

Fédération
Plateformes
de recherche

université
de BORDEAUX

Rapport d'activité
Fédération des plateformes
2020

Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain (MCIA)

1. Présentation de la plateforme

CONTACT

- **Nom de la plateforme** : Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain (MCIA)
- **Rattachement à une unité de recherche** : le MCIA n'est rattaché à aucune unité de recherche, mais ses personnels sont hébergés par l'Institut de Mathématiques de Bordeaux
- **Rattachement au département** : le MCIA a été rattaché au département SIN, mais il est utilisé par d'autres départements (notamment Département Sciences de la matière et du rayonnement, Département de Santé Publique, Département Sciences de l'environnement, Département Sciences et technologies pour la santé)
- **Adresse** : bâtiment A33, Université de Bordeaux, 351, cours de la Libération - 33405 TALENCE
- **Site web** : <https://www.mcia.fr>
- **Noms et contacts des responsables** :
 - o directeur scientifique : Luc Mieussens (luc.mieussens@math.u-bordeaux.fr),
 - o directeur technique : Pierre Gay (pierre.gay@u-bordeaux.fr)

PRESENTATION DE LA PLATEFORME

Bref rappel de l'histoire de la plateforme

L'existence d'un centre de calcul à Bordeaux est assez ancienne, puisque la première création d'un tel centre semble remonter à l'année 1967. Par la suite, le centre de calcul a évolué au gré des acquisitions successives de nouvelles machines. Dans la période plus récente, le pôle « Modélisation Numérique Intensive » (MNI), a été créé par 4 laboratoires de chimie et de mathématiques en 1995, et a fonctionné jusqu'en 1998. Le projet suivant fut le pôle « Modélisation Microscopique et Mésoscopique en Physique, en Environnement et en Chimie » (M3PEC), associant 13 laboratoires en physique, chimie, environnement, mathématiques et informatique, et utilisé par une cinquantaine de chercheurs de 1999 à 2009, avec une ouverture régionale à l'université de Pau dès 2002. Ce pôle a ensuite cédé la place au « Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain » (MCIA) en 2010, qui s'est doté d'un nouveau calculateur en 2011, en fonction jusqu'en 2019, avec un nombre de laboratoires et d'utilisateurs toujours plus grand. En 2017, suite au financement acquis par un CPER pour acquérir le calculateur suivant, la communauté scientifique réunie dans le MCIA a souhaité refonder le mésocentre : un projet a été présenté à l'université de Bordeaux qui a abouti à la création de l'unité de services MCIA, labellisée plateforme de recherche de l'université de Bordeaux en 2019. La même année, le MCIA a installé la machine de calcul curta (10 000 cœurs de calcul), utilisée par plus de 25 laboratoires et plus de 500 utilisateurs sur les sites de Bordeaux et de Pau, dans des disciplines variées (physique, chimie, mécanique, astronomie, océanographie, mathématiques appliquées, informatique, économie, médecine, biologie, etc.).

NB : le dernier CPER a aussi permis à l'UPPA de se doter du calculateur Pyrene (1 000 cœurs de calcul), hébergé à l'UPPA et utilisé par ses chercheurs avant de passer sur Curta.

Description de l'activité de la plateforme

Activité

Le MCIA propose un environnement matériel et logiciel et un lieu d'échange de compétences dans le domaine du calcul scientifique. Il offre un environnement permettant aux chercheurs ayant développé un outil de simulation sur une machine de laboratoire de passer à l'échelle régionale qui lui offre plus de puissance de calcul mais aussi un soutien technique et scientifique. Le MCIA sert aussi de tremplin pour accéder aux moyens de calcul nationaux en effectuant la démonstration de la faisabilité dans les dossiers de demandes d'heures de calcul.

Le MCIA offre à tout chercheur des établissements de Bordeaux et de Pau :

- des moyens de calcul scientifique – calcul intensif : possibilité d'utiliser le calculateur haute performance à tous les chercheurs employés par les partenaires ;
- des moyens de stockage : un système de stockage mutualisé est accessible à toute la communauté, le MCIA assure une aide technique pour l'utilisation de ce système ;
- de la formation à l'utilisation des moyens de calculs (calcul parallèle, optimisation) ;

En outre, le MCIA peut établir des conventions pour permettre à certains industriels d'effectuer des calculs sur les machines du MCIA, moyennant une facturation.

Les moyens de calculs du MCIA sont utilisés par des chercheurs provenant de disciplines très variées (physique, chimie, mécanique, astronomie, océanographie, mathématiques appliquées, informatique, économie, médecine, biologie, etc.).

Accès

L'accès aux moyens de calcul du MCIA est gratuit pour les chercheurs : ce mode de fonctionnement, qui est celui adopté par les centres de calcul nationaux et la plupart des mésocentres régionaux, permet une rentabilité optimale des machines de calcul. Le modèle économique reste encore à définir avec les établissements partenaires.

