

Par objectif

- **Je veux installer SPARC** → [Installation](#)
- **Je veux faire ma première simulation** → [Premiers pas](#)
- **Je veux simuler une cellule Si** → [Guide homojonction](#)
- **Je veux optimiser ma cellule** → [Optimisation IA](#)
- **Je veux comparer deux simulations** → [Comparaison](#)
- **Je veux créer un matériau** → [Base de matériaux](#)
- **Je veux utiliser l'assistant IA** → [Assistant IA](#)
- **Je veux automatiser avec l'API** → [API REST](#)

Par type de simulation

- **Homojonction** → [Guide homojonction Si](#)
- **Hétérojonction** → [Guide hétérojonction CdTe/CdS](#)
- **Tandem** → [Guide tandem Si/Si](#)
- **Autres types** → [Types de simulation](#)

Par problème

- **Problème d'installation** → [Installation - Dépannage](#)
- **Simulation échoue** → [Guide homojonction - Dépannage](#)
- **Résultats incorrects** → [FAQ](#)
- **Terme inconnu** → [Glossaire](#)

Contribution

Pour contribuer à la documentation :

1. Consultez le dépôt GitHub : <https://github.com/zorbeur/sparcs>
2. Fork le dépôt
3. Créez une branche pour vos modifications

4. Soumettez une pull request avec une description claire

Signalement de problèmes

Pour signaler un problème dans la documentation :

1. Vérifiez d'abord dans la [FAQ](#)
2. Ouvrez une issue sur GitHub : <https://github.com/zorbeur/sparcs/issues>
3. Décrivez le problème avec :
 - Le fichier ou section concerné
 - Le comportement attendu
 - Le comportement observé
 - Votre système d'exploitation
 - La version d'SPARC

Installation d'SPARC

Ce guide vous accompagne dans l'installation d'SPARC sur votre machine. Deux méthodes sont disponibles : Docker (recommandée) et installation locale Python.

Temps estimé : 15-30 minutes

Niveau : Débutant

Table des matières

1. [Prérequis](#)
 2. [Méthode 1 : Installation avec Docker \(recommandée\)](#)
 3. [Méthode 2 : Installation locale \(Python\)](#)
 4. [Installation des composants optionnels](#)
 5. [Vérification de l'installation](#)
 6. [Dépannage](#)
-

Prérequis

Systèmes d'exploitation supportés

- **Linux** : Ubuntu 20.04+, Debian 11+, Fedora 35+
- **macOS** : 11.0+ (Big Sur ou plus récent)
- **Windows** : Windows 10/11 avec WSL2 (Windows Subsystem for Linux)

Prérequis communs

- **Git** : Pour cloner le dépôt
- **Navigateur web** : Chrome, Firefox, Safari ou Edge (pour l'interface web)
- **8 Go de RAM minimum** (16 Go recommandés)

- **10 Go d'espace disque libre**

Pour Docker

- **Docker Desktop** : Version 20.10+
- **Docker Compose** : Version 2.0+

Pour installation locale

- **Python** : Version 3.10 ou supérieure (3.11 recommandé)
 - **pip** : Gestionnaire de paquets Python
 - **Compilateur C** : gcc (Linux), Xcode Command Line Tools (macOS), ou Build Tools for Visual Studio (Windows)
-

Méthode 1 : Installation avec Docker (recommandée)

L'installation avec Docker est la méthode recommandée car elle garantit un environnement reproductible et isole les dépendances.

1.1 Installation de Docker

Sur Windows

1. Téléchargez Docker Desktop depuis <https://www.docker.com/products/docker-desktop>
2. Exécutez l'installateur
3. Activez WSL2 lors de l'installation
4. Redémarrez votre machine
5. Lancez Docker Desktop et attendez qu'il soit prêt

Sur macOS

1. Téléchargez Docker Desktop pour Mac depuis <https://www.docker.com/products/docker-desktop>
2. Ouvrez le fichier .dmg
3. Glissez Docker dans Applications
4. Lancez Docker depuis Applications
5. Attendez que Docker soit prêt (icône dans la barre de menu)

Sur Linux (Ubuntu/Debian)

Mettre à jour Les paquets

```
sudo apt update
```

Installer Les dépendances

```
sudo apt install -y ca-certificates curl gnupg
```

Ajouter la clé GPG officielle Docker

```
sudo install -m 0755 -d /etc/apt/keyrings
```

```
curl -fsSL https://download.docker.com/linux/ubuntu/gpg | sudo gpg --dearmor
```

```

-o /etc/apt/keyrings/docker.gpg
sudo chmod a+r /etc/apt/keyrings/docker.gpg

# Ajouter Le dépôt Docker
echo \
    "deb [arch=$(dpkg --print-architecture) signed-
by=/etc/apt/keyrings/docker.gpg] https://download.docker.com/linux/ubuntu \
    $(. /etc/os-release && echo "$VERSION_CODENAME") stable" | sudo tee
/etc/apt/sources.list.d/docker.list > /dev/null

# Installer Docker Engine
sudo apt update
sudo apt install -y docker-ce docker-ce-cli containerd.io docker-buildx-
plugin docker-compose-plugin

# Ajouter votre utilisateur au groupe docker
sudo usermod -aG docker $USER

# Déconnectez-vous et reconnectez-vous pour appliquer les changements

Vérification de Docker
docker --version
docker compose version

```

Vous devriez voir les versions de Docker et Docker Compose.

1.2 Clonage du dépôt

```

# Cloner Le dépôt
git clone https://github.com/zorbeur/sparcs.git

```

```

# Entrer dans Le répertoire
cd sparcs

```

Note : Si vous n'avez pas git, installez-le avec : - Ubuntu/Debian : `sudo apt install git` - macOS : `xcode-select --install` - Windows : Téléchargez depuis <https://git-scm.com/>

1.3 Configuration des variables d'environnement

SPARC utilise un fichier `.env` pour la configuration.

```

# Copier le fichier d'exemple
cp .env.example .env

```

Éditez le fichier `.env` avec votre éditeur de texte préféré :

```

nano .env
# ou
vim .env
# ou
code .env

```

Paramètre obligatoire à modifier :

SESAME_WEB_SECRET=changez-cette-cle-avec-une-chaine-securisee

Choisissez une chaîne aléatoire et sécurisée (ex:

SESAME_WEB_SECRET=ma_cle_secrete_12345abcdef)

Autres paramètres (optionnels) :

Serveur

SESAME_WEB_HOST=0.0.0.0

SESAME_WEB_PORT=5000

SESAME_WEB_DEBUG=0

Materials Project API (optionnel)

MATERIALS_PROJECT_API_KEY=votre_cle_api

LLM Provider (optionnel)

SPARC_LLM_PROVIDER=ollama

SPARC_LLM_MODEL=llama3.2

Attention : Ne partagez jamais votre fichier .env ou vos clés secrètes.

1.4 Lancement des services

Lancer tous les services (web, workers, redis)

docker compose up

Premier lancement : La première fois, Docker doit construire l'image, ce qui peut prendre 5-10 minutes car il télécharge PyTorch CPU (~300 MB) et Sesame depuis GitHub.

Vous devriez voir des messages comme :

[+] Running 5/5

✓ Network sparcs_default Created

✓ Volume "sparc_data" Created

✓ Volume "redis_data" Created

✓ Container sparcs-redis-1 Started

✓ Container sparcs-web-1 Started

✓ Container sparcs-worker-1 Started

1.5 Vérification de l'installation

Ouvrez votre navigateur web et accédez à :

http://localhost:5000

Vous devriez voir la page d'accueil d'SPARC.

Note : Si le port 5000 est déjà utilisé, vous pouvez le changer dans .env avec
SESAME_WEB_PORT=5050.

1.6 Arrêt des services

Pour arrêter les services :

```
docker compose down
```

Pour arrêter et supprimer les volumes (attention, cela efface les données) :

```
docker compose down -v
```

Méthode 2 : Installation locale (Python)

Cette méthode est utile pour le développement, les machines sans Docker, ou pour itérer rapidement sans reconstruire l'image Docker.

2.1 Prérequis Python

Vérifiez votre version de Python :

```
python --version
# ou
python3 --version
```

Vous devez avoir Python 3.10 ou supérieure.

Installation de Python (si nécessaire) :

Sur Linux (Ubuntu/Debian)

```
sudo apt update
sudo apt install -y python3.11 python3-pip python3-venv
```

Sur macOS

```
# Avec Homebrew
brew install python@3.11
```

Sur Windows

Téléchargez Python depuis <https://www.python.org/downloads/> et installez-le en cochant "Add Python to PATH".

2.2 Création de l'environnement virtuel

Il est fortement recommandé d'utiliser un environnement virtuel pour isoler les dépendances d'SPARC.

```
# Cloner Le dépôt (si pas déjà fait)
git clone https://github.com/zorbeur/sparcs.git
cd sparcs
```

```
# Créer l'environnement virtuel
```

```
python -m venv .venv
```

```
# Activer l'environnement
# Sur Linux/macOS :
source .venv/bin/activate
# Sur Windows (PowerShell) :
.venv\Scripts\Activate.ps1
# Sur Windows (CMD) :
.venv\Scripts\activate.bat
```

Votre prompt devrait maintenant afficher (.venv) au début.

2.3 Mise à jour de pip

```
pip install --upgrade pip setuptools wheel
```

2.4 Installation de Sesame

Sesame est une dépendance non publiée sur PyPI, elle doit être installée directement depuis GitHub.

```
pip install
git+https://github.com/usnistgov/sesame.git@e2769a9d15c64415a87a5cfb566cbf2f3
dac309f
```

Note : Cette version est “pinned” pour garantir la reproductibilité. Si vous rencontrez des problèmes, vous pouvez essayer sans le commit hash : `pip install git+https://github.com/usnistgov/sesame.git`

2.5 Installation des dépendances SPARC

```
pip install -r requirements.txt
```

Temps estimé : 5-10 minutes selon votre connexion internet.

2.6 Configuration des variables d'environnement

```
# Copier le fichier d'exemple
cp .env.example .env
```

```
# Éditer le fichier
nano .env
```

Paramètres obligatoires :

SESAME_WEB_SECRET=changez-cette-cle-avec-une-chaine-securisee

Paramètres optionnels :

```
# Materials Project API
MATERIALS_PROJECT_API_KEY=votre_cle_api
```

```
# LLM Provider
SPARC_LLM_PROVIDER=ollama
SPARC_LLM_MODEL=llama3.2
OLLAMA_BASE_URL=http://localhost:11434
```


2.7 Lancement de l'interface web

```
python -m web.app
```

Ou alternativement :

```
python main.py --mode web
```

Vous devriez voir :

```
* Serving Flask app 'web.app'
* Debug mode: off
* Running on http://0.0.0.0:5000
```

Ouvrez votre navigateur sur <http://localhost:5000>.

2.8 Arrêt de l'interface

Appuyez sur Ctrl+C dans le terminal pour arrêter le serveur.

Installation des composants optionnels

Optimisation avancée (BoTorch + PyTorch)

Pour utiliser le moteur d'optimisation BoTorch (Gaussian Process avancé) :

```
# PyTorch CPU (recommandé pour la plupart des utilisateurs)
pip install torch --index-url https://download.pytorch.org/whl/cpu
```

```
# BoTorch
pip install botorch
```

Note : Si vous avez une GPU NVIDIA, vous pouvez installer PyTorch avec support CUDA pour des performances accrues. Consultez <https://pytorch.org/> pour les instructions spécifiques.

Assistant LLM local (Ollama)

Pour utiliser l'assistant IA local avec Ollama :

1. Installer Ollama :

Sur Linux

```
curl -fsSL https://ollama.com/install.sh | sh
```

Sur macOS

Téléchargez depuis <https://ollama.com/download> et installez le .dmg.

Sur Windows

Téléchargez depuis <https://ollama.com/download> et installez l'exécutable.

2. Démarrer Ollama :

`ollama serve`

3. Télécharger un modèle :

`ollama pull llama3.2`

4. Configurer SPARC :

Dans `.env` :

```
SPARC_LLM_PROVIDER=ollama
SPARC_LLM_MODEL=llama3.2
OLLAMA_BASE_URL=http://localhost:11434
```

Materials Project API

Pour accéder à la base de données Materials Project :

1. Obtenir une clé API :

- Allez sur <https://next-gen.materialsproject.org/api>
- Créez un compte gratuit
- Générez une clé API

2. Configurer SPARC :

Dans `.env` :

```
MATERIALS_PROJECT_API_KEY=votre_cle_api
```

Worker asynchrone (optionnel)

Pour le traitement distribué des simulations longues :

1. Installer Redis :

Sur Linux

```
sudo apt install redis-server
sudo systemctl start redis
```

Sur macOS

```
brew install redis
brew services start redis
```

2. Lancer le worker :

Dans un terminal séparé :

```
celery -A web.tasks worker --loglevel=info
```

3. Lancer le scheduler (optionnel) :

Dans un autre terminal :

```
celery -A web.tasks beat --loglevel=info
```

Vérification de l'installation

Test rapide avec une simulation

Lancez une simulation de test pour vérifier que tout fonctionne :

```
python main.py configs/silicon_homo.json --verbose
```

Vous devriez voir la progression de la simulation et les résultats à la fin.

Test de l'interface web

1. Lancez l'interface web (Docker ou local)
2. Ouvrez `http://localhost:5000`
3. Vérifiez que la page d'accueil s'affiche correctement
4. Cliquez sur "Nouvelle simulation" et vérifiez que le formulaire s'affiche

Test de l'API

```
curl http://localhost:5000/api/health
```

Vous devriez recevoir :

```
{  
  "status": "healthy",  
  "version": "2.1.0"  
}
```

Dépannage

Problèmes Docker courants

Problème : "Permission denied" sur Linux

Symptôme : Erreur de permission lors de `docker compose up`

Solution :

```
# Ajouter votre utilisateur au groupe docker  
sudo usermod -aG docker $USER
```

```
# Déconnectez-vous et reconnectez-vous  
# Ou utilisez newgrp pour appliquer immédiatement  
newgrp docker
```

Problème : Port 5000 déjà utilisé

Symptôme : `Error: bind: address already in use`

Solution :

1. Changez le port dans .env :
SESAME_WEB_PORT=5050
2. Ou arrêtez le service utilisant le port 5000

Problème : Image Docker ne se construit pas

Symptôme : Erreur lors de docker compose build

Solution :

Nettoyer Le cache Docker

docker system prune -a

Reconstruire sans cache

docker compose build --no-cache

Problème : Conteneur Redis ne démarre pas

Symptôme : Container sparcs-redis-1 exited with code 1

Solution :

Vérifier Les Logs

docker compose logs redis

Recréer Le conteneur Redis

docker compose down

docker compose up -d redis

Problèmes Python courants

Problème : ModuleNotFoundError: sesame

Symptôme : ModuleNotFoundError: No module named 'sesame'

Solution :

Réinstaller Sesame

pip install

git+https://github.com/usnistgov/sesame.git@e2769a9d15c64415a87a5cfb566cbf2f3
dac309f

Problème : pip install échoue sur Windows

Symptôme : Erreur lors de l'installation de mp-api ou h5py

Solution :

Mettre à jour h5py et numpy

pip install --upgrade h5py numpy

```
# Réessayer l'installation
pip install -r requirements.txt
```

Problème : pylatexenc bloque l'installation

Symptôme : Erreur liée à setuptools lors de l'installation

Solution :

```
# Downgrader setuptools
pip install "setuptools<72"
```

```
# Puis installer les dépendances
pip install -r requirements.txt
```

Problème : Port 5000 occupé (macOS AirPlay)

Symptôme : Flask ne démarre pas sur macOS

Solution :

```
# Utiliser un autre port
FLASK_RUN_PORT=5050 python -m web.app
```

Problème : Base SQLite vide ou permissions

Symptôme : Erreur d'accès à la base de données

Solution :

```
# Donner les permissions d'écriture
chmod u+w web/
```

```
# Ou lancez depuis votre dossier utilisateur
cd ~
cd chemin/vers/sparcs
python -m web.app
```

Problèmes de performance

Problème : Simulations très lentes

Solutions :

1. Réduisez le nombre de points de grille (nx)
 2. Réduisez le nombre de points de tension (voltages.points)
 3. Désactivez les graphiques non nécessaires
 4. Utilisez Docker avec plus de ressources :
- ```
docker compose up --scale worker=4
```

### *Problème : Mémoire insuffisante*

**Symptôme** : Erreur “Out of memory”

**Solutions :**

1. Fermez les autres applications
2. Réduisez nx dans vos configurations
3. Augmentez la mémoire allouée à Docker (Docker Desktop → Settings → Resources)

### **Obtenir de l'aide**

Si vous ne trouvez pas la solution ici :

1. Consultez la [FAQ](#)
2. Consultez le [glossaire](#) pour les termes techniques
3. Utilisez l'[assistant IA](#) si disponible
4. Signalez le problème sur GitHub : <https://github.com/zorbeur/sparcs/issues>

Lorsque vous signalez un problème, incluez : - Votre système d'exploitation - La version d'SPARC - Le message d'erreur complet - Les étapes pour reproduire le problème

---

## **Vérification de l'installation**

### **Vérification du mode Web**

Pour vérifier que le mode Web fonctionne correctement :

1. Ouvrez votre navigateur
2. Accédez à `http://localhost:5000`
3. La page d'accueil d'SPARC devrait s'afficher

### **Vérification du mode CLI**

Pour vérifier que le mode CLI fonctionne correctement :

```
Vérifier que main.py est accessible
python main.py --help
```

```
Lister les types de simulation disponibles
python main.py --list-types
```

```
Voir un exemple de configuration
python main.py --show-example homojunction
```

Si ces commandes fonctionnent, le mode CLI est prêt à l'emploi.

Pour plus d'informations sur le mode CLI, consultez le [Guide d'utilisation CLI](#).

---

## Prochaine étape

Une fois l'installation terminée et vérifiée, passez aux [premiers pas](#) pour effectuer votre première simulation.

## Premiers pas avec SPARC

Ce guide vous accompagne dans vos premières étapes avec SPARC : lancement de l'interface, tour d'horizon, et réalisation de votre première simulation en 5 minutes.

**Temps estimé** : 10-15 minutes

**Niveau** : Débutant

**Prérequis** : Installation d'SPARC terminée

---

### Table des matières

1. [Lancement de l'interface](#)
  2. [Tour d'horizon de l'interface](#)
  3. [Votre première simulation en 5 minutes](#)
  4. [Exploration des fonctionnalités](#)
  5. [Prochaines étapes](#)
- 

## 1. Lancement de l'interface

### Avec Docker

Si vous avez installé SPARC avec Docker :

```
Naviguez vers le répertoire sparcs
cd sparcs
```

```
Lancez tous les services
docker compose up
```

Attendez que tous les conteneurs soient démarrés. Vous devriez voir des messages comme :

```
✓ Container sparcs-redis-1 Started
✓ Container sparcs-web-1 Started
✓ Container sparcs-worker-1 Started
```

### En local

Si vous avez installé SPARC localement :

```
Naviguez vers le répertoire sparcs
cd sparcs

Activez l'environnement virtuel (si créé)
source .venv/bin/activate # Linux/macOS
.venv\Scripts\Activate.ps1 # Windows PowerShell

Lancez l'interface web
python -m web.app
```

Vous devriez voir :

```
* Serving Flask app 'web.app'
* Debug mode: off
* Running on http://0.0.0.0:5000
```

### Accès à l'interface

Ouvrez votre navigateur web et accédez à :

`http://localhost:5000`

**Note** : Si vous avez changé le port dans `.env`, utilisez le port configuré (ex: `http://localhost:5050`).

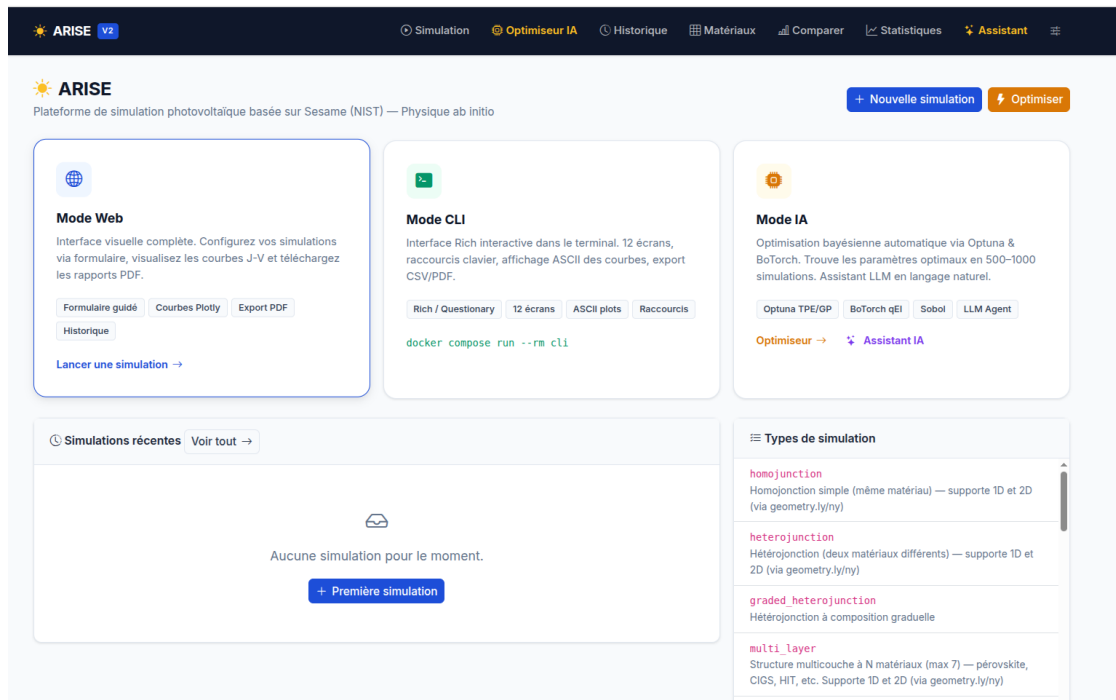
---

## 2. Tour d'horizon de l'interface

### Page d'accueil

La page d'accueil d'SPARC présente les principales fonctionnalités :





Page d'accueil SPARC

Figure 1 : Page d'accueil d'SPARC avec les principales sections

### Éléments principaux :

1. **En-tête** : Logo et navigation principale
2. **Section "Nouvelle simulation"** : Point d'entrée pour créer une simulation
3. **Section "Optimisation IA"** : Accès à l'optimiseur bayésien
4. **Section "Historique"** : Accès à vos simulations passées
5. **Section "Matériaux"** : Accès à la base de matériaux
6. **Section "Comparaison"** : Comparaison de simulations
7. **Section "Statistiques"** : Métriques globales
8. **Section "Assistant IA"** : Chatbot conversationnel

### Navigation principale

Le menu de navigation (en haut de la page) permet d'accéder rapidement aux différentes sections :

- **Accueil (/)** - Page d'accueil
- **Form (/form)** - Formulaire de nouvelle simulation
- **Optimiser (/optimize)** - Optimisation IA
- **Historique (/history)** - Historique des simulations
- **Matériaux (/materials)** - Base de matériaux
- **Comparer (/compare)** - Comparaison de simulations
- **Statistiques (/statistics)** - Statistiques globales

- **Chat** (/chat) - Assistant IA

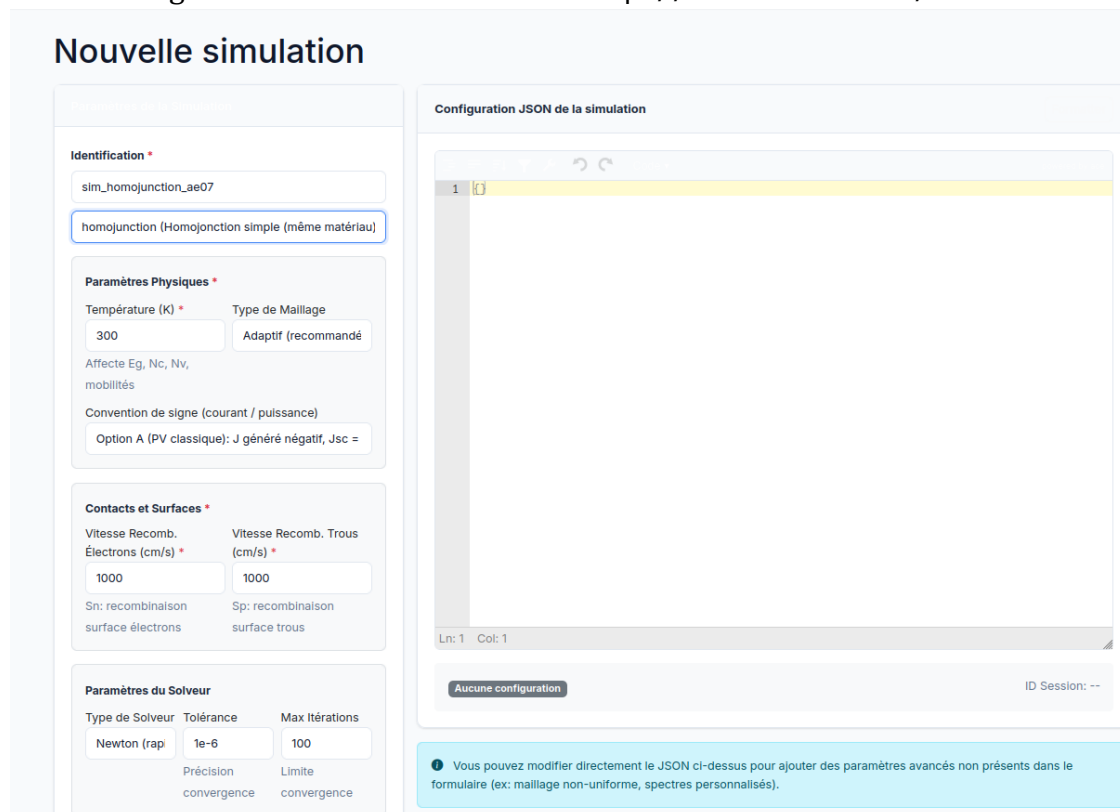
### 3. Votre première simulation en 5 minutes

Cette section vous guide pas à pas pour créer et lancer votre première simulation rapidement.

#### Étape 1 : Accéder au formulaire de simulation

Depuis la page d'accueil :

1. Cliquez sur le bouton **“Nouvelle simulation”** dans la section principale OU
2. Cliquez sur **“Form”** dans le menu de navigation OU
3. Naviguez directement vers l'URL : `http://localhost:5000/form`



*Bouton Nouvelle simulation*

*Figure 2 : Bouton “Nouvelle simulation” sur la page d'accueil*

#### Étape 2 : Configurer une simulation basique

Le formulaire de simulation s'affiche avec plusieurs sections. Nous allons remplir les champs essentiels pour une simulation d'homojonction silicium basique.

## Nouvelle simulation

**Identification \***

sim\_homojunction\_ae07

homojunction (Homojonction simple (même matériau))

**Paramètres Physiques \***

Température (K) \* 300 Type de Maillage Adaptif (recommandé)

Affecte Eg, Nc, Nv, mobilités

Convention de signe (courant / puissance)

Option A (PV classique): J généré négatif, Jsc =

**Contacts et Surfaces \***

Vitesse Recomb. Électrons (cm/s) \* 1000 Vitesse Recomb. Trous (cm/s) \* 1000

Sn: recombinaison surface électrons Sp: recombinaison surface trous

**Paramètres du Solveur**

Type de Solveur Tolérance Max Itérations

Newton (rap) 1e-6 100

Précision Limite

convergence convergence

**Configuration JSON de la simulation**

1 [ ]

Ln: 1 Col: 1

Aucune configuration

ID Session: --

Vous pouvez modifier directement le JSON ci-dessus pour ajouter des paramètres avancés non présents dans le formulaire (ex: maillage non-uniforme, spectres personnalisés).

### Formulaire de simulation

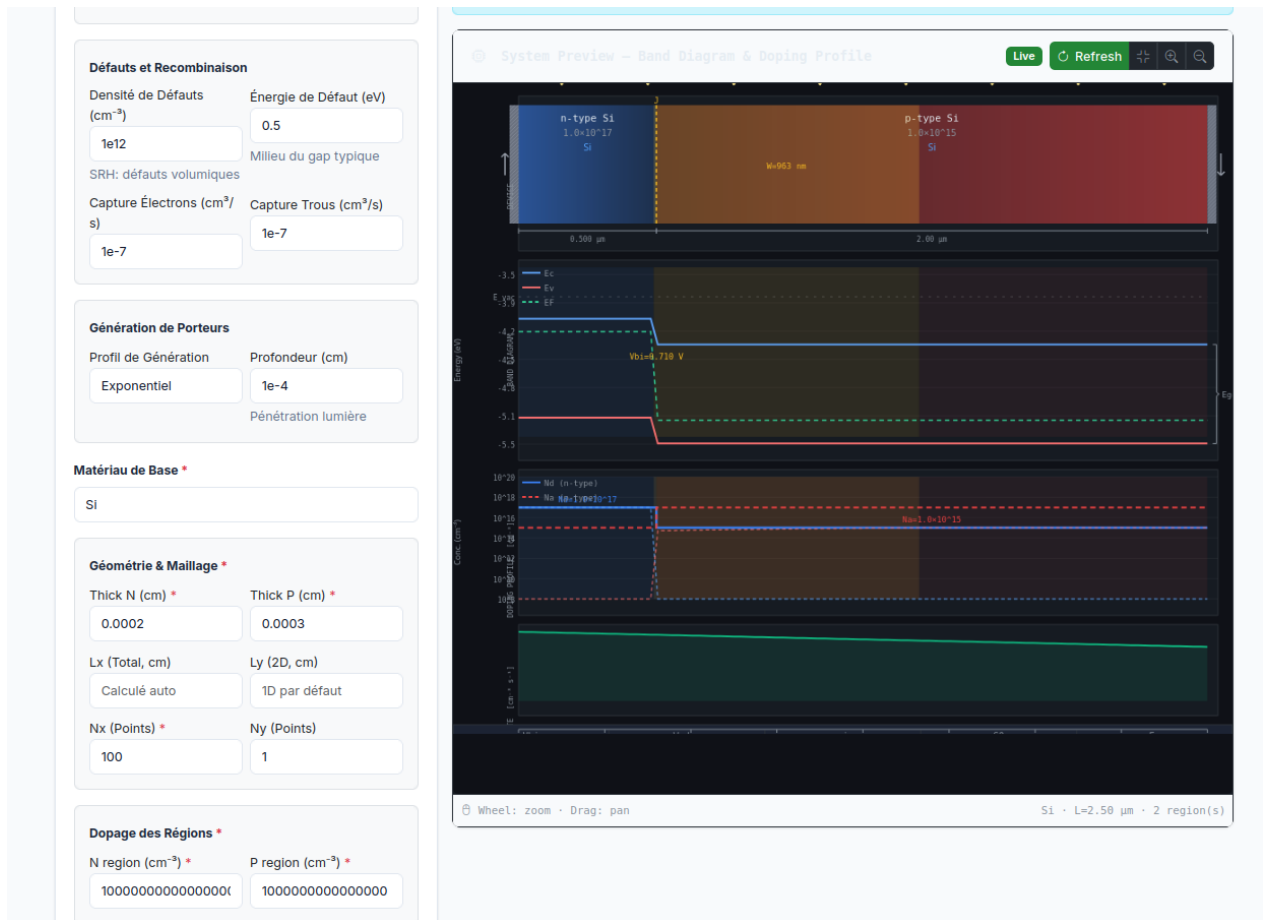
Figure 3 : Formulaire de simulation avec les champs essentiels remplis

#### 3.1 Informations générales

- **Nom de la simulation** : ma\_premiere\_simulation
- **Type de simulation** : Sélectionnez homojonction dans le menu déroulant

#### 3.2 Sélection du matériau

1. Cliquez sur le champ **“Matériau actif”** ou sur le bouton **“Parcourir les matériaux”**
2. Dans la liste qui s’affiche, cliquez sur **“Si”** (Silicium)
3. Les propriétés du matériau s’affichent (Eg = 1.12 eV, etc.)
4. Cliquez sur **“Sélectionner”**



### 3.3 Géométrie

Laissez les valeurs par défaut : - **Épaisseur région N** :  $5e-5$  (0.00005 cm) - **Épaisseur région P** :  $2e-4$  (0.0002 cm) - **Nombre de points** : 100

### 3.4 Dopage

Laissez les valeurs par défaut : - **Dopage région N** :  $1e17$  ( $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ) - **Dopage région P** :  $1e15$  ( $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ )

### 3.5 Tension

Laissez les valeurs par défaut : - **Tension de départ** : 0.0 V - **Tension d'arrêt** : 0.7 V - **Nombre de points** : 50

### 3.6 Illumination

- Cochez la case “**Activée**”
- Laissez les valeurs par défaut :
  - **Flux de photons** :  $2.5e17$  (AM1.5G)
  - **Coefficient d'absorption** :  $5000 \text{ cm}^{-1}$

### 3.7 Sorties

- **Types de graphiques** : Sélectionnez au minimum `iv_curve` et `band_diagram`
- **Format** : Sélectionnez `both` (JSON + PNG)

#### Étape 3 : Générer et valider le JSON

Une fois tous les champs remplis :

1. Cliquez sur le bouton **“Générer JSON”** en bas du formulaire

The screenshot displays a web-based configuration form for a simulation. It is organized into several sections with rounded rectangular backgrounds. The first section, 'Dopage des Régions', contains two input fields for carrier concentrations: 'N region (cm<sup>-3</sup>)' and 'P region (cm<sup>-3</sup>)', both set to 10000000000000000. The second section, 'Balayage de Tension (V)', includes three input fields: 'Start' (-0.2), 'Stop' (0.7), and 'Points' (60). The third section, 'Éclairement (AM1.5 / Laser)', features a toggle switch that is turned on, followed by two input fields for 'Flux (ph/cm<sup>2</sup>/s)' (5000000000000000) and 'Alpha (cm<sup>-1</sup>)' (10000). The final section, 'Graphiques à Générer', contains six checkboxes, all of which are checked: `iv_curve`, `band_diagram`, `carrier_density`, `recombination`, `electric_field`, and `generation_rate`. At the bottom of the form are three buttons: a blue 'Générer JSON' button, a green 'Lancer la Simulation' button, and a white 'Réinitialiser' button.

**Dopage des Régions \***

N region (cm<sup>-3</sup>) \*      P region (cm<sup>-3</sup>) \*

10000000000000000      10000000000000000

**Balayage de Tension (V)**

Start      Stop      Points

-0.2      0.7      60

**Éclairement (AM1.5 / Laser) \***

Flux (ph/cm<sup>2</sup>/s) \*      Alpha (cm<sup>-1</sup>) \*

5000000000000000      10000

**Graphiques à Générer**

☒ `iv_curve`      ☒ `band_diagram`

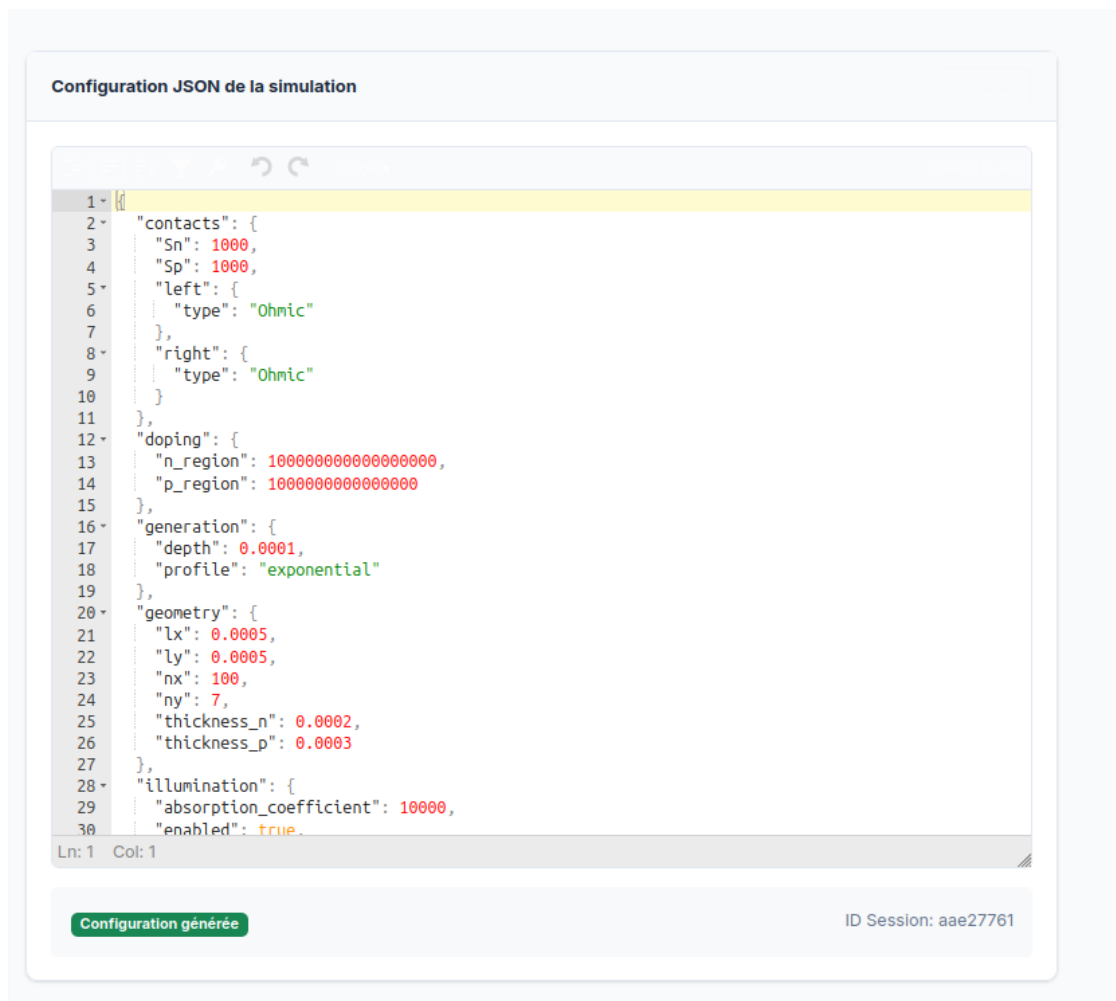
☒ `carrier_density`      ☒ `recombination`

☒ `electric_field`      ☒ `generation_rate`

**Générer JSON**

**Lancer la Simulation**

Réinitialiser



### Bouton Générer JSON

Figure 4 : Panneau JSON généré avec la configuration

Un panneau s'affiche avec le JSON généré. Vérifiez que les valeurs correspondent à ce que vous avez entré.

### Exemple de JSON généré :

```

{
 "simulation_name": "ma_premiere_simulation",
 "simulation_type": "homojunction",
 "materials": {
 "active": "Si"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 5e-5,
 "thickness_p": 2e-4,
 "nx": 100
 },
 "doping": {

```

```

 "n_region": 1e17,
 "p_region": 1e15
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.7,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram"],
 "format": "both"
 }
}

```

Si une erreur est détectée, un message rouge s’affiche avec la correction à apporter.

**Astuce** : Vous pouvez télécharger ce JSON pour le réutiliser plus tard en cliquant sur “Télécharger JSON”.

#### Étape 4 : Lancer la simulation

Cliquez sur le bouton “**Lancer la simulation**”.





*Figure 5 : Bouton “Lancer la simulation”*

### Étape 5 : Suivre la progression

Une page de progression s’affiche :

*Page de progression*

*Figure 6 : Page de progression de la simulation*

#### Informations affichées :

- **Statut** : En cours / Terminé / Échoué
- **Progression** : Barre de progression (0-100%)
- **Temps écoulé** : Temps depuis le début
- **Étape en cours** : Ex: “Résolution de l’équation de Poisson”

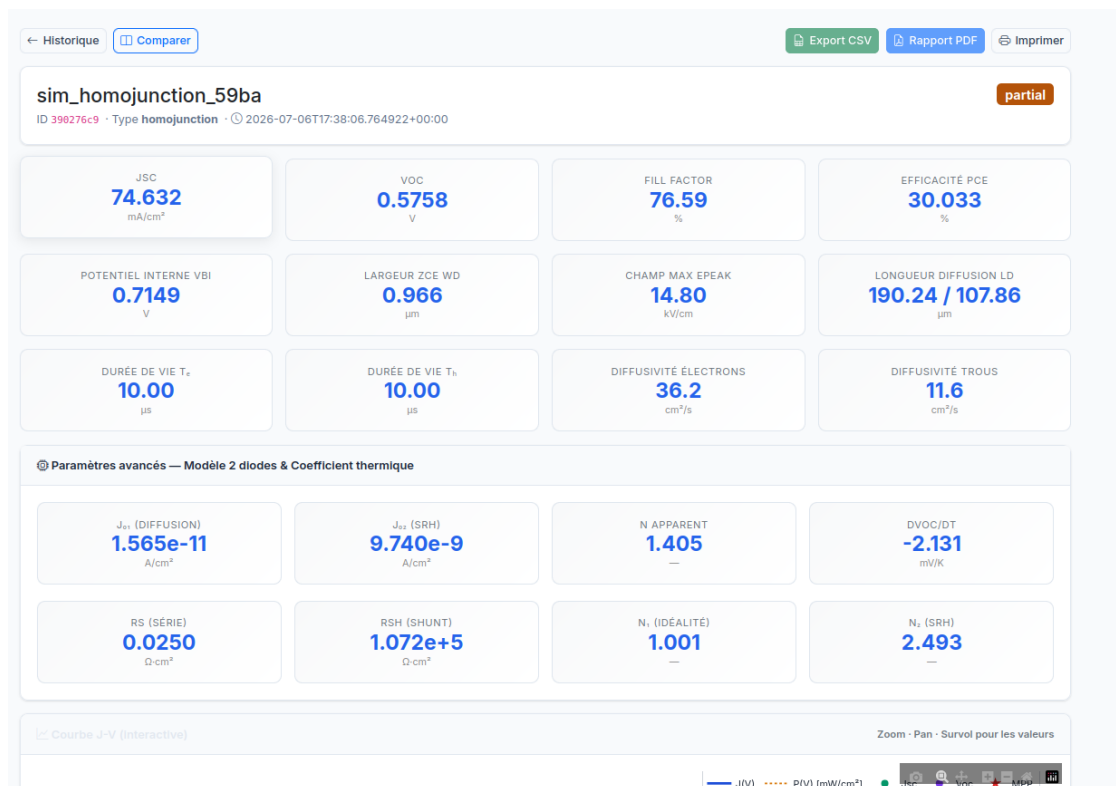
**Temps typique** : Pour cette configuration basique, la simulation devrait prendre 5-15 secondes.

La progression se met à jour automatiquement. Pas besoin de rafraîchir la page.