Gouvernance

Le document des statuts de l'unité de service MCIA, qui devrait être validé par l'université à la rentrée 2020, prévoit la gouvernance suivante : le mésocentre est dirigé par le directeur, l'équipe technique est dirigée par le directeur technique, le comité des partenaires définit la stratégie à moyen terme de la plateforme et les moyens associés, le conseil scientifique définit le programme scientifique, le comité des utilisateurs recueille l'avis des utilisateurs sur le fonctionnement actuel des équipements du MCIA et leurs propositions d'évolution, et enfin le comité de coordination avec la DSI coordonne les actions engagées par la DSI et le MCIA pour l'occupation de la salle SHM1 et discute de l'évolution des besoins du MCIA en terme d'occupation des locaux, réseaux, puissance électrique, etc.

MOYENS

Personnels

Nom Prénom	Grade	Statut	% du temps
Gay Pierre	IE	Statutaire (UB)	100
Nguyen Nguyen Ky	IE	Statutaire (UB)	100
Darrietort Alexandra *	IE	CDI (UB)	100
Mieussens Luc	PR	Statutaire (BxINP)	50

* pour l'année 2019, Alexandra Darrietort était en CDD, porté par la COMUE jusqu'à fin août 2019, puis par Bordeaux INP.

Locaux

- bureau de l'équipe technique (fourni par l'Institut de Mathématiques de Bordeaux) : 13 m²
- salle SHM1 : les baies contenant les machines du MCIA occupent une surface de 20 m²

Equipements scientifiques

Dénomination	Date d'acquisition	Valeur d'acquisition
Calculateur Curta	2018	3 M€

2. Bilan d'activité de l'année 2019

INDICATEURS DE L'ACTIVITE

- Nombre d'utilisateurs en 2019 : **entre 300 et 450 selon les mois**
- Nombre de prestations réalisées : **0**
- Nombre de projets de collaboration : **0**

FOCUS SUR LES UTILISATEURS

Répartition géographique des utilisateurs en % en 2019

Régionaux	Nationaux	Internationaux
100%	0%	0%

Quels sont les types de partenaire de votre plateforme :

- Académiques
- Entreprises privées
- Autres

LES AUTRES TYPES D' ACTIONS

Au cours de l'année 2019, avez-vous :

- Réalisé des sessions de formation
 - 3 formations, entre 2 et 4 jours chacune, 10 participants par session environ ;
 - thème des formations : utilisation des moyens de calcul du MCI, initiation au calcul parallèle MPI/OpenMP

Participé à des publications

Participé des séminaires ou manifestation

Pierre Gay (directeur technique du MCI) a participé aux journées calcul et données (JCAD 2019), organisées à Toulouse par le GIS FRANCE GRILLES, GRID'5000, le Groupe Calcul, le GDR RSD et le GENCI.

FAITS MARQUANTS DE L'ANNEE 2019

En 2019, le MCI a connu deux avancées cruciales :

1. installation du nouveau calculateur curta en mars 2019, machine 3 fois plus puissante que la précédente ;
2. un document de projet des nouveaux statuts du MCI a été rédigé en collaboration avec la DRV.

En outre, le contrat d'Alexandra Darrietort, en CDD dans l'équipe technique du MCI, a été prolongé d'un an (d'août 2019 à août 2020), grâce à la participation financière de plusieurs départements de l'université de Bordeaux (Département Sciences de la matière et du rayonnement, Département de Santé Publique, Département Sciences de l'environnement, Département Sciences et technologies pour la santé) et de Bordeaux INP.

3. Bilan financier

Organisme gestionnaire de la plateforme : Institut de Mathématiques de Bordeaux UMR 5251 (IMB)

Budget 2019

Pour le moment, le MCIA n'a pas de budget propre. Ainsi, le MCIA n'a pas eu de recette en 2019, et en ce qui concerne les dépenses :

- les dépenses de salaire sont prises en charge par UB (pour les deux ingénieurs statutaires), et par BxINP et UB (pour l'ingénieure en CDD en 2019) ;
- les dépenses de fonctionnement (facture électrique et occupation de la salle SHM1) ont été prises en charge par UB.

4. Perspectives

Les points importants à développer ou à renforcer

Statuts

Il faut que les statuts du MCIA soient validés dès que possible et que l'unité de service soit officiellement créée dès la rentrée de septembre 2020. Cela est indispensable pour relancer la discussion sur le modèle économique du mésocentre avec les partenaires.

Ressources humaines

L'ingénieur N. Nguyen Ky devrait partir à la retraite d'ici 1 à 3 ans. Il est indispensable que ce poste statutaire reste au MCIA par la suite.

Une mission importante du MCIA est le soutien aux utilisateurs en terme de développement de codes de calcul : pour cela, il nous faudra impérativement obtenir au moins un poste d'ingénieur supplémentaire.

Visibilité

Bien que le MCIA soit déjà utilisé par de nombreux laboratoires, il semble que les moyens offerts par le mésocentre soient encore trop méconnus, notamment dans le domaine de la santé ou des sciences humaines. Le MCIA devra donc se faire connaître davantage des chercheurs de ces disciplines.

Équipements

Pour le renouvellement de ses équipements, le MCIA a participé à la rédaction d'un projet CPER, en collaboration avec les plateformes CBIB et CREDIM, et les autres établissements de la nouvelle Aquitaine. Il faudra suivre attentivement ce que devient ce projet, et renforcer la coordination entre tous ces partenaires, afin de ne pas prendre de retard dans le planning de renouvellement.