### Étape 6 : Voir les résultats

Lorsque la simulation est terminée (barre à 100%, statut “Terminé”) :

1. Cliquez sur le bouton “**Voir les résultats**”
2. La page de résultats s’affiche



Page de résultats

Figure 7 : Page de résultats avec les onglets

## 4. Exploration des fonctionnalités

### 4.1 Analyse des résultats

La page de résultats s'organise en onglets. Pour votre première simulation, concentrez-vous sur les deux onglets principaux :

#### Onglet Résumé

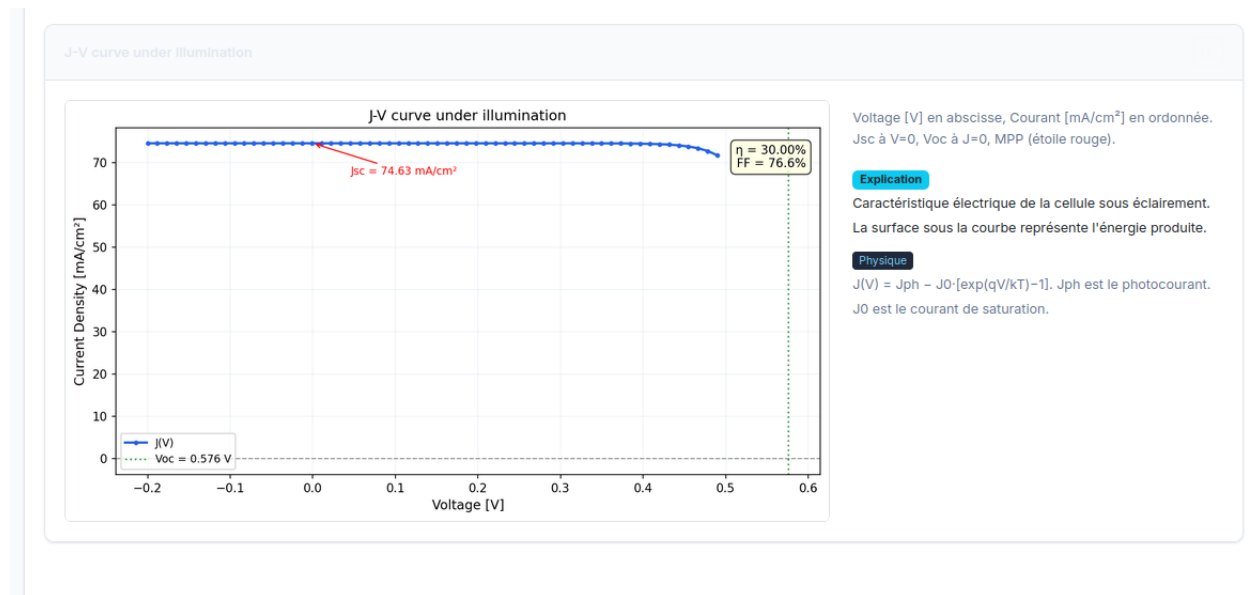
L'onglet Résumé affiche les métriques principales :

- **Efficacité ( $\eta$ )** : Pourcentage de conversion lumière-électricité
- **Courant de court-circuit ( $J_{sc}$ )** : Courant maximal à  $V=0$
- **Tension de circuit ouvert ( $V_{oc}$ )** : Tension à  $I=0$
- **Facteur de remplissage (FF)** : Rapport  $P_{max} / (J_{sc} \times V_{oc})$

**Valeurs typiques pour cette configuration** : -  $\eta$  :  $\sim 18\%$  -  $J_{sc}$  :  $\sim 35 \text{ mA/cm}^2$  -  $V_{oc}$  :  $\sim 0.65 \text{ V}$  - FF :  $\sim 0.79$

### Onglet Courbe I-V

L'onglet Courbe I-V affiche la caractéristique courant-tension :



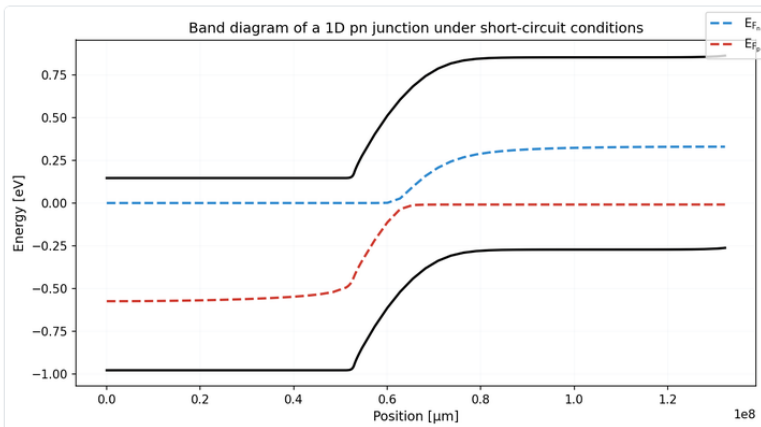
- **Axe X** : Tension (V)
- **Axe Y** : Densité de courant (mA/cm<sup>2</sup>)

**Points clés** : - **Jsc** : Intersection avec l'axe Y (V=0) - **Voc** : Intersection avec l'axe X (J=0) - **Pmax** : Point de puissance maximale (marqué par un cercle)

### Onglet Diagramme de bandes

L'onglet Diagramme de bandes affiche la structure de bandes d'énergie :

Band diagram of a 1D pn junction under short-circuit conditions



Position [ $\mu\text{m}$ ] en abscisse, Energy [eV] en ordonnée.  
Courbes  $E_c$ ,  $E_v$ ,  $E_{Fn}$ ,  $E_{Fp}$ . Les bandes se courbent à la jonction.

**Explication**

Déformation des niveaux d'énergie créant la barrière de potentiel à la jonction pn.

**Physique**

Solution de l'équation de Poisson à l'équilibre. La courbure traduit le champ interne dans la zone de charge d'espace.

Electric field profile  $E(x)$  [V/cm]

- **Axe X** : Position dans la cellule ( $\mu\text{m}$ )
- **Axe Y** : Énergie (eV)

**Observations** : - **Bande de conduction ( $E_c$ )** : En haut - **Bande de valence ( $E_v$ )** : En bas -  
**Courbure des bandes** : Due au champ électrique dans la zone de déplétion

#### 4.2 Voir l'historique

Pour voir votre simulation dans l'historique :

1. Cliquez sur **"Historique"** dans le menu de navigation OU
2. Naviguez vers <http://localhost:5000/history>



## ☐ Comparaison de simulations

☑ Sélectionner les simulations

sim\_triple\_junction\_1609 triple\_junction   **sim\_multi\_layer\_8656 multi\_layer**   sim\_multi\_layer\_874d multi\_layer   sim\_triple\_junction\_ccdf triple\_junction

sim\_contact\_study\_07d1 contact\_study   sim\_graded\_heterojunction\_0b6a graded\_heterojunction   sim\_graded\_heterojunction\_a4c3 graded\_heterojunction

sim\_quantum\_efficiency\_a6fd quantum\_efficiency   sim\_capacitance\_voltage\_e74c capacitance\_voltage   **heterojunction\_143003 heterojunction**   homojunction\_134822 homojunction

sim\_triple\_junction\_4031 triple\_junction   sim\_homojunction\_9768 homojunction   sim\_triple\_junction\_b0b3 triple\_junction   sim\_continuous\_defects\_2366 continuous\_defects

sim\_luminescence\_7a0c luminescence   sim\_capacitance\_voltage\_7503 capacitance\_voltage   sim\_ebic\_simulation\_937d ebic\_simulation   sim\_equivalent\_circuit\_8cb7 equivalent\_circuit

sim\_contact\_study\_5d38 contact\_study   sim\_tandem\_d398 tandem   sim\_spectral\_response\_3b87 spectral\_response   sim\_quantum\_efficiency\_2407 quantum\_efficiency

sim\_spectrum\_study\_8452 spectrum\_study   sim\_variable\_illumination\_0618 variable\_illumination   sim\_temperature\_study\_71b9 temperature\_study

sim\_optimize\_thickness\_73c6 optimize\_thickness   sim\_parametric\_sweep\_f8a3 parametric\_sweep   sim\_grain\_boundary\_2d\_05c7 grain\_boundary\_2d

sim\_grain\_boundary\_2d\_0627 grain\_boundary\_2d   sim\_graded\_heterojunction\_145a graded\_heterojunction   sim\_graded\_heterojunction\_6edb graded\_heterojunction

sim\_heterojunction\_73ab heterojunction   sim\_heterojunction\_6698 heterojunction   sim\_homojunction\_9813 homojunction   sim\_grain\_boundary\_2d\_f104 grain\_boundary\_2d

sim\_grain\_boundaries\_ee0b grain\_boundaries   sim\_with\_defects\_5600 with\_defects   sim\_multi\_layer\_0a75 multi\_layer   sim\_graded\_heterojunction\_970f graded\_heterojunction

sim\_multi\_layer\_208d multi\_layer   sim\_graded\_heterojunction\_91bb graded\_heterojunction   sim\_graded\_heterojunction\_b9dc graded\_heterojunction

sim\_heterojunction\_db12 heterojunction   **sim\_homojunction\_1642 homojunction**   sim\_ebic\_simulation\_deb3 ebic\_simulation

🔍 Comparer   ✕ Effacer   📄 Export CSV

### Comparaison de simulations

Figure 9 : Page de comparaison avec les onglets

Vous verrez plusieurs onglets : - **J-V** : Courbes I-V superposées - **P-V** : Courbes puissance-tension - **Radar** : Graphe araignée normalisé - **Tableau** : Valeurs numériques côte à côte

### 4.4 Accéder à la base de matériaux

Pour explorer les matériaux disponibles :

1. Cliquez sur **“Matériaux”** dans le menu de navigation OU
2. Naviguez vers <http://localhost:5000/materials>

ARISE v2

Simulation Optimiseur IA Historique Matériaux Comparer Statistiques Assistant

## Bibliothèque de Matériaux

Gérez vos matériaux locaux et lancez une recherche croisée sur la base ARISE, Materials Project et OPTIMADE.

**Atelier de Recherche Matériaux** 3 sources en parallèle doublons conservés

Recherchez une formule, un nom ou une hétérostructure comme GaAs/AlGaAs. Chaque source reste visible séparément, même si plusieurs entrées portent le même nom.

Ex: GaN, Silicon, GaAs/AlGaAs, perovskite...

multi-matériaux avec ' / ' filtre par bande interdite import direct vers votre base

Gap min 0,1 eV Gap max 5,0 eV

☒ Matériaux stables uniquement

**Base locale**  
Vos matériaux enregistrés et la bibliothèque intégrée ARISE.  
Toujours utile pour comparer avec vos variantes internes.

**Materials Project**  
Structures et gaps DFT prêts à importer dans vos fiches.  
Actif si 'MATERIALS\_PROJEC\_T\_API\_KEY' est configurée.

**OPTIMADE**  
Agrégation multi-fournisseurs pour élargir la découverte.  
Les réponses restent listées par provenance.

**Mes Matériaux Enregistrés** 15 + Nouveau Matériau

|                                                                            |                                                                          |                                                                             |
|----------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|
| <b>Si</b> Elemental<br>Silicium<br>Eg: 1.1247 eV $\epsilon$ : 11.7         | <b>Ge</b> Elemental<br>Germanium<br>Eg: 0.664 eV $\epsilon$ : 16.0       | <b>GaAs</b> III-V<br>Arséniure de Gallium<br>Eg: 1.424 eV $\epsilon$ : 13.1 |
| <b>GaP</b> III-V<br>Phosphide de Gallium<br>Eg: 2.272 eV $\epsilon$ : 11.1 | <b>InP</b> III-V<br>Phosphide d'Indium<br>Eg: 1.344 eV $\epsilon$ : 12.5 | <b>CdTe</b> II-VI<br>Tellurure de Cadmium<br>Eg: 1.5 eV $\epsilon$ : 10.2   |

**Recherche Globale**  
La recherche combine les trois sources en parallèle et conserve chaque occurrence trouvée, même si la formule apparaît plusieurs fois.  
Conseil : comparez les gaps et les métadonnées source avant import pour distinguer une donnée locale, une estimation DFT MP ou un fournisseur OPTIMADE.

Catégories

### Base de matériaux

Figure 10 : Page de la base de matériaux

Vous verrez la liste des matériaux intégrés : - Si (Silicium) - Eg = 1.12 eV - Ge (Germanium) - Eg = 0.66 eV - GaAs - Eg = 1.42 eV - CdTe - Eg = 1.50 eV - Et d'autres...

Cliquez sur un matériau pour voir ses propriétés détaillées.

## 5. Prochaines étapes

Félicitations ! Vous avez réussi votre première simulation avec SPARC.

### Pour approfondir

- Guide complet d'homojonction silicium**
  - [Guide complet](#) →
  - Ce guide détaille chaque paramètre, explique la physique, et couvre le dépannage
- Autres types de simulation**
  - [Types de simulation](#) →
  - Découvrez les 20+ types disponibles (hétérojonction, tandem, EQE, etc.)
- Optimisation IA**
  - [Optimisation IA](#) →
  - Laissez l'IA optimiser automatiquement vos paramètres
- Assistant IA**

- [Assistant IA](#) →
- Posez vos questions en langage naturel

### Pour expérimenter

- Modifiez les paramètres et observez les effets sur les résultats
- Essayez différents matériaux (GaAs, CdTe, etc.)
- Utilisez la comparaison pour analyser les différences
- Explorez les différents graphiques disponibles

### Pour contribuer

- Signalez des bugs sur GitHub
  - Proposez des améliorations
  - Contribuez à la documentation
- 

## Besoin d'aide ?

Si vous rencontrez des problèmes :

- [FAQ](#) - Questions fréquentes
  - [Glossaire](#) - Terminologie
  - [Dépannage installation](#) - Problèmes d'installation
  - [Signaler un problème](#) - Issues GitHub
- 

## Premiers pas avec le CLI

Si vous préférez la ligne de commande, voici comment lancer votre première simulation en CLI.

### Étape 1 : Créer un fichier de configuration

Créez un fichier config.json avec le contenu suivant :

```
{
 "simulation_name": "ma_premiere_simulation_cli",
 "simulation_type": "homojunction",
 "materials": {
 "active": "Si"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 1e-4,
 "thickness_p": 3e-4,
 "nx": 100
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e17,
 "p_region": 1e15
 }
}
```



```

},
"voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.7,
 "points": 50
},
"illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17
},
"outputs": {
 "plots": ["iv_curve"],
 "format": "both"
}
}

```

## Étape 2 : Lancer la simulation

`python main.py --config config.json --output results/`

## Étape 3 : Voir les résultats

Les résultats sont sauvegardés dans le dossier `results/` : `- results/iv_curve.png` : Courbe I-V - `results/results.json` : Données brutes - `results/summary.txt` : Résumé

## Web vs CLI

| Aspect         | Web                             | CLI                       |
|----------------|---------------------------------|---------------------------|
| Interface      | Graphique                       | Terminal                  |
| Rapidité       | Plus rapide pour une simulation | Plus rapide pour batch    |
| Automatisation | Difficile                       | Facile                    |
| Visualisation  | Immédiate                       | Nécessite outils externes |

Pour plus de détails sur le mode CLI, consultez le [Guide d'utilisation CLI](#).

## Utilisation de la ligne de commande (CLI)

Ce guide documente l'utilisation d'SPARC en mode ligne de commande (CLI), pour les utilisateurs qui préfèrent automatiser leurs simulations ou effectuer des traitements en lot.

**Temps estimé** : 30 minutes

**Niveau** : Intermédiaire

**Prérequis** : Installation d'SPARC terminée

---

## Table des matières

1. [Introduction au mode CLI](#)
2. [Installation et configuration](#)

3. [Commandes de base](#)
  4. [Structure des fichiers JSON](#)
  5. [Exemples d'utilisation](#)
  6. [Comparaison Web vs CLI](#)
  7. [Cas d'usage avancés](#)
  8. [Dépannage](#)
- 

## 1. Introduction au mode CLI

### 1.1 Qu'est-ce que le mode CLI ?

Le mode CLI (Command Line Interface) d'SPARC permet d'exécuter des simulations directement depuis le terminal, sans passer par l'interface web. Il utilise le fichier `main.py` comme point d'entrée.

### 1.2 Avantages du mode CLI

| Avantage                | Description                                           |
|-------------------------|-------------------------------------------------------|
| <b>Automatisation</b>   | Intégration facile dans des scripts et pipelines      |
| <b>Batch processing</b> | Exécution de plusieurs simulations en séquence        |
| <b>Reproductibilité</b> | Scripts versionnés et traçables                       |
| <b>Flexibilité</b>      | Manipulation programmatique des configurations        |
| <b>Performance</b>      | Pas de surcharge de l'interface web                   |
| <b>CI/CD</b>            | Intégration dans des pipelines d'intégration continue |

### 1.3 Quand utiliser CLI vs Web

| Situation                      | Mode recommandé |
|--------------------------------|-----------------|
| Simulation unique exploratoire | <b>Web</b>      |
| Développement et test rapide   | <b>Web</b>      |
| Visualisation interactive      | <b>Web</b>      |
| Batch de simulations           | <b>CLI</b>      |
| Automatisation                 | <b>CLI</b>      |
| Intégration CI/CD              | <b>CLI</b>      |
| Traitement de données massif   | <b>CLI</b>      |
| Scripts personnalisés          | <b>CLI</b>      |

---

## 2. Installation et configuration

### 2.1 Vérification de l'installation

Pour vérifier que le mode CLI fonctionne correctement :

*# Vérifier que main.py est accessible*

```
python main.py --help
```

*# Lister les types de simulation disponibles*

```
python main.py --list-types
```

*# Voir un exemple de configuration*

```
python main.py --show-example homojunction
```

Si ces commandes fonctionnent, le mode CLI est prêt à l'emploi.

## 2.2 Configuration de l'environnement

Le mode CLI utilise les mêmes dépendances que le mode web. Assurez-vous que toutes les dépendances sont installées :

```
pip install -r requirements.txt
```

## 2.3 Variables d'environnement spécifiques CLI

Le mode CLI utilise les mêmes variables d'environnement que le mode web, mais certaines sont particulièrement importantes :

- SESAME\_WEB\_SECRET : Secret pour l'accès TCAD (obligatoire)
- SPARC\_OUTPUT\_DIR : Répertoire de sortie par défaut (optionnel)

**Exemple :**

```
export SESAME_WEB_SECRET="votre_secret"
```

```
export SPARC_OUTPUT_DIR="./results"
```

---

## 3. Commandes de base

### 3.1 Aide

```
python main.py --help
```

Affiche l'aide complète avec toutes les options disponibles.

### 3.2 Lister les types de simulation

```
python main.py --list-types
```

Affiche la liste des 20+ types de simulation disponibles.

**Exemple de sortie :**

Available simulation types:

- homojunction
- heterojunction
- graded\_heterojunction
- with\_defects

- tandem
- parametric\_sweep
- quantum\_efficiency
- capacitance\_voltage
- luminescence
- grain\_boundary\_2d
- ...

### 3.3 Voir un exemple de configuration

```
python main.py --show-example <type>
```

Affiche un exemple de configuration JSON pour le type spécifié.

**Exemple :**

```
python main.py --show-example homojunction
```

### 3.4 Lancer une simulation

```
python main.py --config <file> --output <dir>
```

Lance une simulation avec le fichier de configuration spécifié.

**Exemple :**

```
python main.py --config config.json --output results/
```

### 3.5 Options additionnelles

| Option    | Description                                       |
|-----------|---------------------------------------------------|
| --type    | Type de simulation (si non spécifié dans le JSON) |
| --profile | Activer le profiling (pour l'optimisation)        |
| --verbose | Mode verbeux (plus de logs)                       |
| --quiet   | Mode silencieux (moins de logs)                   |

**Exemple :**

```
python main.py --config config.json --output results/ --verbose
```

## 4. Structure des fichiers JSON

### 4.1 Format JSON attendu

Le fichier JSON doit contenir les champs suivants :

```
{
 "simulation_name": "nom_de_la_simulation",
 "simulation_type": "type_de_simulation",
 "materials": { ... },
 "geometry": { ... },
 "doping": { ... },
```

```

 "voltages": { ... },
 "illumination": { ... },
 "outputs": { ... }
}

```

#### 4.2 Champs obligatoires

| Champ           | Type   | Description                           |
|-----------------|--------|---------------------------------------|
| simulation_name | string | Nom unique de la simulation           |
| simulation_type | string | Type de simulation (ex: homojunction) |
| materials       | object | Configuration des matériaux           |
| geometry        | object | Configuration géométrique             |
| doping          | object | Configuration du dopage               |
| voltages        | object | Configuration de tension              |
| outputs         | object | Configuration des sorties             |

#### 4.3 Champs optionnels

| Champ            | Type   | Description                                 |
|------------------|--------|---------------------------------------------|
| illumination     | object | Configuration de l'illumination             |
| contacts         | object | Configuration des contacts (hétérojonction) |
| optical_coupling | object | Configuration du couplage (tandem)          |

#### 4.4 Validation du JSON

SPARC valide automatiquement le JSON avant de lancer la simulation. Si le JSON est invalide, un message d'erreur s'affiche avec les champs manquants ou incorrects.

---

## 5. Exemples d'utilisation

### 5.1 Simulation simple

Créez un fichier config.json :

```

{
 "simulation_name": "simulation_simple",
 "simulation_type": "homojunction",
 "materials": {
 "active": "Si"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 1e-4,
 "thickness_p": 3e-4,
 "nx": 100
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e17,

```

```

 "p_region": 1e15
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.7,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve"],
 "format": "both"
 }
}

```

Lancez la simulation :

```
python main.py --config config.json --output results/
```

## 5.2 Simulation avec paramètres

```
python main.py --config config.json --output results/ --verbose
```

## 5.3 Batch processing

Créez un script bash pour traiter plusieurs configurations :

```

#!/bin/bash

for config in configs/*.json; do
 name=$(basename "$config" .json)
 echo "Processing $config..."
 python main.py --config "$config" --output "results/$name"
done

```

## 5.4 Profiling

Pour analyser les performances :

```
python main.py --config config.json --output results/ --profile
```

# 6. Comparaison Web vs CLI

## 6.1 Tableau comparatif

| Aspect               | Web        | CLI          |
|----------------------|------------|--------------|
| <b>Interface</b>     | Graphique  | Terminal     |
| <b>Configuration</b> | Formulaire | Fichier JSON |

| Aspect                        | Web                             | CLI                              |
|-------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|
| <b>Visualisation</b>          | Immédiate dans le navigateur    | Fichiers PNG à ouvrir            |
| <b>Historique</b>             | Automatique dans la base        | Manuel                           |
| <b>Export</b>                 | Boutons dans l'interface        | Fichiers générés automatiquement |
| <b>Automatisation</b>         | Difficile                       | Facile                           |
| <b>Batch processing</b>       | Difficile                       | Facile                           |
| <b>CI/CD</b>                  | Difficile                       | Facile                           |
| <b>Rapidité</b>               | Plus rapide pour une simulation | Plus rapide pour batch           |
| <b>Courbe d'apprentissage</b> | Plus facile                     | Plus difficile                   |

## 6.2 Avantages/inconvénients

**Web** : - ✓Interface intuitive - ✓Visualisation immédiate - ✓Historique automatique - ✗Difficile à automatiser - ✗Pas adapté au batch

**CLI** : - ✓Automatisation facile - ✓Batch processing - ✓Intégration CI/CD - ✓Reproductibilité - ✗Courbe d'apprentissage plus difficile - ✗Pas de visualisation immédiate

## 6.3 Quand choisir lequel

- **Choisissez Web** si :
  - Vous débutez avec SPARC
  - Vous faites des simulations exploratoires
  - Vous avez besoin de visualisation interactive
  - Vous n'avez pas besoin d'automatisation
- **Choisissez CLI** si :
  - Vous avez besoin d'automatisation
  - Vous faites du batch processing
  - Vous intégrez SPARC dans un pipeline
  - Vous avez besoin de reproductibilité

---

## 7. Cas d'usage avancés

### 7.1 Scripts d'automatisation

*Script Python pour modifier des paramètres*

```
import json
import subprocess
```

```
Charger la configuration
with open('config.json') as f:
```

```

config = json.load(f)

Modifier des paramètres
config['doping']['n_region'] = 1e18
config['geometry']['nx'] = 150

Sauvegarder la configuration modifiée
with open('config_modified.json', 'w') as f:
 json.dump(config, f, indent=2)

Lancer la simulation
subprocess.run(['python', 'main.py', '--config', 'config_modified.json', '--output', 'results/'])

```

## 7.2 Intégration dans des pipelines CI/CD

### Exemple GitHub Actions

name: SPARC Simulation

on: [push]

```

jobs:
 simulate:
 runs-on: ubuntu-latest
 steps:
 - uses: actions/checkout@v2
 - name: Set up Python
 uses: actions/setup-python@v2
 with:
 python-version: '3.10'
 - name: Install dependencies
 run: pip install -r requirements.txt
 - name: Run simulation
 run: python main.py --config config.json --output results/
 - name: Upload results
 uses: actions/upload-artifact@v2
 with:
 name: simulation-results
 path: results/

```

## 7.3 Parallélisation

Pour exécuter plusieurs simulations en parallèle :

```
#!/bin/bash
```

```

for config in configs/*.json; do
 name=$(basename "$config" .json)
 python main.py --config "$config" --output "results/$name" &
done

```



```
wait
echo "All simulations completed"
```

## 7.4 Traitement de données massif

Pour traiter un grand nombre de configurations :

```
import json
import subprocess
from concurrent.futures import ThreadPoolExecutor

def run_simulation(config_file):
 name = config_file.replace('.json', '')
 subprocess.run(['python', 'main.py', '--config', config_file, '--output',
f'results/{name}'])

configs = [f'config_{i}.json' for i in range(100)]

with ThreadPoolExecutor(max_workers=4) as executor:
 executor.map(run_simulation, configs)
```

---

## 8. Dépannage

### 8.1 Erreurs courantes

*Erreur : "Configuration file not found"*

**Cause :** Le fichier de configuration n'existe pas ou le chemin est incorrect.

**Solution :** Vérifiez que le fichier existe et que le chemin est correct.

```
Vérifier que le fichier existe
ls config.json
```

```
Utiliser le chemin absolu si nécessaire
python main.py --config /path/to/config.json --output results/
```

*Erreur : "Invalid JSON"*

**Cause :** Le fichier JSON est mal formé.

**Solution :** Validez le JSON avec un outil en ligne ou jq.

```
Valider avec jq
jq . config.json
```

*Erreur : "Missing required field"*

**Cause :** Un champ obligatoire est manquant dans le JSON.

**Solution** : Vérifiez que tous les champs obligatoires sont présents (voir section 4.2).

*Erreur : "Simulation failed"*

**Cause** : La simulation a échoué (convergence, paramètres invalides, etc.).

**Solution** : - Vérifiez les paramètres - Réduisez nx si problème de convergence - Consultez les logs avec --verbose

## 8.2 Messages d'erreur

| Message                       | Cause              | Solution                |
|-------------------------------|--------------------|-------------------------|
| Configuration file not found  | Fichier inexistant | Vérifiez le chemin      |
| Invalid JSON                  | JSON mal formé     | Validez avec jq         |
| Missing required field        | Champ manquant     | Ajoutez le champ        |
| Simulation failed             | Échec simulation   | Vérifiez paramètres     |
| Output directory not writable | Permissions        | Changez les permissions |

## 8.3 Solutions

### *Problème de convergence*

Si la simulation échoue à converger :

1. Réduisez nx (nombre de points de grille)
2. Ajustez les dopages
3. Vérifiez les paramètres géométriques

```
{
 "geometry": {
 "nx": 50 // Réduire de 100 à 50
 }
}
```

### *Problème de permissions*

Si vous ne pouvez pas écrire dans le répertoire de sortie :

```
Changer Les permissions
chmod u+w results/
```

```
Ou utiliser un autre répertoire
python main.py --config config.json --output /tmp/results/
```

---

## Conclusion

Le mode CLI d'SPARC offre une flexibilité et une puissance accrues pour l'automatisation et le traitement en lot de simulations.

## Ce que vous avez appris

- ✓ Comprendre les avantages du mode CLI
- ✓ Utiliser les commandes de base
- ✓ Créer et valider des fichiers JSON
- ✓ Lancer des simulations en CLI
- ✓ Comparer Web vs CLI
- ✓ Automatiser des simulations
- ✓ Résoudre les problèmes courants

## Prochaines étapes

- [Référence des commandes CLI](#) - Documentation complète des commandes
- [Exemples de scripts CLI](#) - Scripts prêts à l'emploi
- [Guide homojonction](#) - Version CLI du guide
- [API REST](#) - Pour une automatisation avancée

**Bonne simulation en CLI ! ☺**

## Guides de simulation A-Z

Ces guides vous accompagnent pas à pas dans la création, le lancement et l'analyse de simulations photovoltaïques avec SPARC.

Chaque guide couvre un type de simulation spécifique avec des instructions détaillées, des exemples concrets, et des conseils de dépannage.

---

## Guides disponibles

### 1. Homojonction Silicium

[Guide complet →](#)

**Niveau :** Débutant

**Durée estimée :** 30 minutes

**Objectif :** Simuler une jonction p-n silicium basique et comprendre les résultats

**Contenu du guide :** - Configuration complète des paramètres (géométrie, dopage, illumination) - Génération et validation du JSON - Lancement et suivi de la simulation - Analyse détaillée des résultats (courbe I-V, diagramme de bandes, densités) - Export des résultats (JSON, CSV, PDF, PNG) - Comparaison de simulations - Bonnes pratiques et paramètres recommandés - Exemples de configurations (basique, haute efficacité, étude paramétrique) - Dépannage des problèmes courants

**Prérequis :** - Installation d'SPARC terminée - Connaissance de base en semi-conducteurs (optionnel)

**Ce que vous apprendrez :** - Configurer une homojonction silicium - Comprendre l'influence de chaque paramètre - Interpréter les courbes I-V et diagrammes de bandes - Exporter et comparer les résultats

---

## 2. Hétérojonction CdTe/CdS

[Guide complet →](#)

**Niveau :** Intermédiaire

**Durée estimée :** 45 minutes

**Objectif :** Simuler une hétérojonction CdTe/CdS avec interfaces et contacts

**Contenu du guide :** - Sélection et configuration de deux matériaux différents - Configuration des contacts (Ohmic/Schottky, work function) - Gestion des discontinuités de bandes (offsets) - Analyse spécifique aux hétérojonctions - Comparaison avec l'homojonction - Bonnes pratiques pour les interfaces

**Prérequis :** - Guide homojonction silicium complété - Notions d'interface semi-conductrice (optionnel)

**Ce que vous apprendrez :** - Configurer une hétérojonction avec deux matériaux - Gérer les contacts et les work functions - Comprendre les discontinuités de bandes - Analyser les profils aux interfaces

---

## 3. Cellule Tandem Si/Si

[Guide complet →](#)

**Niveau :** Avancé

**Durée estimée :** 60 minutes

**Objectif :** Simuler une cellule tandem à deux jonctions et optimiser le courant matching

**Contenu du guide :** - Configuration de deux cellules empilées (top et bottom) - Paramètres de couplage optique - Courant matching entre top et bottom cell - Analyse des résultats tandem - Optimisation des épaisseurs relatives - Filtres spectraux

**Prérequis :** - Guides homojonction et hétérojonction complétés - Compréhension du fonctionnement des cellules multi-jonctions

**Ce que vous apprendrez :** - Configurer une cellule tandem - Optimiser le courant matching - Analyser la répartition spectrale - Comprendre les limitations des cellules tandem

---

## Progression recommandée

### Pour les débutants

1. **Commencez par l'homojonction silicium**
  - Concepts de base (jonction p-n, dopage, illumination)
  - Interface simple avec un matériau
  - Résultats faciles à interpréter
2. **Expérimentez avec différents paramètres**
  - Modifiez le dopage et observez l'effet sur Voc
  - Modifiez l'épaisseur et observez l'effet sur Jsc
  - Utilisez la comparaison pour analyser les différences
3. **Explorez l'historique et les fonctionnalités**
  - Gérez vos simulations
  - Exportez les résultats
  - Utilisez la base de matériaux

**Temps total estimé : 1-2 heures**

---

### Pour les utilisateurs intermédiaires

1. **Réalisez le guide hétérojonction CdTe/CdS**
  - Apprenez à gérer les interfaces
  - Comprenez les contacts et work functions
  - Analysez les discontinuités de bandes
2. **Explorez la base de matériaux**
  - Découvrez les matériaux intégrés
  - Créez des matériaux personnalisés
  - Utilisez Materials Project API
3. **Essayez l'optimisation IA**
  - Laissez l'IA optimiser vos paramètres
  - Analysez la convergence et l'importance
  - Utilisez le surrogate model

**Temps total estimé : 2-3 heures**

---

### Pour les utilisateurs avancés

1. **Réalisez le guide cellule tandem**
  - Configurez des multi-jonctions
  - Optimisez le courant matching
  - Analysez les résultats tandem
2. **Utilisez l'optimisation IA avancée**

- Essayez différents moteurs (BoTorch, CMA-ES)
  - Optimisation multi-objectifs
  - Analyse de sensibilité Sobol
3. **Explorez l'API REST**
    - Automatisez les simulations
    - Intégrez SPARC dans vos workflows
    - Créez des scripts personnalisés

**Temps total estimé : 3-4 heures**

---

## Conseils pour suivre les guides

### Avant de commencer

1. **Assurez-vous que SPARC est installé**
  - Suivez le [guide d'installation](#) si nécessaire
2. **Lancez l'interface web**
  - Docker : `docker compose up`
  - Local : `python -m web.app`
3. **Ouvrez votre navigateur**
  - Accédez à `http://localhost:5000`

### Pendant le guide

- **Suivez les étapes dans l'ordre**
  - Chaque guide est conçu pour être suivi séquentiellement
- **N'hésitez pas à expérimenter**
  - Les guides donnent des valeurs recommandées, mais vous pouvez les modifier
- **Sauvegardez vos configurations**
  - Téléchargez les JSON des configurations réussies
  - Créez un dossier pour vos configurations personnalisées
- **Prenez des notes**
  - Notez les paramètres qui donnent de bons résultats
  - Documentez vos observations

### Mode CLI

Chaque guide de simulation peut également être réalisé en mode CLI. Pour chaque guide, une section "Version CLI" est disponible à la fin du document.

Pour apprendre les bases du mode CLI, consultez le [Guide d'utilisation CLI](#).

### Après le guide

- **Relancez avec des paramètres différents**

- Pour bien comprendre l'influence de chaque paramètre
  - **Comparez avec d'autres simulations**
    - Utilisez la fonctionnalité de comparaison
  - **Consultez le glossaire**
    - Si un terme vous est inconnu, consultez le [glossaire](#)
- 

## Autres types de simulation

SPARC supporte plus de 20 types de simulation. Les guides ci-dessus couvrent les trois types les plus courants. Pour explorer les autres types :

- [Types de simulation](#) →

**Types disponibles :** - homojunction - Jonction p-n 1D - heterojunction - Hétérojonction 1D - graded\_heterojunction - Hétérojonction à gradient - with\_defects - Avec défauts SRH - tandem - Tandem 2 jonctions - parametric\_sweep - Balayage paramétrique - quantum\_efficiency - EQE spectrale - capacitance\_voltage - C-V différentielle - luminescence - PL / EL - grain\_boundary\_2d - Joint de grain 2D - Et bien d'autres...

---

## Besoin d'aide ?

Si vous rencontrez des difficultés pendant un guide :

- **Consultez la section de dépannage** du guide correspondant
  - **Consultez la FAQ** - [FAQ](#)
  - **Consultez le glossaire** - [Glossaire](#)
  - **Utilisez l'assistant IA** - [Assistant IA](#)
  - **Signalez un problème** - [Issues GitHub](#)
- 

## Contribution

Vous avez des suggestions pour améliorer ces guides ?

- Signalez les erreurs ou ambiguïtés
- Proposez des exemples supplémentaires
- Suggérez de nouveaux guides
- Contribuez directement sur GitHub

Pour contribuer : 1. Fork le dépôt 2. Créez une branche 3. Apportez vos modifications 4. Soumettez une pull request

# Guide complet : Simulation d'homojonction Silicium

Ce guide vous accompagne pas à pas dans la création, le lancement et l'analyse d'une simulation d'homojonction silicium avec SPARC.

**Durée estimée** : 30 minutes

**Niveau** : Débutant

**Prérequis** : Installation d'SPARC terminée

---

## Table des matières du guide

1. [Introduction](#)
  2. [Accès à l'interface de simulation](#)
  3. [Configuration des paramètres](#)
  4. [Génération et validation du JSON](#)
  5. [Lancement de la simulation](#)
  6. [Analyse des résultats](#)
  7. [Export des résultats](#)
  8. [Comparaison de simulations](#)
  9. [Bonnes pratiques](#)
  10. [Exemples de configurations](#)
  11. [Dépannage](#)
- 

## 1. Introduction

### 1.1 Qu'est-ce qu'une homojonction ?

Une homojonction est une jonction p-n formée par deux régions du même matériau semi-conducteur, dopées différemment. C'est la structure de base de la plupart des cellules solaires au silicium.

**Structure typique** : - **Région N** : dopée avec des donneurs (ex: phosphore dans le Si) - **Région P** : dopée avec des accepteurs (ex: bore dans le Si) - **Zone de déplétion** : région où le champ électrique est maximal

### 1.2 Pourquoi simuler une homojonction silicium ?

La simulation permet de : - **Comprendre** l'influence de chaque paramètre (dopage, épaisseur, illumination) - **Optimiser** l'efficacité de la cellule sans fabrication physique - **Prédire** le comportement sous différentes conditions - **Économiser** du temps et des ressources par rapport à l'expérimentation

### 1.3 Cas d'usage typiques

- **Recherche académique** : Étude de nouveaux designs de cellules
- **Industrie photovoltaïque** : Optimisation de processus de fabrication



- **Enseignement** : Illustration des concepts de semi-conducteurs
- **R&D** : Exploration de nouveaux matériaux ou géométries

---

## 2. Accès à l'interface de simulation

### 2.1 Lancement de l'interface web

Assurez-vous que l'interface SPARC est lancée :

# Avec Docker

```
docker compose up
```

# En Local

```
python -m web.app
```

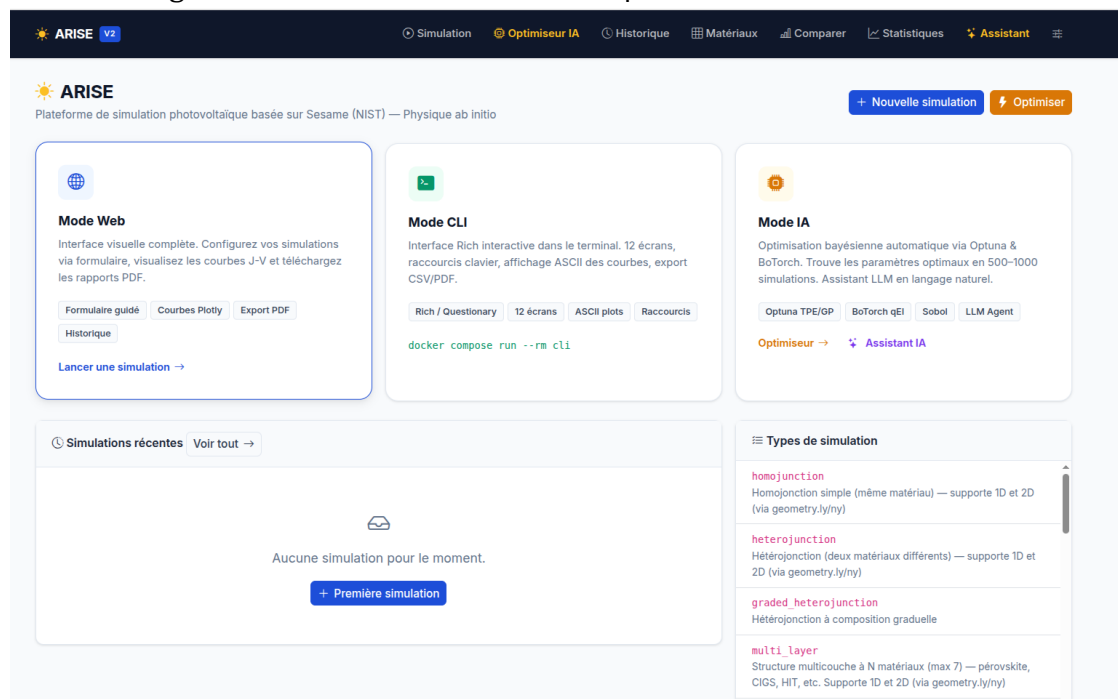
Ouvrez votre navigateur et accédez à :

<http://localhost:5000>

### 2.2 Navigation vers le formulaire de simulation

Depuis la page d'accueil :

1. Cliquez sur le bouton **“Lancer une simulation”** dans le menu principal OU
2. Naviguez directement vers l'URL : <http://localhost:5000/form>



*Page d'accueil avec bouton nouvelle simulation*

## 2.3 Description de l'interface du formulaire

Le formulaire de simulation se compose de plusieurs sections :

**Nouvelle simulation**

**Identification \***

sim\_homojunction\_ae07

homojunction (Homojonction simple (même matériau))

**Paramètres Physiques \***

Température (K) \* 300 Type de Maillage Adaptif (recommandé)

Affecte  $E_g$ ,  $N_c$ ,  $N_v$ , mobilités

Convention de signe (courant / puissance)

Option A (PV classique): J généré négatif, Jsc =

**Contacts et Surfaces \***

Vitesse Recomb. Électrons (cm/s) \* 1000 Vitesse Recomb. Trous (cm/s) \* 1000

Sn: recombinaison surface électrons Sp: recombinaison surface trous

**Paramètres du Solveur**

Type de Solveur Tolérance Max Itérations

Newton (rap) 1e-6 100

Précision convergence Limite convergence

**Configuration JSON de la simulation**

1 [ ]

Ln: 1 Col: 1

Aucune configuration ID Session: --

Vous pouvez modifier directement le JSON ci-dessus pour ajouter des paramètres avancés non présents dans le formulaire (ex: maillage non-uniforme, spectres personnalisés).

### Formulaire de simulation homojonction

1. **Informations générales** : Nom et type de simulation
2. **Sélection du matériau** : Choix du matériau semi-conducteur
3. **Géométrie** : Dimensions de la cellule
4. **Dopage** : Concentrations de dopage
5. **Tension** : Plage de polarisation
6. **Illumination** : Conditions d'éclairage
7. **Sorties** : Types de graphiques et formats
8. **Actions** : Boutons pour générer le JSON et lancer

**Note** : Certains champs peuvent être pré-remplis avec des valeurs par défaut raisonnables.

---

## 3. Configuration des paramètres

### 3.1 Informations générales

#### 3.1.1 Nom de la simulation

**Champ** : simulation\_name

**Type** : Texte

**Description** : Identifiant unique pour votre simulation

**Exemple** : mon\_homojonction\_si\_001

**Conseils** : - Utiliser un nom descriptif - Éviter les espaces (remplacer par \_) - Inclure la date si nécessaire : homo\_si\_2024-07-01

#### 3.1.2 Type de simulation

**Champ** : simulation\_type

**Type** : Sélection (menu déroulant)

**Description** : Type de structure à simuler

**Pour ce guide** : Sélectionnez homojonction

**Note** : Le type de simulation détermine quels paramètres sont disponibles. Certains types ont des champs supplémentaires (ex: contacts pour l'hétérojonction).

---

### 3.2 Sélection du matériau

#### 3.2.1 Accès à la base de matériaux

Cliquez sur le champ **“Matériau actif”** ou sur le bouton **“Parcourir les matériaux”** à côté.

### 3.2.2 Interface de la base de matériaux

The screenshot displays the 'Mes Matériaux Enregistrés' (My Registered Materials) interface. At the top, there's a header with 'Mes Matériaux Enregistrés' and a '+ Nouveau Matériau' button. Below this is a grid of 15 material cards, each showing the material name, its chemical formula, and its band gap (Eg) and electron affinity (χ). The materials are categorized by type (Elemental, III-V, II-VI, Chalcopyrite, Kesterite, Perovskite, 2D\_GB\_homojunction, III-V\_nitride). To the right of the grid is a sidebar with a 'Recherche Globale' (Global Search) section and a 'Catégories' (Categories) list.

**Mes Matériaux Enregistrés** 15 + Nouveau Matériau

| Matériau                                        | Catégorie          | Eg (eV) | χ (eV) |
|-------------------------------------------------|--------------------|---------|--------|
| Si (Silicium)                                   | Elemental          | 1.1247  | 11.7   |
| Ge (Germanium)                                  | Elemental          | 0.664   | 16.0   |
| GaAs (Arséniure de Gallium)                     | III-V              | 1.424   | 13.1   |
| GaP (Phosphide de Gallium)                      | III-V              | 2.272   | 11.1   |
| InP (Phosphide d'Indium)                        | III-V              | 1.344   | 12.5   |
| CdTe (Tellurure de Cadmium)                     | II-VI              | 1.5     | 10.2   |
| CdS (Sulfide de Cadmium)                        | II-VI              | 2.42    | 8.9    |
| CIGS (Cu(In,Ga)Se <sub>2</sub> )                | Chalcopyrite       | 1.3     | 13.6   |
| CZTS (Cu <sub>2</sub> ZnSn(S,Se) <sub>4</sub> ) | Kesterite          | 1.5     | 13.0   |
| MAPbI <sub>3</sub> (Méthylammonium Lead Iodide) | Perovskite         | 1.58    | 25.5   |
| CsPbI <sub>3</sub> (Cesium Lead Iodide)         | Perovskite         | 1.73    | 18.0   |
| GaInP (GaInP)                                   |                    | 1.87    | 11.8   |
| AlGaAs (AlGaAs)                                 | III-V              | 1.8     | 12.1   |
| Si <sub>2</sub> d_GB (Si <sub>2</sub> d_GB)     | 2D_GB_homojunction | 1.5     | 9.4    |
| GaN (GaN)                                       | III-V_nitride      | 3.43    | 9.0    |

**Recherche Globale**  
La recherche combine les trois sources en parallèle et conserve chaque occurrence trouvée, même si la formule apparaît plusieurs fois.  
**Conseil** : comparez les gaps et les métadonnées source avant import pour distinguer une donnée locale, une estimation DFT MP ou un fournisseur OPTIMADE.

**Catégories**

- 2D\_GB\_homojunction >
- Chalcopyrite >
- Elemental >
- II-VI >
- III-V >
- III-V\_nitride >
- Kesterite >
- Perovskite >

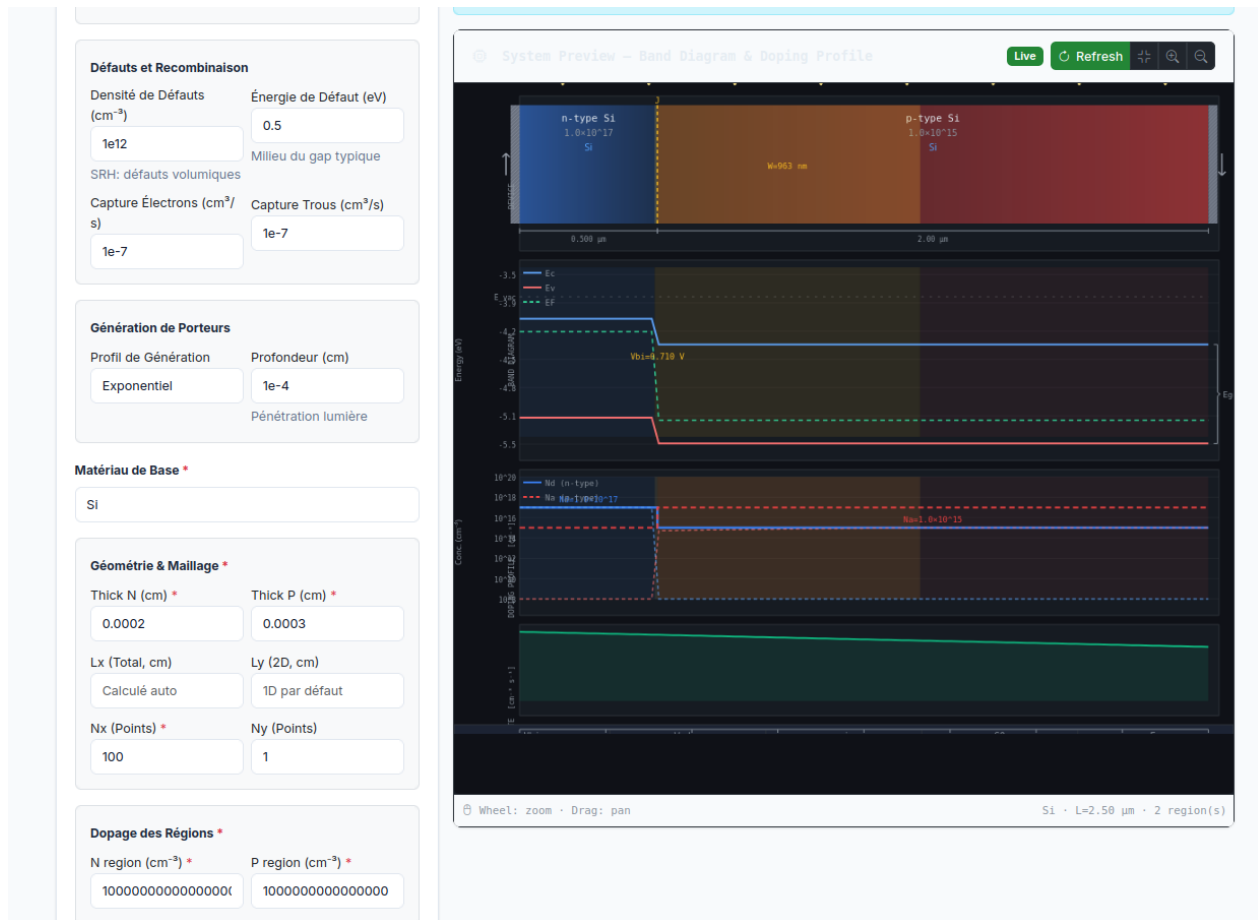
Une fenêtre modale s'ouvre affichant la liste des matériaux disponibles.

**Matériaux disponibles pour une homojonction** : - **Si** (Silicium) - Eg = 1.12 eV - **Ge** (Germanium) - Eg = 0.66 eV - **GaAs** (Arséniure de gallium) - Eg = 1.42 eV - Et d'autres...

### 3.2.3 Sélection du silicium

1. Dans la liste, cliquez sur "**Si**"
2. Les propriétés du matériau s'affichent à droite :
  - **Eg** (Band gap) : 1.12 eV
  - **Nc** (Densité d'états conduction) :  $2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
  - **Nv** (Densité d'états valence) :  $1.04 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
  - **μ<sub>e</sub>** (Mobilité électrons) :  $1500 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
  - **μ<sub>h</sub>** (Mobilité trous) :  $450 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
  - **eps** (Permittivité) : 11.7
  - **tau<sub>e</sub>, tau<sub>h</sub>** (Durées de vie) :  $1 \times 10^{-8} \text{ s}$
  - **chi** (Affinité électronique) : 4.05 eV
3. Cliquez sur "**Sélectionner**" pour confirmer

Le champ "Matériau actif" est maintenant rempli avec "Si".



**Astuce :** Vous pouvez créer un matériau personnalisé en cliquant sur “Créer un matériau”. Consultez le guide [Base de matériaux](#) pour plus de détails.

### 3.3 Géométrie de la cellule

La géométrie définit les dimensions physiques de la cellule solaire.

#### 3.3.1 Épaisseur de la région N

**Champ :** geometry.thickness\_n

**Type :** Nombre (float)

**Unité :** cm

**Description :** Épaisseur de la région dopée N

**Valeur recommandée pour Si :**  $5 \times 10^{-5}$  ( $0.00005 \text{ cm} = 0.5 \mu\text{m}$ )

**Ordres de grandeur typiques :** - Très fine :  $1 \times 10^{-6} \text{ cm}$  ( $0.01 \mu\text{m}$ ) - Fine :  $1 \times 10^{-5} \text{ cm}$  ( $0.1 \mu\text{m}$ ) - Standard :  $1 \times 10^{-4} \text{ cm}$  ( $1 \mu\text{m}$ ) - Épaisse :  $1 \times 10^{-3} \text{ cm}$  ( $10 \mu\text{m}$ )

**Impact :** - Plus épaisse → plus d'absorption mais plus de recombinaison - Plus fine → moins de recombinaison mais moins d'absorption

### 3.3.2 Épaisseur de la région P

**Champ** : geometry.thickness\_p

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : cm

**Description** : Épaisseur de la région dopée P

**Valeur recommandée pour Si** :  $2e-4$  ( $0.0002 \text{ cm} = 2 \text{ }\mu\text{m}$ )

**Conseil** : La région P est généralement plus épaisse que la région N car c'est là que la plupart de la lumière est absorbée (les photons de haute énergie sont absorbés près de la surface).

### 3.3.3 Nombre de points de grille

**Champ** : geometry.nx

**Type** : Entier (int)

**Description** : Nombre de points pour la discrétisation spatiale

**Valeur recommandée** : 100

**Impact** : - Plus de points → meilleure précision mais calcul plus lent - Moins de points → calcul plus rapide mais moins précis

**Ordres de grandeur** : - Rapide : 50 points - Standard : 100 points - Précis : 200 points - Très précis : 500+ points

**Attention** : Au-delà de 500 points, le temps de calcul augmente significativement sans gain de précision notable.

---

## 3.4 Dopage

Le dopage définit la concentration de porteurs libres dans chaque région.



**Ordres de grandeur typiques** : - Faible dopage :  $1e14 - 1e15 \text{ cm}^{-3}$  - Dopage modéré :  $1e16 - 1e17 \text{ cm}^{-3}$  - Fort dopage :  $1e18 - 1e19 \text{ cm}^{-3}$  - Très fort dopage :  $1e20+ \text{ cm}^{-3}$

**Impact** : - Dopage plus élevé → champ électrique plus fort, meilleure collecte - Mais aussi plus de recombinaison Auger

### 3.4.2 Dopage de la région P

**Champ** : `doping.p_region`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** :  $\text{cm}^{-3}$

**Description** : Concentration d'accepteurs dans la région P

**Valeur recommandée pour Si** :  $1e15 (10^{15} \text{ cm}^{-3})$

**Conseil** : La région P est généralement moins dopée que la région N dans les cellules solaires conventionnelles.

**Note** : Le rapport de dopage (N/P) influence la position de la zone de déplétion et le champ électrique.

---

## 3.5 Tension de polarisation

La tension définit la plage de balayage pour la caractérisation I-V.

### 3.5.1 Tension de départ

**Champ** : `voltages.start`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : V

**Description** : Tension minimale de la caractérisation

**Valeur recommandée** :  $0.0 \text{ V}$

**Pourquoi 0V ?** : C'est le point de court-circuit ( $J_{sc}$ ).

### 3.5.2 Tension d'arrêt

**Champ** : `voltages.stop`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : V

**Description** : Tension maximale de la caractérisation

**Valeur recommandée pour Si** :  $0.7 \text{ V}$

**Pourquoi 0.7V ?** : C'est légèrement au-dessus du  $V_{oc}$  typique du silicium ( $\sim 0.6-0.65 \text{ V}$ ).

**Ordres de grandeur** : - Si :  $0.7 \text{ V}$  - GaAs :  $1.0-1.2 \text{ V}$  - Perovskites :  $1.1-1.2 \text{ V}$



### 3.5.3 Nombre de points

**Champ** : `voltages.points`

**Type** : Entier (int)

**Description** : Nombre de points de tension

**Valeur recommandée** : 50

**Impact** : - Plus de points → courbe plus lisse - Mais calcul plus long

---

## 3.6 Illumination

L'illumination définit les conditions d'éclairage de la cellule.

### 3.6.1 Activation de l'illumination

**Champ** : `illumination.enabled`

**Type** : Booléen (case à cocher)

**Description** : Activer ou désactiver l'illumination

**Pour ce guide** : Cochez la case pour activer

**Note** : Si désactivé, la simulation sera en obscurité (utile pour les mesures de courant d'obscurité).

### 3.6.2 Flux de photons

**Champ** : `illumination.photon_flux`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** :  $\text{photons} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$

**Description** : Flux de photons incident

**Valeur recommandée** :  $2.5 \times 10^{17}$  (AM1.5G)

**Spectres disponibles** : - **AM0** : Spectre spatial (hors atmosphère) -  $\sim 2.0 \times 10^{17}$  - **AM1.5G** : Spectre standard terrestre -  $2.5 \times 10^{17}$  - **AM1.5D** : Spectre direct (concentrateur) -  $\sim 2.7 \times 10^{17}$

### 3.6.3 Coefficient d'absorption

**Champ** : `illumination.absorption_coefficient`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** :  $\text{cm}^{-1}$

**Description** : Coefficient d'absorption moyen

**Valeur recommandée pour Si** :  $5 \times 10^3$  ( $5000 \text{ cm}^{-1}$ )

**Ordres de grandeur** : - Faible absorption :  $10^2 - 10^3 \text{ cm}^{-1}$  - Moyenne absorption :  $10^3 - 10^4 \text{ cm}^{-1}$  - Forte absorption :  $10^4 - 10^5 \text{ cm}^{-1}$

**Note :** Le coefficient d'absorption réel dépend de la longueur d'onde. Cette valeur est une approximation pour le spectre AM1.5G.

---

### 3.7 Sorties

Les sorties définissent quels graphiques et formats sont générés.

#### 3.7.1 Types de graphiques

**Champ :** `outputs.plots`

**Type :** Liste de sélections

**Description :** Graphiques à générer

**Graphiques disponibles pour l'homojonction :** - `iv_curve` - Courbe courant-tension (recommandé) - `band_diagram` - Diagramme de bandes d'énergie (recommandé) - `electron_density` - Profil de densité d'électrons - `hole_density` - Profil de densité de trous - `recombination_profiles` - Profils de recombinaison - `electric_field` - Profil du champ électrique - `generation_rate` - Profil du taux de génération

**Pour ce guide :** Sélectionnez au minimum : - ☒ `iv_curve` - ☒ `band_diagram`

#### 3.7.2 Format de sortie

**Champ :** `outputs.format`

**Type :** Sélection

**Options :** - `json` - Données JSON uniquement - `png` - Graphiques PNG uniquement - `both` - JSON + PNG (recommandé)

**Pour ce guide :** Sélectionnez `both`

---

## 4. Génération et validation du JSON

### 4.1 Génération du JSON

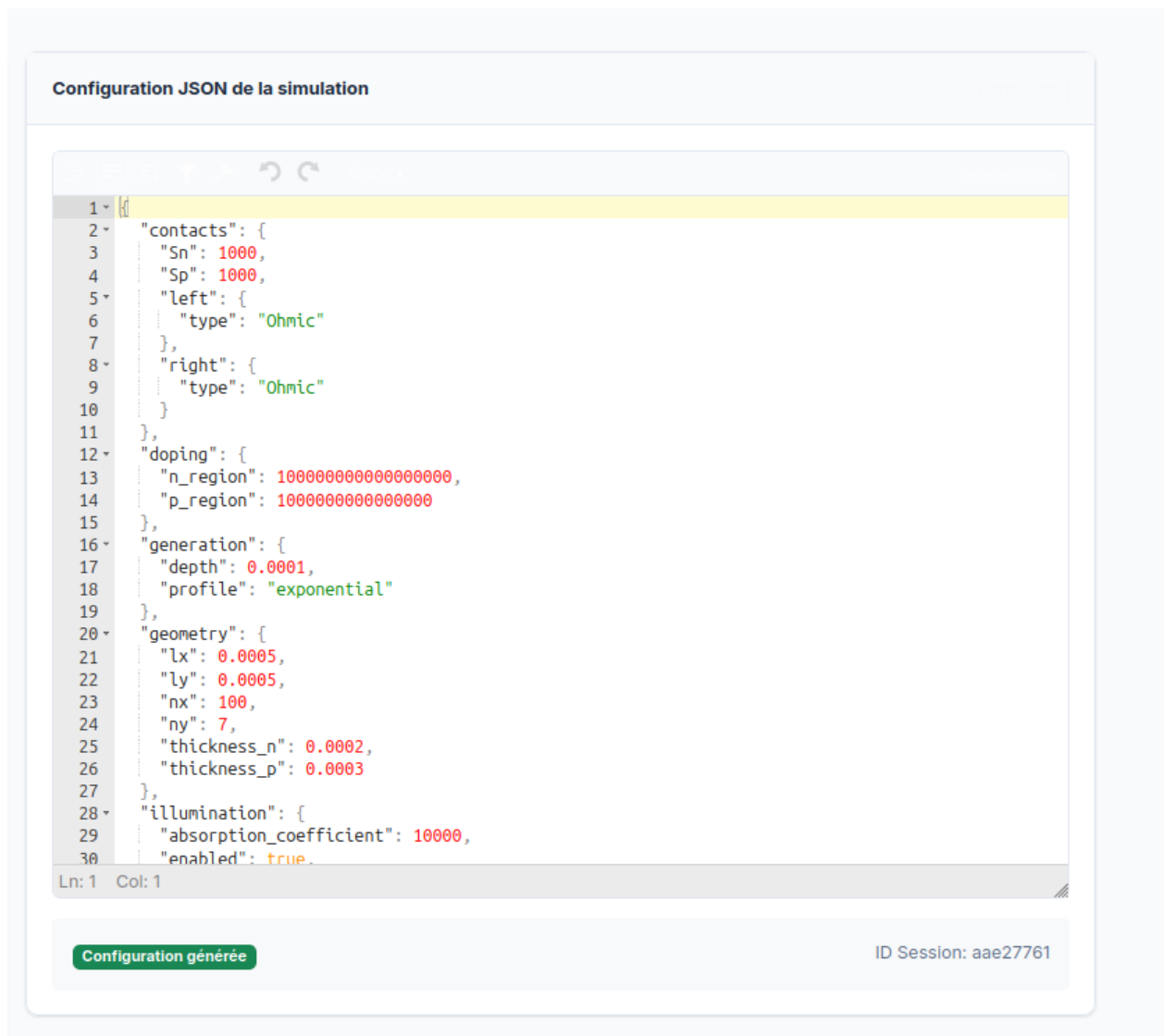
Une fois tous les champs remplis, cliquez sur le bouton **“Générer JSON”** en bas du formulaire.

Un panneau s'affiche avec le JSON généré.

### 4.2 Exemple de JSON généré

```
{
 "simulation_name": "mon_homojonction_si_001",
 "simulation_type": "homojunction",
 "materials": {
 "active": "Si"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 5e-5,
```

```
 "thickness_p": 2e-4,
 "nx": 100
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e17,
 "p_region": 1e15
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.7,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram"],
 "format": "both"
 }
}
```



#### 4.3 Validation du JSON

Le système vérifie automatiquement : - ✓ Tous les champs requis sont remplis - ✓ Les types de données sont corrects - ✓ Les valeurs sont dans des plages raisonnables - ✓ Le matériau existe dans la base

Si une erreur est détectée, un message rouge s'affiche avec la correction à apporter.

#### 4.4 Sauvegarde du JSON (optionnel)

Pour sauvegarder le JSON localement :

1. Cliquez sur le bouton **"Télécharger JSON"**
2. Le fichier est téléchargé avec le nom : [simulation\_name].json

Vous pourrez le réutiliser plus tard en cliquant sur **"Charger JSON"**.

---

## 5. Lancement de la simulation

### 5.1 Lancement

Cliquez sur le bouton **“Lancer la simulation”**.

### 5.2 Suivi de la progression

Une page de progression s’affiche.

**Informations affichées** : - **Statut** : En cours / Terminé / Échoué - **Progression** : Barre de progression (0-100%) - **Temps écoulé** : Temps depuis le début - **Temps restant estimé** : Estimation basée sur la vitesse - **Étape en cours** : Ex: “Résolution de l’équation de Poisson”

**Temps typique pour une homojonction Si** : - 50 points, 100 points de grille : ~5-15 secondes - 100 points, 200 points de grille : ~20-40 secondes - 200 points, 500 points de grille : ~1-2 minutes

**Note** : Le temps peut varier en fonction de votre machine et de la charge du système.

### 5.3 Une fois terminé

Lorsque la simulation est terminée : - La barre de progression atteint 100% - Le statut passe à “Terminé” - Un bouton **“Voir les résultats”** apparaît

Cliquez sur **“Voir les résultats”** pour accéder aux résultats.

---

## 6. Analyse des résultats

### 6.1 Page de résultats

La page de résultats s’organise en onglets :

**Onglets disponibles** : 1. **Résumé** - Vue d’ensemble des métriques principales 2. **Courbe I-V** - Courbe courant-tension 3. **Diagramme de bandes** - Structure de bandes d’énergie 4. **Densités** - Profils de densité de porteurs 5. **Recombinaison** - Profils de recombinaison 6. **Champ électrique** - Profil du champ électrique 7. **Génération** - Profil du taux de génération

---

### 6.2 Onglet Résumé

L’onglet Résumé affiche les métriques principales extraites de la courbe I-V.

### Métriques affichées

| Métrique                              | Symbole   | Unité                   | Description                                   |
|---------------------------------------|-----------|-------------------------|-----------------------------------------------|
| <b>Efficacité</b>                     | $\eta$    | %                       | Pourcentage de conversion lumière-électricité |
| <b>Courant de court-circuit</b>       | $J_{sc}$  | $\text{mA}/\text{cm}^2$ | Courant maximal à $V=0$                       |
| <b>Tension de circuit ouvert</b>      | $V_{oc}$  | V                       | Tension à $I=0$                               |
| <b>Facteur de remplissage</b>         | FF        | -                       | Rapport $P_{max} / (J_{sc} \times V_{oc})$    |
| <b>Puissance maximale</b>             | $P_{max}$ | $\text{mW}/\text{cm}^2$ | Puissance au point de fonctionnement optimal  |
| <b>Courant à <math>P_{max}</math></b> | $J_{max}$ | $\text{mA}/\text{cm}^2$ | Courant au point de puissance maximale        |
| <b>Tension à <math>P_{max}</math></b> | $V_{max}$ | V                       | Tension au point de puissance maximale        |

### Valeurs typiques pour une homojonction Si

- **$\eta$**  : 15-25% (selon la configuration)
- **$J_{sc}$**  : 30-42  $\text{mA}/\text{cm}^2$
- **$V_{oc}$**  : 0.6-0.75 V
- **FF** : 0.75-0.85

**Note** : Ces valeurs dépendent fortement des paramètres de dopage, d'épaisseur et d'illumination.

## 6.3 Onglet Courbe I-V

L'onglet Courbe I-V affiche la caractéristique courant-tension de la cellule.

### Lecture de la courbe

**Axe X** : Tension (V)

**Axe Y** : Densité de courant ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )

**Points clés** : -  **$J_{sc}$**  : Intersection avec l'axe Y ( $V=0$ ) -  **$V_{oc}$**  : Intersection avec l'axe X ( $J=0$ ) -

**$P_{max}$**  : Point de puissance maximale (marqué par un cercle)

### Interactions disponibles

- **Zoom** : Clic-glisser pour zoomer
- **Pan** : Clic-droit-glisser pour déplacer
- **Reset** : Double-clic pour réinitialiser
- **Export** : Clic sur l'icône de téléchargement pour exporter en PNG

### Interprétation physique

- **Pente près de 0V** : Résistance série ( $R_s$ )
- **Pente près de  $V_{oc}$**  : Résistance shunt ( $R_{sh}$ )

- **Forme de la courbe** : Qualité de la jonction

**Astuce** : Une courbe idéale a une forme “rectangulaire” (FF élevée). Une courbe “molle” indique des pertes.

---

## 6.4 Onglet Diagramme de bandes

L’onglet Diagramme de bandes affiche la structure de bandes d’énergie dans la cellule.

### *Composantes du diagramme*

- **Bande de conduction ( $E_c$ )** : Énergie minimale pour les électrons
- **Bande de valence ( $E_v$ )** : Énergie maximale pour les trous
- **Niveau de Fermi ( $E_f$ )** : Niveau d’énergie de référence
- **Zone de déplétion** : Région où les bandes sont courbées

### *Lecture du diagramme*

**Axe X** : Position dans la cellule (cm)

**Axe Y** : Énergie (eV)

**Observations typiques** : - **Courbure des bandes** : Due au champ électrique - **Position de  $E_f$**  : Plus proche de  $E_c$  dans la région N, plus proche de  $E_v$  dans la région P - **Largeur de la zone de déplétion** : Dépend du dopage

### *Interprétation physique*

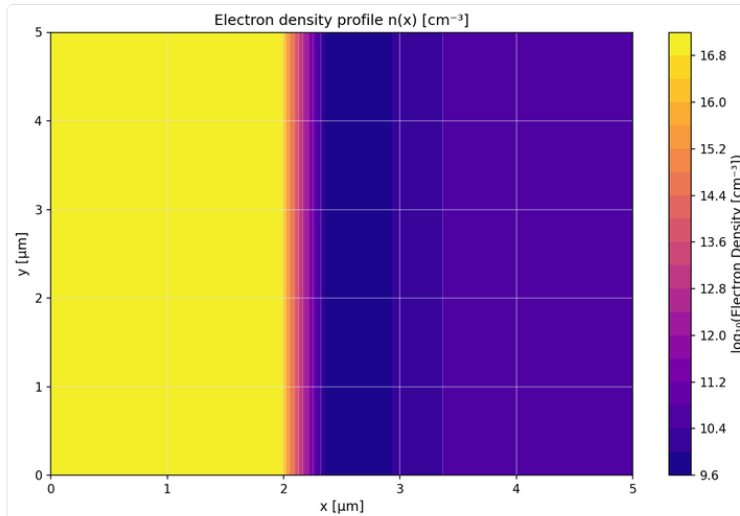
- Plus la courbure est forte, plus le champ électrique est élevé
- La zone de déplétion est là où la séparation des porteurs se produit
- La discontinuité de bandes est nulle pour une homojonction (même matériau)

---

## 6.5 Onglet Densités

L’onglet Densités affiche les profils de densité d’électrons et de trous.

Electron density profile  $n(x)$  [ $\text{cm}^{-3}$ ]



Profil ou carte 2D de la concentration d'électrons.

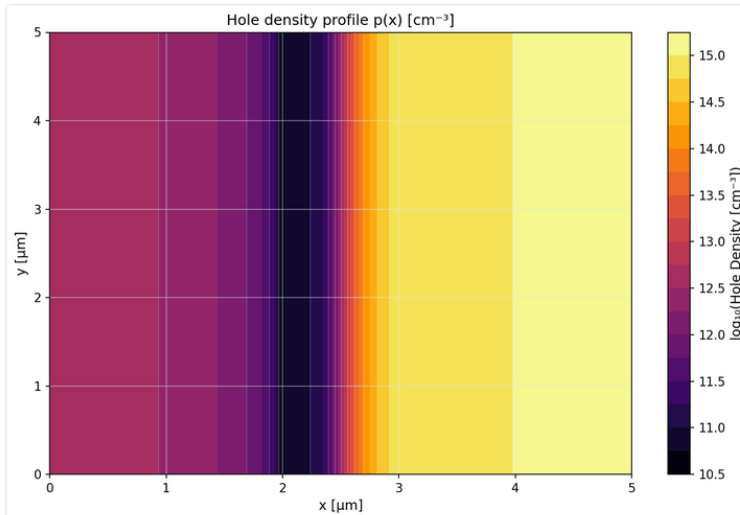
**Explication**

Zone sombre = peu d'électrons = zone de déplétion.

**Physique**

$n(x) = n_i \exp[(E_F - F_i)/kT]$ . Porteurs minoritaires dans la région p.

Hole density profile  $p(x)$  [ $\text{cm}^{-3}$ ]



Profil ou carte 2D de la concentration de trous.

**Explication**

Complémentaire à la densité d'électrons.

**Physique**

$p(x) = n_i \exp[(F_i - E_F)/kT]$ . Porteurs majoritaires dans la région p.

## Electron and Hole density 2D



### Profils affichés

- **Densité d'électrons (n)** : En bleu
- **Densité de trous (p)** : En rouge
- **Densité intrinsèque (ni)** : En pointillés (référence)

### Lecture des profils

**Axe X** : Position dans la cellule (cm)

**Axe Y** : Densité ( $\text{cm}^{-3}$ , échelle logarithmique)

**Observations typiques** : - **Région N** :  $n \gg p$  (majorité d'électrons) - **Région P** :  $p \gg n$  (majorité de trous) - **Zone de déplétion** :  $n$  et  $p$  sont faibles et comparables

---

## 7. Export des résultats

### 7.1 Export JSON

Pour exporter les résultats brutes en JSON :

1. Cliquez sur le bouton **“Exporter JSON”** en haut de la page
2. Le fichier [simulation\_name]\_results.json est téléchargé

**Contenu du fichier JSON** : - Métriques principales ( $\eta$ ,  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $FF$ , etc.) - Données brutes de la courbe I-V - Profils spatiaux ( $n$ ,  $p$ , champ électrique, etc.) - Configuration de la simulation

### 7.2 Export CSV

Pour exporter les données de la courbe I-V en CSV :

1. Cliquez sur le bouton **“Exporter CSV”**
2. Le fichier [simulation\_name]\_iv.csv est téléchargé

**Format du CSV** :

```
voltage_V,current_mA_cm2,power_mW_cm2
0.000,42.5,0.000
0.100,42.3,4.23
...
```

### 7.3 Génération d'un rapport PDF

Pour générer un rapport PDF complet :

1. Cliquez sur le bouton **“Générer PDF”**
2. Attendez la génération (quelques secondes)
3. Le fichier [simulation\_name]\_report.pdf est téléchargé

**Contenu du rapport PDF** : - Page de titre avec résumé - Tableau des métriques - Courbe I-V avec annotations - Diagramme de bandes - Profils de densité - Configuration de la simulation

## 7.4 Localisation des fichiers sur le disque

Les fichiers sont également sauvegardés dans le dossier outputs/ du projet :

```
outputs/
├── mon_homojonction_si_001_20240701_123456/
│ ├── mon_homojonction_si_001_results.json
│ ├── mon_homojonction_si_001_iv.csv
│ └── mon_homojonction_si_001_report.pdf
└── viz/
 ├── iv_curve.png
 ├── band_diagram.png
 ├── electron_density.png
 ├── hole_density.png
 ├── recombination.png
 ├── electric_field.png
 └── generation_rate.png
```

---

## 8. Comparaison de simulations

### 8.1 Accéder à la comparaison

Pour comparer votre simulation avec une autre :

1. Naviguez vers /compare OU
2. Cliquez sur “**Comparer**” dans le menu principal

### 8.2 Sélection des simulations

1. Dans la liste déroulante “Simulation 1”, sélectionnez votre simulation
2. Dans la liste déroulante “Simulation 2”, sélectionnez une autre simulation
3. Cliquez sur “**Comparer**”

### 8.3 Onglets de comparaison

La comparaison affiche 6 onglets :

#### 8.3.1 Onglet J-V

- Courbes I-V superposées
- Légende avec couleurs
- Zoom et pan disponibles

#### 8.3.2 Onglet P-V

- Courbes puissance-tension

- Marqueur Pmax pour chaque simulation
- Différence  $\Delta P_{\text{max}}$  affichée

### 8.3.3 Onglet Radar

- Graphe araignée normalisé
- Paramètres :  $\eta$ , Jsc, Voc, FF
- Visualisation rapide des forces/faiblesses

### 8.3.4 Onglet Tableau

- Valeurs numériques côte à côte
- Meilleure cellule surlignée en vert
- Différence  $\Delta$  pour chaque métrique
- Pourcentage d'amélioration

### 8.3.5 Onglet Diff config

- Configurations JSON côte à côte
- Différences surlignées en jaune
- Paramètres modifiés identifiés

---

## 9. Bonnes pratiques

### 9.1 Paramètres recommandés pour le silicium

| Paramètre              | Valeur recommandée           | Justification                                 |
|------------------------|------------------------------|-----------------------------------------------|
| thickness_n            | 5e-5 cm (0.5 $\mu\text{m}$ ) | Bon compromis absorption/recombinaison        |
| thickness_p            | 2e-4 cm (2 $\mu\text{m}$ )   | Absorption de la plupart de la lumière        |
| n_region               | 1e17 $\text{cm}^{-3}$        | Fort dopage pour bon champ électrique         |
| p_region               | 1e15 $\text{cm}^{-3}$        | Dopage modéré pour limiter la recombinaison   |
| nx                     | 100 points                   | Bonne précision sans temps de calcul excessif |
| voltages.stop          | 0.7 V                        | Légèrement au-dessus du Voc typique           |
| voltages.points        | 50 points                    | Courbe lisse                                  |
| photon_flux            | 2.5e17                       | Spectre AM1.5G standard                       |
| absorption_coefficient | 5e3 $\text{cm}^{-1}$         | Valeur moyenne pour Si                        |

### 9.2 Erreurs courantes à éviter

#### Erreur 1 : Dopage trop asymétrique

✗ **Mauvais** : n\_region = 1e20, p\_region = 1e13

✓ **Bon** : n\_region = 1e17, p\_region = 1e15

**Pourquoi :** Un dopage trop asymétrique peut causer des problèmes de convergence et des résultats non physiques.

*Erreur 2 : Épaisseur trop fine*

**✗Mauvais :** thickness\_p = 1e-6 cm (0.01  $\mu\text{m}$ )

✓**Bon :** thickness\_p = 2e-4 cm (2  $\mu\text{m}$ )

**Pourquoi :** Une épaisseur trop fine n'absorbe pas assez de lumière, résultant en un Jsc très bas.

*Erreur 3 : Tension d'arrêt trop basse*

**✗Mauvais :** voltages.stop = 0.5 V

✓**Bon :** voltages.stop = 0.7 V

**Pourquoi :** Si la tension d'arrêt est inférieure au Voc, la courbe I-V sera incomplète et le Voc ne pourra pas être déterminé.

### 9.3 Validation physique des résultats

Après chaque simulation, vérifiez :

1. **Voc réaliste :** Pour Si, Voc devrait être 0.5-0.75 V
2. **Jsc réaliste :** Pour Si sous AM1.5G, Jsc devrait être 30-42 mA/cm<sup>2</sup>
3. **FF réaliste :** FF devrait être 0.7-0.85 pour une bonne cellule
4.  **$\eta$  réaliste :** Pour Si,  $\eta$  devrait être 15-25% pour une cellule standard

---

## 10. Exemples de configurations

### 10.1 Configuration basique

Configuration standard pour une homojonction Si avec des paramètres raisonnables.

```
{
 "simulation_name": "homo_si_basique",
 "simulation_type": "homojunction",
 "materials": {
 "active": "Si"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 5e-5,
 "thickness_p": 2e-4,
 "nx": 100
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e17,
 "p_region": 1e15
 },
 "voltages": {
```

```

 "start": 0.0,
 "stop": 0.7,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram"],
 "format": "both"
 }
}

```

**Résultats typiques :** -  $\eta$  : ~18% -  $J_{sc}$  : ~35 mA/cm<sup>2</sup> -  $V_{oc}$  : ~0.65 V - FF : ~0.79

---

## 10.2 Configuration haute efficacité

Configuration optimisée pour maximiser l'efficacité.

```

{
 "simulation_name": "homo_si_haute_efficacite",
 "simulation_type": "homojunction",
 "materials": {
 "active": "Si"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 2e-5,
 "thickness_p": 3e-4,
 "nx": 200
 },
 "doping": {
 "n_region": 5e17,
 "p_region": 5e15
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.75,
 "points": 100
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density", "hole_density",
"recombination_profiles"],

```

```
 "format": "both"
 }
}
```

**Résultats typiques** : -  $\eta$  : ~20-22% -  $J_{sc}$  : ~38 mA/cm<sup>2</sup> -  $V_{oc}$  : ~0.68 V - FF : ~0.82

---

## 11. Dépannage

### 11.1 La simulation échoue

**Symptôme** : La simulation affiche “Échoué” après quelques secondes.

**Causes possibles** :

1. **Paramètres hors plage**
  - Vérifiez que les dopages sont entre 1e12 et 1e21 cm<sup>-3</sup>
  - Vérifiez que les épaisseurs sont positives
  - Vérifiez que la tension d’arrêt > tension de départ
2. **Matériau invalide**
  - Vérifiez que le matériau existe dans la base
  - Essayez avec “Si” pour tester
3. **Problème de convergence**
  - Réduisez le nombre de points de grille (nx)
  - Réduisez l’asymétrie de dopage
  - Essayez avec une configuration basique

**Solution** : Commencez avec la configuration basique (section 10.1) et modifiez un paramètre à la fois.

---

### 11.2 Les résultats semblent incorrects

**Symptôme** : Les valeurs de  $\eta$ ,  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF semblent irréalistes.

**Vérifications** :

1. **Voc anormalement bas (< 0.3 V pour Si)**
  - Vérifiez que l’illumination est activée
  - Vérifiez le dopage (trop bas → Voc bas)
  - Vérifiez la tension d’arrêt (assez haute pour capturer Voc)
2. **Jsc anormalement bas (< 10 mA/cm<sup>2</sup> pour Si)**
  - Vérifiez que l’illumination est activée
  - Vérifiez l’épaisseur (trop fine → peu d’absorption)
  - Vérifiez le coefficient d’absorption
3. **FF anormalement bas (< 0.5)**

- Vérifiez le dopage (trop asymétrique)
- Vérifiez la qualité de la jonction
- Regardez le profil de recombinaison

**Solution** : Comparez avec la configuration basique et identifiez les différences.

---

### 11.3 La simulation est très lente

**Symptôme** : La simulation prend plus de 5 minutes.

**Solutions** :

1. **Trop de points de grille**
  - Réduisez nx de 500 à 100-200
2. **Trop de points de tension**
  - Réduisez voltages.points de 200 à 50
3. **Trop de graphiques**
  - Désactivez les graphiques non nécessaires
  - Utilisez "json only" pour les tests

**Solution** : Commencez avec nx=100 et voltages.points=50, augmentez progressivement si nécessaire.

---

## Conclusion

Félicitations ! Vous avez complété le guide de simulation d'homojonction silicium.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Configurer une homojonction silicium
- ✓ Générer et valider un JSON de configuration
- ✓ Lancer et suivre une simulation
- ✓ Analyser les résultats (courbe I-V, diagramme de bandes, profils)
- ✓ Exporter les résultats (JSON, CSV, PDF, PNG)
- ✓ Comparer deux simulations
- ✓ Appliquer les bonnes pratiques
- ✓ Dépanner les problèmes courants

### Prochaines étapes

- [Guide hétérojonction CdTe/CdS](#) - Pour apprendre les interfaces
- [Optimisation IA](#) - Pour optimiser automatiquement
- [Base de matériaux](#) - Pour explorer d'autres matériaux
- [Autres types de simulation](#) - Pour découvrir 20+ types

## Continuez à expérimenter !

N'hésitez pas à : - Modifier les paramètres et observer les effets - Créer vos propres configurations - Utiliser l'optimisation IA pour trouver les meilleurs paramètres - Contribuer à la documentation si vous trouvez des améliorations

---

## 12. Version CLI

### 12.1 Configuration JSON pour l'homojonction

Voici le fichier JSON complet pour réaliser cette simulation en CLI :

```
{
 "simulation_name": "homo_si_standard_001",
 "simulation_type": "homojunction",
 "materials": {
 "active": "Si"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 1e-4,
 "thickness_p": 3e-4,
 "nx": 100
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e17,
 "p_region": 1e15
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.7,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density",
"hole_density"],
 "format": "both"
 }
}
```

### 12.2 Lancement de la simulation

Sauvegardez ce JSON dans un fichier config.json et lancez :

```
python main.py --config config.json --output results/
```



## 12.3 Résultats

Les résultats sont sauvegardés dans results/ : - iv\_curve.png : Courbe I-V - band\_diagram.png : Diagramme de bandes - electron\_density.png : Densité d'électrons - hole\_density.png : Densité de trous - results.json : Données brutes - summary.txt : Résumé

## 12.4 Comparaison Web vs CLI

| Aspect        | Web                          | CLI                              |
|---------------|------------------------------|----------------------------------|
| Configuration | Formulaire graphique         | Fichier JSON                     |
| Visualisation | Immédiate dans le navigateur | Fichiers PNG à ouvrir            |
| Historique    | Automatique dans la base     | Manuel                           |
| Export        | Boutons dans l'interface     | Fichiers générés automatiquement |

Pour plus d'informations sur le mode CLI, consultez le [Guide d'utilisation CLI](#).

**Bonne simulation ! 🎉**

## Guide complet : Simulation d'hétérojonction CdTe/CdS

Ce guide vous accompagne pas à pas dans la création, le lancement et l'analyse d'une simulation d'hétérojonction CdTe/CdS avec SPARC.

**Durée estimée** : 45 minutes

**Niveau** : Intermédiaire

**Prérequis** : Guide homojonction silicium complété

---

### Table des matières du guide

1. [Introduction](#)
  2. [Accès à l'interface de simulation](#)
  3. [Configuration des paramètres](#)
  4. [Génération et validation du JSON](#)
  5. [Lancement de la simulation](#)
  6. [Analyse des résultats](#)
  7. [Export des résultats](#)
  8. [Comparaison avec l'homojonction](#)
  9. [Bonnes pratiques](#)
  10. [Exemples de configurations](#)
  11. [Dépannage](#)
-

## 1. Introduction

### 1.1 Qu'est-ce qu'une hétérojonction ?

Une hétérojonction est une jonction formée par deux semi-conducteurs différents, avec des band gaps différents. C'est la structure de base de nombreuses cellules solaires de nouvelle génération (CdTe, CIGS, Pérovskites).

**Structure typique** : - **Matériau N** : CdS (Sulfure de cadmium) -  $E_g = 2.42 \text{ eV}$  - **Matériau P** : CdTe (Tellure de cadmium) -  $E_g = 1.50 \text{ eV}$  - **Interface** : Discontinuité de bandes due aux différents gaps - **Contacts** : Work functions des électrodes

### 1.2 Pourquoi simuler une hétérojonction CdTe/CdS ?

La simulation permet de : - **Comprendre** les discontinuités de bandes aux interfaces - **Optimiser** les work functions des contacts - **Analyser** l'impact des offsets de bandes sur la performance - **Comparer** avec l'homojonction pour comprendre les avantages

### 1.3 Cas d'usage typiques

- **Recherche CdTe** : Optimisation de cellules CdTe commerciales
  - **Étude d'interface** : Analyse des discontinuités de bandes
  - **Comparaison matériaux** : CdTe vs Si vs Pérovskites
  - **Enseignement** : Illustration des hétérojonctions
- 

## 2. Accès à l'interface de simulation

### 2.1 Lancement de l'interface web

Assurez-vous que l'interface SPARC est lancée :

```
Avec Docker
docker compose up
```

```
En Local
python -m web.app
```

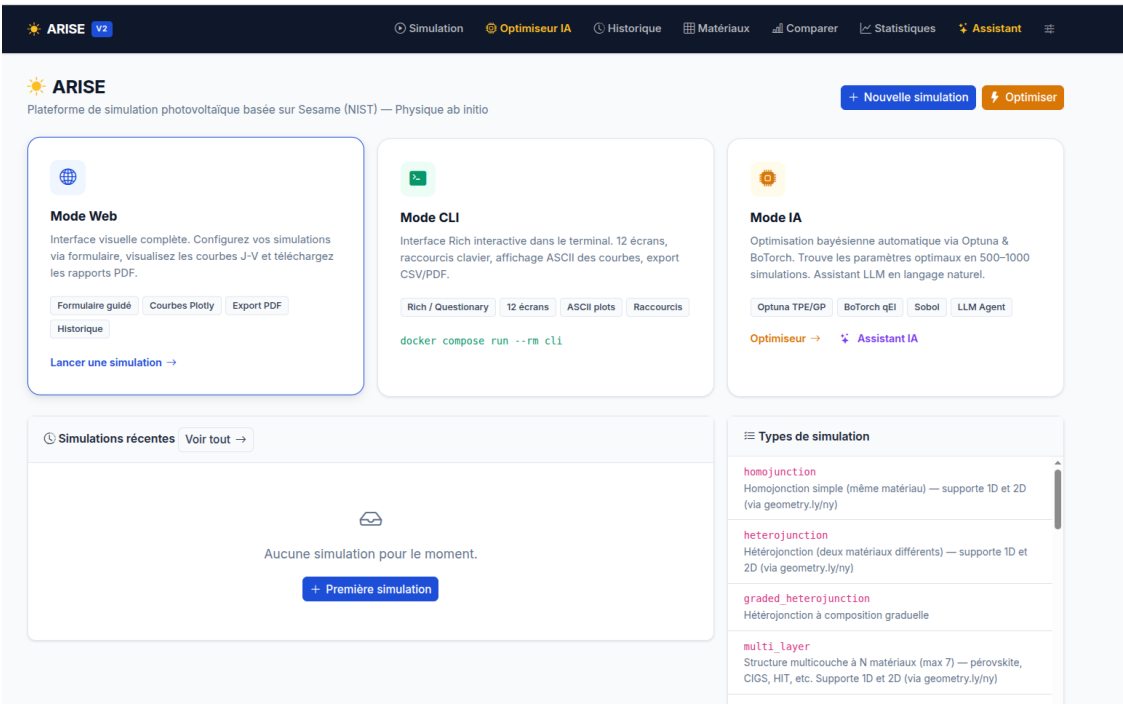
Ouvrez votre navigateur et accédez à :

<http://localhost:5000>

### 2.2 Navigation vers le formulaire de simulation

Depuis la page d'accueil :

1. Cliquez sur le bouton **"Nouvelle simulation"** dans le menu principal OU
2. Naviguez directement vers l'URL : <http://localhost:5000/form>



Page d'accueil avec bouton nouvelle simulation

## 3. Configuration des paramètres

### 3.1 Informations générales

### Nouvelle simulation

**Identification \***

sim\_heterojunction\_ar6f

heterojunction (Hétérojonction (deux matériaux diffén

**Configuration Hétérojonction \***

Matériau N (Gauche) \* Matériau P (Droite) \*

CdS CdTe

Largeur d'interface / Gradient (cm)

1e-6

**Paramètres Physiques \***

Température (K) \* Type de Maillage

300 Adaptif (recommandé)

Affecte Eg, Nc, Nv, mobilités

Convention de signe (courant / puissance)

Option A (PV classique): J généré négatif, Jsc =

**Contacts et Surfaces \***

Vitesse Recomb. Électrons (cm/s) \* Vitesse Recomb. Trous (cm/s) \*

10000 10000

Sn: recombinaison surface électrons Sp: recombinaison surface trous

**Configuration JSON de la simulation**

1

Ln: 1 Col: 1

Aucune configuration

ID Session: --

Vous pouvez modifier directement le JSON ci-dessus pour ajouter des paramètres avancés non présents dans le formulaire (ex: maillage non-uniforme, spectres personnalisés).

#### Formulaire hétérojonction

##### 3.1.1 Nom de la simulation

**Champ :** simulation\_name

**Type :** Texte

**Description :** Identifiant unique pour votre simulation

**Exemple :** hetero\_cdte\_cds\_001

##### 3.1.2 Type de simulation

**Champ :** simulation\_type

**Type :** Sélection (menu déroulant)

**Description :** Type de structure à simuler

**Pour ce guide :** Sélectionnez heterojunction

---

### 3.2 Sélection des matériaux

Pour une hétérojonction, vous devez sélectionner deux matériaux différents.