Les projets identifiés sur les prochaines années

Projet UMS

L'unité de service MCIA doit d'abord être officiellement créée (cela devrait se faire à la rentrée 2020). Par la suite, nous souhaitons demander au CNRS la transformation du MCIA en tant qu'unité mixte de service (UMS), afin de permettre au CNRS de soutenir le MCIA par la création de postes d'ingénieurs (comme cela est fait à Grenoble et à Toulouse).

Mésocentre Nouvelle-Aquitaine

En outre, le développement du MCIA à l'échelle de la Nouvelle-Aquitaine doit se poursuivre : des discussions avec les mésocentres des établissements du nord de la région (Poitiers, La Rochelle, Limoges) seront initiées afin de travailler à un projet commun. Ces discussions seront essentielles pour la mise en place du futur datacentre régional.

5. Annexes

Nous donnons ici une rapide présentation de quelques travaux réalisés en 2019 par des utilisateurs de différents laboratoires. Bien que non exhaustive, cette liste illustre bien la variété des disciplines bénéficiant du MCIA :

Astrophysique (LAB)	9
Biostatistique (BPH)	12
Chimie (ISM)	14
Chimie (IPREM)	18
Chimie-Biologie (CBMN)	22
Informatique (INRIA)	24
Imagerie Neurofonctionnelle (IMN)	27
Matériaux (LCSTS)	29
Mathématiques (IMB)	32
Mathématiques (LMAP)	37
Mécanique des fluides (I2M)	41
Mécanique des fluides (LFCR)	45
Physique des Plasmas (CELIA)	49
Thermique, Énergétique et Procédés (LaTEP)	52

Astrophysique (LAB)

unité de recherche : **Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (LAB)**, UMR 5804, unité constitutive de l'Observatoire Aquitain des Sciences de l'Univers (OASU)

a. Migration des planètes dans les disques riches en poussière.

Dans un article publié en 2019 dans la revue MNRAS (Pierens, Lin, Raymond, 2019), nous avons présenté les résultats de simulations numériques 2D réalisées sous CURTA de l'interaction entre une planète de petite masse (de l'ordre de quelques masses terrestres) avec un disque protoplanétaire contenant une grande quantité de poussière. Nous avons montré que le résultat de cette interaction est la formation de nombreux tourbillons (vortex) au voisinage de la planète. Parce que ces vortex correspondent à des extrema de la pression du gaz, ces derniers peuvent capturer une quantité importante de poussière, correspondant à un enrichissement en poussière plus grand d'un facteur ~ 1000 en comparaison du reste du disque. Nous avons montré que ces vortex se réorganisent ensuite en filaments pouvant éventuellement s'effondrer pour former des planétésimaux. Cela est illustré à la Figure 1 où est représentée l'évolution de la densité de poussière pour une simulation réalisée avec CURTA et nécessitant environ 140 000 heures CPU.

Dans cet article, nous avons également étudié la conséquence de la formation de ces vortex sur la migration de la planète et son évolution dynamique dans le disque. Nous avons montré que la formation de vortex a pour conséquence de rendre le caractère de la migration non prédictif, de telle sorte que son évolution devienne très sensible aux conditions initiales.

Ces résultats permettent de mieux comprendre non seulement la formation des planétésimaux mais également l'évolution des planètes dans les disques contenant un rapport poussière-sur-gaz important.

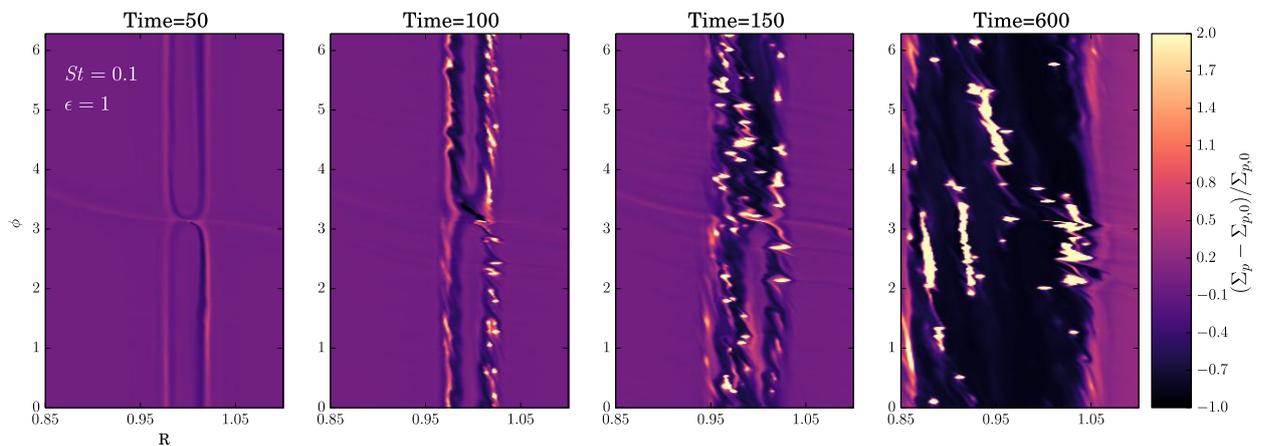


Figure1 : Evolution de la densité de poussière dans un disque contenant une planète de 5 masses terrestres et issue d'une simulation réalisée sur CURTA (d'après Pierens, Lin, Raymond 2019)

b. Turbulence hydrodynamique dans les disques circumbinaires

La plus grande partie du temps CPU alloué à la machine CURTA a été utilisé pour un projet concernant la possibilité de turbulence hydrodynamique dans les disques circumbinaires. Ce projet se base sur des travaux analytiques précédents qui ont en effet suggéré que les disques protoplanétaires possédant une excentricité finie peuvent être instables vis-à-vis d'une instabilité dite paramétrique. Les disques circumbinaires étant naturellement excentriques de par leur interaction avec la binaire centrale, ils apparaissent ainsi comme de bon candidats pour déclencher cette instabilité. Nous avons démontré, en utilisant des simulations hydrodynamiques 3D, non seulement que ces disques sont effectivement sujets à cette instabilité, mais aussi que l'évolution non-linéaire de cette instabilité conduit à de la turbulence dans le disque. La Figure 2 ci-dessous montre l'écoulement turbulent dans un plan vertical du disque et comment il est associé à l'excentricité du disque, qui se caractérise par la structure en forme de banane présente dans le plan horizontal du disque. Cette simulation a été réalisée sur CURTA en utilisant 240 cœurs et a nécessité 250000 heures CPU.

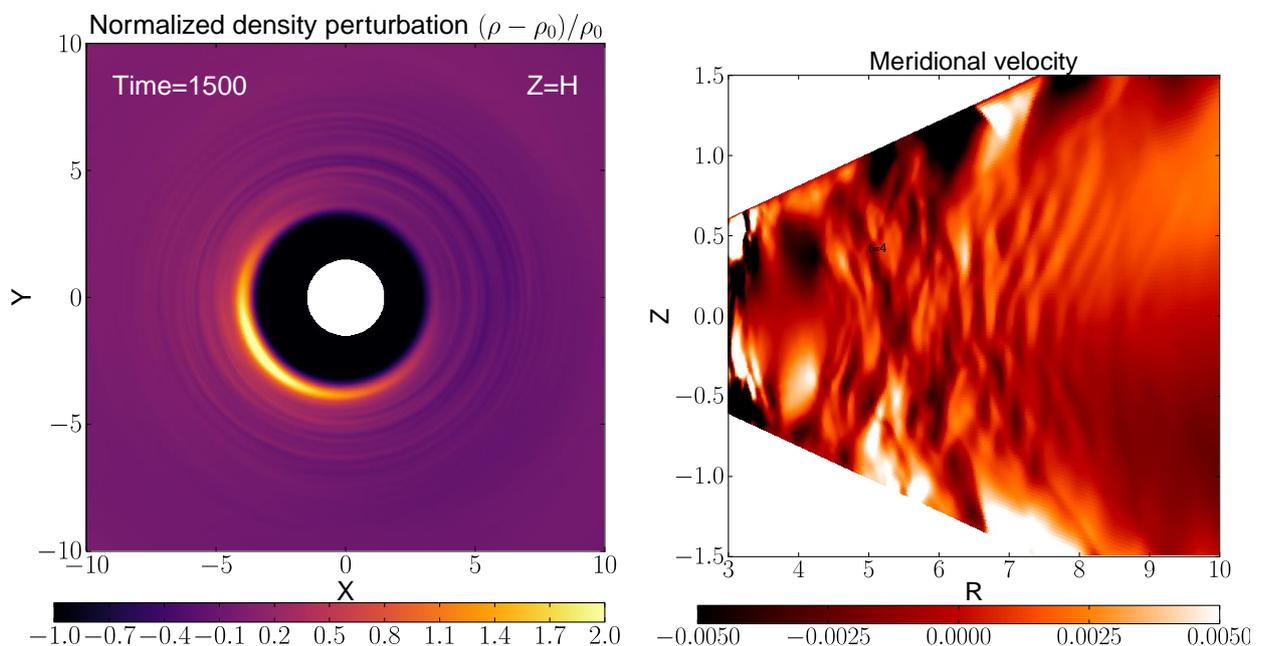


Figure 2 : Densité dans le plan médian du disque (à gauche) et composante verticale de la vitesse (à droite) issues d'une simulation réalisée sur CURTA et utilisant 240 cœurs. L'écoulement turbulent visible à droite est une conséquence de la structure en forme de banane présente sur l'image de gauche.

Nous avons montré que la présence de turbulence peut avoir des conséquences importantes sur la formation planétaire dans les disques circumbinaires. D'une part, elle empêche la poussière de sédimenter dans le plan de disque. D'autre part, elle limite fortement la croissance des planètes se formant par accrétion de particules dont la taille est comprise entre le cm et le mètre. En utilisant un code 3D hybride (fluide+particules), nous avons pu établir qu'en présence de turbulence le temps de formation des planètes devient équivalent au temps de vie du disque, ce qui signifie qu'il est peu probable que les planètes circumbinaires observées aujourd'hui se soient formées in-situ. Un scénario plus probable de formation serait que ces planètes se soient plutôt formées plus loin dans le disque, là où la turbulence est faible, puis aient ensuite migré jusqu'à l'endroit où elles sont observées actuellement.