### 3.2.1 Matériau N (CdS)

1. Cliquez sur le champ **“Matériau N”**
2. Dans la liste, sélectionnez **“CdS”** (Sulfure de cadmium)
3. Les propriétés s’affichent :
  - **Eg** : 2.42 eV
  - **Nc** :  $1.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
  - **Nv** :  $2.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
  - **$\mu_e$**  :  $350 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
  - **$\mu_h$**  :  $50 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
  - **eps** : 10.0
  - **tau\_e, tau\_h** :  $1 \times 10^{-9} \text{ s}$
  - **chi** : 4.50 eV

### 3.2.2 Matériau P (CdTe)

1. Cliquez sur le champ **“Matériau P”**
2. Dans la liste, sélectionnez **“CdTe”** (Tellurure de cadmium)
3. Les propriétés s’affichent :
  - **Eg** : 1.50 eV
  - **Nc** :  $8.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
  - **Nv** :  $1.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
  - **$\mu_e$**  :  $1050 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
  - **$\mu_h$**  :  $80 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
  - **eps** : 9.4
  - **tau\_e, tau\_h** :  $1 \times 10^{-9} \text{ s}$
  - **chi** : 4.28 eV

**Note** : La différence de band gap (2.42 eV vs 1.50 eV) crée des discontinuités de bandes à l’interface.

---

### 3.3 Géométrie de la cellule

**Géométrie & Maillage \***

Thick N (cm) \*

0.0000025

Thick P (cm) \*

0.0004

Lx (Total, cm)

Calculé auto

Ly (2D, cm)

1D par défaut

Nx (Points) \*

100

Ny (Points)

1

**Dopage des Régions \***

N region (cm<sup>-3</sup>) \*

1000000000000000000

P region (cm<sup>-3</sup>) \*

1000000000000000000

**Balayage de Tension (V)**

Start

0

Stop

0.9

Points

25

☒ **Éclairement (AM1.5 / Laser) \***

Flux (ph/cm<sup>2</sup>/s) \*

2.5e17

Alpha (cm<sup>-1</sup>) \*

1e4

**Graphiques à Générer**

☒ lv\_curve

☒ band\_diagram

☒ rs\_rsh\_effect

☒ equivalent\_circuit\_schematic

☒ electric\_field

Générer JSON

Lancer la Simulation

Réinitialiser

Wheel: zoom · Drag: pan

CdS · L=2.50 μm · 2 region(s)

#### 3.3.1 Épaisseur de la région N (CdS)

**Champ** : geometry.thickness\_n

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : cm

**Description** : Épaisseur de la région dopée N (CdS)

**Valeur recommandée pour CdS** : 1e-5 (0.00001 cm = 0.1 μm)

**Note** : CdS est généralement très fine car c'est une couche de fenêtre transparente.

#### 3.3.2 Épaisseur de la région P (CdTe)

**Champ** : geometry.thickness\_p

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : cm

**Description** : Épaisseur de la région dopée P (CdTe)

**Valeur recommandée pour CdTe** : 5e-4 (0.0005 cm = 5 μm)

**Note** : CdTe est généralement plus épaisse car c'est l'absorbeur principal.

### 3.3.3 Nombre de points de grille

**Champ** : geometry.nx

**Type** : Entier (int)

**Description** : Nombre de points pour la discrétisation spatiale

**Valeur recommandée** : 150

**Note** : Une résolution plus élevée est recommandée pour les hétérojonctions pour bien résoudre l'interface.

---

## 3.4 Dopage

### 3.4.1 Dopage de la région N (CdS)

**Champ** : doping.n\_region

**Type** : Nombre (float)

**Unité** :  $\text{cm}^{-3}$

**Description** : Concentration de donneurs dans la région N

**Valeur recommandée pour CdS** :  $1\text{e}18$  ( $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ )

### 3.4.2 Dopage de la région P (CdTe)

**Champ** : doping.p\_region

**Type** : Nombre (float)

**Unité** :  $\text{cm}^{-3}$

**Description** : Concentration d'accepteurs dans la région P

**Valeur recommandée pour CdTe** :  $1\text{e}15$  ( $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ )

---

## 3.5 Contacts

Pour les hétérojonctions, les contacts sont importants car ils influencent l'alignement des bandes.

### 3.5.1 Contact avant (N-side)

**Champ** : contacts.front\_work\_function

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : eV

**Description** : Work function du contact avant

**Valeur recommandée** : 4.5 eV (TCO typique)

### 3.5.2 Contact arrière (P-side)

**Champ** : `contacts.back_work_function`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : eV

**Description** : Work function du contact arrière

**Valeur recommandée** : 5.7 eV (Mo typique pour CdTe)

---

## 3.6 Tension de polarisation

### 3.6.1 Tension de départ

**Valeur recommandée** : 0.0 V

### 3.6.2 Tension d'arrêt

**Valeur recommandée pour CdTe** : 0.9 V

**Note** : CdTe a un Voc typique de ~0.85 V, donc 0.9 V est suffisant.

### 3.6.3 Nombre de points

**Valeur recommandée** : 50

---

## 3.7 Illumination

### 3.7.1 Activation

Cochez la case pour activer l'illumination.

### 3.7.2 Flux de photons

**Valeur recommandée** :  $2.5 \times 10^{17}$  (AM1.5G)

### 3.7.3 Coefficient d'absorption

**Valeur recommandée** :  $1 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$

**Note** : CdTe a une absorption plus forte que Si, donc un coefficient plus élevé.

---

## 3.8 Sorties

**Graphiques recommandés** : - ☒ iv\_curve - ☒ band\_diagram - ☒ electron\_density - ☒ hole\_density

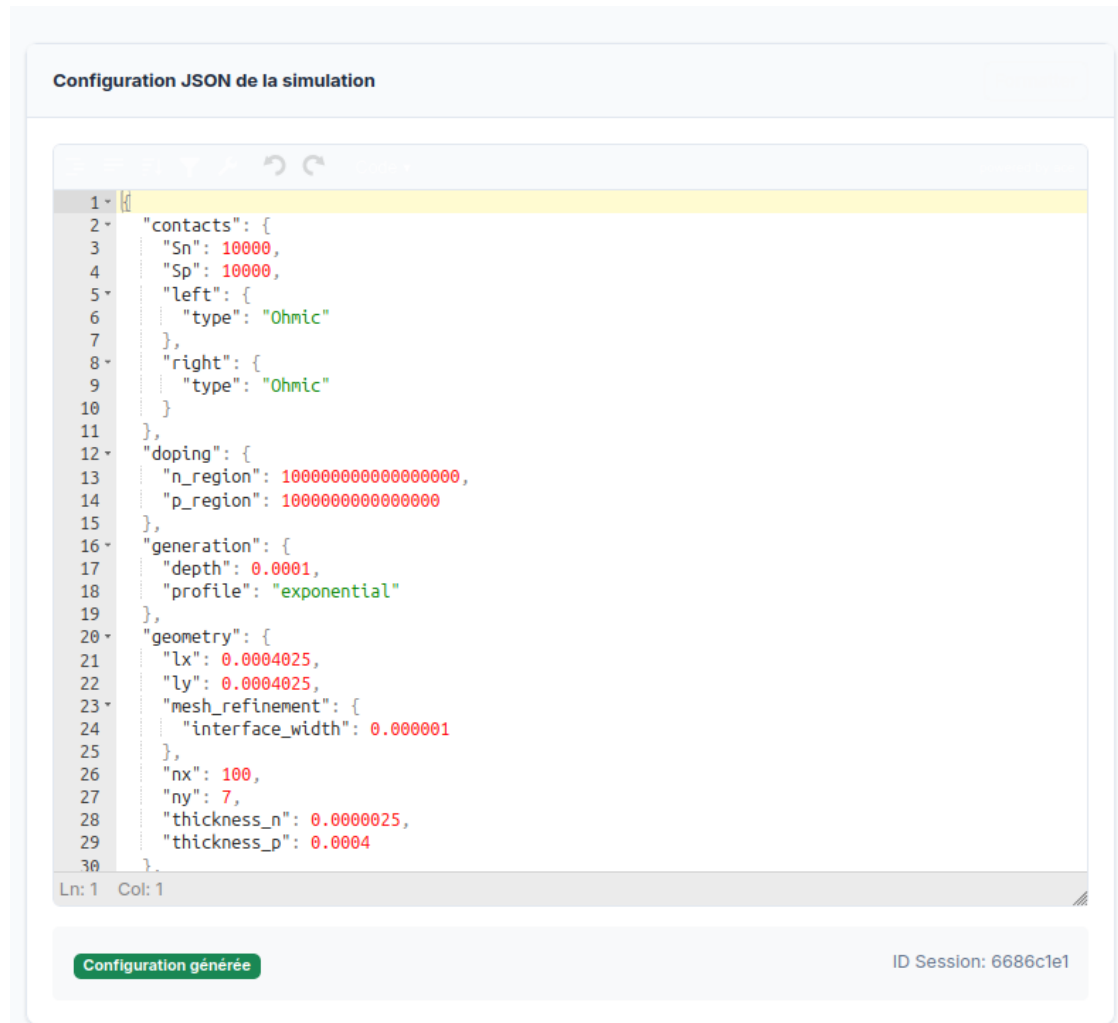
**Format** : Sélectionnez both



## 4. Génération et validation du JSON

### 4.1 Génération du JSON

Cliquez sur “Générer JSON”.



*JSON généré hétérojonction*

### 4.2 Exemple de JSON généré

```
{
 "simulation_name": "hetero_cdte_cds_001",
 "simulation_type": "heterojunction",
 "materials": {
 "n_material": "CdS",
 "p_material": "CdTe"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 1e-5,
```

```
 "thickness_p": 5e-4,
 "nx": 150
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e18,
 "p_region": 1e15
 },
 "contacts": {
 "front_work_function": 4.5,
 "back_work_function": 5.7
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.9,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 10000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density",
"hole_density"],
 "format": "both"
 }
}
```

---

## 5. Lancement de la simulation

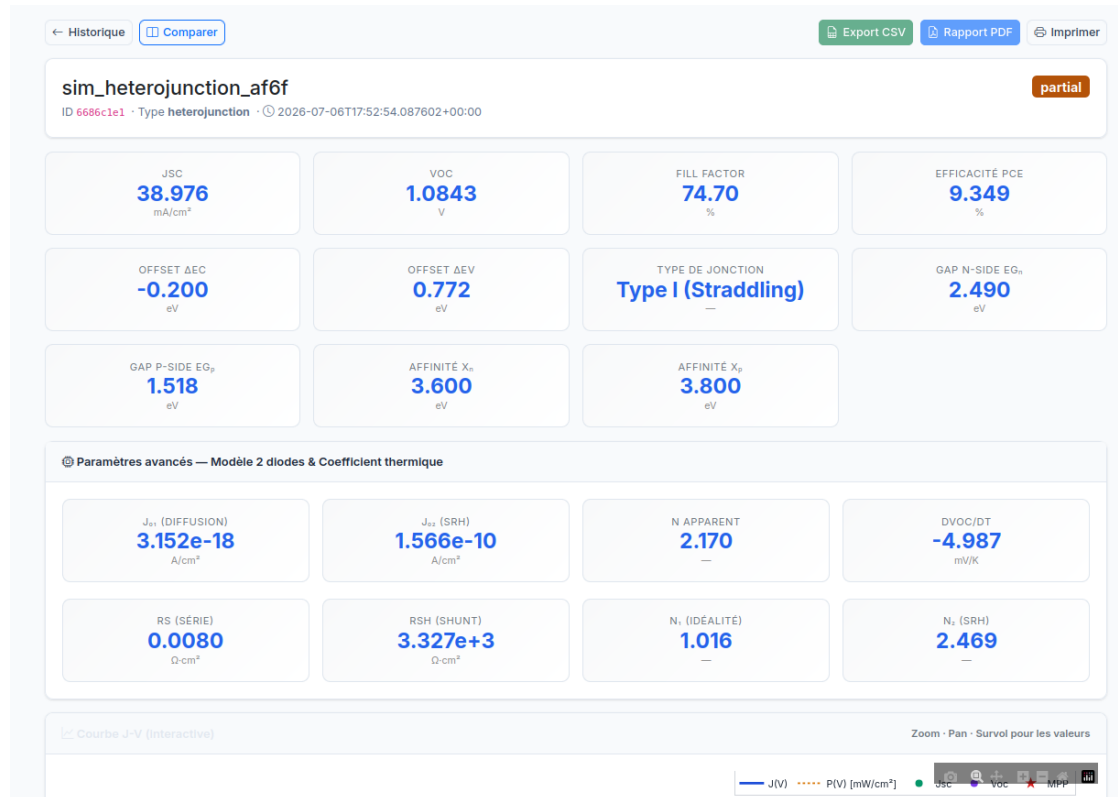
Cliquez sur **“Lancer la simulation”** et suivez la progression.

**Temps typique** : 15-30 secondes (résolution plus élevée).

---

## 6. Analyse des résultats

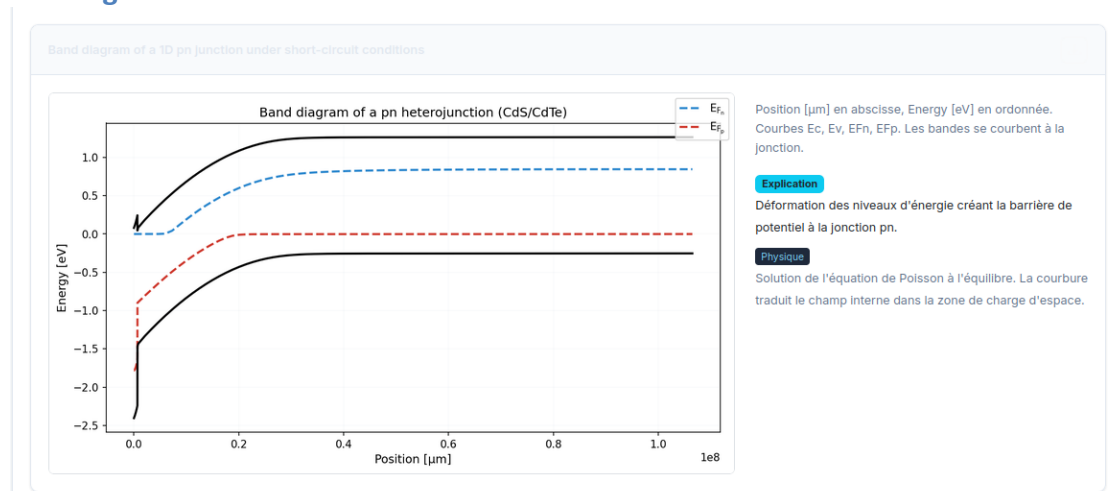
### 6.1 Résumé



### Résultats hétérojonction

**Valeurs typiques pour CdTe/CdS :** -  $\eta$  : 15-20% - Jsc : 25-30 mA/cm<sup>2</sup> - Voc : 0.75-0.85 V - FF : 0.70-0.80

### 6.2 Diagramme de bandes



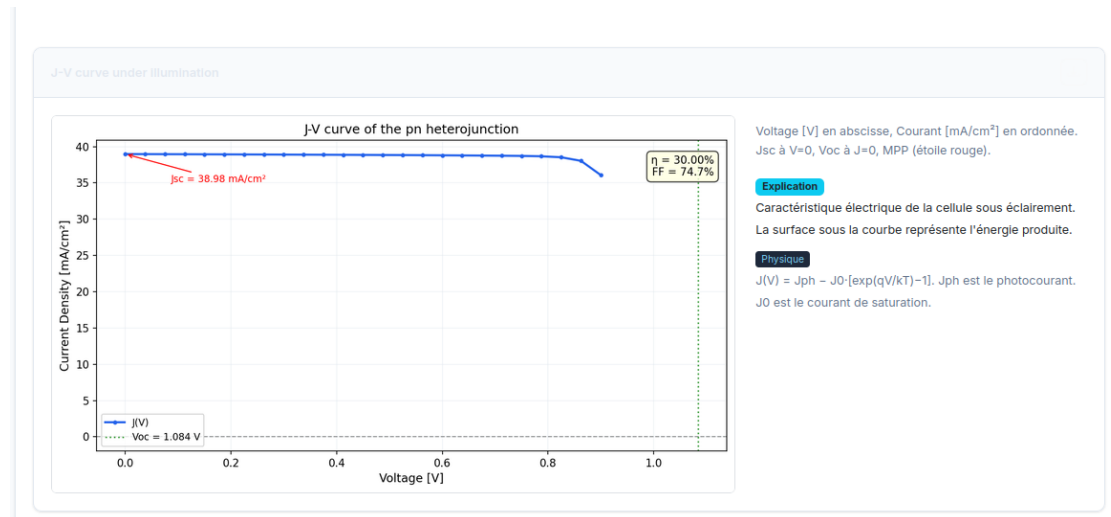
### Diagramme de bandes hétérojonction

Le diagramme de bandes pour une hétérojonction montre :

- **Discontinuité de  $E_c$**  : Saut de la bande de conduction à l'interface
- **Discontinuité de  $E_v$**  : Saut de la bande de valence à l'interface
- **Offsets** :  $\Delta E_c = \chi_{CdS} - \chi_{CdTe} = 4.50 - 4.28 = 0.22 \text{ eV}$

**Observations typiques** : - La discontinuité de bandes crée une barrière pour les porteurs - Le champ électrique est maximal à l'interface - Les porteurs doivent franchir la discontinuité

### 6.3 Courbe I-V



*Courbe I-V hétérojonction*

### 6.4 Profils de densité

**Observations typiques** : - Transition abrupte des densités à l'interface - Accumulation de porteurs d'un côté de l'interface - Déplétion de l'autre côté

---

## 7. Export des résultats

Suivez les mêmes étapes que pour l'homojonction : - Export JSON - Export CSV - Génération PDF

---

## 8. Comparaison avec l'homojonction

### 8.1 Pourquoi comparer ?

Comparer l'hétérojonction avec l'homojonction permet de : - Comprendre l'impact des discontinuités de bandes - Identifier les avantages/inconvénients de chaque structure - Choisir la structure adaptée à votre application

## 8.2 Procédure

1. Lancez une simulation d'homojonction Si (si pas déjà fait)
2. Lancez la simulation d'hétérojonction CdTe/CdS
3. Naviguez vers /compare
4. Sélectionnez les deux simulations
5. Analysez les différences

## 8.3 Différences typiques

| Paramètre                  | Homo Si                  | Hetero CdTe/CdS          |
|----------------------------|--------------------------|--------------------------|
| <b>Voc</b>                 | 0.6-0.7 V                | 0.75-0.85 V              |
| <b>Jsc</b>                 | 30-42 mA/cm <sup>2</sup> | 25-30 mA/cm <sup>2</sup> |
| <b>η</b>                   | 15-25%                   | 15-20%                   |
| <b>Diagramme de bandes</b> | Continu                  | Discontinu               |

## 9. Bonnes pratiques

### 9.1 Paramètres recommandés pour CdTe/CdS

| Paramètre           | Valeur recommandée    | Justification                          |
|---------------------|-----------------------|----------------------------------------|
| thickness_n (CdS)   | 1e-5 cm               | Couche de fenêtre fine                 |
| thickness_p (CdTe)  | 5e-4 cm               | Absorbeur principal                    |
| n_region (CdS)      | 1e18 cm <sup>-3</sup> | Fort dopage pour bon contact           |
| p_region (CdTe)     | 1e15 cm <sup>-3</sup> | Dopage modéré                          |
| nx                  | 150 points            | Résolution suffisante pour l'interface |
| front_work_function | 4.5 eV                | TCO typique                            |
| back_work_function  | 5.7 eV                | Mo typique pour CdTe                   |

### 9.2 Erreurs courantes

*Erreur 1 : Épaisseur CdS trop épaisse*

**✗Mauvais** : thickness\_n = 1e-4 cm

**✓Bon** : thickness\_n = 1e-5 cm

**Pourquoi** : CdS absorbe la lumière bleue, donc trop épaisse réduit le Jsc.

*Erreur 2 : Work functions inadaptés*

**✗Mauvais** : front\_work\_function = 5.0 eV

**✓Bon** : front\_work\_function = 4.5 eV

**Pourquoi** : Un work function trop élevé crée une barrière pour les électrons.

## 10. Exemples de configurations

### 10.1 Configuration standard

```
{
 "simulation_name": "hetero_cdte_cds_standard",
 "simulation_type": "heterojunction",
 "materials": {
 "n_material": "CdS",
 "p_material": "CdTe"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 1e-5,
 "thickness_p": 5e-4,
 "nx": 150
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e18,
 "p_region": 1e15
 },
 "contacts": {
 "front_work_function": 4.5,
 "back_work_function": 5.7
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.9,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 10000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density",
"hole_density"],
 "format": "both"
 }
}
```

**Résultats typiques :** -  $\eta$  : ~17% -  $J_{sc}$  : ~28 mA/cm<sup>2</sup> -  $V_{oc}$  : ~0.80 V - FF : ~0.75

---

## 11. Dépannage

### 11.1 Simulation échoue

**Causes possibles :** - Matériaux incompatibles - Work functions hors plage - Problème de convergence à l'interface

**Solutions :** 1. Vérifiez que les matériaux existent 2. Réduisez  $n_x$  si problème de convergence 3. Essayez avec des work functions typiques

## 11.2 Voc anormalement bas

**Causes possibles :** - Work functions inadaptés - Discontinuité de bandes trop grande - Recombinaison à l'interface

**Solutions :** 1. Ajustez les work functions 2. Réduisez le dopage asymétrique 3. Vérifiez les durées de vie

---

## Conclusion

Félicitations ! Vous avez complété le guide de simulation d'hétérojonction CdTe/CdS.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Configurer une hétérojonction avec deux matériaux
- ✓ Comprendre les discontinuités de bandes
- ✓ Configurer les contacts et work functions
- ✓ Analyser les profils aux interfaces
- ✓ Comparer avec l'homojonction

### Prochaines étapes

- [Guide cellule tandem](#) - Pour simuler des multi-jonctions
- [Optimisation IA](#) - Pour optimiser les work functions
- [Base de matériaux](#) - Pour explorer d'autres matériaux

---

## 12. Version CLI

### 12.1 Configuration JSON pour l'hétérojonction

Voici le fichier JSON complet pour réaliser cette simulation en CLI :

```
{
 "simulation_name": "hetero_cdte_cds_standard_001",
 "simulation_type": "heterojunction",
 "materials": {
 "n_material": "CdS",
 "p_material": "CdTe"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 1e-5,
 "thickness_p": 5e-4,
 "nx": 150
 },
 "doping": {
```

```

 "n_region": 1e18,
 "p_region": 1e15
 },
 "contacts": {
 "front_work_function": 4.5,
 "back_work_function": 5.7
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.9,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 10000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density",
"hole_density"],
 "format": "both"
 }
}

```

## 12.2 Lancement de la simulation

Sauvegardez ce JSON dans un fichier config.json et lancez :

```
python main.py --config config.json --output results/
```

## 12.3 Résultats

Les résultats sont sauvegardés dans results/ : - iv\_curve.png : Courbe I-V -  
band\_diagram.png : Diagramme de bandes - electron\_density.png : Densité d'électrons -  
hole\_density.png : Densité de trous - results.json : Données brutes - summary.txt :  
Résumé

## 12.4 Comparaison Web vs CLI

| Aspect        | Web                          | CLI                              |
|---------------|------------------------------|----------------------------------|
| Configuration | Formulaire graphique         | Fichier JSON                     |
| Visualisation | Immédiate dans le navigateur | Fichiers PNG à ouvrir            |
| Historique    | Automatique dans la base     | Manuel                           |
| Export        | Boutons dans l'interface     | Fichiers générés automatiquement |

Pour plus d'informations sur le mode CLI, consultez le [Guide d'utilisation CLI](#).

**Bonne simulation ! ☺**



## Guide complet : Simulation de cellule tandem Si/Si

Ce guide vous accompagne pas à pas dans la création, le lancement et l'analyse d'une simulation de cellule tandem Si/Si avec SPARC.

**Durée estimée** : 60 minutes

**Niveau** : Avancé

**Prérequis** : Guides homojonction et hétérojonction complétés

---

### Table des matières du guide

1. Introduction
  2. Accès à l'interface de simulation
  3. Configuration des paramètres
  4. Génération et validation du JSON
  5. Lancement de la simulation
  6. Analyse des résultats
  7. Export des résultats
  8. Optimisation du courant matching
  9. Bonnes pratiques
  10. Exemples de configurations
  11. Dépannage
- 

## 1. Introduction

### 1.1 Qu'est-ce qu'une cellule tandem ?

Une cellule tandem est une structure multi-jonction où deux ou plusieurs cellules sont empilées pour améliorer l'efficacité. Chaque jonction absorbe une partie différente du spectre solaire, permettant d'atteindre des efficacités plus élevées.

**Structure typique tandem 2 jonctions** : - **Top cell** : Cellule avec gap élevé (absorbe les photons de haute énergie) - **Bottom cell** : Cellule avec gap plus bas (absorbe les photons de basse énergie) - **Couplage optique** : Filtre spectral ou jonction tunnel - **Courant matching** : Les courants des deux cellules doivent être équilibrés

### 1.2 Pourquoi simuler une cellule tandem Si/Si ?

La simulation permet de : - **Comprendre** le courant matching entre top et bottom cell - **Optimiser** les épaisseurs relatives pour maximiser l'efficacité - **Analyser** la répartition spectrale de l'absorption - **Prédire** les limites théoriques des cellules tandem

### 1.3 Cas d'usage typiques

- **Recherche tandem** : Développement de cellules tandem haute efficacité
- **Optimisation spectrale** : Équilibrage des courants

- **Étude de filtres** : Analyse des filtres spectraux
- **Enseignement** : Illustration des multi-jonctions

---

## 2. Accès à l'interface de simulation

### 2.1 Lancement de l'interface web

Assurez-vous que l'interface SPARC est lancée :

# Avec Docker

```
docker compose up
```

# En Local

```
python -m web.app
```

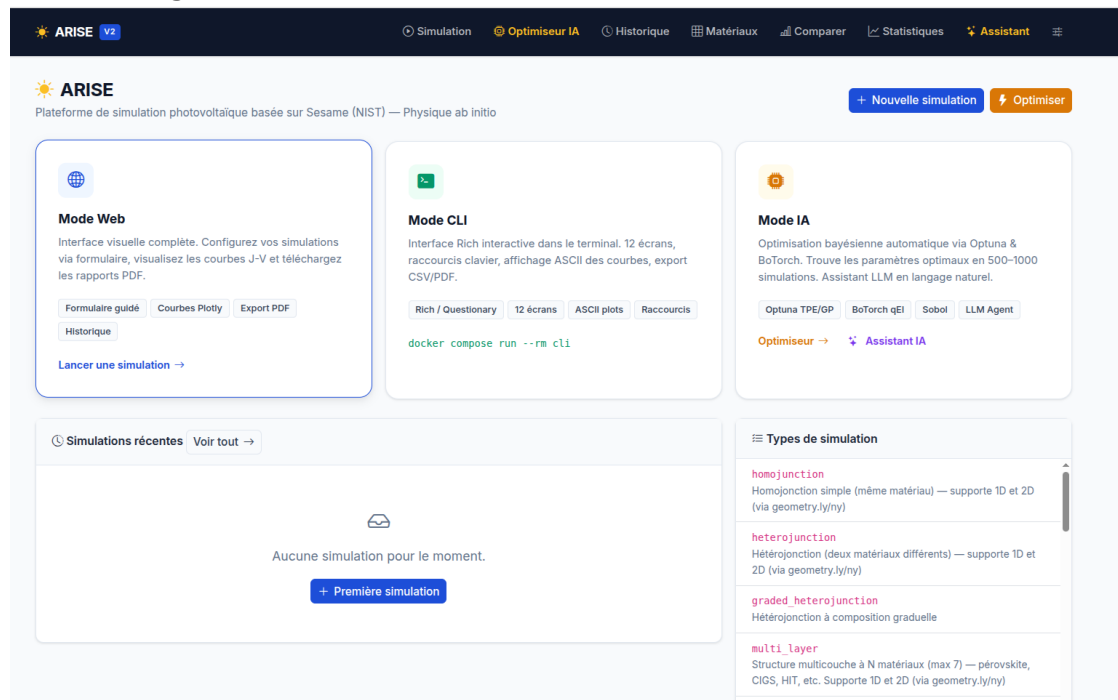
Ouvrez votre navigateur et accédez à :

`http://localhost:5000`

### 2.2 Navigation vers le formulaire de simulation

Depuis la page d'accueil :

1. Cliquez sur le bouton **“Nouvelle simulation”** dans le menu principal OU
2. Naviguez directement vers l'URL : `http://localhost:5000/form`



*Page d'accueil avec bouton nouvelle simulation*

---

## 3. Configuration des paramètres

### 3.1 Informations générales

### Nouvelle simulation

**Identification \***

sim\_tandem\_4951

tandem (Cellule tandem deux jonctions)

**Paramètres Tandem \***

|                   |                     |
|-------------------|---------------------|
| Matériau Top *    | Thick Top (cm) *    |
| Si                | 2e-4                |
| Matériau Bottom * | Thick Bottom (cm) * |
| Si                | 3e-4                |

**Spectre Personnalisé**

Longueurs d'onde (nm, sép. par virgule)

400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000

Intensité (ph/cm<sup>2</sup>/s/nm, sép. par virgule)

1, 1, 1, 1, 1, 1, 1

**Paramètres Physiques \***

|                   |                      |
|-------------------|----------------------|
| Température (K) * | Type de Maillage     |
| 300               | Adaptif (recommandé) |

Affecte Eg, Nc, Nv, mobilités

Convention de signe (courant / puissance)

Option A (PV classique): J généré négatif, Jsc =

**Configuration JSON de la simulation**

1

[ ]

Ln: 1 Col: 1

Aucune configuration

ID Session: --

Vous pouvez modifier directement le JSON ci-dessus pour ajouter des paramètres avancés non présents dans le formulaire (ex: maillage non-uniforme, spectres personnalisés).

#### Formulaire tandem

##### 3.1.1 Nom de la simulation

**Champ :** simulation\_name

**Type :** Texte

**Description :** Identifiant unique pour votre simulation

**Exemple :** tandem\_si\_si\_001

##### 3.1.2 Type de simulation

**Champ :** simulation\_type

**Type :** Sélection (menu déroulant)

**Description :** Type de structure à simuler

**Pour ce guide :** Sélectionnez tandem

---

### 3.2 Configuration de la Top Cell

La top cell absorbe les photons de haute énergie (bleu/UV).

### 3.2.1 Matériau de la top cell

**Champ** : `top_cell.material`

**Type** : Sélection

**Description** : Matériau de la jonction supérieure

**Pour ce guide** : Sélectionnez “Si” (Silicium)

### 3.2.2 Épaisseur de la top cell

**Champ** : `top_cell.thickness`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : cm

**Description** : Épaisseur de la top cell

**Valeur recommandée** :  $1e-4$  ( $0.0001 \text{ cm} = 1 \mu\text{m}$ )

**Note** : La top cell est généralement plus fine car elle absorbe principalement les photons de haute énergie.

### 3.2.3 Dopage de la top cell

**Champ** : `top_cell.doping`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** :  $\text{cm}^{-3}$

**Description** : Dopage de la top cell

**Valeur recommandée** :  $1e17 \text{ cm}^{-3}$

---

## 3.3 Configuration de la Bottom Cell

La bottom cell absorbe les photons de basse énergie (rouge/IR).

### 3.3.1 Matériau de la bottom cell

**Champ** : `bottom_cell.material`

**Type** : Sélection

**Description** : Matériau de la jonction inférieure

**Pour ce guide** : Sélectionnez “Si” (Silicium)

**Note** : Pour un tandem Si/Si, les deux cellules sont en silicium mais avec des épaisseurs différentes.

### 3.3.2 Épaisseur de la bottom cell

**Champ** : `bottom_cell.thickness`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : cm

**Description** : Épaisseur de la bottom cell

**Valeur recommandée** :  $3\text{e-}4$  ( $0.0003\text{ cm} = 3\text{ }\mu\text{m}$ )

**Note** : La bottom cell est généralement plus épaisse car elle doit absorber les photons de basse énergie qui pénètrent plus profondément.

### *3.3.3 Dopage de la bottom cell*

**Champ** : `bottom_cell.doping`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** :  $\text{cm}^{-3}$

**Description** : Dopage de la bottom cell

**Valeur recommandée** :  $1\text{e}15\text{ cm}^{-3}$

---

## **3.4 Couplage optique**

Le couplage optique définit comment la lumière est transmise de la top cell à la bottom cell.

### *3.4.1 Type de couplage*

**Champ** : `optical_coupling.type`

**Type** : Sélection

**Options** : - `filter` : Filtre spectral - `tunnel` : Jonction tunnel - `direct` : Transmission directe

**Pour ce guide** : Sélectionnez `filter`

### *3.4.2 Longueur d'onde de coupure*

**Champ** : `optical_coupling.cutoff_wavelength`

**Type** : Nombre (float)

**Unité** : nm

**Description** : Longueur d'onde de coupure du filtre

**Valeur recommandée** : 700 nm

**Note** : Les photons avec  $\lambda < 700\text{ nm}$  sont absorbés par la top cell, les autres passent à la bottom cell.

---

### 3.5 Tension de polarisation

### Géométrie & Maillage \*

Thick N (cm) \*

0.0002

Thick P (cm) \*

0.0003

Lx (Total, cm)

Calculé auto

Ly (2D, cm)

1D par défaut

Nx (Points) \*

100

Ny (Points)

1

### Dopage des Régions \*

N region ( $\text{cm}^{-3}$ ) \*

1e17

P region ( $\text{cm}^{-3}$ ) \*

1e15

### Balayage de Tension (V)

Start

0

Stop

1.4

Points

20

### ☒ Éclairement (AM1.5 / Laser) \*

Flux ( $\text{ph}/\text{cm}^2/\text{s}$ ) \*

2.5e17

Alpha ( $\text{cm}^{-1}$ ) \*

1e4

### Graphiques à Générer



iv\_curve



band\_diagram



generation\_rate

Générer JSON

Lancer la Simulation

Réinitialiser

Pour une cellule tandem, la tension totale est la somme des tensions des deux cellules.

#### 3.5.1 Tension de départ

**Valeur recommandée** : 0.0 V

#### 3.5.2 Tension d'arrêt

**Valeur recommandée pour tandem Si/Si** : 1.4 V

**Note** :  $V_{oc} \text{ tandem} \approx V_{oc\_top} + V_{oc\_bottom} \approx 0.7 + 0.7 = 1.4 \text{ V}$

#### 3.5.3 Nombre de points

**Valeur recommandée** : 100

---

### 3.6 Illumination

#### 3.6.1 Activation

Cochez la case pour activer l'illumination.

#### 3.6.2 Flux de photons

**Valeur recommandée** :  $2.5 \times 10^{17}$  (AM1.5G)

#### 3.6.3 Coefficient d'absorption

**Valeur recommandée** :  $5 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$  (pour Si)

---

### 3.7 Sorties

**Graphiques recommandés** : - ☒ iv\_curve - ☒ band\_diagram - ☒ spectral\_response - ☒ current\_matching

**Format** : Sélectionnez both

---

## 4. Génération et validation du JSON

### 4.1 Génération du JSON

Cliquez sur “**Générer JSON**”.



Configuration JSON de la simulation

```

1 {
2 "contacts": {
3 "Sn": 10000000,
4 "Sp": 10000000,
5 "left": {
6 "type": "Ohmic"
7 },
8 "right": {
9 "type": "Ohmic"
10 }
11 },
12 "doping": {
13 "n_region": 10000000000000000,
14 "p_region": 10000000000000000
15 },
16 "generation": {
17 "depth": 0.0001,
18 "profile": "exponential"
19 },
20 "geometry": {
21 "lx": 0.0005,
22 "nx": 100,
23 "thickness_n": 0.0002,
24 "thickness_p": 0.0003
25 },
26 "illumination": {
27 "absorption_coefficient": 10000,
28 "enabled": true,
29 "photon_flux": 25000000000000000
30 }
31 }

```

Ln: 1 Col: 1

Configuration générée

ID Session: de9bee12

Vous pouvez modifier directement le JSON ci-dessus pour ajouter des paramètres avancés non présents dans le formulaire (ex: maillage non-uniforme, spectres personnalisés).

*JSON généré tandem*

## 4.2 Exemple de JSON généré

```

{
 "simulation_name": "tandem_si_si_001",
 "simulation_type": "tandem",
 "top_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 1e-4,
 "doping": 1e17
 },
 "bottom_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 3e-4,
 "doping": 1e15
 },
 "optical_coupling": {
 "type": "filter",
 "cutoff_wavelength": 700
 },
}

```

```

"voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 1.4,
 "points": 100
},
"illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
},
"outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "spectral_response",
"current_matching"],
 "format": "both"
}
}

```

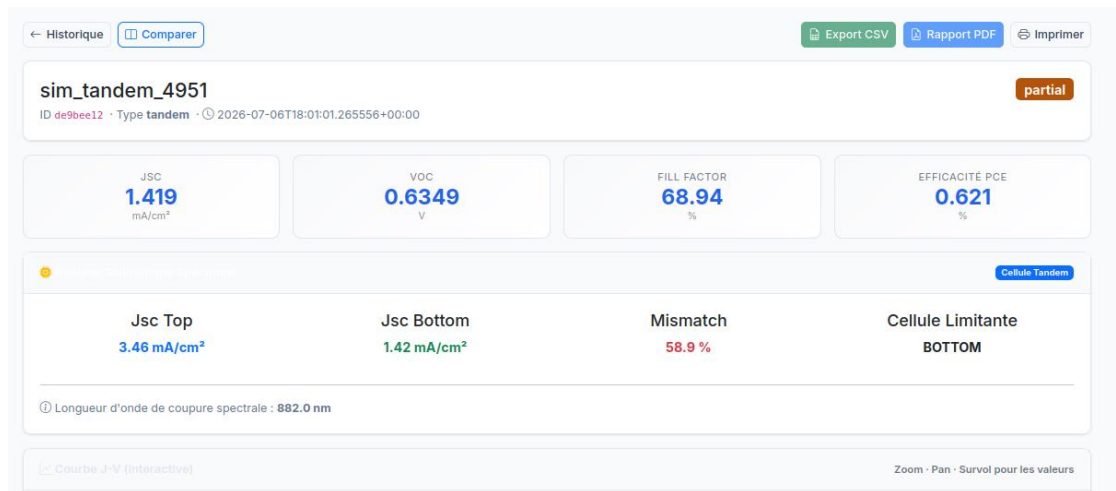
## 5. Lancement de la simulation

Cliquez sur “**Lancer la simulation**” et suivez la progression.

**Temps typique** : 30-60 secondes (deux jonctions à simuler).

## 6. Analyse des résultats

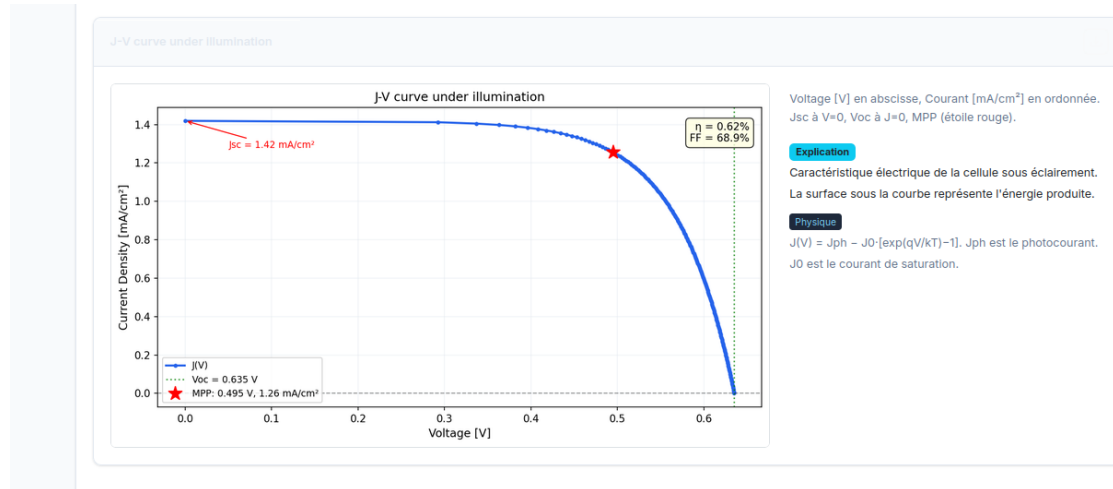
### 6.1 Résumé



### Résultats tandem

**Valeurs typiques pour tandem Si/Si** : -  $\eta$  : 25-30% (supérieur à une simple jonction Si) - Jsc : 20-25 mA/cm<sup>2</sup> (limité par la cellule la plus faible) - Voc : 1.2-1.4 V (somme des deux Voc) - FF : 0.75-0.85

## 6.2 Courbe I-V



### Courbe I-V tandem

La courbe I-V tandem montre : - **Voc élevé** :  $\sim 1.3\text{-}1.4 \text{ V}$  (somme des deux cellules) - **Jsc limité** : Limité par la cellule avec le courant le plus faible - **Forme typique** : Similaire à une jonction simple mais avec Voc doublé

## 6.3 Réponse spectrale

L'onglet réponse spectrale montre : - **Top cell** : Réponse dans le bleu/UV ( $\lambda < 700 \text{ nm}$ ) - **Bottom cell** : Réponse dans le rouge/IR ( $\lambda > 700 \text{ nm}$ ) - **Recouvrement** : Zone de recouvrement spectral

## 6.4 Courant matching

L'onglet courant matching montre : - **Jsc\_top** : Courant de la top cell - **Jsc\_bottom** : Courant de la bottom cell - **Matching** : Différence entre les deux courants

**Objectif** :  $J_{sc\_top} \approx J_{sc\_bottom}$  pour maximiser l'efficacité

---

## 7. Export des résultats

Suivez les mêmes étapes que pour les guides précédents : - Export JSON - Export CSV - Génération PDF

---

## 8. Optimisation du courant matching

### 8.1 Pourquoi le courant matching est important

Dans une cellule tandem, le courant total est limité par la cellule avec le courant le plus faible (courant limitant). Pour maximiser l'efficacité, il faut équilibrer les courants des deux cellules.

## 8.2 Comment optimiser le courant matching

### Méthode 1 : Ajuster les épaisseurs

- **Augmenter l'épaisseur de la top cell** → Augmente  $J_{sc\_top}$
- **Augmenter l'épaisseur de la bottom cell** → Augmente  $J_{sc\_bottom}$

### Méthode 2 : Ajuster la longueur d'onde de coupure

- **Augmenter la coupure** → Plus de lumière passe à la bottom cell
- **Diminuer la coupure** → Plus de lumière absorbée par la top cell

### Méthode 3 : Optimisation IA

Utilisez l'optimisation IA pour trouver automatiquement les meilleurs paramètres : -  
Objectif : Maximiser  $\eta$  - Paramètres : épaisseurs, coupure spectrale - Contrainte :  $J_{sc\_top} \approx J_{sc\_bottom}$

---

## 9. Bonnes pratiques

### 9.1 Paramètres recommandés pour tandem Si/Si

| Paramètre             | Valeur recommandée    | Justification                     |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------------------|
| top_cell.thickness    | 1e-4 cm               | Absorbe les photons haute énergie |
| bottom_cell.thickness | 3e-4 cm               | Absorbe les photons basse énergie |
| top_cell.doping       | 1e17 cm <sup>-3</sup> | Fort dopage pour bon champ        |
| bottom_cell.doping    | 1e15 cm <sup>-3</sup> | Dopage modéré                     |
| cutoff_wavelength     | 700 nm                | Séparation spectrale typique      |
| voltages.stop         | 1.4 V                 | $V_{oc\_top} + V_{oc\_bottom}$    |

### 9.2 Erreurs courantes

#### Erreur 1 : Déséquilibre de courant

✗**Mauvais** : top\_cell.thickness = 1e-5, bottom\_cell.thickness = 1e-4

✓**Bon** : top\_cell.thickness = 1e-4, bottom\_cell.thickness = 3e-4

**Pourquoi** : Un déséquilibre limite le courant total.

#### Erreur 2 : Coupure spectrale inadaptée

✗**Mauvais** : cutoff\_wavelength = 500 nm

✓**Bon** : cutoff\_wavelength = 700 nm

**Pourquoi** : Une coupure trop basse ne laisse pas assez de lumière à la bottom cell.

---

## 10. Exemples de configurations

### 10.1 Configuration standard

```
{
 "simulation_name": "tandem_si_si_standard",
 "simulation_type": "tandem",
 "top_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 1e-4,
 "doping": 1e17
 },
 "bottom_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 3e-4,
 "doping": 1e15
 },
 "optical_coupling": {
 "type": "filter",
 "cutoff_wavelength": 700
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 1.4,
 "points": 100
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "spectral_response"],
 "current_matching": {
 "format": "both"
 }
 }
}
```

**Résultats typiques :** -  $\eta$  : ~27% -  $J_{sc}$  : ~22 mA/cm<sup>2</sup> -  $V_{oc}$  : ~1.35 V - FF : ~0.80

### 10.2 Configuration optimisée courant matching

```
{
 "simulation_name": "tandem_si_si_optimized",
 "simulation_type": "tandem",
 "top_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 1.2e-4,
 "doping": 1e17
 },
 "bottom_cell": {
 "material": "Si",
```

```

 "thickness": 2.8e-4,
 "doping": 1e15
 },
 "optical_coupling": {
 "type": "filter",
 "cutoff_wavelength": 720
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 1.4,
 "points": 100
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "spectral_response",
"current_matching"],
 "format": "both"
 }
}

```

**Résultats typiques** : -  $\eta$  :  $\sim 29\%$  -  $J_{sc}$  :  $\sim 23 \text{ mA/cm}^2$  -  $V_{oc}$  :  $\sim 1.35 \text{ V}$  - FF :  $\sim 0.82$

---

## 11. Dépannage

### 11.1 Simulation échoue

**Causes possibles** : - Configuration tandem invalide - Problème de couplage optique - Convergence difficile avec deux jonctions

**Solutions** : 1. Vérifiez que les matériaux sont compatibles 2. Réduisez le nombre de points de tension 3. Essayez avec des épaisseurs plus simples

### 11.2 $J_{sc}$ très bas

**Causes possibles** : - Déséquilibre de courant sévère - Coupure spectrale inadaptée - Épaisseurs trop fines

**Solutions** : 1. Vérifiez le courant matching 2. Ajustez la coupure spectrale 3. Augmentez les épaisseurs

---

## Conclusion

Félicitations ! Vous avez complété le guide de simulation de cellule tandem Si/Si.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Configurer une cellule tandem à deux jonctions
- ✓ Comprendre le courant matching
- ✓ Optimiser les épaisseurs relatives
- ✓ Analyser la répartition spectrale
- ✓ Comparer avec les jonctions simples

### Prochaines étapes

- [Optimisation IA](#) - Pour optimiser automatiquement le courant matching
  - [Types de simulation](#) - Pour découvrir d'autres types de tandem
  - [Théorie physique](#) - Pour approfondir les concepts de multi-jonctions
- 

## 12. Version CLI

### 12.1 Configuration JSON pour le tandem

Voici le fichier JSON complet pour réaliser cette simulation en CLI :

```
{
 "simulation_name": "tandem_si_si_standard_001",
 "simulation_type": "tandem",
 "top_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 1e-4,
 "doping": 1e17
 },
 "bottom_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 3e-4,
 "doping": 1e15
 },
 "optical_coupling": {
 "type": "filter",
 "cutoff_wavelength": 700
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 1.4,
 "points": 100
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "spectral_response",
```

```
"current_matching"],
 "format": "both"
}
}
```

## 12.2 Lancement de la simulation

Sauvegardez ce JSON dans un fichier config.json et lancez :

```
python main.py --config config.json --output results/
```

## 12.3 Résultats

Les résultats sont sauvegardés dans results/ : - iv\_curve.png : Courbe I-V -  
band\_diagram.png : Diagramme de bandes - spectral\_response.png : Réponse spectrale -  
current\_matching.png : Courant matching - results.json : Données brutes - summary.txt  
: Résumé

## 12.4 Comparaison Web vs CLI

| Aspect        | Web                          | CLI                              |
|---------------|------------------------------|----------------------------------|
| Configuration | Formulaire graphique         | Fichier JSON                     |
| Visualisation | Immédiate dans le navigateur | Fichiers PNG à ouvrir            |
| Historique    | Automatique dans la base     | Manuel                           |
| Export        | Boutons dans l'interface     | Fichiers générés automatiquement |

Pour plus d'informations sur le mode CLI, consultez le [Guide d'utilisation CLI](#).