L'article présentant les résultats de cette étude vient d'être accepté dans la revue MNRAS (*Pierens, McNally, Nelson, 2020*) et le projet dans sa globalité a nécessité plus d'1 million d'heures CPU.

Biostatistique (BPH)

unité de recherche : **Bordeaux Population Health (BPH)**, UMR1219

Les deux équipes du centre de recherche BPH utilisant le plus CURTA sont l'équipe Biostat et l'équipe SISTM (rattachée aussi au centre INRIA Bordeaux Sud-Ouest). Ces deux équipes de recherche en Biostatistique développent des méthodes statistiques très variées pour analyser des données de santé issues de grandes cohortes ou d'essais cliniques. L'utilisation principale du MCIa vise : (i) soit à analyser des jeux de données avec des méthodes statistiques développées très complexes (demandant des calculs très intensifs), (ii) soit à réaliser des études de simulation pour valider les méthodes statistiques développées.

Ce rapport donne un aperçu du type d'utilisation du mésocentre MCIa par ces deux équipes sur la file d'attente ISPED de Curta. Les scripts étaient généralement des scripts R utilisant possiblement d'autres technologies (e.g., C++, Fortran, JAGS).

- Marine Gauthier (doctorante de l'équipe SISTM) a utilisé le MCIa pour une évaluation par simulations des performances des méthodes `dearseq-asymp` et `dearseq-perm` en développement contre 3 autres méthodes d'analyse différentielle de l'expression génique, selon 4 scénarios de génération de données (article en révision : Biorxiv : [10.1101/635714v1](https://doi.org/10.1101/635714v1)). L'estimation de Monte-Carlo (sur 1000 simulations) de l'erreur de type-I et du taux de fausses découvertes en fonction de la taille d'échantillon est représentée dans la figure 1. Elle lançait une vingtaine de jobs, chacun sur 1 nœud bigmem, pour un temps d'exécution allant de quelques minutes à une dizaine d'heures et une mise en attente allant de quelques secondes à une dizaine d'heures.
- Denis Rustand (doctorant de l'équipe de Biostatistique) a utilisé CURTA pour les simulations et l'application sur données réelles d'un article publié en 2020 (<https://doi.org/10.1093/biostatistics/kxaa012>). L'algorithme utilisé pour la maximisation de la vraisemblance du modèle était parallélisé sur les individus. Il utilisait entre 6 et 10 jobs simultanément avec 80 processeurs et 200 heures par job (durée effective : 100-150 h).
- Maude Wagner (post-doctorante de l'équipe de Biostatistique) a utilisé CURTA pour réaliser une étude de simulations dans un article qui sera prochainement soumis sur la modélisation conjointe de l'effet dépendant du temps de l'histoire d'une exposition sur un événement ultérieur avec l'identification de fenêtres critiques. La figure 2 montre le type de résultats issus de ces simulations : l'évaluation des estimateurs du modèle statistique (en terme de biais et de taux de couverture). Elle lançait une centaine de jobs utilisant 100 nœuds pour un temps estimé de 13h et un fichier de sortie de 1,3 MB (à noter que certains jobs ont échoué, la raison serait que certains nœuds rencontraient des problèmes).

- Hugues de Courson (doctorant de l'équipe de Biostatistique) a utilisé CURTA pour un article en cours de finalisation pour soumission prochaine sur l'application d'un modèle conjoint pour un biomarqueur hétéroscédaste dépendant du temps et un temps d'événement par une méthode d'estimation Bayésienne proposé par d'autres chercheurs (<http://arxiv.org/abs/1803.05757>). Il lançait 11 jobs sur 1 seul nœud bigmem de 64 coeurs avec génération de fichiers de sortie de 1 Go. Durée d'exécution : entre 24h et 32h. Durée de mise sur liste d'attente très variable (instantanée à plusieurs jours).

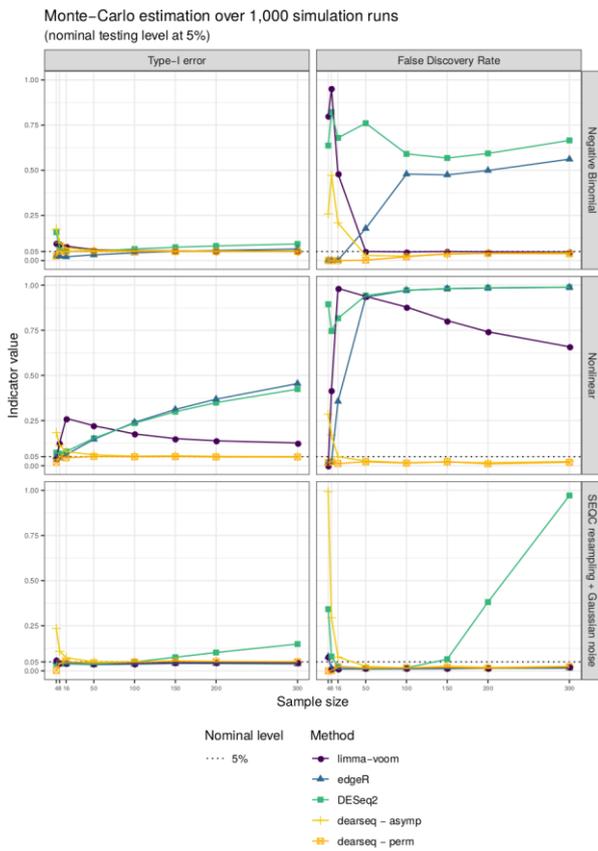


Figure 1: Type-I error and FDR curves for each DEA method with increasing sample sizes In each setting (Negative Binomial, Non-linear, and SEQC data resampling), the Type-I error is computed as the number significant genes among the true negative, and the FDR as the average number of false positives among the genes declared DE.

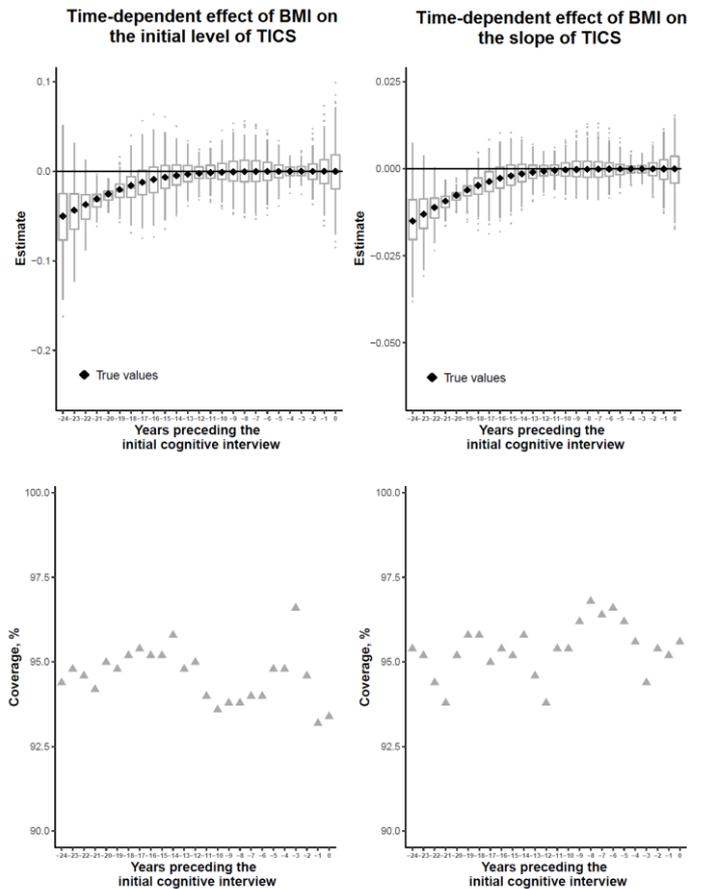


Figure 2 : Boxplots of the time-varying effects of the exposure history over the 24 years prior to the initial health outcome assessment on the initial level (top left panel) or the slope (top right panel) of the outcome of interest across 500 simulations of 1,000 subjects each, and corresponding coverage rates of the 95% pointwise confidence interval (lower panels) for Scenario B (distant negative effect).

Chimie (ISM)

unité de recherche : Institut des Sciences Moléculaires (ISM), UMR 5255

L'ISM est structuré en 10 groupes rassemblant au total 130 chercheurs, enseignants-chercheurs, techniciens et ingénieurs selon des thématiques et/ou des compétences spécifiques :

- Analyse du Cycle de Vie et Chimie Durable (CyVi)
- Catalysis, Synthesis and Health (CSH)
- Chimie Moléculaire et Matériaux (C2M)
- Chimie Théorique (THEO)
- Collisions Moléculaires en Milieux Extrêmes (COMEX)
- IRM et Photonique Moléculaires (IPM)
- Nanostructures Organiques (NEO)
- NanoSystèmes Analytiques (NSysA)
- Spectroscopie Moléculaire (GSM)
- Synthèse organique et substances naturelles (ORGA)

La recherche au sein de l'institut est diverse et variée, mais quel que soient les thématiques, le désir de comprendre et maîtriser les processus et propriétés des systèmes à l'échelle moléculaire est toujours présent. Celui-ci s'inscrit dans le cadre de fortes collaborations intergroupes. Dans cet objectif, l'approche numérique est un outil de compréhension indispensable et s'appuie non seulement sur son équipement propre (par le biais de sa plateforme mutualisée du « Pôle Modélisation ») mais aussi sur les **ressources dispensées par le MCIA et notamment son supercalculateur Curta (et feu Avakas) et l'infrastructure de stockage distribuée iRods** pour l'archivage de données dont l'ISM est un partenaire. La quasi-totalité des groupes de recherche de l'ISM utilise de manière directe ou indirecte (par le biais de collaborations avec des membres du groupe THEO principalement) les équipements du MCIA.

Dans le présent rapport, nous ne prétendons pas à une exhaustivité des tous les travaux qui ont pu y être menés mais nous focaliserons sur certains travaux de recherche émanant du groupe de Chimie Théorique et Modélisation qui est une **équipe disciplinaire** couvrant un spectre étendu de thématiques. En recherche, sa mission première est **la production de connaissances fondamentales**. Les activités allient développements méthodologiques et applications dans des domaines aussi variés que l'astrochimie, la chimie atmosphérique, la dynamique des collisions froides, des processus élémentaires aux interfaces, la modélisation de la phase condensée, la réactivité des substances bioactives, la chimie quantique moléculaire et supramoléculaire, le transport électronique et excitonique, l'optique non linéaire et le photovoltaïque.