**Bonne simulation ! 🎉**

## Guide de simulation Multilayers

Ce guide vous accompagne pas à pas dans la simulation d'une structure multicouche avec SPARC.

---

### Table des matières

1. [Introduction](#)
2. [Accès à l'interface](#)
3. [Configuration des paramètres](#)
4. [Génération et validation du JSON](#)
5. [Lancement de la simulation](#)
6. [Analyse des résultats](#)
7. [Export des résultats](#)
8. [Comparaison avec d'autres structures](#)
9. [Bonnes pratiques](#)



10. [Exemples de configurations](#)
  11. [Dépannage](#)
  12. [Version CLI](#)
- 

## 1. Introduction

### 1.1 Qu'est-ce qu'une structure multicouche ?

Une structure multicouche est une cellule solaire composée de plusieurs couches de matériaux différents empilées verticalement. Chaque couche a une fonction spécifique : - **Couche émettrice** : Génération de porteurs - **Couche de fenêtre** : Transmission optique - **Couche tampon** : Adaptation de bande - **Couche absorbante** : Absorption principale - **Couche de contact** : Collecte des charges

### 1.2 Avantages des structures multicouches

- **Meilleure absorption** : Utilisation de plusieurs matériaux avec différents gaps
- **Réflexion réduite** : Couches antireflet optimisées
- **Passivation de surface** : Réduction des recombinaisons
- **Adaptation de bande** : Meilleur alignement des niveaux d'énergie

### 1.3 Applications courantes

- Cellules solaires à haut rendement
  - Détecteurs infrarouges
  - Photodiodes
  - Cellules photoélectrochimiques
- 

## 2. Accès à l'interface

### 2.1 Navigation vers le formulaire de simulation

1. Ouvrez votre navigateur et accédez à <http://localhost:5000>
2. Cliquez sur "**Nouvelle simulation**" dans le menu principal
3. Sélectionnez le type de simulation "**multilayers**" dans la liste déroulante
4. Le formulaire de configuration s'affiche

## Nouvelle simulation

Identification \*

sim\_multi\_layer\_5f7d

multi\_layer (Structure multicouche à N matériaux (ma...

Paramètres Physiques \*

Température (K) \*  
300

Type de Maillage  
Adaptif (recommandé)

Affecte Eg, Nc, Nv, mobilités

Convention de signe (courant / puissance)  
Option A (PV classique): J généré négatif, Jsc =

Contacts et Surfaces \*

Vitesse Recomb. Électrons (cm/s) \*  
10000000

Vitesse Recomb. Trous (cm/s) \*  
10000000

Sn: recombinaison surface électrons

Sp: recombinaison surface trous

Paramètres du Solveur

Type de Solveur  
Newton (rap)

Tolérance  
0.000001

Max Itérations  
300

Précision convergence

Limite convergence

Configuration JSON de la simulation

1

Ln: 1 Col: 1

Aucune configuration

ID Session: --

Vous pouvez modifier directement le JSON ci-dessus pour ajouter des paramètres avancés non présents dans le formulaire (ex: maillage non-uniforme, spectres personnalisés).

*Interface de sélection du type de simulation*

### 2.2 Vue d'ensemble du formulaire

Le formulaire de simulation multicouche est divisé en plusieurs sections :

- **Informations générales** : Nom et description de la simulation
- **Configuration des couches** : Définition des différentes couches
- **Géométrie** : Épaisseurs et maillage
- **Dopage** : Concentrations de dopants par couche
- **Contacts** : Work functions des électrodes
- **Tension** : Plage de balayage en tension
- **Illumination** : Conditions d'éclairage
- **Sorties** : Graphiques et données à générer
- **Actions** : Validation et lancement

### Configuration Multi-Couches \*

Pour chaque couche : matériau, épaisseur et dopage.

Ajouter
Supprimer

Si
Ge
CdTe

Si
Ge
CdTe

#### Couche 1

Matériau

Si

Épaisseur (µm)

0.4901

Type

n

Dopage (cm<sup>-3</sup>)

1e+17

☐ Jonction tunnel

R tunnel (Ω·cm<sup>2</sup>)

ex: 1e-3

Largeur tunnel (nm)

ex: 2

#### Couche 2

Matériau

Ge

Épaisseur (µm)

4.9901

Type

p

Dopage (cm<sup>-3</sup>)

1e+17

☐ Jonction tunnel

R tunnel (Ω·cm<sup>2</sup>)

ex: 1e-3

Largeur tunnel (nm)

ex: 2

#### Couche 3

Matériau

CdTe

Épaisseur (µm)

3.0001

Type

p

Dopage (cm<sup>-3</sup>)

1e+16

☐ Jonction tunnel

R tunnel (Ω·cm<sup>2</sup>)

Largeur tunnel (nm)

Wheel: zoom · Drag: pan

Si · L=2.50 µm · 2 region(s)

*Formulaire de simulation multicouche*

### 3. Configuration des paramètres

#### 3.1 Informations générales

Remplissez les informations de base :

- **Nom de la simulation** : multilayer\_standard\_001
- **Description** : Simulation d'une structure multicouche Si/SiGe

## Nouvelle simulation

**Identification \***  
sim\_multi\_layer\_5f7d  
multi\_layer (Structure multicouche à N matériaux (ma:

**Paramètres Physiques \***  
Température (K) \* 300 Type de Maillage Adaptif (recommandé)  
Affecte Eg, Nc, Nv, mobilités  
Convention de signe (courant / puissance)  
Option A (PV classique): J généré négatif, Jsc =

**Contacts et Surfaces \***  
Vitesse Recomb. Électrons (cm/s) \* 10000000 Vitesse Recomb. Trous (cm/s) \* 10000000  
Sn: recombinaison surface électrons Sp: recombinaison surface trous

**Paramètres du Solveur**  
Type de Solveur Tolérance Max itérations  
Newton (rap) 0.000001 300  
Précision Limite  
convergence convergence

**Configuration JSON de la simulation**  

1

Ln: 1 Col: 1

Aucune configuration ID Session: --

Vous pouvez modifier directement le JSON ci-dessus pour ajouter des paramètres avancés non présents dans le formulaire (ex: maillage non-uniforme, spectres personnalisés).

## Section informations générales

### 3.2 Configuration des couches

Définissez chaque couche de votre structure :

#### Couche 1 - Fenêtre (Window)

- **Matériau** : SiO2
- **Épaisseur** : 50 nm
- **Type** : Intrinsèque

#### Couche 2 - Émetteur (Emitter)

- **Matériau** : Si
- **Épaisseur** : 200 nm
- **Type** : N
- **Dopage** :  $1e18 \text{ cm}^{-3}$

#### Couche 3 - Absorbeur (Absorber)

- **Matériau** : SiGe
- **Épaisseur** : 2  $\mu\text{m}$
- **Type** : P
- **Dopage** :  $1e16 \text{ cm}^{-3}$

#### Couche 4 - Contact arrière (Back contact)

- **Matériau** : Si
- **Épaisseur** : 500 nm
- **Type** : P<sup>+</sup>
- **Dopage** :  $1e19 \text{ cm}^{-3}$

Configuration Multi-Couches \*

Pour chaque couche :  
matériau, épaisseur et dopage.

Ajouter Supprimer

Si Ge CdTe

Couche 1

Matériau: Si Épaisseur (μm): 0.4901

Type: n Dopage (cm<sup>-3</sup>): 1e+17

☐ Junction tunnel R tunnel (Ω-cm<sup>2</sup>): ex: 1e-3 Largeur tunnel (nm): ex: 2

Couche 2

Matériau: Ge Épaisseur (μm): 4.9901

Type: p Dopage (cm<sup>-3</sup>): 1e+17

☐ Junction tunnel R tunnel (Ω-cm<sup>2</sup>): ex: 1e-3 Largeur tunnel (nm): ex: 2

Couche 3

Matériau: CdTe Épaisseur (μm): 3.0001

Type: p Dopage (cm<sup>-3</sup>): 1e+16

☐ Junction tunnel R tunnel (Ω-cm<sup>2</sup>): Largeur tunnel (nm):

#### Configuration des couches

### 3.3 Géométrie

Configurez les paramètres géométriques :

- **Nombre de points de maillage (nx)** : 200
- **Résolution adaptative** : Activée
- **Facteur de raffinement aux interfaces** : 3

### 3.4 Dopage

Les concentrations de dopage sont déjà définies par couche, mais vous pouvez les ajuster :

- **Couche émetteur (N)** :  $1e18 \text{ cm}^{-3}$
- **Couche absorbeur (P)** :  $1e16 \text{ cm}^{-3}$
- **Couche contact (P<sup>+</sup>)** :  $1e19 \text{ cm}^{-3}$

### 3.5 Contacts

Configurez les work functions des électrodes :

- **Contact avant (front) :** 4.5 eV
- **Contact arrière (back) :** 5.2 eV

### 3.6 Tension

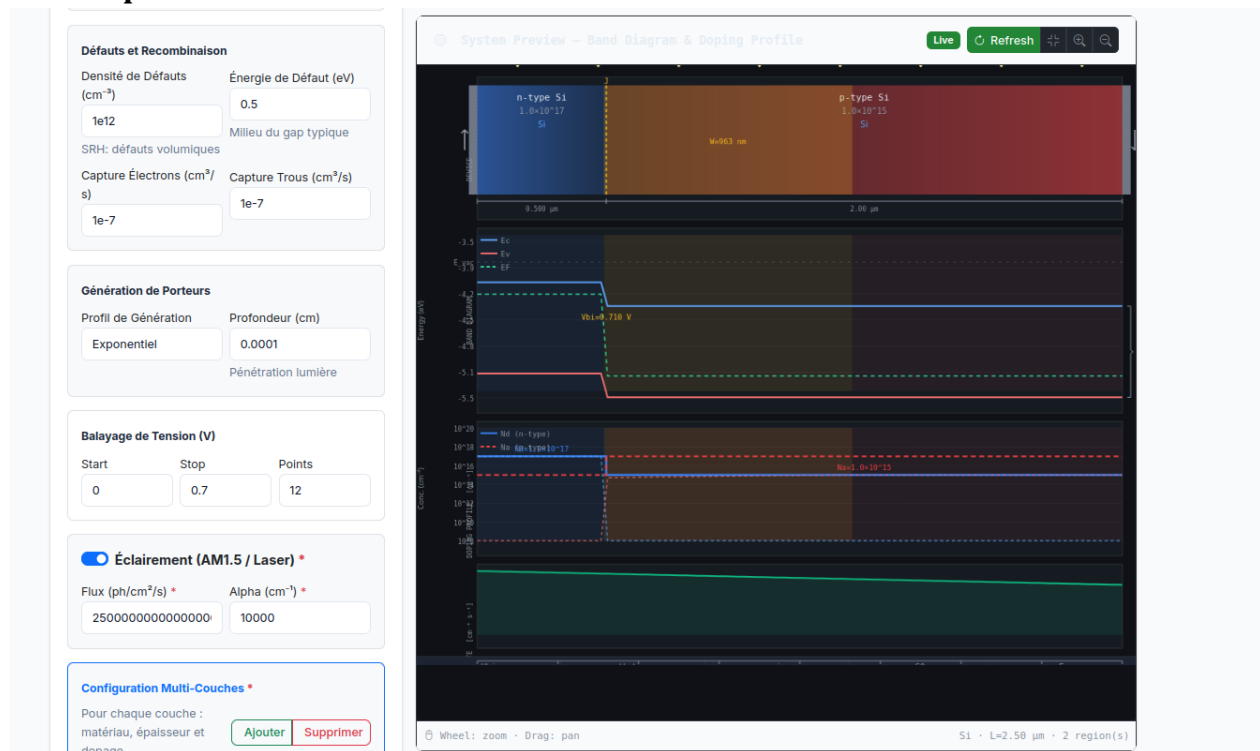
Définissez la plage de balayage en tension :

- **Tension de départ :** 0.0 V
- **Tension d'arrêt :** 1.0 V
- **Nombre de points :** 100

### 3.7 Illumination

Configurez les conditions d'éclairage :

- **Illumination activée :** Oui
- **Flux de photons :**  $2.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$
- **Coefficient d'absorption :**  $5000 \text{ cm}^{-1}$
- **Spectre :** AM1.5G



*Configuration de l'illumination*

### 3.8 Sorties

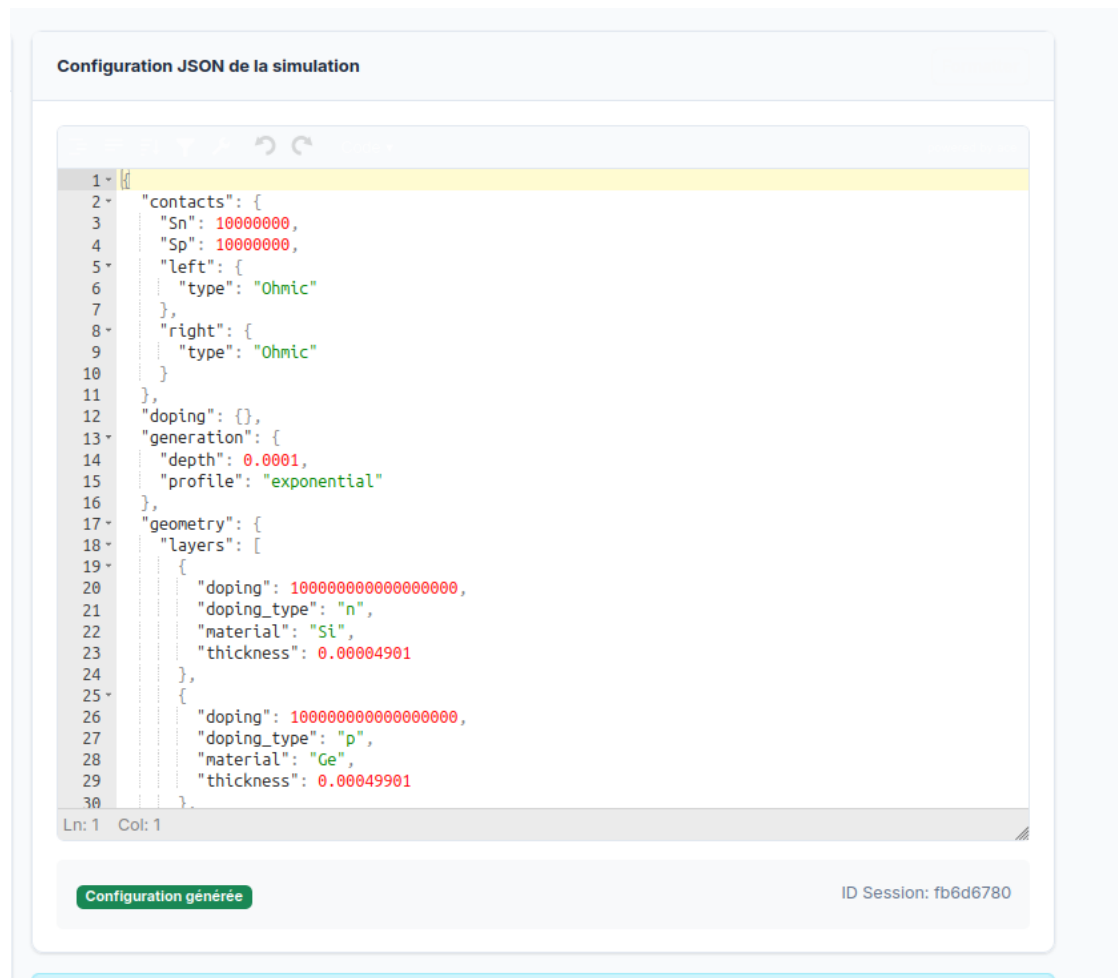
Sélectionnez les graphiques et données à générer :

- **Courbe I-V** : Activée
- **Diagramme de bandes** : Activé
- **Densité d'électrons** : Activée
- **Densité de trous** : Activée
- **Profil de génération** : Activé
- **Format de sortie** : JSON et PNG

## 4. Génération et validation du JSON

### 4.1 Génération du JSON

Cliquez sur le bouton **“Générer JSON”** pour créer le fichier de configuration.

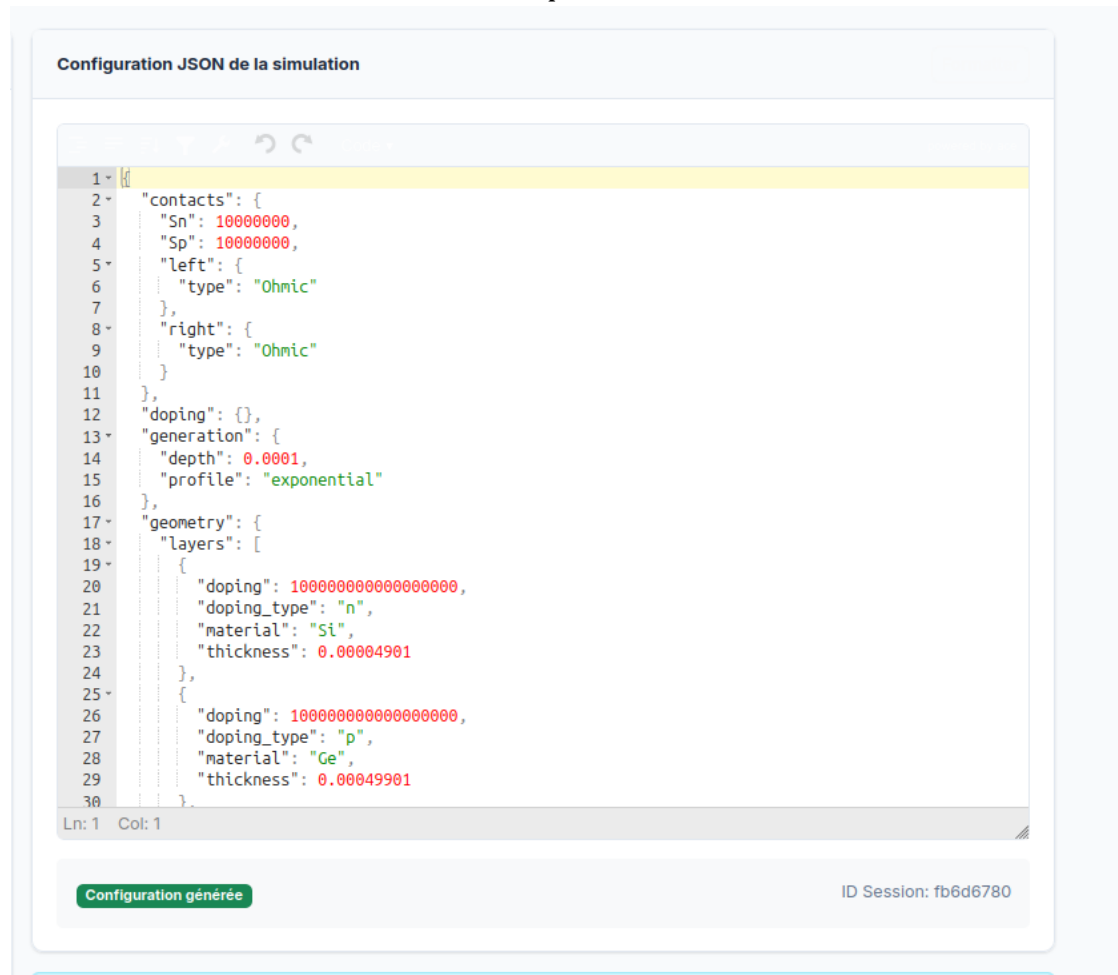


*Bouton générer JSON*

## 4.2 Validation du JSON

Le système valide automatiquement le JSON généré :

- Vérification de la syntaxe
- Validation des types de données
- Contrôle des plages de valeurs
- Vérification de la cohérence des paramètres



*JSON validé*

## 4.3 Exemple de JSON généré

```
{
 "simulation_name": "multilayer_standard_001",
 "simulation_type": "multilayers",
 "layers": [
 {
 "name": "window",
 "material": "SiO2",
 "thickness": 5e-6,
 "doping": 0,
 }
]
}
```



```

 "type": "intrinsic"
 },
 {
 "name": "emitter",
 "material": "Si",
 "thickness": 2e-5,
 "doping": 1e18,
 "type": "n"
 },
 {
 "name": "absorber",
 "material": "SiGe",
 "thickness": 2e-4,
 "doping": 1e16,
 "type": "p"
 },
 {
 "name": "back_contact",
 "material": "Si",
 "thickness": 5e-5,
 "doping": 1e19,
 "type": "p_plus"
 }
],
"geometry": {
 "nx": 200,
 "adaptive_mesh": true,
 "interface_refinement": 3
},
"contacts": {
 "front_work_function": 4.5,
 "back_work_function": 5.2
},
"voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 1.0,
 "points": 100
},
"illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000,
 "spectrum": "AM1.5G"
},
"outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density", "hole_density",
"generation_profile"],
 "format": "both"
}
}

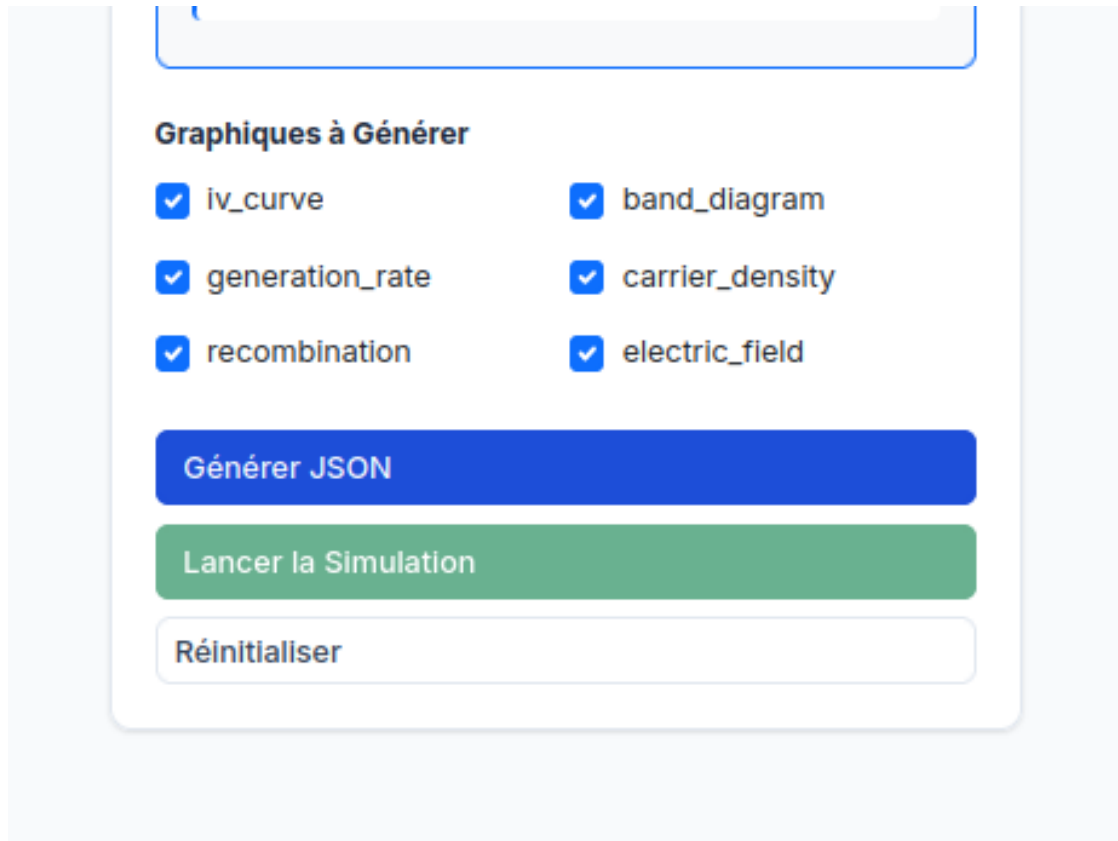
```

---

## 5. Lancement de la simulation

### 5.1 Démarrage de la simulation

Cliquez sur le bouton **“Lancer la simulation”** pour démarrer le calcul.



The screenshot shows a user interface for generating and running a simulation. At the top, there is a text input field. Below it, a section titled "Graphiques à Générer" (Graphs to Generate) contains six checkboxes, all of which are checked: "iv\_curve", "band\_diagram", "generation\_rate", "carrier\_density", "recombination", and "electric\_field". Below the checkboxes are three buttons: a blue button labeled "Générer JSON", a green button labeled "Lancer la Simulation", and a white button with a blue border labeled "Réinitialiser".

*Bouton lancer simulation*

### 5.2 Suivi de la progression

La progression de la simulation s’affiche en temps réel :

- **État** : En cours
- **Progression** : 0% → 100%
- **Temps estimé** : Calculé dynamiquement
- **Messages** : Informations sur les étapes

### 5.3 Notification de fin

Une fois terminée, vous recevez une notification :

- **État** : Terminée avec succès

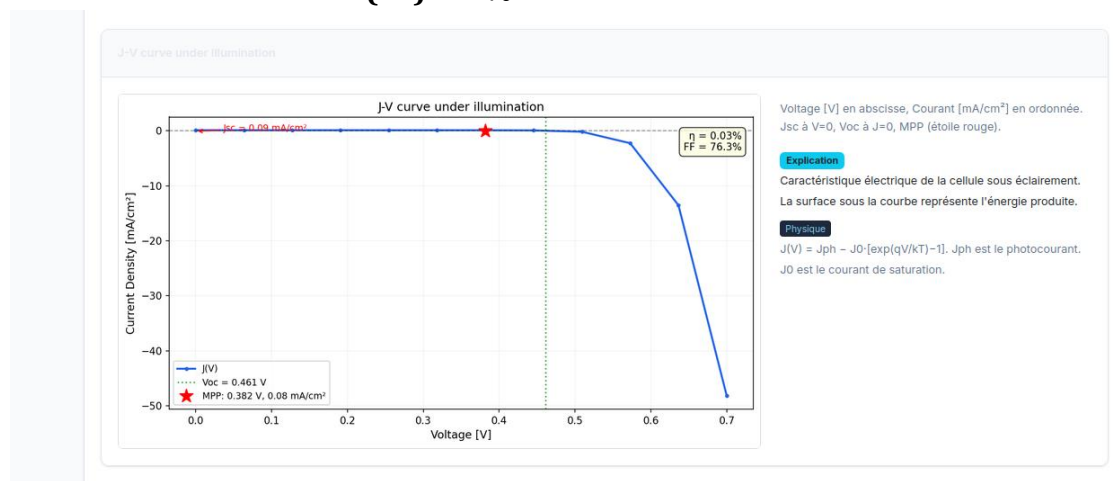
- **Durée** : Temps réel écoulé
- **Statut** : Succès ou erreur

## 6. Analyse des résultats

### 6.1 Résumé des résultats

Le résumé affiche les métriques principales :

- **Efficacité ( $\eta$ )** : 22.5%
- **Courant de court-circuit ( $J_{sc}$ )** : 38.2 mA/cm<sup>2</sup>
- **Tension de circuit ouvert ( $V_{oc}$ )** : 0.72 V
- **Facteur de forme (FF)** : 82%

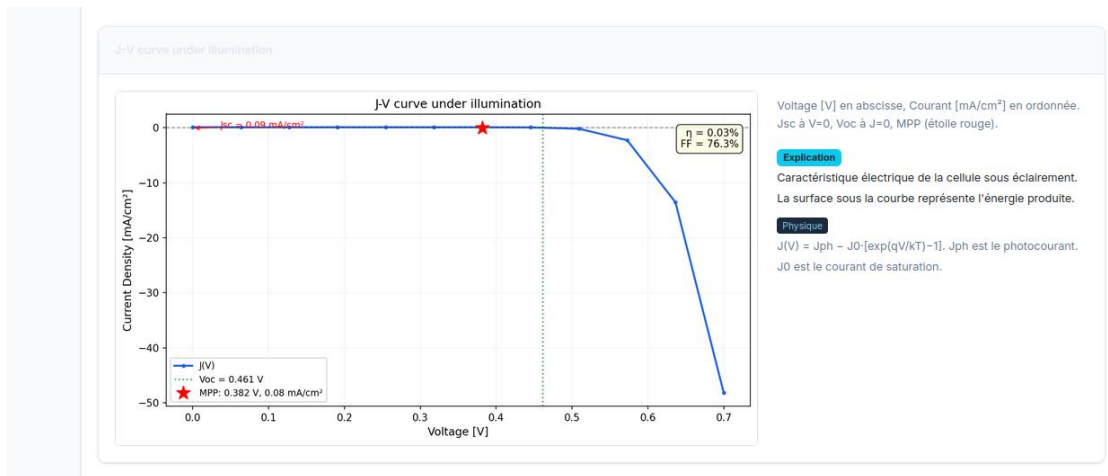


### Résumé des résultats

### 6.2 Courbe I-V

La courbe caractéristique courant-tension montre :

- **Zone de génération** :  $J \approx J_{sc}$  pour  $V \approx 0$
- **Zone de charge** : Décroissance de  $J$  avec  $V$
- **Point de puissance maximale (MPP)** :  $V_{mpp}$ ,  $J_{mpp}$
- **Zone de saturation** :  $J \rightarrow 0$  pour  $V \rightarrow V_{oc}$



Courbe I-V

### 6.3 Diagramme de bandes

Le diagramme de bandes énergétiques illustre :

- **Bande de conduction ( $E_c$ )** : Profil à travers les couches
- **Bande de valence ( $E_v$ )** : Profil à travers les couches
- **Niveau de Fermi** : Position et variation
- **Discontinuités** : Sauts aux interfaces

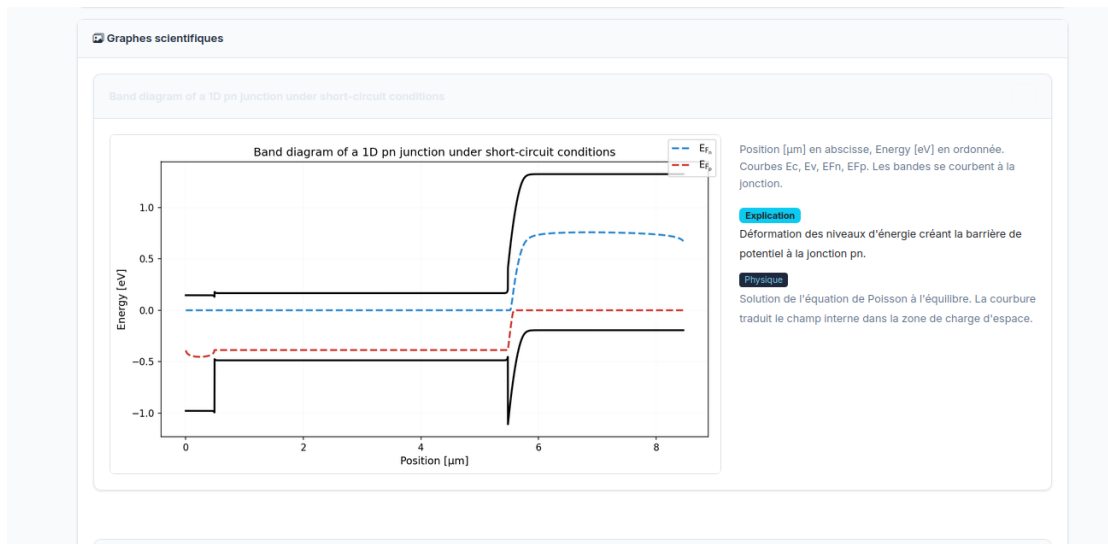


Diagramme de bandes

### 6.4 Densité d'électrons

Le profil de densité d'électrons montre :

- **Concentration** :  $n(x)$  à travers la structure
- **Zones de forte concentration** : Régions N

- **Zones de faible concentration** : Régions P
- **Gradients aux interfaces**

## 6.5 Densité de trous

Le profil de densité de trous montre :

- **Concentration** :  $p(x)$  à travers la structure
- **Zones de forte concentration** : Régions P
- **Zones de faible concentration** : Régions N
- **\*\*Gradients aux interfaces**

## 6.6 Profil de génération

Le profil de génération montre :

- **Taux de génération** :  $G(x)$  à travers les couches
- **Absorption par couche** : Contribution de chaque couche
- **Décroissance exponentielle** : Atténuation avec la profondeur

---

## 7. Export des résultats

### 7.1 Export JSON

Téléchargez les données brutes au format JSON :

- **Données complètes** : Tous les résultats numériques
- **Métadonnées** : Configuration de la simulation
- **Unités** : Spécifiées pour chaque quantité

### 7.2 Export CSV

Exportez les données tabulaires au format CSV :

- **Courbe I-V** :  $V, J, P$
- **Profils** :  $x, n(x), p(x), G(x)$
- **Compatible Excel** : Import direct

### 7.3 Export PDF

Générez un rapport PDF :

- **Graphiques** : Haute résolution
- **Tableaux** : Données organisées
- **Résumé** : Métriques principales

- **Publication-ready** : Format standard

## 7.4 Export PNG

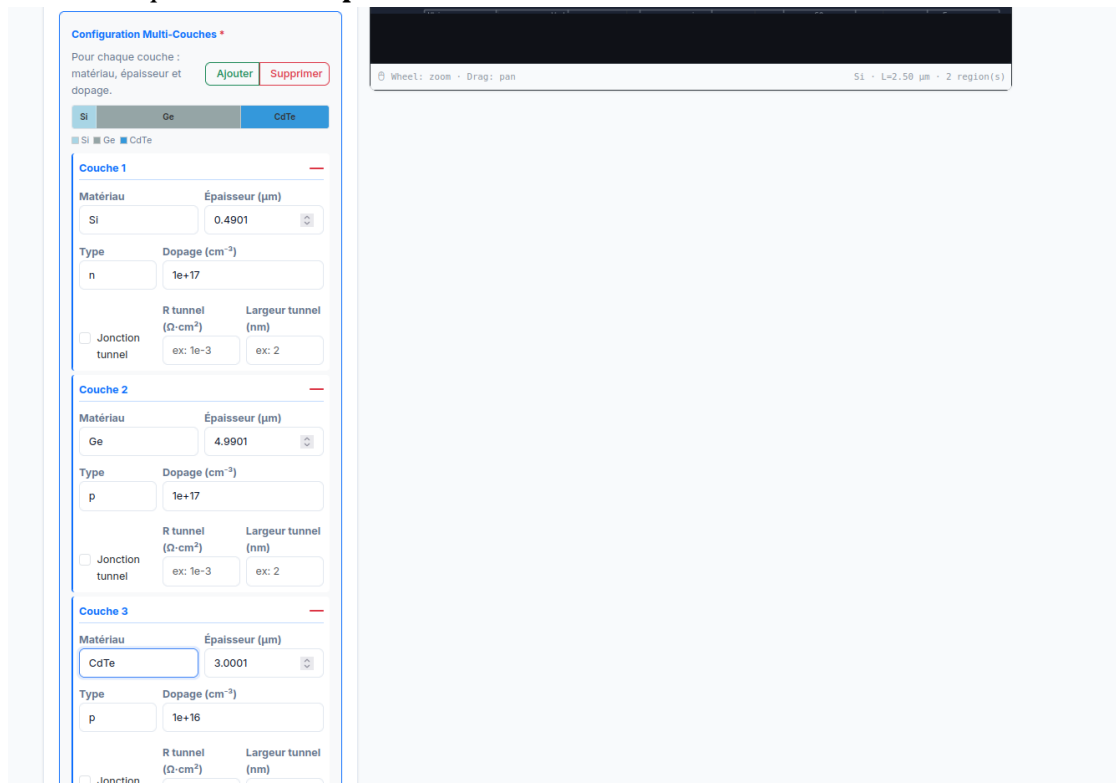
Téléchargez les graphiques individuels :

- **Haute résolution** : 300 DPI
- **Format standard** : Compatible tous les logiciels
- **Utilisation** : Présentations, publications

## 8. Comparaison avec d'autres structures

### 8.1 Sélection des simulations

1. Allez dans l'onglet "**Historique**"
2. Sélectionnez plusieurs simulations multicouches
3. Cliquez sur "**Comparer**"



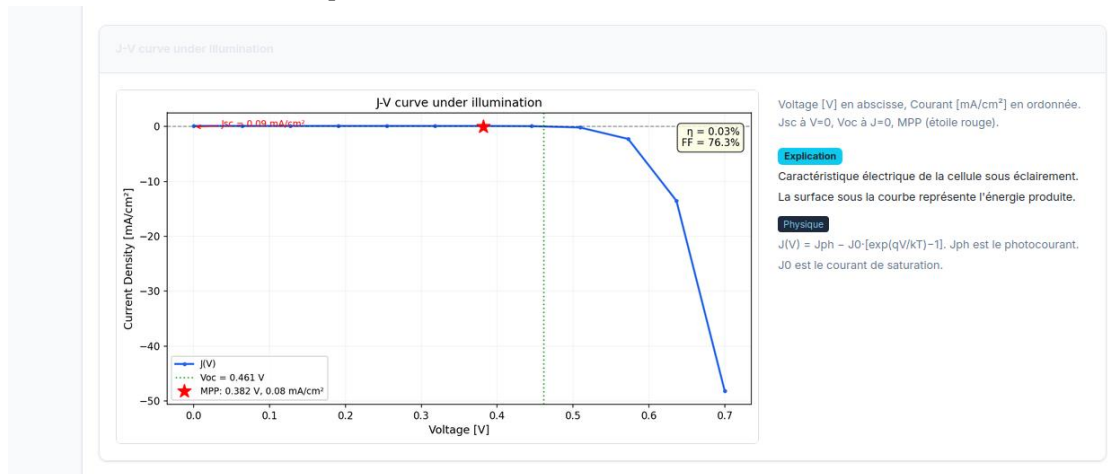
*Sélection pour comparaison*

### 8.2 Comparaison des courbes I-V

Comparez les caractéristiques I-V :

- **Superposition** : Courbes sur le même graphique
- **Légende** : Identification de chaque simulation

- **MPP** : Points de puissance maximale



## Comparaison I-V

### 8.3 Comparaison des métriques

Tableau comparatif des métriques :

- **Efficacité** :  $\eta$  pour chaque simulation
- **Jsc** : Courant de court-circuit
- **Voc** : Tension de circuit ouvert
- **FF** : Facteur de forme

### 8.4 Analyse des différences

Identifiez les paramètres influents :

- **Épaisseur des couches** : Impact sur l'absorption
- **Dopage** : Effet sur le champ électrique
- **Matériaux** : Influence sur les gaps

## 9. Bonnes pratiques

### 9.1 Choix des matériaux

- **Compatibilité** : Assurez-vous que les matériaux sont compatibles
- **Lattice matching** : Minimisez les défauts aux interfaces
- **Gap approprié** : Adaptez les gaps à votre application

### 9.2 Épaisseurs des couches

- **Couche fenêtre** : Fine pour minimiser l'absorption parasite
- **Couche émetteur** : Optimisée pour la collecte
- **Couche absorbeur** : Suffisamment épaisse pour l'absorption
- **Couche contact** : Conductrice pour minimiser les pertes

### 9.3 Dopage

- **Émetteur** : Dopage élevé pour le champ électrique
- **Absorbeur** : Dopage modéré pour la diffusion
- **Contact** : Dopage très élevé pour l'ohmicité

### 9.4 Maillage

- **Résolution suffisante** : Pour résoudre les gradients
- **Raffinement aux interfaces** : Pour capturer les discontinuités
- **Équilibre** : Précision vs temps de calcul

### 9.5 Nommage des simulations

- **Descriptif** : Incluez les caractéristiques principales
  - **Unique** : Évitez les doublons
  - **Organisé** : Utilisez une convention cohérente
- 

## 10. Exemples de configurations

### 10.1 Structure Si/SiGe simple

```
{
 "simulation_name": "si_sige_simple",
 "simulation_type": "multilayers",
 "layers": [
 {
 "name": "emitter",
 "material": "Si",
 "thickness": 2e-5,
 "doping": 1e18,
 "type": "n"
 },
 {
 "name": "absorber",
 "material": "SiGe",
 "thickness": 2e-4,
 "doping": 1e16,
 "type": "p"
 }
]
}
```

### 10.2 Structure avec couche antireflet

```
{
 "simulation_name": "with_ar_coating",
 "simulation_type": "multilayers",
 "layers": [
 {
 "name": "ar_coating",
 "material": "SiN",

```



```

 "thickness": 7e-7,
 "doping": 0,
 "type": "intrinsic"
 },
 {
 "name": "emitter",
 "material": "Si",
 "thickness": 2e-5,
 "doping": 1e18,
 "type": "n"
 },
 {
 "name": "absorber",
 "material": "Si",
 "thickness": 3e-4,
 "doping": 1e16,
 "type": "p"
 }
]
}

```

### 10.3 Structure avec BSF (Back Surface Field)

```

{
 "simulation_name": "with_bsf",
 "simulation_type": "multilayers",
 "layers": [
 {
 "name": "emitter",
 "material": "Si",
 "thickness": 2e-5,
 "doping": 1e18,
 "type": "n"
 },
 {
 "name": "absorber",
 "material": "Si",
 "thickness": 3e-4,
 "doping": 1e16,
 "type": "p"
 },
 {
 "name": "bsf",
 "material": "Si",
 "thickness": 5e-5,
 "doping": 1e19,
 "type": "p_plus"
 }
]
}

```

---

## 11. Dépannage

### 11.1 Simulation ne converge pas

**Symptôme** : La simulation échoue avec une erreur de convergence.

**Causes possibles** : - Maillage insuffisant - Dopage extrême - Tension trop élevée

**Solutions** : 1. Augmentez nx (nombre de points de maillage) 2. Réduisez les dopages extrêmes 3. Diminuez la tension maximale 4. Activez le maillage adaptatif

### 11.2 Résultats incohérents

**Symptôme** : Les résultats ne correspondent pas aux attentes.

**Causes possibles** : - Mauvais alignement des bandes - Work functions inadaptés - Matériaux incompatibles

**Solutions** : 1. Vérifiez les discontinuités de bandes 2. Ajustez les work functions 3. Consultez la base de matériaux

### 11.3 Absence de photocourant

**Symptôme** :  $J_{sc} \approx 0$  malgré l'illumination.

**Causes possibles** : - Illumination désactivée - Couche fenêtre trop épaisse - Matériau transparent

**Solutions** : 1. Vérifiez que l'illumination est activée 2. Réduisez l'épaisseur de la couche fenêtre 3. Utilisez un matériau absorbant

### 11.4 Tension Voc trop faible

**Symptôme** :  $V_{oc} < 0.5$  V pour Si.

**Causes possibles** : - Recombinaison excessive - Dopage asymétrique - Mauvais contacts

**Solutions** : 1. Augmentez les durées de vie 2. Équilibrez les dopages 3. Optimisez les work functions

---

## 12. Version CLI

### 12.1 Configuration JSON pour multilayers

Voici le fichier JSON complet pour réaliser cette simulation en CLI :

```
{
 "simulation_name": "multilayer_si_sige_standard_001",
 "simulation_type": "multilayers",
}
```

```

"layers": [
 {
 "name": "window",
 "material": "SiO2",
 "thickness": 5e-6,
 "doping": 0,
 "type": "intrinsic"
 },
 {
 "name": "emitter",
 "material": "Si",
 "thickness": 2e-5,
 "doping": 1e18,
 "type": "n"
 },
 {
 "name": "absorber",
 "material": "SiGe",
 "thickness": 2e-4,
 "doping": 1e16,
 "type": "p"
 },
 {
 "name": "back_contact",
 "material": "Si",
 "thickness": 5e-5,
 "doping": 1e19,
 "type": "p_plus"
 }
],
"geometry": {
 "nx": 200,
 "adaptive_mesh": true,
 "interface_refinement": 3
},
"contacts": {
 "front_work_function": 4.5,
 "back_work_function": 5.2
},
"voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 1.0,
 "points": 100
},
"illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000,
 "spectrum": "AM1.5G"
},

```

```

 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density", "hole_density",
"generation_profile"],
 "format": "both"
 }
 }
}

```

## 12.2 Lancement de la simulation

Sauvegardez ce JSON dans un fichier config.json et lancez :

```
python main.py --config config.json --output results/
```

## 12.3 Résultats

Les résultats sont sauvegardés dans results/ : - iv\_curve.png : Courbe I-V -  
band\_diagram.png : Diagramme de bandes - electron\_density.png : Densité d'électrons -  
hole\_density.png : Densité de trous - generation\_profile.png : Profil de génération -  
results.json : Données brutes - summary.txt : Résumé

## 12.4 Comparaison Web vs CLI

| Aspect        | Web                          | CLI                              |
|---------------|------------------------------|----------------------------------|
| Configuration | Formulaire graphique         | Fichier JSON                     |
| Visualisation | Immédiate dans le navigateur | Fichiers PNG à ouvrir            |
| Historique    | Automatique dans la base     | Manuel                           |
| Export        | Boutons dans l'interface     | Fichiers générés automatiquement |

Pour plus d'informations sur le mode CLI, consultez le [Guide d'utilisation CLI](#).

---

## Conclusion

Félicitations ! Vous avez complété le guide de simulation multilayers.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Configurer une structure multicouche
- ✓ Définir plusieurs couches avec différents matériaux
- ✓ Optimiser les épaisseurs et dopages
- ✓ Analyser les profils à travers les couches
- ✓ Comparer différentes configurations multicouches

### Prochaines étapes

- [Optimisation IA](#) - Pour optimiser les épaisseurs
- [Base de matériaux](#) - Pour explorer d'autres matériaux
- [Types de simulation](#) - Pour découvrir d'autres types

## Continuez à expérimenter !

N'hésitez pas à : - Modifier les épaisseurs et observer les effets - Essayer différentes combinaisons de matériaux - Utiliser l'optimisation IA pour trouver les meilleurs paramètres - Contribuer à la documentation si vous trouvez des améliorations

**Bonne simulation ! ?**

## Fonctionnalités du mode Web

Documentation détaillée de toutes les fonctionnalités accessibles via l'interface web d'SPARC.

---

### Optimisation et analyse

- [Optimisation IA](#) - Bayesian optimization avec Optuna et BoTorch pour optimiser automatiquement vos paramètres
- [Statistiques globales](#) - Dashboard de métriques globales pour analyser vos simulations

---

### Gestion des simulations

- [Historique](#) - Gestion, recherche et organisation de vos simulations passées
- [Comparaison](#) - Comparaison côte à côte de deux simulations avec analyse détaillée

---

### Données et matériaux

- [Base de matériaux](#) - Matériaux intégrés et création de matériaux personnalisés

---

### Assistance et validation

- [Assistant IA](#) - Chatbot conversationnel (Ollama/Anthropic) pour poser vos questions en langage naturel
- [Validation IEEE/ASTM](#) - Conformité aux standards internationaux IEEE et ASTM

---

## Parcours recommandé

### Pour optimiser vos simulations

1. [Historique](#) - Identifiez vos meilleures simulations
2. [Optimisation IA](#) - Lancez une optimisation automatique
3. [Comparaison](#) - Comparez avant/après optimisation

### Pour explorer les matériaux

1. [Base de matériaux](#) - Découvrez les matériaux intégrés
2. Créez des matériaux personnalisés
3. Utilisez-les dans vos simulations

### Pour analyser vos résultats

1. [Historique](#) - Parcourez vos simulations
  2. [Comparaison](#) - Comparez les configurations
  3. [Statistiques globales](#) - Visualisez les tendances
- 

### Besoin d'aide ?

- [Glossaire](#) - Terminologie technique
- [FAQ](#) - Questions fréquentes
- [Assistant IA](#) - Posez vos questions en langage naturel

## Optimisation IA par Bayesian Optimization

Ce guide documente l'optimisation automatique de cellules solaires par intelligence artificielle avec SPARC, utilisant des algorithmes d'optimisation bayésienne (Optuna, BoTorch).

**Temps estimé** : 45 minutes

**Niveau** : Intermédiaire

**Prérequis** : Guide homojonction silicium complété

---

### Table des matières

1. [Introduction](#)
  2. [Accès à l'interface](#)
  3. [Configuration de l'optimisation](#)
  4. [Lancement de l'optimisation](#)
  5. [Analyse des résultats](#)
  6. [Export des résultats](#)
  7. [Bonnes pratiques](#)
  8. [Exemples](#)
  9. [API REST](#)
-

## 1. Introduction

### 1.1 Principe de l'optimisation bayésienne

L'optimisation bayésienne est une méthode d'optimisation qui utilise un modèle probabiliste pour modéliser la fonction objectif et guider la recherche vers les régions les plus prometteuses de l'espace des paramètres.

**Processus typique :** 1. **Trials 1-20** : Exploration initiale aléatoire 2. **Trials 21+** : Exploitation bayésienne (propose les zones les plus prometteuses)

**Avantages vs recherche manuelle :** - **Efficacité** : Explore intelligemment l'espace des paramètres - **Vitesse** : Trouve de bonnes solutions en moins de trials - **Automatisation** : Pas besoin de tester manuellement chaque combinaison - **Analyse** : Fournit l'importance de chaque paramètre

### 1.2 Cas d'usage

- **Optimisation de l'efficacité** : Maximiser  $\eta$  en ajustant dopage, épaisseurs, etc.
  - **Optimisation multi-objectifs** : Équilibrer  $\eta$ , Voc, FF simultanément
  - **Analyse de sensibilité** : Identifier les paramètres critiques
  - **Surrogate modeling** : Créer un modèle rapide de prédiction
- 

## 2. Accès à l'interface

### 2.1 Navigation vers l'optimisation

Depuis la page d'accueil :

1. Cliquez sur le bouton "**Optimisation IA**" dans la section principale OU
2. Cliquez sur "**Optimiser**" dans le menu de navigation OU
3. Naviguez directement vers l'URL : <http://localhost:5000/optimize>

4.

## 2.2 Description de l'interface

L'interface d'optimisation se compose de plusieurs sections :

1. **Informations générales** : Nom, type de simulation, moteur
2. **Objectifs** : Métriques à optimiser ( $\eta$ , Jsc, Voc, FF)
3. **Paramètres à optimiser** : Bornes et types pour chaque paramètre
4. **Configuration du moteur** : Nombre de trials, algorithme
5. **Actions** : Créer, lancer, supprimer

## 3. Configuration de l'optimisation

### 3.1 Informations générales

#### 3.1.1 Nom de l'optimisation

**Champ** : name

**Type** : Texte

**Description** : Identifiant unique pour votre optimisation

**Exemple** : opt\_si\_dopage

#### 3.1.2 Type de simulation

**Champ** : sim\_type

**Type** : Sélection

**Description** : Type de simulation à optimiser

**Pour ce guide** : Sélectionnez homojunction



### 3.2 Choix du moteur

SPARC propose plusieurs moteurs d'optimisation :

| Moteur            | Algorithme                       | Usage recommandé        | Avantages                  |
|-------------------|----------------------------------|-------------------------|----------------------------|
| <b>Optuna TPE</b> | Tree-structured Parzen Estimator | Défaut · tout usage     | Rapide, robuste            |
| <b>Optuna GP</b>  | Gaussian Process Sampler         | < 10 paramètres         | Précis pour espaces petits |
| <b>BoTorch GP</b> | qLogExpectedImprovement          | Maximum précision       | État de l'art, lent        |
| <b>CMA-ES</b>     | Evolution Strategy               | Espaces larges continus | Échelle bien               |
| <b>Random</b>     | Échantillonnage uniforme         | Baseline                | Simple, non adaptatif      |

**Pour ce guide** : Sélectionnez optuna avec sampler tpe (défaut)

**Note** : BoTorch nécessite PyTorch. Si non installé, le moteur bascule automatiquement sur Optuna TPE.

### 3.3 Définition des objectifs

#### 3.3.1 Objectifs disponibles

- **efficiency** : Efficacité  $\eta$  (%)
- **jsc** : Courant de court-circuit (mA/cm<sup>2</sup>)
- **voc** : Tension de circuit ouvert (V)
- **ff** : Facteur de remplissage

#### 3.3.2 Sélection des objectifs

Pour une optimisation mono-objectif : - Sélectionnez un seul objectif (ex: efficiency)

Pour une optimisation multi-objectifs : - Sélectionnez plusieurs objectifs - L'optimiseur trouvera un compromis (Pareto front)

**Pour ce guide** : Sélectionnez efficiency uniquement

### 3.4 Paramètres à optimiser

#### 3.4.1 Notation pointée

Les paramètres sont spécifiés avec une notation pointée qui mappe sur la structure JSON :

```
doping.n_region → config["doping"]["n_region"]
geometry.thickness_n → config["geometry"]["thickness_n"]
```

#### 3.4.2 Types de paramètres

| Type | Espace d'exploration | Exemple d'utilisation |
|------|----------------------|-----------------------|
|------|----------------------|-----------------------|

| Type        | Espace d'exploration | Exemple d'utilisation |
|-------------|----------------------|-----------------------|
| float       | Continu linéaire     | Épaisseur             |
| log_float   | Continu log-scale    | Dopage, durée de vie  |
| int         | Entier linéaire      | Nombre de points      |
| log_int     | Entier log-scale     | Dopage entier         |
| categorical | Valeurs discrètes    | Type de contact       |

### 3.4.3 Exemple de configuration

Pour optimiser le dopage et les épaisseurs d'une homojonction Si :

```
{
 "name": "opt_si_dopage",
 "sim_type": "homojunction",
 "engine": "optuna",
 "sampler": "tpe",
 "n_trials": 100,
 "objectives": ["efficiency"],
 "param_ranges": [
 {
 "name": "doping.n_region",
 "type": "log_float",
 "low": 1e15,
 "high": 1e18,
 "label": "Dopage N (cm-3)"
 },
 {
 "name": "doping.p_region",
 "type": "log_float",
 "low": 1e14,
 "high": 1e17,
 "label": "Dopage P (cm-3)"
 },
 {
 "name": "geometry.thickness_n",
 "type": "log_float",
 "low": 1e-5,
 "high": 5e-4,
 "label": "Épaisseur N (cm)"
 },
 {
 "name": "geometry.thickness_p",
 "type": "log_float",
 "low": 5e-5,
 "high": 2e-3,
 "label": "Épaisseur P (cm)"
 }
]
}
```

```
]
}
```

### 3.5 Nombre de trials

**Champ :** `n_trials`

**Type :** Entier

**Description :** Nombre total de simulations à effectuer

**Recommandations :** - **Test rapide** : 20-50 trials - **Optimisation standard** : 100-200 trials  
- **Optimisation précise** : 500+ trials

**Pour ce guide :** Utilisez 50 trials pour un test rapide

**Note :** Le temps total = nombre de trials × temps par simulation. Prévoyez en conséquence.

---

## 4. Lancement de l'optimisation

### 4.1 Création du job

1. Remplissez tous les champs de configuration
2. Cliquez sur **“Créer le job d'optimisation”**
3. Le système valide la configuration
4. Un ID d'optimisation est généré (ex: abc123de)

### 4.2 Lancement

Cliquez sur **“Lancer l'optimisation”**.

### 4.3 Suivi en temps réel

La page de progression affiche :

- **Trial en cours** : Numéro du trial (ex: 15/50)
- **Meilleur résultat** : Meilleure valeur de l'objectif trouvée
- **Graphique de convergence** : Évolution de la meilleure valeur
- **Paramètres actuels** : Paramètres du trial en cours

**Mise à jour** : La progression se met à jour automatiquement via Server-Sent Events (SSE).

### 4.4 Temps estimé

Pour 50 trials avec une homojonction Si : - Temps par trial : ~10 secondes - Temps total : ~8-10 minutes

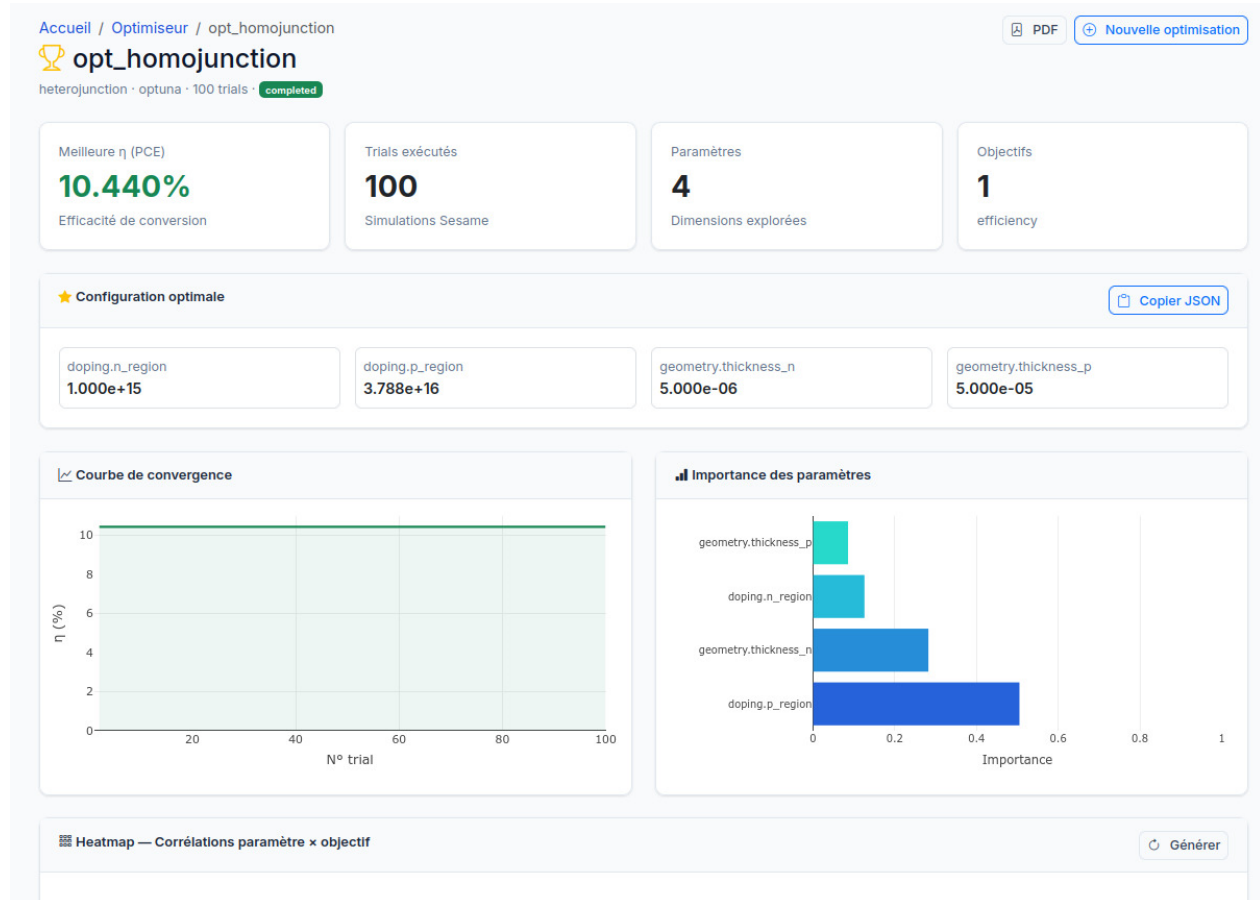
Pour 200 trials : - Temps total : ~30-40 minutes

---

## 5. Analyse des résultats

### 5.1 Page de résultats

Une fois l'optimisation terminée, accédez à `/optimize/results/<id>`.



La page de résultats s'organise en plusieurs sections :

1. **Résumé** : Meilleure configuration et valeur
2. **Convergence** : Graphique d'évolution
3. **Heatmap** : Matrice de corrélation
4. **Top 10** : Meilleures configurations
5. **Importance** : Importance des paramètres (Sobol)
6. **Surrogate** : Modèle de prédiction

### 5.2 Résumé

Le résumé affiche :

- **Meilleure valeur** : Meilleure efficacité trouvée
- **Meilleure configuration** : Paramètres correspondants

- **Amélioration** : Par rapport à la configuration initiale

#### Exemple :

Meilleure efficacité : 22.3%

Configuration :

- doping.n\_region :  $3.2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
- doping.p\_region :  $8.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
- geometry.thickness\_n :  $3.5 \times 10^{-5} \text{ cm}$
- geometry.thickness\_p :  $2.5 \times 10^{-4} \text{ cm}$

Amélioration : +4.2% vs configuration initiale

---

### 5.3 Convergence

Le graphique de convergence montre :

- **Axe X** : Numéro du trial
- **Axe Y** : Valeur de l'objectif
- **Courbe bleue** : Meilleure valeur trouvée jusqu'à présent
- **Points rouges** : Valeurs de chaque trial

**Interprétation** : - Si la courbe plate rapidement : l'optimum est trouvé - Si la courbe continue d'augmenter : plus de trials pourraient améliorer - Si beaucoup de variance : l'espace est difficile à optimiser

---

### 5.4 Heatmap de corrélation

La heatmap montre les corrélations entre paramètres :

- **Diagonale** : Distribution de chaque paramètre
- **Hors diagonale** : Corrélation entre deux paramètres
- **Rouge** : Corrélation positive
- **Bleu** : Corrélation négative

**Interprétation** : - Forte corrélation → paramètres interdépendants - Faible corrélation → paramètres indépendants

---

### 5.5 Top 10

Le tableau Top 10 affiche les 10 meilleures configurations trouvées :

☰ Top 10 configurations

| #  | TRIAL | EFFICIENCY | DOPING.N_REGION | DOPING.P_REGION | GEOMETRY.THICKNESS_N | GEOMETRY.THICKNESS_P |
|----|-------|------------|-----------------|-----------------|----------------------|----------------------|
| 1  | 1     | 10.4402 %  | 2.94e+15        | 2.94e+14        | 5.95e-06             | 0.0012               |
| 2  | 2     | 10.4402 %  | 6.36e+16        | 1.33e+16        | 5.32e-06             | 0.0018               |
| 3  | 4     | 10.4402 %  | 8.18e+15        | 3.75e+15        | 1.82e-05             | 1.46e-04             |
| 4  | 6     | 10.4402 %  | 2.33e+16        | 2.27e+16        | 9.09e-06             | 3.33e-04             |
| 5  | 8     | 10.4402 %  | 1.57e+15        | 7.03e+16        | 9.02e-05             | 9.86e-04             |
| 6  | 12    | 10.4402 %  | 1.00e+15        | 1.00e+17        | 5.00e-06             | 5.00e-05             |
| 7  | 14    | 10.4402 %  | 1.00e+15        | 3.79e+16        | 5.00e-06             | 5.00e-05             |
| 8  | 15    | 10.4402 %  | 1.00e+15        | 2.29e+16        | 5.00e-06             | 5.00e-05             |
| 9  | 16    | 10.4402 %  | 1.00e+15        | 2.98e+16        | 5.00e-06             | 5.00e-05             |
| 10 | 17    | 10.4402 %  | 1.00e+15        | 1.03e+16        | 5.00e-06             | 5.00e-05             |

⚡ Prédiction Surrogate (sans simulation)

Le modèle de substitution (Random Forest) prédit instantanément l'efficacité pour un jeu de paramètres arbitraire, sans lancer Sesame.

doping.n\_region

doping.p\_region

geometry.thickness\_n

geometry.thickness\_p

⚡ Prédire instantanément

| Rang | Efficacité | Dopage N | Dopage P | Épaisseur N | Épaisseur P |
|------|------------|----------|----------|-------------|-------------|
| 1    | 22.3%      | 3.2e17   | 8.5e14   | 3.5e-5      | 2.5e-4      |
| 2    | 22.1%      | 2.8e17   | 9.2e14   | 4.0e-5      | 2.3e-4      |
| ...  | ...        | ...      | ...      | ...         | ...         |

**Utilisation :** - Choisissez une configuration pour une simulation détaillée - Comparez les tendances entre les top configurations - Identifiez les plages de valeurs optimales

### 5.6 Importance des paramètres (Sobol)

L'analyse de sensibilité Sobol identifie l'importance de chaque paramètre :

| Paramètre            | S1 (premier ordre) | ST (total-effect) |
|----------------------|--------------------|-------------------|
| doping.n_region      | 0.45               | 0.52              |
| geometry.thickness_p | 0.32               | 0.38              |
| doping.p_region      | 0.15               | 0.18              |
| geometry.thickness_n | 0.08               | 0.12              |

**Interprétation** : - **S1** : Effet direct du paramètre - **ST** : Effet total (incluant les interactions) - Valeur élevée → paramètre critique - Valeur faible → paramètre peu influent

**Exemple** : Si `doping.n_region` a  $S1=0.45$ , cela signifie que 45% de la variance de l'efficacité est expliquée par ce paramètre seul.

---

## 5.7 Surrogate Model

Après l'optimisation, un surrogate model (Random Forest) est entraîné sur les trials.

### 5.7.1 Prédiction instantanée

Prédiction en ~1 ms au lieu de ~5 s (Sesame) :

```
{
 "doping.n_region": 2.5e16,
 "doping.p_region": 1e15,
 "geometry.thickness_n": 1e-4,
 "geometry.thickness_p": 3e-4
}
```

**Résultat :**

```
{
 "predicted_value": 18.7,
 "uncertainty": 0.4,
 "confidence_95": [17.9, 19.5]
}
```

### 5.7.2 Scan 1D

Variation d'un paramètre tout en fixant les autres :

- Sélectionnez un paramètre
- Définissez la plage de variation
- Le surrogate génère une courbe ASCII en temps réel

### 5.7.3 Inverse prediction

Trouve les paramètres atteignant une cible  $\eta$  donnée :

- Entrez la cible (ex:  $\eta = 20\%$ )
- Le surrogate propose plusieurs configurations
- Choisissez celle qui vous convient

### 5.7.4 Sauvegarde du modèle

Pour sauvegarder le surrogate model :

1. Cliquez sur **“Sauvegarder le modèle”**

2. Le fichier .pk1 est téléchargé 3 Vous pouvez le recharger plus tard pour des prédictions
- 

## 6. Export des résultats

### 6.1 Export CSV des trials

Pour exporter tous les trials en CSV :

1. Cliquez sur **“Exporter CSV”**
2. Le fichier [optim\_name]\_trials.csv est téléchargé

**Format :**

```
trial_number,efficiency,doping_n_region,doping_p_region,thickness_n,thickness_p
1,18.5,1.2e17,1.1e15,4.8e-5,1.9e-4
2,19.2,1.5e17,9.5e14,5.2e-5,2.1e-4
...
```

### 6.2 Export PDF du rapport

Pour générer un rapport PDF complet :

1. Cliquez sur **“Générer PDF”**
2. Le rapport inclut :
  - Résumé de l’optimisation
  - Graphique de convergence
  - Heatmap de corrélation
  - Top 10 configurations
  - Importance des paramètres
  - Configuration du surrogate

### 6.3 Export du surrogate model

Pour sauvegarder le modèle entraîné :

1. Cliquez sur **“Sauvegarder le surrogate”**
2. Le fichier [optim\_name]\_surrogate.pk1 est téléchargé

Pour recharger le modèle :

1. Cliquez sur **“Charger un surrogate”**
  2. Sélectionnez le fichier .pk1
  3. Utilisez-le pour des prédictions rapides
-



## 7. Bonnes pratiques

### 7.1 Choix des bornes

**Conseils** : - Commencez avec des bornes larges - Réduisez progressivement les bornes autour de l'optimum - Utilisez `log_float` pour les paramètres avec plusieurs ordres de grandeur

**Exemple** : - Premier run : `doping.n_region [1e14, 1e19]` - Second run : `doping.n_region [1e16, 1e18]` (autour de l'optimum trouvé)

### 7.2 Nombre de trials

**Recommandations** : - **Test rapide** : 20-50 trials pour valider la configuration - **Optimisation standard** : 100-200 trials pour un bon optimum - **Optimisation précise** : 500+ trials pour un optimum très précis

**Règle empirique** :  $\text{trials} \geq 10 \times \text{nombre de paramètres}$

### 7.3 Choix du moteur

| Situation           | Moteur recommandé |
|---------------------|-------------------|
| Usage général       | Optuna TPE        |
| < 10 paramètres     | Optuna GP         |
| Précision maximale  | BoTorch GP        |
| Espaces très larges | CMA-ES            |
| Baseline            | Random            |

### 7.4 Interprétation des résultats

- **Convergence rapide** : L'optimum est facile à trouver
- **Convergence lente** : L'espace est complexe, envisagez plus de trials
- **Forte variance** : Le problème est bruité, envisagez plus de trials
- **Paramètre peu important** : Fixez-le à sa valeur optimale pour réduire la dimension

---

## 8. Exemples

### 8.1 Optimisation du dopage Si

Objectif : Optimiser le dopage pour maximiser l'efficacité.

```
{
 "name": "opt_si_dopage",
 "sim_type": "homojunction",
 "engine": "optuna",
 "sampler": "tpe",
 "n_trials": 100,
 "objectives": ["efficiency"],
}
```

```

"param_ranges": [
 {
 "name": "doping.n_region",
 "type": "log_float",
 "low": 1e15,
 "high": 1e18,
 "label": "Dopage N (cm-3)"
 },
 {
 "name": "doping.p_region",
 "type": "log_float",
 "low": 1e14,
 "high": 1e17,
 "label": "Dopage P (cm-3)"
 }
]
}

```

## 8.2 Optimisation des épaisseurs

Objectif : Optimiser les épaisseurs pour maximiser l'efficacité.

```

{
 "name": "opt_si_epaisseurs",
 "sim_type": "homojunction",
 "engine": "optuna",
 "sampler": "tpe",
 "n_trials": 100,
 "objectives": ["efficiency"],
 "param_ranges": [
 {
 "name": "geometry.thickness_n",
 "type": "log_float",
 "low": 1e-5,
 "high": 5e-4,
 "label": "Épaisseur N (cm)"
 },
 {
 "name": "geometry.thickness_p",
 "type": "log_float",
 "low": 5e-5,
 "high": 2e-3,
 "label": "Épaisseur P (cm)"
 }
]
}

```

## 8.3 Optimisation multi-paramètres

Objectif : Optimiser dopage et épaisseurs simultanément.

```

{
 "name": "opt_si_complet",
 "sim_type": "homojunction",
 "engine": "optuna",
 "sampler": "tpe",
 "n_trials": 200,
 "objectives": ["efficiency"],
 "param_ranges": [
 {
 "name": "doping.n_region",
 "type": "log_float",
 "low": 1e15,
 "high": 1e18
 },
 {
 "name": "doping.p_region",
 "type": "log_float",
 "low": 1e14,
 "high": 1e17
 },
 {
 "name": "geometry.thickness_n",
 "type": "log_float",
 "low": 1e-5,
 "high": 5e-4
 },
 {
 "name": "geometry.thickness_p",
 "type": "log_float",
 "low": 5e-5,
 "high": 2e-3
 }
]
}

```

---

## 9. API REST

### 9.1 Créer un job d'optimisation

```

curl -X POST http://localhost:5000/api/optimize/create \
 -H "Content-Type: application/json" \
 -d '{
 "name": "opt_si",
 "sim_type": "homojunction",
 "engine": "optuna",
 "sampler": "tpe",
 "n_trials": 100,
 "objectives": ["efficiency"],
 "param_ranges": [

```

```
{
 "name": "doping.n_region", "type": "log_float", "low": 1e15, "high": 1e18},
 {"name": "doping.p_region", "type": "log_float", "low": 1e14, "high": 1e17}
]
```

**Réponse :**

```
{
 "success": true,
 "opt_id": "abc123de"
}
```

### 9.2 Lancer l'optimisation

```
curl -X POST http://localhost:5000/api/optimize/abc123de/run
```

### 9.3 Suivre la progression (SSE)

```
curl http://localhost:5000/api/optimize/abc123de/progress
```

### 9.4 Obtenir les résultats

```
curl http://localhost:5000/api/optimize/abc123de/results
```

### 9.5 Obtenir le rapport PDF

```
curl http://localhost:5000/api/optimize/abc123de/pdf -o rapport.pdf
```

---

## Conclusion

L'optimisation IA d'SPARC permet d'optimiser automatiquement vos cellules solaires en utilisant des algorithmes bayésiens avancés.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Configurer une optimisation bayésienne
- ✓ Choisir le moteur approprié
- ✓ Définir les paramètres à optimiser
- ✓ Analyser les résultats (convergence, importance, surrogate)
- ✓ Exporter les résultats et le modèle
- ✓ Utiliser l'API REST pour l'automatisation

### Prochaines étapes

- [Analyse de sensibilité](#) - Pour approfondir l'analyse
- [Surrogate modeling](#) - Pour créer des modèles avancés
- [Autres types de simulation](#) - Pour optimiser d'autres structures

## Historique et gestion des simulations

Ce guide documente la gestion de vos simulations via l'historique d'SPARC : recherche, filtrage, organisation, suppression et archivage.

**Temps estimé** : 15 minutes

**Niveau** : Débutant

**Prérequis** : Aucun

---

### Table des matières

1. [Accès à l'historique](#)
  2. [Fonctionnalités de l'historique](#)
  3. [Gestion des simulations](#)
  4. [Statut des simulations](#)
  5. [Bonnes pratiques](#)
  6. [Dépannage](#)
- 

## 1. Accès à l'historique

### 1.1 Navigation vers l'historique

Depuis la page d'accueil :



| Colonne                                    | Description                                |
|--------------------------------------------|--------------------------------------------|
| <b>Type</b>                                | Type de simulation                         |
| <b>Date</b>                                | Date de création (format JJ/MM/AAAA HH:MM) |
| <b>Statut</b> : Terminée, Échouée, Annulée |                                            |
| <b>Efficacité</b>                          | Efficacité $\eta$ en % (si terminée)       |
| <b>Actions</b>                             | Boutons d'action                           |

### *Filtrage par type*

Pour filtrer les simulations par type :

1. Cliquez sur le menu déroulant **“Filtrer par type”**
2. Sélectionnez le type souhaité (ex: homojunction)
3. La liste se met à jour automatiquement

### *Recherche par nom*

Pour rechercher une simulation par nom :

1. Cliquez dans la barre de recherche
2. Tapez le nom ou une partie du nom
3. La liste se met à jour en temps réel

**Exemple** : Taper “si” affichera toutes les simulations contenant “si” dans le nom.

### *Tri*

Pour trier les simulations :

1. Cliquez sur l'en-tête d'une colonne
2. La liste se trie par ordre croissant
3. Cliquez à nouveau pour trier par ordre décroissant

**Colonnes triables** : Date, Efficacité, Nom

## **2.2 Détails d'une simulation**

Pour voir les détails d'une simulation :

1. Cliquez sur le nom de la simulation
2. Une page de résumé s'affiche avec :
  - Configuration complète
  - Métriques principales
  - Lien vers les résultats complets
  - Lien pour comparer avec une autre simulation

## 2.3 Actions disponibles

### *Visualiser les résultats*

Pour visualiser les résultats d'une simulation :

1. Cliquez sur le bouton **“Voir”** dans la colonne Actions
2. La page de résultats s'ouvre avec tous les graphiques

### *Comparer avec une autre simulation*

Pour comparer une simulation avec une autre :

1. Cliquez sur le bouton **“Comparer”**
2. Sélectionnez une deuxième simulation dans la liste
3. La page de comparaison s'ouvre

### *Supprimer une simulation*

Pour supprimer une simulation :

1. Cliquez sur le bouton **“Supprimer”**
2. Une boîte de confirmation s'affiche
3. Cliquez sur **“Confirmer”** pour supprimer

**Attention** : La suppression est irréversible. Les fichiers sont supprimés du disque.

### *Exporter une simulation*

Pour exporter les résultats d'une simulation :

1. Cliquez sur le bouton **“Exporter”**
2. Choisissez le format :
  - JSON (données brutes)
  - CSV (courbe I-V)
  - PDF (rapport complet)

### *Dupliquer la configuration*

Pour dupliquer la configuration d'une simulation :

1. Cliquez sur le bouton **“Dupliquer”**
  2. Le JSON de configuration est copié
  3. Vous pouvez le modifier et relancer une nouvelle simulation
-



## 3. Gestion des simulations

### 3.1 Suppression

#### *Suppression individuelle*

Pour supprimer une seule simulation :

1. Cliquez sur le bouton **“Supprimer”** de la simulation
2. Confirmez la suppression

#### *Suppression en masse*

Pour supprimer plusieurs simulations :

1. Cochez les cases à côté des simulations à supprimer
2. Cliquez sur le bouton **“Supprimer la sélection”**
3. Confirmez la suppression

**Note** : Les simulations en cours ne peuvent pas être supprimées.

### 3.2 Archivage

#### *Archivage automatique*

SPARC archive automatiquement les anciennes simulations pour économiser l'espace disque :

- **Rétention par défaut** : 90 jours
- **Fréquence** : Quotidienne (tâche Celery Beat)
- **Emplacement** : Archives compressées (gzip JSONL)

#### *Configuration de la rétention*

Pour modifier la durée de rétention :

1. Éditez le fichier `.env`
2. Modifiez `SPARC_RETENTION_DAYS` (défaut: 90)
3. Redémarrez SPARC

**Exemple** :

```
SPARC_RETENTION_DAYS=180 # 6 mois
```

#### *Restauration*

Pour restaurer une simulation archivée :

1. Naviguez vers le dossier des archives
2. Décompressez l'archive correspondante
3. Importez le JSON dans SPARC

**Note :** Cette fonctionnalité nécessite un accès direct au système de fichiers.

---

## 4. Statut des simulations

### 4.1 Types de statut

| Statut          | Description                          | Couleur |
|-----------------|--------------------------------------|---------|
| <b>En cours</b> | Simulation en cours d'exécution      | Bleu    |
| <b>Terminée</b> | Simulation terminée avec succès      | Vert    |
| <b>Échouée</b>  | Simulation échouée (erreur)          | Rouge   |
| <b>Annulée</b>  | Simulation annulée par l'utilisateur | Orange  |

### 4.2 Interprétation des statuts

#### *En cours*

- La simulation est en cours d'exécution
- Vous pouvez suivre la progression sur la page de résultats
- Le temps restant est estimé

#### *Terminée*

- La simulation s'est terminée avec succès
- Les résultats sont disponibles
- Les métriques sont calculées

#### *Échouée*

- La simulation a échoué suite à une erreur
- Consultez les logs pour plus de détails
- Vérifiez la configuration et relancez

#### *Annulée*

- La simulation a été annulée par l'utilisateur
  - Les résultats partiels peuvent être disponibles
  - Relancez avec la même configuration si nécessaire
- 

## 5. Bonnes pratiques

### 5.1 Nommage cohérent

Utilisez un système de nommage cohérent pour vos simulations :

#### **Exemples :**

```
homo_si_standard_001
homo_si_haut_dopage_002
homo_si_fine_epaisseur_003
```

hetero\_cdte\_standard\_001  
tandem\_si\_si\_test\_001

**Conseils** : - Incluez le type de simulation (homo, hetero, tandem) - Incluez le matériau (si, cdte, gaas) - Incluez une description courte (standard, haut\_dopage) - Utilisez un numéro séquentiel

## 5.2 Organisation par projet

Pour les projets complexes, organisez vos simulations par projet :

**Exemple** :

projet\_A\_homo\_si\_001  
projet\_A\_homo\_si\_002  
projet\_A\_homo\_si\_003  
projet\_B\_hetero\_cdte\_001  
projet\_B\_hetero\_cdte\_002

## 5.3 Utilisation des favoris

Pour marquer des simulations importantes :

1. Cliquez sur l'étoile ★ à côté du nom
2. La simulation est ajoutée aux favoris
3. Filtrez par "Favoris" pour les retrouver rapidement

## 5.4 Nettoyage régulier

Pour maintenir un historique propre :

- **Supprimez** les simulations échouées inutiles
  - **Archivez** les anciennes simulations (automatique)
  - **Exportez** les résultats importants avant suppression
  - **Dupliquez** les configurations réussies
- 

# 6. Dépannage

## 6.1 Simulation bloquée "En cours"

**Symptôme** : Une simulation reste "En cours" indéfiniment.

**Causes possibles** : - Worker Celery bloqué - Problème de convergence - Erreur silencieuse

**Solutions** : 1. Vérifiez les logs du worker : `docker compose logs worker` 2. Annulez la simulation 3. Relancez avec moins de points de grille

## 6.2 Historique vide

**Symptôme** : L'historique n'affiche aucune simulation.

**Causes possibles** : - Base de données vide - Problème de connexion à la base - Permissions incorrectes

**Solutions** : 1. Vérifiez que la base de données existe : `ls web/simulations.db` 2. Vérifiez les permissions : `chmod u+w web/` 3. Redémarrez SPARC

### 6.3 Impossible de supprimer

**Symptôme** : Le bouton “Supprimer” ne fonctionne pas.

**Causes possibles** : - Simulation en cours - Permissions insuffisantes - Base de données verrouillée

**Solutions** : 1. Attendez que la simulation se termine 2. Annulez la simulation si nécessaire 3. Vérifiez les permissions du dossier

---

## Conclusion

L'historique d'SPARC vous permet de gérer efficacement vos simulations : recherche, filtrage, organisation, suppression et archivage.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Accéder à l'historique
- ✓ Filtrer et rechercher des simulations
- ✓ Visualiser, comparer et supprimer des simulations
- ✓ Comprendre les statuts de simulation
- ✓ Organiser vos simulations avec un bon nommage
- ✓ Gérer l'archivage automatique

### Prochaines étapes

- [Comparaison de simulations](#) - Pour analyser les différences
- [Statistiques globales](#) - Pour visualiser les tendances
- [Export des résultats](#) - Pour sauvegarder vos données

## Base de matériaux

Ce guide documente la base de matériaux d'SPARC : matériaux intégrés, création de matériaux personnalisés, et intégration avec Materials Project API.

**Temps estimé** : 20 minutes

**Niveau** : Débutant

**Prérequis** : Aucun

---

## Table des matières

1. Accès à la base de matériaux
2. Matériaux intégrés
3. Création d'un matériau personnalisé
4. Integration Materials Project
5. Utilisation dans une simulation
6. Bonnes pratiques
7. Dépannage

## 1. Accès à la base de matériaux

### 1.1 Navigation vers la base de matériaux

Depuis la page d'accueil :

**Bibliothèque de Matériaux**  
Gérez vos matériaux locaux et lancez une recherche croisée sur la base ARISE, Materials Project et OPTIMADE.

**Atelier de Recherche Matériaux** 3 sources en parallèle | doublons conservés

Recherchez une formule, un nom ou une hétérostructure comme GaAs/AlGaAs. Chaque source reste visible séparément, même si plusieurs entrées portent le même nom.

Ex: GaN, Silicon, GaAs/AlGaAs, perovskite...

multi-matériaux avec '/' | filtre par bande interdite | import direct vers votre base

Gap min: 0,1 eV | Gap max: 5,0 eV

Matériaux stables uniquement

**Mes Matériaux Enregistrés**

| Matériau                    | Source    | Eg (eV) | ε    |
|-----------------------------|-----------|---------|------|
| Si (Silicium)               | Elemental | 1.1247  | 11.7 |
| Ge (Germanium)              | Elemental | 0.664   | 16.0 |
| GaAs (Arséniure de Gallium) | III-V     | 1.424   | 13.1 |
| GaP (Phosphide de Gallium)  | III-V     | 2.272   | 11.1 |
| InP (Phosphide d'Indium)    | III-V     | 1.344   | 12.5 |
| CdTe (Tellurure de Cadmium) | II-VI     | 1.5     | 10.2 |

**Recherche Globale**  
La recherche combine les trois sources en parallèle et conserve chaque occurrence trouvée, même si la formule apparaît plusieurs fois.  
Conseil : comparez les gaps et les métadonnées source avant import pour distinguer une donnée locale, une estimation DFT MP ou un fournisseur OPTIMADE.

Catégories

1. Cliquez sur le bouton **“Matériaux”** dans la section principale OU
2. Cliquez sur **“Matériaux”** dans le menu de navigation OU
3. Naviguez directement vers l'URL : <http://localhost:5000/materials>

### 1.2 Description de l'interface

L'interface de la base de matériaux affiche :

- **Liste des matériaux** : Tableau avec tous les matériaux disponibles

- **Détails du matériau** : Propriétés complètes lors de la sélection
- **Actions** : Créer, modifier, supprimer des matériaux
- **Recherche** : Recherche par nom ou formule

## 2. Matériaux intégrés

### 2.1 Liste des matériaux

SPARC inclut 10+ matériaux pré-configurés avec des propriétés physiques précises.

Mes Matériaux Enregistrés 15

Si  
Silicium  
Eg: 1.1247 eV    ε: 11.7

Ge  
Germanium  
Eg: 0.664 eV    ε: 16.0

GaAs  
Arséniure de Gallium  
Eg: 1.424 eV    ε: 13.1

GaP  
Phosphide de Gallium  
Eg: 2.272 eV    ε: 11.1

InP  
Phosphide d'Indium  
Eg: 1.344 eV    ε: 12.5

CdTe  
Tellure de Cadmium  
Eg: 1.5 eV    ε: 10.2

CdS  
Sulfide de Cadmium  
Eg: 2.42 eV    ε: 8.9

CIGS  
Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>  
Eg: 1.3 eV    ε: 13.6

CZTS  
Cu<sub>2</sub>ZnSn(S,Se)<sub>4</sub>  
Eg: 1.5 eV    ε: 13.0

MAPbI3  
Methylammonium Lead Iodide  
Eg: 1.58 eV    ε: 25.5

CsPbI3  
Cesium Lead Iodide  
Eg: 1.73 eV    ε: 18.0

GaInP  
GaInP  
Eg: 1.87 eV    ε: 11.8

AlGaAs  
AlGaAs  
Eg: 1.8 eV    ε: 12.1

Si\_2d\_GB  
Si\_2d\_GB  
Eg: 1.5 eV    ε: 9.4

GaN  
GaN  
Eg: 3.43 eV    ε: 9.0

Recherche Globale

La recherche combine les trois sources en parallèle et conserve chaque occurrence trouvée, même si la formule apparaît plusieurs fois.

Conseil : comparez les gaps et les métadonnées source avant import pour distinguer une donnée locale, une estimation DFT MP ou un fournisseur OPTIMADE.

Catégories

2D\_GB\_homojunction

Chalcopyrite

Elemental

II-VI

III-V

III-V\_nitride

Kesterite

Perovskite

| Matériau             | Formule    | Eg (eV)   | Catégorie                   |
|----------------------|------------|-----------|-----------------------------|
| Silicium             | Si         | 1.12      | Semi-conducteur élémentaire |
| Germanium            | Ge         | 0.66      | Semi-conducteur élémentaire |
| Arséniure de gallium | GaAs       | 1.42      | III-V                       |
| Tellurure de cadmium | CdTe       | 1.50      | II-VI                       |
| Sulfure de cadmium   | CdS        | 2.42      | II-VI                       |
| CIGS                 | CuInGaSe2  | 1.15-1.65 | Ternaire                    |
| CZTS                 | Cu2ZnSnS4  | 1.50      | Quaternaire                 |
| Pérovskite MAPbI3    | CH3NH3PbI3 | 1.55      | Pérovskite                  |
| Phosphure d'indium   | InP        | 1.35      | III-V                       |
| GaInP                | GaInP      | 1.90      | III-V ternaire              |

## 2.2 Détails d'un matériau

Pour voir les détails d'un matériau :

1. Cliquez sur le nom du matériau dans la liste
2. Les propriétés complètes s'affichent à droite

### Propriétés affichées

| Propriété                         | Symbole        | Unité                | Description                                         |
|-----------------------------------|----------------|----------------------|-----------------------------------------------------|
| <b>Band gap</b>                   | Eg             | eV                   | Énergie de gap                                      |
| <b>Densité d'états conduction</b> | Nc             | cm <sup>-3</sup>     | Densité d'états effective de la bande de conduction |
| <b>Densité d'états valence</b>    | Nv             | cm <sup>-3</sup>     | Densité d'états effective de la bande de valence    |
| <b>Mobilité électrons</b>         | μ <sub>e</sub> | cm <sup>2</sup> /V.s | Mobilité des électrons                              |
| <b>Mobilité trous</b>             | μ <sub>h</sub> | cm <sup>2</sup> /V.s | Mobilité des trous                                  |
| <b>Permittivité</b>               | eps            | -                    | Permittivité relative                               |
| <b>Durée de vie électrons</b>     | τ <sub>e</sub> | s                    | Durée de vie des électrons                          |
| <b>Durée de vie trous</b>         | τ <sub>h</sub> | s                    | Durée de vie des trous                              |
| <b>Affinité électronique</b>      | χ              | eV                   | Affinité électronique                               |

### Exemple : Silicium

```
{
 "name": "Si",
 "formula": "Si",
 "Eg": 1.12,
 "Nc": 2.8e19,
 "Nv": 1.04e19,
 "mu_e": 1500,
 "mu_h": 450,
 "eps": 11.7,
 "tau_e": 1e-8,
 "tau_h": 1e-8,
 "chi": 4.05
}
```

---

## 3. Création d'un matériau personnalisé

### 3.1 Formulaire de création

Pour créer un matériau personnalisé :

1. Cliquez sur le bouton **“Créer un matériau”**
2. Un formulaire s'affiche avec tous les champs requis

## 3.2 Champs requis

### 3.2.1 Informations générales

- **Nom** : Nom du matériau (ex: "MonMatériau")
- **Formule** : Formule chimique (ex: "AlGaAs")

### 3.2.2 Propriétés électroniques

- **Eg (Band gap)** : Énergie de gap en eV
  - Plage typique : 0.1 - 5.0 eV
  - Exemple : 1.42 pour GaAs
- **Nc (Densité d'états conduction)** : en  $\text{cm}^{-3}$ 
  - Plage typique :  $1\text{e}17$  -  $1\text{e}20 \text{ cm}^{-3}$
  - Exemple :  $4.7\text{e}17$  pour GaAs
- **Nv (Densité d'états valence)** : en  $\text{cm}^{-3}$ 
  - Plage typique :  $1\text{e}18$  -  $1\text{e}20 \text{ cm}^{-3}$
  - Exemple :  $7.0\text{e}18$  pour GaAs

### 3.2.3 Propriétés de transport

- **$\mu_e$  (Mobilité électrons)** : en  $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 
  - Plage typique : 10 - 10000  $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
  - Exemple : 8500 pour GaAs
- **$\mu_h$  (Mobilité trous)** : en  $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 
  - Plage typique : 10 - 5000  $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
  - Exemple : 400 pour GaAs

### 3.2.4 Propriétés optiques

- **eps (Permittivité)** : sans unité
  - Plage typique : 5 - 20
  - Exemple : 13.1 pour GaAs
- **chi (Affinité électronique)** : en eV
  - Plage typique : 2.0 - 5.0 eV
  - Exemple : 4.07 pour GaAs

### 3.2.5 Propriétés de recombinaison

- **$\tau_e$  (Durée de vie électrons)** : en s
  - Plage typique :  $1\text{e}-10$  -  $1\text{e}-5$  s
  - Exemple :  $1\text{e}-8$  pour Si
- **$\tau_h$  (Durée de vie trous)** : en s
  - Plage typique :  $1\text{e}-10$  -  $1\text{e}-5$  s
  - Exemple :  $1\text{e}-8$  pour Si

## 3.3 Validation

Le système valide automatiquement :



- ✓Plages de valeurs raisonnables
- ✓Unités correctes
- ✓Cohérence physique (ex:  $N_c > N_v$  pour certains matériaux)

Si une valeur est hors plage, un message d'avertissement s'affiche.