L'utilisation de la mécanique semi-classique a permis le développement de corrections dans le formalisme classique de la dynamique réactionnelle pour les processus ayant lieu dans le régime quantique, c'est-à-dire, lorsqu'un faible nombre d'états des réactifs et des produits est accessible. Ainsi, l'inclusion de la pondération gaussienne (quantification des états internes) et la correction d'adiabaticité (piégeage par diffraction) a permis de reproduire les calculs quantiques exacts les plus précis à partir de trajectoires classiques, par exemple pour les collisions $H_2/Pd(111)$ [J. Phys. Chem. Lett. doi : 10.1021/acs.jpcllett.9b02742] et $S(^1D)+H_2$. [J. Phys. Chem. A 2019, doi : 10.1021/acs.jpca.9b04938]. Ce résultat est illustré en Fig. 1 où une comparaison entre résultats classiques corrigés et quantiques exacts est présentée pour le collage de H_2 sur le Pd(111).

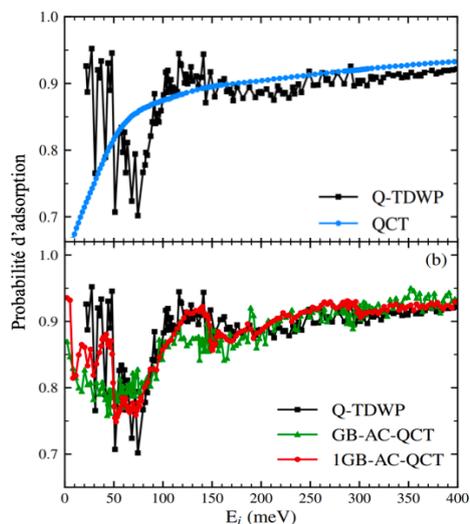


Fig. 1 : Probabilité d'adsorption de H_2 sur le Pd(111) en fonction de l'énergie de collision (E_i) par : le calcul quantique exact (noir), l'approche QCT standard (bleu) et deux approches classiques corrigées (vert, rouge).

Le développement d'un protocole calculatoire combinant simulations de dynamique moléculaire classique et calculs DFT a permis de franchir une étape dans la description des effets de dynamique collective sur les propriétés optiques de systèmes supramoléculaires. Cette approche a été appliquée à la simulation des réponses ONL de couches minces de photochromes organiques greffés sur des surfaces d'oxydes métalliques [J Chem. Mater. 2019, 31, 6759], ainsi qu'aux réponses de chromophores sondes insérés au sein de bicouches lipidiques [J. Phys. Chem. B 2020, 124, 2101] (voir Fig. 2).

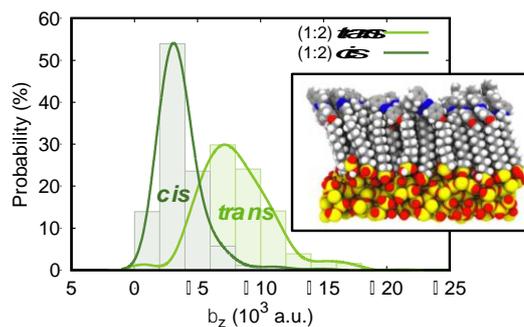


Fig. 2 : Distributions des valeurs dynamiques de la première hyperpolarisabilité de monocouches d'azobenzènes dans leur forme trans et cis, calculées en utilisant une approche combinant dynamique moléculaire et DFT.

Le mécanisme d'oxydation de trois monoterpènes parmi les COVB les plus émis dans l'atmosphère (l'alpha et le gamma-terpinène et le terpinolène) a été élucidé. En combinant les mesures cinétiques et les calculs de chimie quantique, nous avons établi les mécanismes réactionnels conduisant à la formation de nitrate organique (avec un rendement d'environ 50%) et d'aérosol secondaire organique (SOA) dont le rendement est fortement dépendant du monoterpène impliqué. Le β -terpinène apparaît être un producteur de "SOA" très efficace. La figure xx ci-dessous montre la structure du γ -terpinène ainsi celles de deux des aérosols résultant de l'ouverture des cycles. (voir Fig. 3)

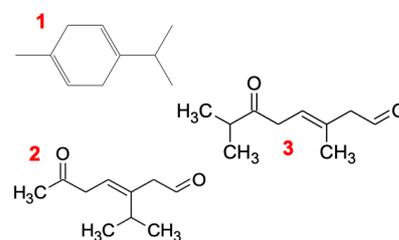


Fig 3 : 1 : γ -terpinène – 2 et 3 : Structures aérosols dicétoniques ouvertes résultant de la réaction en plusieurs étapes avec NO_3 , détectées par spectrométrie de masse et confirmées par la théorie (masse 168 u.a.)