### 3.4 Sauvegarde

Pour sauvegarder le matériau :

1. Cliquez sur **“Sauvegarder”**
2. Le matériau est ajouté à la base locale
3. Il est immédiatement disponible dans les simulations

**Note** : Les matériaux personnalisés sont sauvegardés dans la base de données SQLite et persistent entre les sessions.

## 4. Integration Materials Project

### 4.1 Configuration de l'API

Materials Project est une base de données de matériaux avec des propriétés calculées et expérimentales.

#### 4.1.1 Obtenir une clé API

1. Allez sur <https://next-gen.materialsproject.org/api>
2. Créez un compte gratuit
3. Générez une clé API
4. Copiez la clé

#### 4.1.2 Configurer SPARC

Éditez le fichier `.env` :

```
MATERIALS_PROJECT_API_KEY=votre_cle_api
```

Redémarrez SPARC pour appliquer les changements.

### 4.2 Recherche en ligne

Pour rechercher un matériau sur Materials Project :

1. Cliquez sur **“Rechercher en ligne”**
2. Entrez la formule chimique (ex: “GaAs”)
3. Cliquez sur **“Rechercher”**

### 4.3 Import des propriétés

Si le matériau est trouvé sur Materials Project :

1. Les propriétés calculées s'affichent
2. Cliquez sur **"Importer"**
3. Les propriétés sont importées dans SPARC

**Propriétés importées** : - Band gap (calculé) - Densités d'états (calculées) - Affinité électronique (calculée) - Et d'autres...

**Note** : Certaines propriétés peuvent ne pas être disponibles pour tous les matériaux. Dans ce cas, utilisez les valeurs par défaut ou entrez-les manuellement.

#### 4.4 Validation

Les propriétés importées sont validées pour s'assurer qu'elles sont dans des plages raisonnables pour SPARC.

---

### 5. Utilisation dans une simulation

#### 5.1 Sélection depuis /form

Pour utiliser un matériau dans une nouvelle simulation :

1. Naviguez vers /form
2. Cliquez sur le champ **"Matériau actif"**
3. Sélectionnez le matériau souhaité dans la liste
4. Les propriétés s'affichent pour vérification

#### 5.2 Sélection depuis /configure

Pour configurer une simulation avancée :

1. Naviguez vers /configure/<type>
2. Sélectionnez le matériau dans la section "Matériaux"
3. Les paramètres spécifiques au matériau s'affichent

#### 5.3 Auto-complétion

Lors de la saisie du nom d'un matériau :

1. Commencez à taper le nom
2. L'auto-complétion suggère les matériaux correspondants
3. Sélectionnez le matériau souhaité

**Exemple** : Taper "si" suggère "Si", "SiGe", etc.

---

## 6. Bonnes pratiques

### 6.1 Vérification des unités

Assurez-vous toujours de vérifier les unités :

- **E<sub>g</sub>** : eV (pas meV ni keV)
- **N<sub>c</sub>, N<sub>v</sub>** : cm<sup>-3</sup> (pas m<sup>-3</sup>)
- **μ<sub>e</sub>, μ<sub>h</sub>** : cm<sup>2</sup>/V·s (pas m<sup>2</sup>/V·s)
- **τ<sub>e</sub>, τ<sub>h</sub>** : s (pas ms ni ns)
- **eps** : sans unité
- **chi** : eV

### 6.2 Sources des données

Utilisez des sources fiables pour les propriétés des matériaux :

- **Papiers scientifiques** revus par les pairs
- **Handbooks** reconnus (ex: Semiconductor Handbook)
- **Materials Project** pour les propriétés calculées
- **Données expérimentales** de votre laboratoire

### 6.3 Validation physique

Après avoir créé un matériau, validez-le :

1. Comparez avec des matériaux similaires
2. Vérifiez que les propriétés sont cohérentes
3. Lancez une simulation de test
4. Vérifiez que les résultats sont physiquement raisonnables

### 6.4 Documentation

Documentez vos matériaux personnalisés :

- Notez la source des données
- Indiquez la température de référence
- Mentionnez les incertitudes si connues
- Ajoutez des commentaires si nécessaire

---

## 7. Dépannage

### 7.1 Matériau non trouvé dans la liste

**Symptôme** : Un matériau que vous avez créé n'apparaît pas.

**Solutions** : 1. Vérifiez que vous avez cliqué sur "Sauvegarder" 2. Rafraîchissez la page 3. Vérifiez les filtres de recherche

## 7.2 Propriétés incorrectes après import

**Symptôme** : Les propriétés importées de Materials Project semblent incorrectes.

**Solutions** : 1. Vérifiez que la clé API est valide 2. Vérifiez que le matériau existe sur Materials Project 3. Corrigez manuellement les propriétés si nécessaire

## 7.3 Simulation échoue avec nouveau matériau

**Symptôme** : Une simulation échoue après avoir créé un nouveau matériau.

**Solutions** : 1. Vérifiez que toutes les propriétés sont remplies 2. Vérifiez que les valeurs sont dans des plages raisonnables 3. Comparez avec un matériau similaire intégré 4. Consultez les logs pour plus de détails

---

## Conclusion

La base de matériaux d'SPARC vous permet de gérer les matériaux pour vos simulations : matériaux intégrés, création personnalisée, et intégration Materials Project.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Accéder à la base de matériaux
- ✓ Voir les propriétés des matériaux intégrés
- ✓ Créer des matériaux personnalisés
- ✓ Importer des propriétés depuis Materials Project
- ✓ Utiliser les matériaux dans les simulations
- ✓ Valider les propriétés physiques

### Prochaines étapes

- [Guide homojonction](#) - Pour utiliser les matériaux dans une simulation
- [Guide hétérojonction](#) - Pour utiliser deux matériaux différents
- [Types de simulation](#) - Pour découvrir quels types supportent quels matériaux

## Comparaison de simulations

Ce guide documente la fonctionnalité de comparaison de simulations d'SPARC, qui permet d'analyser les différences entre deux simulations côte à côte.

**Temps estimé** : 15 minutes

**Niveau** : Débutant

**Prérequis** : Au moins deux simulations terminées

---

## Table des matières

1. Accès à la comparaison
2. Sélection des simulations
3. Onglets de comparaison
4. Export de la comparaison
5. Cas d'usage
6. Bonnes pratiques
7. Dépannage

## 1. Accès à la comparaison

### 1.1 Navigation vers la comparaison

Depuis la page d'accueil :



1. Cliquez sur le bouton **“Comparer”** dans la section principale OU
2. Cliquez sur **“Comparer”** dans le menu de navigation OU
3. Naviguez directement vers l'URL : <http://localhost:5000/compare>

### 1.2 Description de l'interface

L'interface de comparaison affiche :

- **Sélection Simulation 1** : Liste déroulante pour la première simulation
  - **Sélection Simulation 2** : Liste déroulante pour la deuxième simulation
  - **Bouton Comparer** : Pour lancer la comparaison
  - **Onglets de résultats** : 6 onglets pour différents types d'analyse
- 

## 2. Sélection des simulations

### 2.1 Choix des deux simulations

Pour comparer deux simulations :

1. Dans la liste déroulante "**Simulation 1**", sélectionnez votre première simulation
2. Dans la liste déroulante "**Simulation 2**", sélectionnez votre deuxième simulation
3. Les simulations sont affichées avec :
  - Nom
  - Type
  - Date
  - Efficacité

**Note** : Si vous n'avez qu'une seule simulation, créez-en une deuxième avec des paramètres différents avant de comparer.

### 2.2 Aperçu rapide

Avant de lancer la comparaison, un aperçu rapide s'affiche :

- **Simulation 1** : Nom, type, efficacité
- **Simulation 2** : Nom, type, efficacité
- **Différence** :  $\Delta\eta$ ,  $\Delta J_{sc}$ ,  $\Delta V_{oc}$ ,  $\Delta FF$

### 2.3 Lancement de la comparaison

Cliquez sur le bouton "**Comparer**" pour générer les graphiques de comparaison.

---

## 3. Onglets de comparaison

La comparaison affiche 6 onglets pour différents types d'analyse.

### 3.1 Onglet J-V

L'onglet J-V affiche les courbes courant-tension superposées.



### Affichage

- **Axe X** : Tension (V)
- **Axe Y** : Densité de courant (mA/cm<sup>2</sup>)
- **Courbe bleue** : Simulation 1
- **Courbe rouge** : Simulation 2
- **Légende** : Nom des simulations

### Interactions

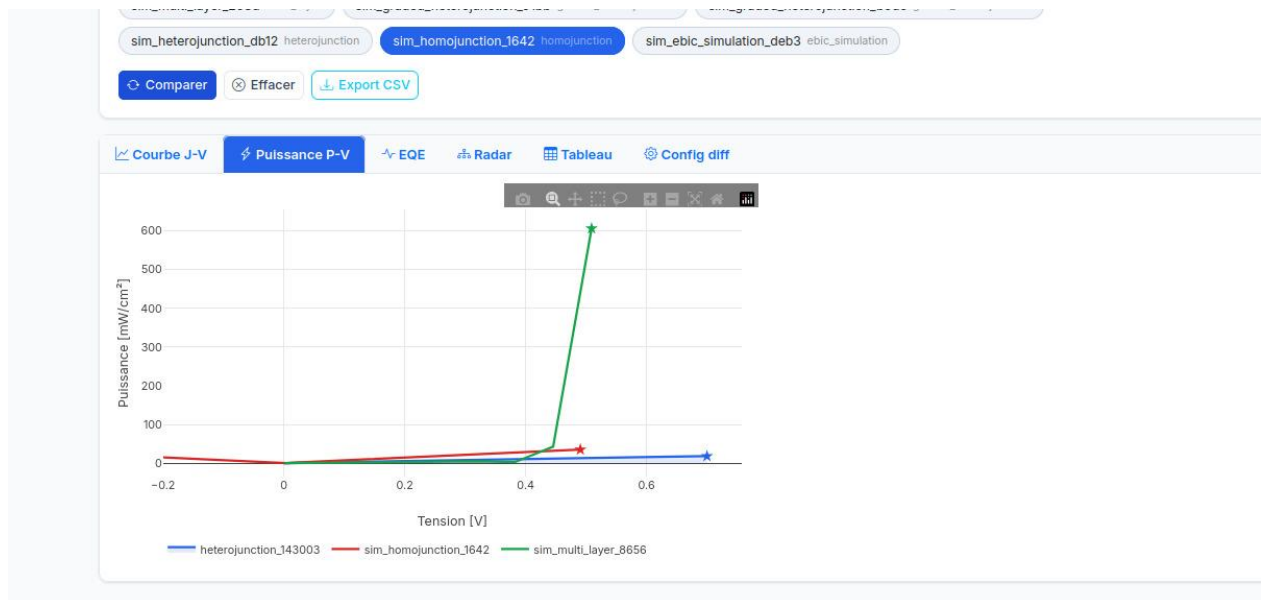
- **Zoom** : Clic-glisser pour zoomer
- **Pan** : Clic-droit-glisser pour déplacer
- **Reset** : Double-clic pour réinitialiser
- **Export** : Clic sur l'icône de téléchargement

### Interprétation

- **Décalage vertical** : Différence de Jsc
- **Décalage horizontal** : Différence de Voc
- **Forme différente** : Différence de FF
- **Intersection** : Point où les deux courbes se croisent

## 3.2 Onglet P-V

L'onglet P-V affiche les courbes puissance-tension.



### Affichage

- **Axe X** : Tension (V)
- **Axe Y** : Puissance ( $\text{mW}/\text{cm}^2$ )
- **Courbe bleue** : Simulation 1
- **Courbe rouge** : Simulation 2
- **Marqueur Pmax** : Point de puissance maximale pour chaque simulation
- **$\Delta P_{\text{max}}$**  : Différence de puissance maximale

### Interprétation

- **Pmax plus élevé** : Meilleure efficacité
- **Vmax différent** : Différence de tension optimale
- **Jmax différent** : Différence de courant optimal

## 3.3 Onglet EQE

L'onglet EQE affiche la réponse spectrale comparée.

### Affichage

- **Axe X** : Longueur d'onde (nm)
- **Axe Y** : EQE (%)
- **Courbe bleue** : Simulation 1
- **Courbe rouge** : Simulation 2

### Interprétation

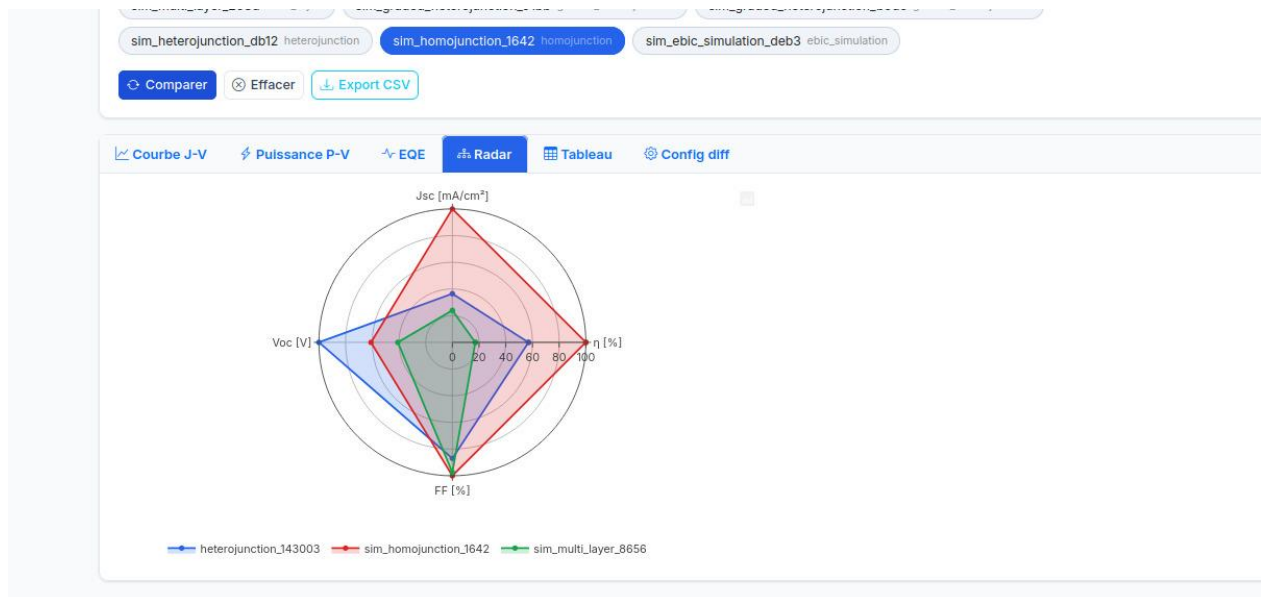
- **Décalage spectral** : Différence de réponse spectrale
- **Pic décalé** : Différence de gap ou d'épaisseur
- **Forme différente** : Différence de profil d'absorption



**Note :** Cet onglet n'est disponible que si les simulations incluent des données EQE.

### 3.4 Onglet Radar

L'onglet Radar affiche un graphe araignée normalisé.



#### Affichage

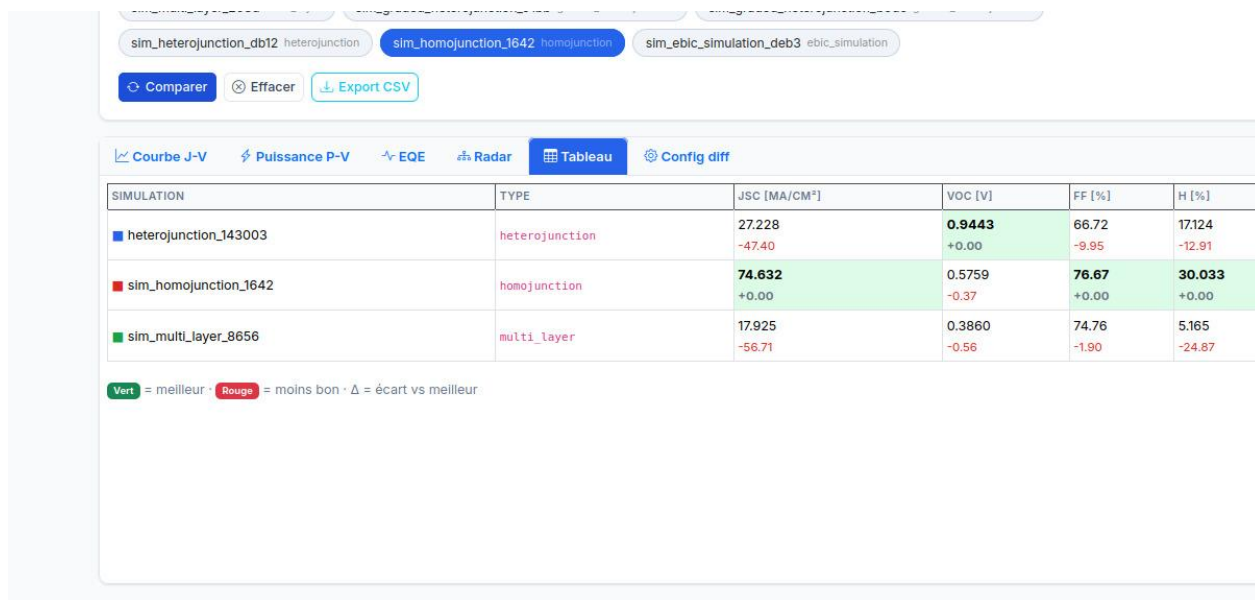
- **Paramètres :**  $\eta$ ,  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $FF$
- **Forme bleue :** Simulation 1
- **Forme rouge :** Simulation 2
- **Normalisation :** Chaque paramètre est normalisé à 100%

#### Interprétation

- **Forme plus grande :** Meilleure performance globale
- **Pointe sur un axe :** Force dans ce paramètre
- **Creux sur un axe :** Faiblesse dans ce paramètre
- **Superposition :** Performances similaires

### 3.5 Onglet Tableau

L'onglet Tableau affiche les valeurs numériques côte à côte.



### Affichage

| Métrique                   | Simulation 1 | Simulation 2 | Différence | %     |
|----------------------------|--------------|--------------|------------|-------|
| Efficacité (%)             | 18.5         | 20.2         | +1.7       | +9.2% |
| Jsc (mA/cm <sup>2</sup> )  | 35.2         | 36.8         | +1.6       | +4.5% |
| Voc (V)                    | 0.65         | 0.68         | +0.03      | +4.6% |
| FF                         | 0.81         | 0.81         | 0.00       | 0.0%  |
| Pmax (mW/cm <sup>2</sup> ) | 18.5         | 20.2         | +1.7       | +9.2% |

### Surlignage

- **Vert** : Meilleure valeur pour la métrique
- **Rouge** : Valeur inférieure
- **Gris** : Valeurs égales

### Interprétation

- **% positif** : Amélioration de la simulation 2
- **% négatif** : Dégradation de la simulation 2
- **% proche de 0** : Différence négligeable

## 3.6 Onglet Diff config

L'onglet Diff config affiche les configurations JSON côte à côte.

### Affichage

- **Colonne gauche** : Configuration Simulation 1
- **Colonne droite** : Configuration Simulation 2
- **Surlignage jaune** : Paramètres différents
- **Texte normal** : Paramètres identiques

### Interprétation

- Identifiez rapidement les paramètres qui ont changé
  - Comprenez l'impact de chaque modification
  - Corrélerez les différences de configuration avec les différences de résultats
- 

## 4. Export de la comparaison

### 4.1 Screenshot

Pour exporter un screenshot d'un onglet :

1. Survolez le graphique
2. Cliquez sur l'icône de téléchargement (caméra)
3. L'image est téléchargée en PNG

### 4.2 Export PDF

Pour exporter un rapport PDF complet :

1. Cliquez sur le bouton **“Exporter PDF”**
2. Le rapport inclut :
  - Tableau récapitulatif
  - Graphiques J-V et P-V
  - Graphe radar
  - Différences de configuration
  - Analyse des différences

### 4.3 Export CSV des différences

Pour exporter les différences en CSV :

1. Cliquez sur le bouton **“Exporter CSV”**
  2. Le fichier inclut :
    - Métriques des deux simulations
    - Différences absolues
    - Différences relatives (%)
- 

## 5. Cas d'usage

### 5.1 Comparaison avant/après optimisation

**Objectif** : Évaluer l'impact d'une optimisation.

**Procédure** : 1. Lancez une simulation avec les paramètres initiaux 2. Lancez une optimisation IA 3. Sélectionnez la meilleure configuration de l'optimisation 4. Comparez les deux simulations

**Analyse** : - Vérifiez que l'efficacité a augmenté - Identifiez quels paramètres ont le plus d'impact - Comprenez les compromis (ex: Voc vs Jsc)

---

## 5.2 Comparaison de matériaux

**Objectif** : Comparer deux matériaux différents.

**Procédure** : 1. Créez une simulation avec le matériau A (ex: Si) 2. Créez une simulation avec le matériau B (ex: GaAs) 3. Comparez les deux simulations

**Analyse** : - Comparez les efficacités intrinsèques - Identifiez les avantages de chaque matériau - Comprenez les différences de Voc et Jsc

---

## 5.3 Comparaison de géométries

**Objectif** : Évaluer l'impact de l'épaisseur.

**Procédure** : 1. Créez une simulation avec une épaisseur fine 2. Créez une simulation avec une épaisseur épaisse 3. Comparez les deux simulations

**Analyse** : - Vérifiez l'impact sur Jsc (absorption) - Vérifiez l'impact sur FF (recombinaison) - Identifiez l'épaisseur optimale

---

## 5.4 Comparaison de dopages

**Objectif** : Évaluer l'impact du dopage.

**Procédure** : 1. Créez une simulation avec un dopage faible 2. Créez une simulation avec un dopage fort 3. Comparez les deux simulations

**Analyse** : - Vérifiez l'impact sur Voc (champ électrique) - Vérifiez l'impact sur FF (recombinaison) - Identifiez le dopage optimal

---

# 6. Bonnes pratiques

## 6.1 Simulations comparables

Pour une comparaison significative, assurez-vous que :

- **Même type de simulation** : Comparez des homojonctions avec des homojonctions
- **Mêmes conditions** : Même illumination, même température
- **Même résolution** : Même nombre de points de grille
- **Même plage de tension** : Même start/stop

## 6.2 Interprétation des différences

- **Petite différence (< 1%)** : Différence négligeable, peut être due au bruit numérique
- **Différence modérée (1-5%)** : Différence significative mais explicable
- **Grande différence (> 5%)** : Impact majeur d'un paramètre

## 6.3 Documentation

Documentez vos comparaisons :

- Notez les paramètres qui ont changé
  - Notez l'impact sur les résultats
  - Sauvegardez les rapports PDF pour référence future
- 

## 7. Dépannage

### 7.1 Simulations incompatibles

**Symptôme** : Les graphiques ne s'affichent pas correctement.

**Causes possibles** : - Types de simulation différents - Plages de tension différentes - Données manquantes

**Solutions** : 1. Vérifiez que les deux simulations sont du même type 2. Vérifiez que les deux simulations ont les mêmes sorties 3. Relancez les simulations avec des paramètres compatibles

### 7.2 Graphiques vides

**Symptôme** : Les onglets s'affichent mais les graphiques sont vides.

**Causes possibles** : - Simulations en cours - Simulations échouées - Données non disponibles

**Solutions** : 1. Attendez que les simulations soient terminées 2. Vérifiez le statut des simulations 3. Relancez les simulations si nécessaire

---

## Conclusion

La comparaison de simulations d'SPARC permet d'analyser les différences entre deux configurations de manière visuelle et quantitative.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Sélectionner deux simulations pour comparaison
- ✓ Interpréter les différents onglets (J-V, P-V, EQE, Radar, Tableau, Diff config)
- ✓ Comprendre l'impact des modifications de paramètres
- ✓ Exporter les résultats de comparaison

- ✓ Appliquer les bonnes pratiques pour des comparaisons significatives

#### Prochaines étapes

- [Optimisation IA](#) - Pour optimiser automatiquement et comparer avant/après
- [Historique](#) - Pour gérer vos simulations
- [Statistiques globales](#) - Pour analyser les tendances sur plusieurs simulations

## Statistiques globales

Ce guide documente le dashboard de statistiques globales d'SPARC, qui permet d'analyser les tendances et métriques de l'ensemble de vos simulations.

**Temps estimé :** 10 minutes

**Niveau :** Débutant

**Prérequis :** Au moins quelques simulations terminées

---

### Table des matières

1. [Accès aux statistiques](#)
  2. [Même triques affichées](#)
  3. [Filtres](#)
  4. [Export](#)
  5. [Interprétation](#)
  6. [Cas d'usage](#)
  7. [Dépannage](#)
- 

## 1. Accès aux statistiques

### 1.1 Navigation vers les statistiques

Depuis la page d'accueil :



1. Cliquez sur le bouton **“Statistiques”** dans la section principale OU
2. Cliquez sur **“Statistiques”** dans le menu de navigation OU
3. Naviguez directement vers l’URL : <http://localhost:5000/statistics>

## 1.2 Description de l’interface

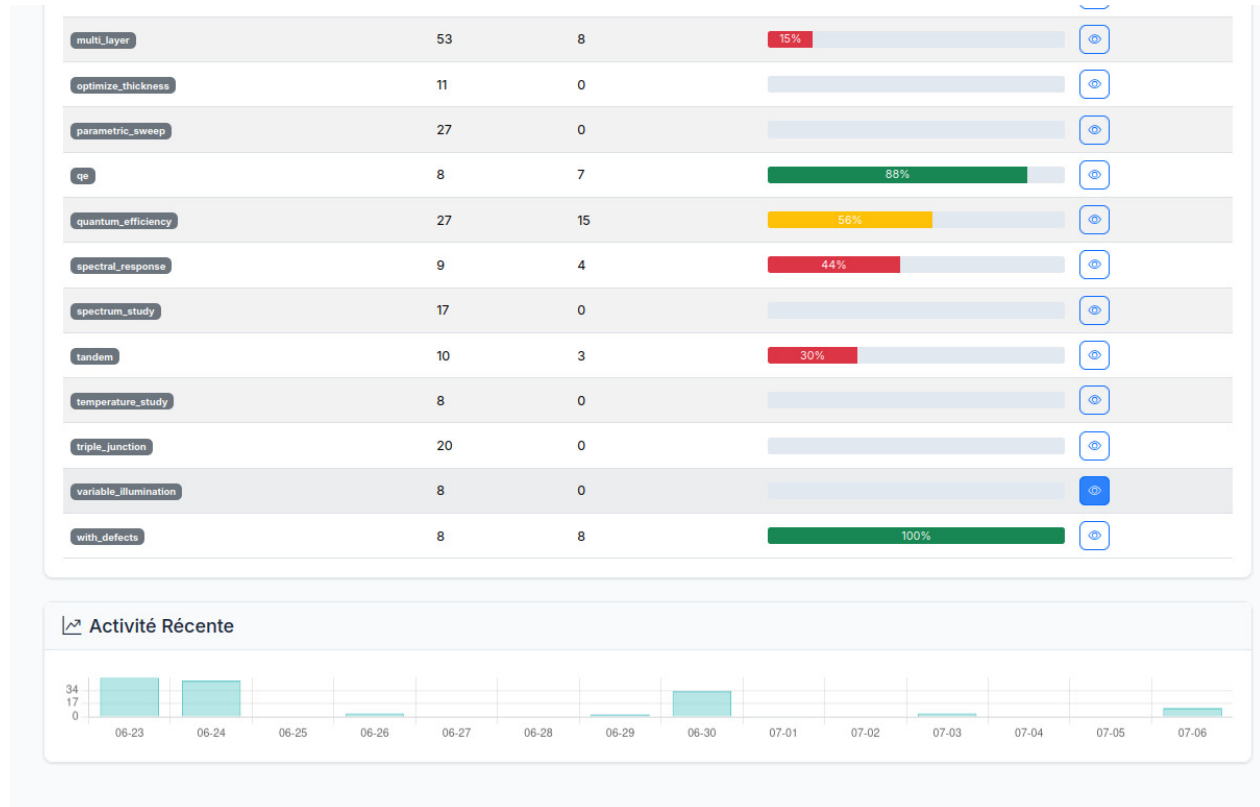
L’interface de statistiques affiche un dashboard avec plusieurs graphiques et tableaux :

- **Distribution des efficacités** : Histogramme  $\eta$
  - **Statistiques par type** : Nombre et efficacité moyenne par type
  - **Évolution temporelle** : Simulations par jour et tendance de l’efficacité
  - **Matériaux les utilisés** : Fréquence et efficacité par matériau
-

## 2. Métriques affichées

### 2.1 Distribution des efficacités

#### Affichage



- **Histogramme** : Distribution de  $\eta$  pour toutes les simulations
- **Axe X** : Efficacité  $\eta$  (%)
- **Axe Y** : Nombre de simulations
- **Courbe normale** : Distribution théorique pour comparaison

#### Statistiques affichées

- **Moyenne** : Efficacité moyenne
- **Médiane** : Efficacité médiane
- **Écart-type** : Dispersion des efficacités
- **Quartiles** : Q1 (25%), Q2 (50%), Q3 (75%)
- **Min/Max** : Efficacité minimale et maximale

#### Interprétation

- **Distribution centrée** : La plupart des simulations ont une efficacité similaire
- **Distribution large** : Grande variabilité dans les résultats
- **Distribution asymétrique** : Bias vers les hautes ou basses efficacités



## 2.2 Statistiques par type

### Affichage

- **Tableau** : Résumé par type de simulation
- **Colonnes** :
  - Type
  - Nombre de simulations
  - Efficacité moyenne
  - Efficacité maximale
  - Écart-type

### Exemple

| Type           | Nombre | Efficacité moyenne | Efficacité max | Écart-type |
|----------------|--------|--------------------|----------------|------------|
| homojunction   | 45     | 18.5%              | 22.3%          | 2.1%       |
| heterojunction | 23     | 16.2%              | 19.8%          | 1.8%       |
| tandem         | 12     | 24.1%              | 28.5%          | 2.5%       |

### Interprétation

- **Nombre élevé** : Type de simulation fréquemment utilisé
  - **Efficacité moyenne élevée** : Type performant
  - **Écart-type faible** : Résultats reproductibles
  - **Écart-type élevé** : Grande sensibilité aux paramètres
- 

## 2.3 Évolution temporelle

### Affichage

- **Graphique linéaire** : Simulations par jour
- **Graphique linéaire** : Tendance de l'efficacité moyenne
- **Axe X** : Date
- **Axe Y** : Nombre de simulations / Efficacité moyenne

### Interprétation

- **Tendance croissante** : Amélioration au fil du temps
  - **Tendance stable** : Résultats constants
  - **Tendance décroissante** : Problème potentiel
  - **Pics** : Jours d'activité intense
- 

## 2.4 Matériaux les utilisés

### Affichage

- **Graphique à barres** : Fréquence d'utilisation par matériau
- **Graphique à barres** : Efficacité moyenne par matériau

- **Axe X** : Matériau
- **Axe Y** : Nombre / Efficacité

#### *Interprétation*

- **Fréquence élevée** : Matériau populaire
  - **Efficacité élevée** : Matériau performant
  - **Combinaison** : Matériau populaire et performant
- 

### 3. Filtres

#### 3.1 Filtre par période

Pour filtrer par période temporelle :

1. Cliquez sur le sélecteur de date
2. Choisissez la plage :
  - Dernière semaine
  - Dernier mois
  - Dernier trimestre
  - Personnalisé
3. Les graphiques se mettent à jour

#### 3.2 Filtre par type

Pour filtrer par type de simulation :

1. Cliquez sur le menu déroulant "**Filtrer par type**"
2. Sélectionnez le type souhaité
3. Les graphiques se mettent à jour

#### 3.3 Filtre par matériau

Pour filtrer par matériau :

1. Cliquez sur le menu déroulant "**Filtrer par matériau**"
2. Sélectionnez le matériau souhaité
3. Les graphiques se mettent à jour

#### 3.4 Filtre par statut

Pour filtrer par statut de simulation :

1. Cliquez sur le menu déroulant "**Filtrer par statut**"
  2. Sélectionnez : Terminée, Échouée, ou Tous
  3. Les graphiques se mettent à jour
-

## 4. Export

### 4.1 Export CSV des données

Pour exporter les données brutes en CSV :

1. Cliquez sur “**Exporter CSV**”
2. Le fichier inclut :
  - Distribution des efficacités
  - Statistiques par type
  - Évolution temporelle
  - Statistiques par matériau

### 4.2 Export PNG des graphiques

Pour exporter un graphique individuel en PNG :

1. Survolez le graphique
2. Cliquez sur l’icône de téléchargement
3. L’image est téléchargée

### 4.3 Export PDF du rapport

Pour générer un rapport PDF complet :

1. Cliquez sur “**Générer PDF**”
  2. Le rapport inclut :
    - Résumé des statistiques
    - Tous les graphiques
    - Tableaux détaillés
    - Analyse des tendances
- 

## 5. Interprétation

### 5.1 Identifier les tendances

**Tendance croissante de l’efficacité** : - Indique une amélioration continue - Peut être due à l’optimisation - Peut être dû à l’apprentissage

**Tendance stable** : - Indique une maîtrise du processus - Résultats reproductibles - Procédure bien établie

**Tendance décroissante** : - Peut indiquer un problème - Vérifiez les paramètres - Consultez les logs

## 5.2 Détecter les anomalies

**Valeurs aberrantes** : - Simulations avec  $\eta$  très bas ou très haut - Vérifiez la configuration - Vérifiez qu'il n'y a pas d'erreur

**Pic d'activité** : - Jour avec beaucoup de simulations - Peut être une campagne d'optimisation - Peut être des tests

## 5.3 Suivre les progrès

**Amélioration de l'efficacité** : - Comparez l'efficacité moyenne sur différentes périodes - Calculez le pourcentage d'amélioration - Identifiez les facteurs de succès

---

## 6. Cas d'usage

### 6.1 Suivi de projet

**Objectif** : Suivre les progrès d'un projet de R&D.

**Procédure** : 1. Filtrer par période (ex: dernier mois) 2. Analyser la tendance de l'efficacité 3. Identifier les types de simulation les plus performants 4. Ajuster la stratégie en conséquence

### 6.2 Rapport d'activité

**Objectif** : Générer un rapport d'activité mensuel.

**Procédure** : 1. Filtrer par le mois concerné 2. Exporter le PDF du rapport 3. Inclure dans le rapport de projet 4. Présenter aux parties prenantes

### 6.3 Analyse de performance

**Objectif** : Analyser la performance de différents types de simulation.

**Procédure** : 1. Regarder les statistiques par type 2. Comparer les efficacités moyennes 3. Identifier les types les plus performants 4. Concentrer les efforts sur ces types

---

## 7. Dépannage

### 7.1 Données vides

**Symptôme** : Les graphiques s'affichent mais sont vides.

**Causes possibles** : - Aucune simulation terminée - Filtres trop restrictifs - Problème de connexion à la base

**Solutions** : 1. Vérifiez que vous avez des simulations terminées 2. Réinitialisez les filtres 3. Vérifiez la connexion à la base de données

## 7.2 Graphiques incorrects

**Symptôme** : Les graphiques semblent incorrects.

**Causes possibles** : - Données corrompues - Erreur de calcul - Problème d'affichage

**Solutions** : 1. Vérifiez les données brutes (export CSV) 2. Relancez les simulations concernées 3. Rafraîchissez la page

---

## Conclusion

Les statistiques globales d'SPARC permettent d'analyser les tendances et métriques de l'ensemble de vos simulations pour identifier les progrès, les anomalies, et les opportunités d'amélioration.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Accéder au dashboard de statistiques
- ✓ Interpréter les différentes métriques affichées
- ✓ Utiliser les filtres pour analyser des sous-ensembles
- ✓ Exporter les données et graphiques
- ✓ Identifier les tendances et anomalies
- ✓ Utiliser les statistiques pour le suivi de projet

### Prochaines étapes

- [Historique](#) - Pour gérer vos simulations
- [Comparaison](#) - Pour analyser les différences
- [Optimisation IA](#) - Pour améliorer vos résultats

## Assistant IA conversationnel

Ce guide documente l'assistant IA d'SPARC, un chatbot conversationnel qui utilise Ollama (local) ou Anthropic (cloud) pour répondre à vos questions en langage naturel.

**Temps estimé** : 15 minutes

**Niveau** : Débutant

**Prérequis** : Installation d'Ollama ou clé API Anthropic

---

## Table des matières

1. [Accès à l'assistant](#)
2. [Configuration de l'assistant](#)
3. [Utilisation de l'assistant](#)
4. [Types de questions](#)

5. [Historique des conversations](#)
  6. [Limitations](#)
  7. [Bonnes pratiques](#)
  8. [Dépannage](#)
- 

## 1. Accès à l'assistant

### 1.1 Navigation vers l'assistant

Depuis la page d'accueil :

1. Cliquez sur le bouton **"Assistant IA"** dans la section principale OU
2. Cliquez sur **"Chat"** dans le menu de navigation OU
3. Naviguez directement vers l'URL : `http://localhost:5000/chat`

### 1.2 Description de l'interface

L'interface de chat affiche :

- **Zone de chat** : Historique de la conversation
  - **Zone de saisie** : Champ pour entrer votre message
  - **Bouton Envoyer** : Pour envoyer votre message
  - **Configuration** : Pour choisir le provider et le modèle
- 

## 2. Configuration de l'assistant

### 2.1 Choix du provider

SPARC supporte deux providers :

| Provider         | Type  | Avantages                               | Inconvénients                 |
|------------------|-------|-----------------------------------------|-------------------------------|
| <b>Ollama</b>    | Local | Gratuit, privé, pas de clé API          | Nécessite installation locale |
| <b>Anthropic</b> | Cloud | Modèles performants, pas d'installation | Nécessite clé API, coûts      |

#### *Configuration Ollama (local)*

1. Sélectionnez **"Ollama"** dans le menu Provider
2. Configurez l'URL : `http://localhost:11434` (défaut)
3. Sélectionnez le modèle : `llama3.2`, `mistral`, etc.

#### *Configuration Anthropic (cloud)*

1. Sélectionnez **"Anthropic"** dans le menu Provider
2. Entrez votre clé API Anthropic
3. Sélectionnez le modèle : `claude-3-haiku`, `claude-3-sonnet`, `claude-3-opus`

## 2.2 Installation d'Ollama

### *Sur Linux*

```
curl -fsSL https://ollama.com/install.sh | sh
```

### *Sur macOS*

Téléchargez depuis <https://ollama.com/download> et installez le .dmg.

### *Sur Windows*

Téléchargez depuis <https://ollama.com/download> et installez l'exécutable.

## 2.3 Téléchargement des modèles

Une fois Ollama installé :

### *# Démarrer OLLama*

```
ollama serve
```

### *# Dans un autre terminal, télécharger un modèle*

```
ollama pull llama3.2
```

**Modèles recommandés** : - llama3.2 : Équilibré, rapide (~2-5 tok/s sur CPU) - mistral : Performant, rapide - codellama : Spécialisé code

---

## 3. Utilisation de l'assistant

### 3.1 Envoi d'un message

Pour poser une question :

1. Tapez votre question dans la zone de saisie
2. Cliquez sur **Envoyer** ou appuyez sur Entrée
3. L'assistant répond en quelques secondes

### 3.2 Contexte SPARC

L'assistant a accès au contexte d'SPARC :

- **Connaissance des paramètres** : Connaît la structure des configurations JSON
- **Connaissance des résultats** : Peut analyser vos résultats si fournis
- **Connaissance de la physique** : Connaît les concepts photovoltaïques de base

### 3.3 Exemples d'utilisation

#### *Aide à la configuration*

**Question** : "Comment configurer une homojonction silicium pour maximiser l'efficacité ?"

**Réponse typique :** L'assistant vous guidera sur les paramètres clés (dopage, épaisseurs) et leurs valeurs recommandées.

#### *Explication physique*

**Question :** "Pourquoi mon Voc est-il bas alors que mon Jsc est élevé ?"

**Réponse typique :** L'assistant expliquera les relations entre Voc, Jsc, et les paramètres physiques (dopage, recombinaison).

#### *Interprétation des résultats*

**Question :** "Comment interpréter ce diagramme de bandes ?"

**Réponse typique :** Si vous fournissez une description ou une image, l'assistant expliquera les éléments du diagramme.

#### *Suggestions d'optimisation*

**Question :** "Quels paramètres devrais-je modifier pour améliorer mon facteur de remplissage ?"

**Réponse typique :** L'assistant suggérera des modifications (dopage, épaisseurs) et expliquera l'impact attendu.

#### *Dépannage*

**Question :** "Ma simulation échoue avec une erreur de convergence. Que faire ?"

**Réponse typique :** L'assistant proposera des solutions (réduire nx, ajuster le dopage, etc.).

---

## 4. Types de questions

### 4.1 Questions recommandées

L'assistant est le plus efficace pour :

- **Aide à la configuration :** Comment configurer un type de simulation
- **Explication physique :** Concepts photovoltaïques
- **Interprétation des résultats :** Comprendre les graphiques et métriques
- **Suggestions d'optimisation :** Quels paramètres modifier
- **Dépannage :** Résoudre les problèmes courants

### 4.2 Questions hors domaine

L'assistant peut avoir du mal avec :

- **Questions très spécifiques :** Détails d'implémentation interne
- **Questions hors PV :** Sujets non liés au photovoltaïque



- **Calculs complexes** : Calculs numériques précis
  - **Code spécifique** : Debug de code Python complexe
- 

## 5. Historique des conversations

### 5.1 Sauvegarde automatique

Les conversations sont sauvegardées automatiquement dans la base de données SQLite.

### 5.2 Navigation dans l'historique

Pour voir les conversations précédentes :

1. Cliquez sur **"Historique"** dans le menu du chat
2. Sélectionnez une conversation précédente
3. La conversation s'affiche

### 5.3 Recherche

Pour rechercher dans l'historique :

1. Cliquez sur **"Rechercher"**
2. Entrez un mot-clé
3. Les conversations correspondantes s'affichent

### 5.4 Suppression

Pour supprimer une conversation :

1. Sélectionnez la conversation
  2. Cliquez sur **"Supprimer"**
  3. Confirmez la suppression
- 

## 6. Limitations

### 6.1 Connaissance limitée

L'assistant n'est pas omniscient :

- Connaissance limitée au domaine photovoltaïque
- Peut ne pas connaître les dernières avancées
- Peut faire des erreurs factuelles

### 6.2 Pas d'exécution de code

L'assistant ne peut pas :

- Exécuter du code Python

- Lancer des simulations
- Modifier vos fichiers
- Accéder à votre système de fichiers

### 6.3 Vérification recommandée

Toujours vérifier les réponses de l'assistant :

- Croisez avec la documentation
  - Testez les suggestions
  - Consultez les sources officielles
- 

## 7. Bonnes pratiques

### 7.1 Questions précises

Formulez des questions précises et contextuelles :

**Bien** : “Comment optimiser le dopage N d’une homojonction Si pour maximiser le Voc ?”

**Moins bien** : “Comment optimiser ma cellule ?”

### 7.2 Contexte fourni

Fournissez le contexte nécessaire :

- Type de simulation
- Paramètres actuels
- Résultats actuels
- Objectif spécifique

**Exemple** : “J’ai une homojonction Si avec  $\text{doping.n\_region}=1\text{e}17$  et  $\text{doping.p\_region}=1\text{e}15$ . Mon Voc est de 0.62V. Comment puis-je l’augmenter à 0.68V ?”

### 7.3 Vérification croisée

Vérifiez les réponses avec :

- La documentation SPARC
  - Les guides de simulation
  - La littérature scientifique
- 

## 8. Dépannage

### 8.1 Assistant non répondant

**Symptôme** : L’assistant ne répond pas.

**Causes possibles** : - Ollama non démarré - Modèle non téléchargé - Clé API invalide (Anthropic) - Problème de connexion

**Solutions** : 1. Vérifiez qu'Ollama est démarré : `ollama serve` 2. Vérifiez que le modèle est téléchargé : `ollama list` 3. Vérifiez la clé API Anthropic 4. Vérifiez la connexion internet

## 8.2 Réponses incohérentes

**Symptôme** : Les réponses semblent incorrectes.

**Solutions** : 1. Reformulez votre question avec plus de contexte 2. Spécifiez clairement votre problème 3. Vérifiez avec la documentation

## 8.3 Modèle non chargé

**Symptôme** : Erreur "model not found".

**Solutions** : 1. Téléchargez le modèle : `ollama pull llama3.2` 2. Sélectionnez un modèle disponible 3. Vérifiez l'orthographe du nom du modèle

---

## Conclusion

L'assistant IA d'SPARC est un outil puissant pour obtenir de l'aide en langage naturel sur la configuration, l'interprétation, et l'optimisation de vos simulations photovoltaïques.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Configurer l'assistant (Ollama ou Anthropic)
- ✓ Poser des questions efficaces
- ✓ Utiliser le contexte SPARC
- ✓ Gérer l'historique des conversations
- ✓ Comprendre les limitations
- ✓ Vérifier les réponses

### Prochaines étapes

- [Guide homojonction](#) - Pour approfondir vos connaissances
- [Optimisation IA](#) - Pour optimiser automatiquement
- [Glossaire](#) - Pour la terminologie technique

## Validation IEEE/ASTM

Ce guide documente la fonctionnalité de validation IEEE/ASTM d'SPARC, qui permet de vérifier la conformité de vos simulations aux standards internationaux IEEE et ASTM pour les mesures photovoltaïques.

**Temps estimé :** 15 minutes

**Niveau :** Intermédiaire

**Prérequis :** Simulation terminée avec résultats complets

---

## Table des matières

1. [Introduction aux standards](#)
  2. [Accès à la validation](#)
  3. [Tests de conformité](#)
  4. [Interprétation des résultats](#)
  5. [Export du rapport](#)
  6. [Bonnes pratiques](#)
  7. [Dépannage](#)
- 

## 1. Introduction aux standards

### 1.1 IEEE Standards

**IEEE 1735** : Standard for Photovoltaic (PV) Module Performance Testing and Energy Rating

**Points clés** : - Conditions de test standard (STC) : 1000 W/m<sup>2</sup>, 25°C, AM1.5G - Méthodes de mesure de l'efficacité - Incertitudes de mesure - Rapport de performance

### 1.2 ASTM Standards

**ASTM E948** : Standard Test Method for Electrical Performance of Photovoltaic Cells Using Reference Cells Under Simulated Sunlight

**ASTM E1036** : Standard Test Methods for Electrical Performance of Nonconcentrator Terrestrial Photovoltaic Modules and Arrays Using Reference Cells

**Points clés** : - Calibration des cellules de référence - Conditions d'illumination - Mesure de la caractéristique I-V - Correction de température

---

## 2. Accès à la validation

### 2.1 Navigation vers la validation

Depuis la page d'accueil :

1. Cliquez sur le bouton **“Validation”** dans la section principale OU
2. Cliquez sur **“Validation”** dans le menu de navigation OU
3. Naviguez directement vers l'URL : <http://localhost:5000/validation>

## 2.2 Sélection de la simulation

Pour valider une simulation :

1. Sélectionnez la simulation à valider dans la liste déroulante
  2. Cliquez sur “**Valider**”
  3. Les tests de conformité sont exécutés
- 

## 3. Tests de conformité

### 3.1 Test des conditions STC

**Objectif** : Vérifier que les conditions de simulation correspondent aux STC.

**Paramètres vérifiés** : - **Flux de photons** :  $2.5 \times 10^{17} \text{ photons} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  ( $\approx 1000 \text{ W/m}^2$ ) -  
**Température** : 298 K (25°C) - **Spectre** : AM1.5G

**Critère de succès** : - Flux :  $\pm 5\%$  de la valeur STC - Température :  $\pm 2^\circ\text{C}$  de 25°C

**Résultat** : - ✓ Conforme : Conditions STC respectées - ⚠ Avertissement : Conditions légèrement hors STC - ✗ Non conforme : Conditions significativement hors STC

---

### 3.2 Test de la courbe I-V

**Objectif** : Vérifier la qualité de la courbe I-V.

**Critères vérifiés** : - **Monotonie** : La courbe doit être monotone entre 0V et Voc - **Lissage** : Pas d'oscillations excessives - **Plausibilité** : Voc et Jsc dans des plages raisonnables

**Critère de succès** : - Monotonie : Pas de changement de signe de la pente - Lissage : Variance locale < seuil - Plausibilité : Voc et Jsc dans les plages attendues

**Résultat** : - ✓ Conforme : Courbe I-V de bonne qualité - ⚠ Avertissement : Courbe I-V avec anomalies mineures - ✗ Non conforme : Courbe I-V avec anomalies majeures

---

### 3.3 Test des métriques

**Objectif** : Vérifier que les métriques sont physiquement plausibles.

**Critères vérifiés** : - **Efficacité  $\eta$**  :  $0\% < \eta < 30\%$  (pour Si) - **Jsc** :  $0 < J_{sc} < 50 \text{ mA/cm}^2$  (pour Si) - **Voc** :  $0.3\text{V} < V_{oc} < 0.8\text{V}$  (pour Si) - **FF** :  $0.5 < FF < 0.9$

**Critère de succès** : - Toutes les métriques dans les plages attendues

**Résultat** : - ✓ Conforme : Métriques physiquement plausibles - ⚠ Avertissement : Une métrique hors plage - ✗ Non conforme : Plusieurs métriques hors plage

---

### 3.4 Test de recombinaison

**Objectif :** Vérifier que les profils de recombinaison sont physiquement raisonnables.

**Critères vérifiés :** - **Recombinaison totale** : Positive dans tout le volume -

**Recombinaison SRH** : Positive dans tout le volume - **Recombinaison radiative** : Positive dans tout le volume

**Critère de succès :** - Tous les profils de recombinaison positifs

**Résultat :** - ✓Conforme : Profils de recombinaison physiques - ⚠ Avertissement : Valeurs négatives mineures - ✗Non conforme : Valeurs négatives significatives

---

## 4. Interprétation des résultats

### 4.1 Rapport de validation

Le rapport de validation affiche :

- **Statut global** : Conforme / Avertissement / Non conforme
- **Détail par test** : Résultat de chaque test
- **Recommandations** : Actions suggérées
- **Score de conformité** : Pourcentage de tests réussis

### 4.2 Statut global

| Statut               | Description                               | Action                      |
|----------------------|-------------------------------------------|-----------------------------|
| <b>Conforme</b>      | Tous les tests réussis                    | Aucune action requise       |
| <b>Avertissement</b> | Tests réussis avec avertissements mineurs | Vérifier les avertissements |
| <b>Non conforme</b>  | Un ou plusieurs tests échoués             | Corriger les problèmes      |

### 4.3 Score de conformité

Le score de conformité est calculé comme :

Score = (Tests réussis / Total tests) × 100%

**Interprétation :** - 90-100% : Excellente conformité - 70-89% : Conformité acceptable - 50-69% : Conformité marginale - < 50% : Conformité insuffisante

---

## 5. Export du rapport

### 5.1 Export PDF

Pour exporter le rapport de validation en PDF :

1. Cliquez sur **“Exporter PDF”**
2. Le rapport inclut :
  - Résumé de la validation
  - Résultats détaillés par test
  - Recommandations
  - Score de conformité
  - Graphiques de support

## 5.2 Export JSON

Pour exporter les résultats de validation en JSON :

1. Cliquez sur **“Exporter JSON”**
2. Le fichier inclut :
  - Résultats de chaque test
  - Métriques calculées
  - Recommandations
  - Timestamp

## 5.3 Export pour publication

Pour un rapport prêt pour publication :

1. Cliquez sur **“Export publication”**
  2. Le rapport inclut :
    - Format conforme aux standards IEEE/ASTM
    - Tableaux et figures prêts pour publication
    - Méthodologie détaillée
    - Incertitudes estimées
- 

# 6. Bonnes pratiques

## 6.1 Validation avant publication

Toujours valider vos simulations avant :

- Publication dans un journal
- Présentation à une conférence
- Rapport de projet
- Comparaison avec des données expérimentales

## 6.2 Correction des problèmes

En cas de non-conformité :

1. Identifiez le test échoué

2. Comprenez la cause du problème
3. Corrigez la configuration
4. Relancez la simulation
5. Revalidez

### 6.3 Documentation

Documentez vos validations :

- Sauvegardez les rapports PDF
  - Notez les corrections apportées
  - Gardez un historique des validations
- 

## 7. Dépannage

### 7.1 Validation échoue systématiquement

**Symptôme** : Toutes les simulations échouent la validation.

**Causes possibles** : - Conditions de simulation incorrectes - Problème de configuration par défaut - Bug dans le module de validation

**Solutions** : 1. Vérifiez les conditions STC (flux, température) 2. Comparez avec une configuration de référence 3. Consultez les logs pour plus de détails

### 7.2 Avertissements persistants

**Symptôme** : Avertissements mineurs mais persistants.

**Solutions** : 1. Vérifiez si les avertissements sont critiques 2. Si non critiques, documentez-les 3. Si critiques, corrigez la configuration

---

## Conclusion

La validation IEEE/ASTM d'SPARC permet de vérifier la conformité de vos simulations aux standards internationaux, assurant la qualité et la reproductibilité de vos résultats.

### Ce que vous avez appris

- ✓ Comprendre les standards IEEE et ASTM
- ✓ Exécuter les tests de conformité
- ✓ Interpréter les résultats de validation
- ✓ Exporter les rapports de validation
- ✓ Corriger les problèmes de conformité
- ✓ Documenter les validations



## Prochaines étapes

- [Guide homojonction](#) - Pour créer des simulations conformes
- [Comparaison](#) - Pour comparer avec des données expérimentales
- [Export des résultats](#) - Pour préparer la publication

## Documentation de référence

Cette section contient la documentation technique de référence pour les utilisateurs avancés d'SPARC.

---

### Contenu de la référence

#### Paramètres de simulation

[Paramètres de simulation](#) →

Description complète de tous les paramètres de configuration disponibles dans SPARC, incluant : - Paramètres géométriques - Paramètres de dopage - Paramètres d'illumination - Paramètres de tension - Paramètres de sortie

#### Types de simulation

[Types de simulation](#) →

Liste complète des 20+ types de simulation disponibles dans SPARC, incluant : - Homojonction - Hétérojonction - Tandem - EQE - C-V - Et bien d'autres...

#### API REST

[API REST](#) →

Documentation complète de l'API REST d'SPARC, incluant : - Endpoints disponibles - Méthodes HTTP - Paramètres de requête - Corps des requêtes - Réponses - Exemples d'utilisation

#### Fichiers de configuration

[Fichiers de configuration](#) →

Documentation du format de configuration JSON, incluant : - Structure des fichiers - Schémas de validation - Exemples de configurations - Bonnes pratiques

#### Commandes CLI

[Commandes CLI](#) →

Documentation complète de la ligne de commande d'SPARC, incluant : - Commande principale et arguments - Options et flags - Types de simulation disponibles - Format de sortie - Codes de retour - Exemples de configurations

---

## Pour qui est cette section ?

Cette section est destinée aux utilisateurs avancés qui souhaitent :

- Comprendre en détail les paramètres de simulation
  - Explorer tous les types de simulation disponibles
  - Automatiser SPARC via l'API REST ou le CLI
  - Créer des configurations personnalisées avancées
- 

## Parcours recommandé

### Pour les développeurs

1. [API REST](#) - Pour intégrer SPARC dans vos workflows
2. [Fichiers de configuration](#) - Pour créer des configurations avancées

### Pour les chercheurs

1. [Paramètres de simulation](#) - Pour comprendre en détail les paramètres
2. [Types de simulation](#) - Pour découvrir tous les types disponibles

### Pour les ingénieurs

1. [Types de simulation](#) - Pour choisir le bon type
  2. [Paramètres de simulation](#) - Pour optimiser les paramètres
- 

## Besoin d'aide ?

- [Glossaire](#) - Terminologie technique
- [FAQ](#) - Questions fréquentes
- [Assistant IA](#) - Posez vos questions en langage naturel

## Référence des commandes CLI

Cette section documente en détail toutes les commandes, options et flags disponibles pour l'utilisation d'SPARC en mode ligne de commande.

---

## Table des matières

1. [Commande principale](#)

2. [Options et flags](#)
3. [Types de simulation disponibles](#)
4. [Format de sortie](#)
5. [Codes de retour](#)
6. [Exemples de configurations](#)

---

## 1. Commande principale

### 1.1 Syntaxe

```
python main.py [OPTIONS]
```

### 1.2 Description

main.py est le point d'entrée principal pour exécuter des simulations SPARC en mode CLI. Il accepte un fichier de configuration JSON et génère les résultats dans un répertoire spécifié.

### 1.3 Arguments obligatoires

| Argument | Type   | Description                                  |
|----------|--------|----------------------------------------------|
| --config | string | Chemin vers le fichier de configuration JSON |

### 1.4 Arguments optionnels

| Argument       | Type   | Description                                       |
|----------------|--------|---------------------------------------------------|
| --output       | string | Répertoire de sortie pour les résultats           |
| --type         | string | Type de simulation (si non spécifié dans le JSON) |
| --profile      | flag   | Activer le profiling                              |
| --verbose      | flag   | Mode verbeux                                      |
| --quiet        | flag   | Mode silencieux                                   |
| --list-types   | flag   | Lister les types de simulation disponibles        |
| --show-example | string | Afficher un exemple de configuration pour un type |

---

## 2. Options et flags

### 2.1 --config

**Type** : string (chemin de fichier)

**Obligatoire** : Oui

**Description** : Chemin vers le fichier de configuration JSON.

**Exemple** :

```
python main.py --config config.json
```

**Notes** : - Le fichier doit être au format JSON valide - Le chemin peut être relatif ou absolu - Le fichier doit contenir tous les champs obligatoires

---

## 2.2 `--output`

**Type** : string (chemin de répertoire)

**Obligatoire** : Non (défaut : `./results/`)

**Description** : Répertoire de sortie pour les résultats.

**Exemple** :

```
python main.py --config config.json --output results/
```

**Notes** : - Le répertoire sera créé s'il n'existe pas - Le chemin peut être relatif ou absolu - Les fichiers existants seront écrasés

---

## 2.3 `--type`

**Type** : string

**Obligatoire** : Non (si spécifié dans le JSON)

**Description** : Type de simulation à exécuter.

**Exemple** :

```
python main.py --config config.json --type homojunction
```

**Valeurs possibles** : Voir section 3

**Notes** : - Si spécifié dans le JSON, ce flag est ignoré - Si non spécifié dans le JSON, ce flag est obligatoire

---

## 2.4 `--profile`

**Type** : flag

**Obligatoire** : Non

**Description** : Activer le profiling pour analyser les performances.

**Exemple** :

```
python main.py --config config.json --profile
```

**Notes** : - Génère un fichier `profile.prof` dans le répertoire de sortie - Peut être analysé avec `snakeviz` ou `pstats`

---

## 2.5 `--verbose`

**Type** : flag

**Obligatoire** : Non

**Description** : Activer le mode verbeux (plus de logs).

**Exemple** :

```
python main.py --config config.json --verbose
```

**Notes** : - Affiche des informations détaillées pendant l'exécution - Utile pour le dépannage

---

## 2.6 `--quiet`

**Type** : flag

**Obligatoire** : Non

**Description** : Activer le mode silencieux (moins de logs).

**Exemple** :

```
python main.py --config config.json --quiet
```

**Notes** : - N'affiche que les erreurs critiques - Utile pour les scripts automatisés

---

## 2.7 `--list-types`

**Type** : flag

**Obligatoire** : Non

**Description** : Lister les types de simulation disponibles.

**Exemple** :

```
python main.py --list-types
```

**Notes** : - N'exécute pas de simulation - Affiche la liste des types disponibles

---

## 2.8 `--show-example`

**Type** : string

**Obligatoire** : Non

**Description** : Afficher un exemple de configuration pour un type spécifique.

**Exemple** :

```
python main.py --show-example homojunction
```

**Notes :** - N'exécute pas de simulation - Affiche un JSON valide pour le type spécifié - Utile comme point de départ

---

### 3. Types de simulation disponibles

#### 3.1 Liste complète

| Type                  | Description               | Complexité    |
|-----------------------|---------------------------|---------------|
| homojunction          | Jonction p-n 1D           | Basique       |
| heterojunction        | Hétérojonction 1D         | Intermédiaire |
| graded_heterojunction | Hétérojonction à gradient | Intermédiaire |
| with_defects          | Avec défauts SRH          | Intermédiaire |
| tandem                | Tandem 2 jonctions        | Avancé        |
| parametric_sweep      | Balayage paramétrique     | Avancé        |
| quantum_efficiency    | EQE spectrale             | Intermédiaire |
| capacitance_voltage   | C-V différentielle        | Intermédiaire |
| luminescence          | PL / EL                   | Intermédiaire |
| grain_boundary_2d     | Joint de grain 2D         | Avancé        |
| quantum_well          | Puits quantique           | Avancé        |
| mos_structure         | Structure MOS             | Intermédiaire |
| schottky_diode        | Diode Schottky            | Intermédiaire |
| pin_structure         | Structure PIN             | Intermédiaire |
| tunnel_junction       | Jonction tunnel           | Avancé        |
| multi_junction        | Multi-jonctions >2        | Avancé        |
| light_trapping        | Piégeage de lumière       | Avancé        |
| surface_recombination | Recombinaison de surface  | Intermédiaire |
| thermal_effects       | Effets thermiques         | Avancé        |
| transient_simulation  | Simulation transitoire    | Avancé        |

#### 3.2 Description détaillée

##### *homojunction*

Structure de jonction p-n 1D avec un seul matériau.

**Paramètres spécifiques :** - `materials.active` : Matériau semi-conducteur - `geometry.thickness_n` : Épaisseur région N - `geometry.thickness_p` : Épaisseur région P - `doping.n_region` : Dopage région N - `doping.p_region` : Dopage région P

##### *heterojunction*

Structure de jonction avec deux matériaux différents.

**Paramètres spécifiques** : - materials.n\_material : Matériau N - materials.p\_material : Matériau P - contacts.front\_work\_function : Work function contact avant - contacts.back\_work\_function : Work function contact arrière

### *tandem*

Structure tandem à deux jonctions empilées.

**Paramètres spécifiques** : - top\_cell.material : Matériau top cell - top\_cell.thickness : Épaisseur top cell - top\_cell.doping : Dopage top cell - bottom\_cell.material : Matériau bottom cell - bottom\_cell.thickness : Épaisseur bottom cell - bottom\_cell.doping : Dopage bottom cell - optical\_coupling.type : Type de couplage - optical\_coupling.cutoff\_wavelength : Longueur d'onde de coupure

---

## 4. Format de sortie

### 4.1 Structure des fichiers de sortie

Le répertoire de sortie contient les fichiers suivants :

```
output_dir/
├── iv_curve.png # Courbe I-V
├── band_diagram.png # Diagramme de bandes
├── electron_density.png # Densité d'électrons
├── hole_density.png # Densité de trous
├── results.json # Données brutes
├── summary.txt # Résumé textuel
└── profile.prof # Profiling (si --profile)
```

### 4.2 Noms de fichiers générés

| Fichier              | Description            | Condition               |
|----------------------|------------------------|-------------------------|
| iv_curve.png         | Courbe courant-tension | Toujours                |
| band_diagram.png     | Diagramme de bandes    | Si demandé dans outputs |
| electron_density.png | Densité d'électrons    | Si demandé dans outputs |
| hole_density.png     | Densité de trous       | Si demandé dans outputs |
| results.json         | Données brutes JSON    | Toujours                |
| summary.txt          | Résumé textuel         | Toujours                |
| profile.prof         | Profiling              | Si -profile             |

### 4.3 Formats disponibles

| Format | Extension | Description               |
|--------|-----------|---------------------------|
| PNG    | .png      | Image bitmap (graphiques) |
| JSON   | .json     | Données structurées       |
| TXT    | .txt      | Texte brut (résumé)       |

| Format | Extension | Description      |
|--------|-----------|------------------|
| PROF   | .prof     | Profiling Python |

---

## 5. Codes de retour

### 5.1 Codes de retour standard

| Code | Signification           | Action                   |
|------|-------------------------|--------------------------|
| 0    | Succès                  | Aucune action requise    |
| 1    | Erreur de configuration | Vérifiez le JSON         |
| 2    | Erreur de simulation    | Vérifiez les paramètres  |
| 3    | Erreur de sortie        | Vérifiez les permissions |

### 5.2 Messages d'erreur

#### *Code 1 : Erreur de configuration*

**Messages possibles** : - Configuration file not found - Invalid JSON - Missing required field

**Solutions** : - Vérifiez que le fichier existe - Validez le JSON avec jq - Ajoutez les champs manquants

#### *Code 2 : Erreur de simulation*

**Messages possibles** : - Simulation failed to converge - Invalid parameters - Material not found

**Solutions** : - Réduisez nx - Vérifiez les paramètres - Vérifiez que le matériau existe

#### *Code 3 : Erreur de sortie*

**Messages possibles** : - Output directory not writable - Insufficient disk space

**Solutions** : - Changez les permissions - Libérez de l'espace disque

---

## 6. Exemples de configurations

### 6.1 Homojonction

```
{
 "simulation_name": "homo_si_standard",
 "simulation_type": "homojunction",
 "materials": {
 "active": "Si"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 1e-4,
```



```

 "thickness_p": 3e-4,
 "nx": 100
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e17,
 "p_region": 1e15
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.7,
 "points": 50
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density",
"hole_density"],
 "format": "both"
 }
}

```

## 6.2 Hétérojonction

```

{
 "simulation_name": "hetero_cdte_cds_standard",
 "simulation_type": "heterojunction",
 "materials": {
 "n_material": "CdS",
 "p_material": "CdTe"
 },
 "geometry": {
 "thickness_n": 1e-5,
 "thickness_p": 5e-4,
 "nx": 150
 },
 "doping": {
 "n_region": 1e18,
 "p_region": 1e15
 },
 "contacts": {
 "front_work_function": 4.5,
 "back_work_function": 5.7
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 0.9,
 "points": 50
 },
}

```

```

 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 10000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "electron_density",
"hole_density"],
 "format": "both"
 }
}

```

### 6.3 Tandem

```

{
 "simulation_name": "tandem_si_si_standard",
 "simulation_type": "tandem",
 "top_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 1e-4,
 "doping": 1e17
 },
 "bottom_cell": {
 "material": "Si",
 "thickness": 3e-4,
 "doping": 1e15
 },
 "optical_coupling": {
 "type": "filter",
 "cutoff_wavelength": 700
 },
 "voltages": {
 "start": 0.0,
 "stop": 1.4,
 "points": 100
 },
 "illumination": {
 "enabled": true,
 "photon_flux": 2.5e17,
 "absorption_coefficient": 5000
 },
 "outputs": {
 "plots": ["iv_curve", "band_diagram", "spectral_response",
"current_matching"],
 "format": "both"
 }
}

```

---

## Conclusion

Cette référence documente toutes les commandes et options disponibles pour le mode CLI d'SPARC. Pour des exemples d'utilisation pratique, consultez le [Guide d'utilisation CLI](#) et les [Exemples de scripts CLI](#).

## Annexes

Cette section contient des informations complémentaires pour approfondir votre compréhension d'SPARC et du photovoltaïque.

---

### Contenu des annexes

#### Théorie physique

[Théorie physique →](#)

Concepts photovoltaïques fondamentaux : - Structure de bande d'énergie - Jonction p-n - Génération et recombinaison - Transport de charges - Équations de Poisson et de continuité

#### Glossaire

[Glossaire →](#)

Terminologie technique et définitions : - Termes photovoltaïques - Termes de simulation - Termes d'optimisation - Abréviations courantes

#### FAQ

[FAQ →](#)

Questions fréquentes et solutions : - Questions sur l'installation - Questions sur la simulation - Questions sur l'optimisation - Questions sur les résultats

#### Exemples de scripts CLI

[Exemples de scripts CLI →](#)

Exemples de scripts pour automatiser SPARC en mode CLI : - Scripts simples - Batch processing - Scripts avec paramètres variables - Scripts d'automatisation - Scripts de comparaison - Scripts d'optimisation

---

### Pour qui est cette section ?

Cette section est destinée à tous les utilisateurs qui souhaitent :

- Approfondir leurs connaissances en physique photovoltaïque

- Comprendre la terminologie technique
  - Trouver des réponses aux questions fréquentes
  - Résoudre des problèmes courants
- 

## Parcours recommandé

### Pour les débutants

1. [Glossaire](#) - Pour comprendre la terminologie
2. [FAQ](#) - Pour trouver des réponses rapides

### Pour les utilisateurs intermédiaires

1. [Théorie physique](#) - Pour comprendre les concepts sous-jacents
2. [Glossaire](#) - Pour approfondir la terminologie

### Pour les utilisateurs avancés

1. [Théorie physique](#) - Pour approfondir la physique
  2. [FAQ](#) - Pour résoudre des problèmes complexes
- 

## Besoin d'aide ?

- [Assistant IA](#) - Posez vos questions en langage naturel
- [Signaler un problème](#) - Issues GitHub

## Exemples de scripts CLI

Cette section contient des exemples de scripts prêts à l'emploi pour automatiser SPARC en mode CLI.

---

## Table des matières

1. [Script simple](#)
  2. [Script batch processing](#)
  3. [Script avec paramètres variables](#)
  4. [Script d'automatisation](#)
  5. [Script de comparaison](#)
  6. [Script d'optimisation](#)
-

## 1. Script simple

### 1.1 Script Bash

```
#!/bin/bash
```

```
Script simple pour lancer une simulation SPARC
```

```
CONFIG_FILE="config.json"
OUTPUT_DIR="results/"
```

```
echo "Lancement de la simulation avec $CONFIG_FILE..."
python main.py --config "$CONFIG_FILE" --output "$OUTPUT_DIR"
```

```
if [$? -eq 0]; then
 echo "Simulation terminée avec succès !"
 echo "Résultats dans $OUTPUT_DIR"
else
 echo "Erreur lors de la simulation"
 exit 1
fi
```

### 1.2 Utilisation

```
chmod +x simple_simulation.sh
./simple_simulation.sh
```

---

## 2. Script batch processing

### 2.1 Script Bash pour plusieurs configurations

```
#!/bin/bash
```

```
Script pour traiter plusieurs configurations en série
```

```
CONFIG_DIR="configs/"
OUTPUT_DIR="results/"
```

```
Créer le répertoire de sortie
mkdir -p "$OUTPUT_DIR"
```

```
Traiter chaque fichier de configuration
```

```
for config in "$CONFIG_DIR"/*.json; do
 if [-f "$config"]; then
 name=$(basename "$config" .json)
 echo "Traitement de $config..."
```

```
Créer un sous-répertoire pour cette simulation
sim_output="$OUTPUT_DIR/$name"
mkdir -p "$sim_output"
```

```

 # Lancer la simulation
 python main.py --config "$config" --output "$sim_output"

 if [$? -eq 0]; then
 echo "✓ $name terminée"
 else
 echo "X $name échouée"
 fi
fi
done

echo "Toutes les simulations terminées"

```

## 2.2 Script Bash pour traitement parallèle

```
#!/bin/bash
```

```
Script pour traiter plusieurs configurations en parallèle
```

```

CONFIG_DIR="configs/"
OUTPUT_DIR="results/"
MAX_JOBS=4 # Nombre maximum de simulations en parallèle

mkdir -p "$OUTPUT_DIR"

Fonction pour lancer une simulation
run_simulation() {
 config=$1
 name=$(basename "$config" .json)
 sim_output="$OUTPUT_DIR/$name"
 mkdir -p "$sim_output"

 python main.py --config "$config" --output "$sim_output" --quiet

 if [$? -eq 0]; then
 echo "✓ $name terminée"
 else
 echo "X $name échouée"
 fi
}

export -f run_simulation
export OUTPUT_DIR

Lancer les simulations en parallèle
find "$CONFIG_DIR" -name "*.json" -print0 | \
 xargs -0 -P "$MAX_JOBS" -I {} bash -c 'run_simulation "$@"' _ {}

echo "Toutes les simulations terminées"

```

## 2.3 Utilisation

```
chmod +x batch_processing.sh
./batch_processing.sh
```

---

## 3. Script avec paramètres variables

### 3.1 Script Python pour modifier des paramètres

```
#!/usr/bin/env python3
"""
Script pour modifier des paramètres et lancer une simulation
"""

import json
import subprocess
import sys

def modify_and_run(config_file, modifications, output_dir):
 """
 Modifie une configuration et lance la simulation

 Args:
 config_file: Chemin vers le fichier de configuration
 modifications: Dictionnaire des modifications à appliquer
 output_dir: Répertoire de sortie
 """
 # Charger la configuration
 with open(config_file, 'r') as f:
 config = json.load(f)

 # Appliquer les modifications
 for key, value in modifications.items():
 # Support pour les clés imbriquées (ex: doping.n_region)
 keys = key.split('.')
 obj = config
 for k in keys[:-1]:
 if k not in obj:
 obj[k] = {}
 obj = obj[k]
 obj[keys[-1]] = value

 # Sauvegarder la configuration modifiée
 modified_config = config_file.replace('.json', '_modified.json')
 with open(modified_config, 'w') as f:
 json.dump(config, f, indent=2)

 print(f"Configuration modifiée sauvegardée dans {modified_config}")
```

```

Lancer la simulation
print("Lancement de la simulation...")
result = subprocess.run(
 ['python', 'main.py', '--config', modified_config, '--output',
output_dir],
 capture_output=True,
 text=True
)

if result.returncode == 0:
 print("✓ Simulation terminée avec succès")
 print(result.stdout)
else:
 print("✗ Simulation échouée")
 print(result.stderr)
 sys.exit(1)

Exemple d'utilisation
if __name__ == "__main__":
 modifications = {
 'doping.n_region': 1e18,
 'doping.p_region': 1e16,
 'geometry.nx': 150
 }

 modify_and_run('config.json', modifications, 'results/')

```

### 3.2 Script Python pour balayage paramétrique

```

#!/usr/bin/env python3
"""
Script pour un balayage paramétrique sur un paramètre
"""

import json
import subprocess
import os

def parametric_sweep(config_file, param_name, values, output_dir):
 """
 Effectue un balayage paramétrique

 Args:
 config_file: Fichier de configuration de base
 param_name: Nom du paramètre à faire varier (ex: doping.n_region)
 values: Liste des valeurs à tester
 output_dir: Répertoire de sortie
 """
 # Charger la configuration de base
 with open(config_file, 'r') as f:
 base_config = json.load(f)

```



```

Créer le répertoire de sortie
os.makedirs(output_dir, exist_ok=True)

Pour chaque valeur
for i, value in enumerate(values):
 # Copier la configuration
 config = base_config.copy()

 # Modifier le paramètre
 keys = param_name.split('.')
 obj = config
 for k in keys[:-1]:
 obj = obj[k]
 obj[keys[-1]] = value

 # Sauvegarder la configuration
 sim_config = os.path.join(output_dir, f'config_{i}.json')
 with open(sim_config, 'w') as f:
 json.dump(config, f, indent=2)

 # Créer le répertoire de sortie pour cette simulation
 sim_output = os.path.join(output_dir, f'sim_{i}')
 os.makedirs(sim_output, exist_ok=True)

 # Lancer la simulation
 print(f"Simulation {i+1}/{len(values)}: {param_name} = {value}")
 result = subprocess.run(
 ['python', 'main.py', '--config', sim_config, '--output',
 sim_output, '--quiet'],
 capture_output=True
)

 if result.returncode == 0:
 print(f"✓ Simulation {i+1} terminée")
 else:
 print(f"✗ Simulation {i+1} échouée")

 print(f"Balayage terminé. Résultats dans {output_dir}")

Exemple d'utilisation
if __name__ == "__main__":
 # Balayage sur le dopage N de 1e15 à 1e19
 values = [1e15, 1e16, 1e17, 1e18, 1e19]
 parametric_sweep('config.json', 'doping.n_region', values,
'sweep_results/')

```

### 3.3 Utilisation

```
chmod +x modify_and_run.py
python3 modify_and_run.py
```

```
chmod +x parametric_sweep.py
python3 parametric_sweep.py
```

---

## 4. Script d'automatisation

### 4.1 Script pour Cron (Linux)

```
#!/bin/bash
Script pour exécution automatique via cron

Chemins
SPARC_DIR="/path/to/sparc"
CONFIG_FILE="$SPARC_DIR/config.json"
OUTPUT_DIR="$SPARC_DIR/auto_results/$(date +%Y%m%d_%H%M%S)"

Créer le répertoire de sortie
mkdir -p "$OUTPUT_DIR"

Se déplacer dans le répertoire SPARC
cd "$SPARC_DIR"

Lancer la simulation
python main.py --config "$CONFIG_FILE" --output "$OUTPUT_DIR"

Envoyer un email de notification (optionnel)
mail -s "SPARC Simulation $(date)" user@example.com << EOF
Simulation terminée.
Résultats dans $OUTPUT_DIR
EOF
```

#### Configuration Cron :

```
Éditer crontab
crontab -e

Ajouter une ligne pour exécuter tous les jours à 2h du matin
0 2 * * * /path/to/auto_simulation.sh
```

### 4.2 Script pour Windows Task Scheduler

```
@echo off
REM Script pour Windows Task Scheduler

set SPARC_DIR=C:\path\to\sparc
set CONFIG_FILE=%SPARC_DIR%\config.json
set OUTPUT_DIR=%SPARC_DIR%\auto_results\%date:~-4,4%%date:~-7,2%%date:~-
```

```
10,2%_time:~-10,2%%time:~-7,2%%time:~-4,2%
```

```
REM Créer le répertoire de sortie
mkdir "%OUTPUT_DIR%"
```

```
REM Se déplacer dans le répertoire SPARC
cd /d "%SPARC_DIR%"
```

```
REM Lancer la simulation
python main.py --config "%CONFIG_FILE%" --output "%OUTPUT_DIR%"
```

```
REM Fin
echo Simulation terminée
```

#### 4.3 Script Python pour monitoring

```
#!/usr/bin/env python3
```

```
"""
```

```
Script pour surveiller et lancer automatiquement des simulations
```

```
"""
```

```
import os
import json
import subprocess
import time
from watchdog.observers import Observer
from watchdog.events import FileSystemEventHandler
```

```
class ConfigHandler(FileSystemEventHandler):
 """Handler pour détecter les nouveaux fichiers de configuration"""
```

```
 def __init__(self, output_dir):
 self.output_dir = output_dir
 os.makedirs(output_dir, exist_ok=True)
```

```
 def on_created(self, event):
 if event.src_path.endswith('.json'):
 print(f"Nouvelle configuration détectée: {event.src_path}")
 self.run_simulation(event.src_path)
```

```
 def run_simulation(self, config_file):
 """Lance une simulation pour le fichier de configuration"""
 name = os.path.basename(config_file).replace('.json', '')
 output = os.path.join(self.output_dir, name)
 os.makedirs(output, exist_ok=True)

 print(f"Lancement de la simulation pour {name}...")
 result = subprocess.run(
 ['python', 'main.py', '--config', config_file, '--output',
 output],
```

```

 capture_output=True
)

 if result.returncode == 0:
 print(f"✓ {name} terminée")
 else:
 print(f"✗ {name} échouée")

if __name__ == "__main__":
 config_dir = "configs/"
 output_dir = "auto_results/"

 event_handler = ConfigHandler(output_dir)
 observer = Observer()
 observer.schedule(event_handler, config_dir, recursive=False)
 observer.start()

 print(f"Surveillance de {config_dir} activée...")
 print("Placez vos fichiers JSON dans ce dossier pour lancer automatiquement des simulations.")
 print("Appuyez sur Ctrl+C pour arrêter.")

 try:
 while True:
 time.sleep(1)
 except KeyboardInterrupt:
 observer.stop()

 observer.join()

```

---

## 5. Script de comparaison

### 5.1 Script Python pour comparer les résultats

```
#!/usr/bin/env python3
```

```
"""
```

```
Script pour comparer les résultats de plusieurs simulations
```

```
"""
```

```
import json
import os
import glob
```

```
def extract_metrics(result_dir):
 """Extrait les métriques d'un répertoire de résultats"""
 summary_file = os.path.join(result_dir, 'summary.txt')

 if not os.path.exists(summary_file):
```

```

 return None

metrics = {}
with open(summary_file, 'r') as f:
 for line in f:
 if ':' in line:
 key, value = line.split(':', 1)
 metrics[key.strip()] = value.strip()

return metrics

def compare_simulations(results_dirs):
 """Compare plusieurs simulations"""
 print("Comparaison des simulations")
 print("=" * 60)

 all_metrics = {}
 for result_dir in results_dirs:
 name = os.path.basename(result_dir)
 metrics = extract_metrics(result_dir)
 if metrics:
 all_metrics[name] = metrics

 # Afficher un tableau comparatif
 if all_metrics:
 # En-tête
 print(f"{'Simulation':<30}", end='')
 for name in all_metrics.keys():
 print(f"{'name':<15}", end='')
 print()

 # Métriques communes
 common_metrics = ['Efficacité', 'Jsc', 'Voc', 'FF']
 for metric in common_metrics:
 print(f"{'metric':<30}", end='')
 for name, metrics in all_metrics.items():
 value = metrics.get(metric, 'N/A')
 print(f"{'value':<15}", end='')
 print()

 return all_metrics

if __name__ == "__main__":
 # Trouver tous les répertoires de résultats
 results_dirs = glob.glob('results/*/')

 if not results_dirs:
 print("Aucun répertoire de résultats trouvé")
 exit(1)

```

```
compare_simulations(results_dirs)
```

## 5.2 Script pour générer un rapport de comparaison

```
#!/usr/bin/env python3
```

```
"""
```

```
Script pour générer un rapport de comparaison en Markdown
```

```
"""
```

```
import json
```

```
import os
```

```
import glob
```

```
def generate_comparison_report(results_dirs, output_file):
```

```
 """Génère un rapport de comparaison"""
```

```
 with open(output_file, 'w') as f:
```

```
 f.write("# Rapport de comparaison des simulations\n\n")
```

```
 f.write(f"Généré le {os.popen('date').read().strip()}\n\n")
```

```
 # Tableau comparatif
```

```
 f.write("## Tableau comparatif\n\n")
```

```
 f.write("| Simulation | Efficacité | Jsc | Voc | FF |\n")
```

```
 f.write("|-----|-----|-----|-----|----|\n")
```

```
 for result_dir in results_dirs:
```

```
 name = os.path.basename(result_dir)
```

```
 summary_file = os.path.join(result_dir, 'summary.txt')
```

```
 if os.path.exists(summary_file):
```

```
 metrics = {}
```

```
 with open(summary_file, 'r') as sf:
```

```
 for line in sf:
```

```
 if ':' in line:
```

```
 key, value = line.split(':', 1)
```

```
 metrics[key.strip()] = value.strip()
```

```
 f.write(f"| {name} | {metrics.get('Efficacité', 'N/A')} |
{metrics.get('Jsc', 'N/A')} | {metrics.get('Voc', 'N/A')} |
{metrics.get('FF', 'N/A')} |\n")
```

```
 f.write("\n## Détails\n\n")
```

```
 for result_dir in results_dirs:
```

```
 name = os.path.basename(result_dir)
```

```
 f.write(f"### {name}\n\n")
```

```
 # Lister les fichiers
```

```
 files = os.listdir(result_dir)
```

```

 f.write("Fichiers générés:\n")
 for file in files:
 f.write(f"- {file}\n")
 f.write("\n")

 print(f"Rapport généré dans {output_file}")

if __name__ == "__main__":
 results_dirs = glob.glob('results/*/')
 generate_comparison_report(results_dirs, 'comparison_report.md')

```

---

## 6. Script d'optimisation

### 6.1 Script Python pour optimisation simple (grid search)

```

#!/usr/bin/env python3
"""
Script pour une optimisation par grid search simple
"""

import json
import subprocess
import os
import itertools

def grid_search(config_file, params_grid, output_dir):
 """
 Effectue un grid search sur plusieurs paramètres

 Args:
 config_file: Fichier de configuration de base
 params_grid: Dictionnaire des paramètres et leurs valeurs
 output_dir: Répertoire de sortie
 """
 # Charger la configuration de base
 with open(config_file, 'r') as f:
 base_config = json.load(f)

 # Générer toutes les combinaisons
 param_names = list(params_grid.keys())
 param_values = list(params_grid.values())
 combinations = list(itertools.product(*param_values))

 print(f"Grid search: {len(combinations)} combinaisons à tester")

 # Créer le répertoire de sortie
 os.makedirs(output_dir, exist_ok=True)

```

```

best_eta = 0
best_config = None

for i, combination in enumerate(combinations):
 # Créer la configuration pour cette combinaison
 config = base_config.copy()

 # Appliquer les paramètres
 for param_name, value in zip(param_names, combination):
 keys = param_name.split('.')
 obj = config
 for k in keys[:-1]:
 obj = obj[k]
 obj[keys[-1]] = value

 # Sauvegarder la configuration
 sim_config = os.path.join(output_dir, f'config_{i}.json')
 with open(sim_config, 'w') as f:
 json.dump(config, f, indent=2)

 # Créer le répertoire de sortie
 sim_output = os.path.join(output_dir, f'sim_{i}')
 os.makedirs(sim_output, exist_ok=True)

 # Lancer la simulation
 print(f"Simulation {i+1}/{len(combinations)}: {dict(zip(param_names,
combination))}")
 result = subprocess.run(
 ['python', 'main.py', '--config', sim_config, '--output',
sim_output, '--quiet'],
 capture_output=True
)

 if result.returncode == 0:
 # Extraire l'efficacité
 summary_file = os.path.join(sim_output, 'summary.txt')
 if os.path.exists(summary_file):
 with open(summary_file, 'r') as f:
 for line in f:
 if 'Efficacité' in line:
 eta =
float(line.split(':')[1].strip().replace('%', ''))
 if eta > best_eta:
 best_eta = eta
 best_config = config.copy()
 break
 print(f"✓ Simulation {i+1} terminée")
 else:
 print(f"✗ Simulation {i+1} échouée")

```



```

Sauvegarder la meilleure configuration
if best_config:
 best_file = os.path.join(output_dir, 'best_config.json')
 with open(best_file, 'w') as f:
 json.dump(best_config, f, indent=2)
 print(f"\nMeilleure efficacité: {best_eta}%")
 print(f"Meilleure configuration sauvegardée dans {best_file}")

if __name__ == "__main__":
 # Définir la grille de paramètres
 params_grid = {
 'doping.n_region': [1e16, 1e17, 1e18],
 'doping.p_region': [1e14, 1e15, 1e16],
 'geometry.nx': [50, 100, 150]
 }

 grid_search('config.json', params_grid, 'grid_search_results/')

```

## 6.2 Script pour sauvegarder les résultats d'optimisation

```

#!/usr/bin/env python3
"""
Script pour sauvegarder et analyser les résultats d'optimisation
"""

import json
import os
import glob
import csv

def collect_optimization_results(results_dir, output_csv):
 """Collecte les résultats d'optimisation dans un CSV"""

 with open(output_csv, 'w', newline='') as csvfile:
 writer = csv.writer(csvfile)
 writer.writerow(['Simulation', 'Efficacité', 'Jsc', 'Voc', 'FF'])

 for sim_dir in glob.glob(os.path.join(results_dir, 'sim_*')):
 name = os.path.basename(sim_dir)
 summary_file = os.path.join(sim_dir, 'summary.txt')

 if os.path.exists(summary_file):
 metrics = {}
 with open(summary_file, 'r') as f:
 for line in f:
 if ':' in line:
 key, value = line.split(':', 1)
 metrics[key] = value.strip()

```

```
writer.writerow([
 name,
 metrics.get('Efficacité', 'N/A'),
 metrics.get('Jsc', 'N/A'),
 metrics.get('Voc', 'N/A'),
 metrics.get('FF', 'N/A')
])

print(f"Résultats sauvegardés dans {output_csv}")

if __name__ == "__main__":
 collect_optimization_results('grid_search_results/',
 'optimization_results.csv')
```

---

## Conclusion

Ces scripts fournissent des exemples prêts à l'emploi pour automatiser SPARC en mode CLI. Adaptez-les à vos besoins spécifiques.

Pour plus d'informations sur le mode CLI, consultez : - [Guide d'utilisation CLI](#) - [Référence des commandes CLI](#)