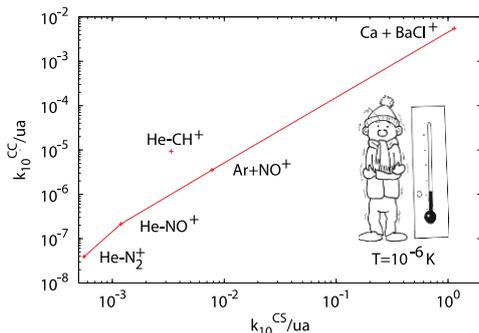


Fig. 4: Vitesses de refroidissement rotationnel calculées à l'aide d'une méthode quantique (k10CC) et statistique(k10CS) à 10⁻⁶K, pour les collisions atome-diatome indiquées. La forte corrélation atteste de la validité de l'approche statistique.

Trois méthodes quantiques originales ont été développées, permettant pour la première fois de traiter le couplage pliage rotation d'une molécule triatomique linéaire ou coudée à l'équilibre en collision avec un atome, de décrire la formation d'une molécule triatomique par l'association radiative d'un atome et d'un diatome et, pour la plus récente, de modéliser le processus d'attachement électronique radiatif,

potentiellement responsable de la formation des anions dans le milieu interstellaire. Ces travaux menés dans le cadre de 3 ANR et d'un projet ECOS Sud ont conduit à deux publications résultant de collaborations internationales

dans deux revues du groupe Nature, l'une en Astrochimie et l'autre en Chimie froide. Un résultat est illustré en Fig. 4.

Une étude couplant expérience, calculs de chimie quantique et calculs statistiques sur les réactions C + H₂O et C + D₂O à basse température suggère que les mécanismes par effet tunnel pourraient être omniprésents dans les nuages denses froids. (J Phys Chem Lett 2016, 7, 3641). Travaux en collaboration avec l'équipe COMEX et illustrés en Fig. 5.

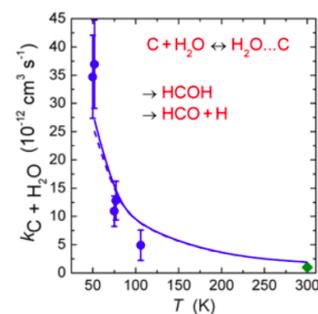


Fig. 5: Comparaison Théorie Expérience des constantes de vitesses C+H₂O en fonction de la température.

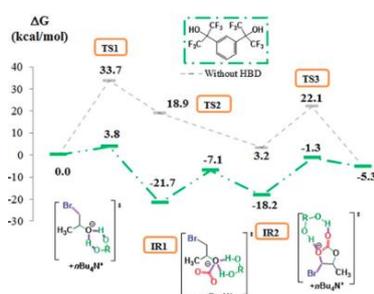


Fig. 6: Chemin de réaction pour la synthèse de carbonates cycliques à partir d'époxydes et CO₂.

Les calculs DFT ont permis la compréhension de l'activité remarquable du système catalytique composé d'un sel de tétrabutylammonium et d'un alcool fluoré (1,3-bis-HFAB) pour la synthèse rapide et sélective de carbonates cycliques par réaction entre les époxydes et le CO₂. (Catal. Sci. Technol., 2015, 5, 4636 / RSC Adv., 2016, 6, 36327). Ce résultat, en collaboration avec l'équipe GSM, est illustré en Fig. 6.

Un protocole de simulation basé sur la méthode replica exchange molecular dynamics (REMD) couplée à un potentiel interatomique réactif (ReaxFF) a permis de simuler la conversion géologique complète de résidus organiques en kérogène et hydrocarbures [Chem. Sci. 2017, 8, 8325]. Le comportement des modèles de kérogène vis-à-vis de l'adsorption et du transport de méthane a ensuite été étudié en prenant en compte l'évolution de leur déformabilité par adsorption en fonction de leur maturité (rapport H/C) [Langmuir 2018, 34, 13766 ; J. Phys. Chem. B 2019, 123, 5635]. Fig. 7

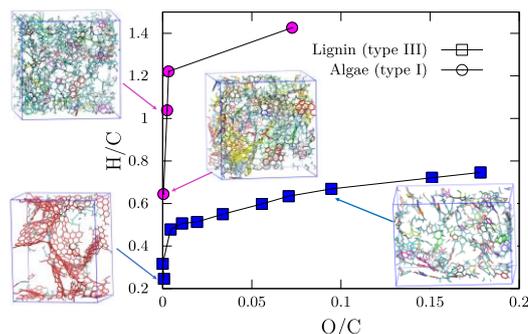


Fig. 7: Simulation REMD de l'évolution géologique de kérogènes issus de la lignine (matière organique de type III) et d'algues (matière organique de type I). Au cours de l'évolution, la partie solide (kérogène) libère de l'hydrogène et de l'oxygène tout en évoluant d'une structure aliphatique à une structure aromatique.

Ressources utilisées :

De part l'étendue et la variété des thématiques abordées dans ce rapport, nécessitant des méthodes de simulation extrêmement variées, les types de calcul soumis au supercalculateur du MCI vont du calcul monoprocesseur jusqu'au hautement parallèle (quelques centaines de cœurs CPU) en passant par des calculs de type OpenMP pur sur quelques dizaines de cœurs CPU. De plus, l'évolution récente des logiciels de chimie théorique vers la technologie des GPU – grands codes commerciaux, abondamment utilisés par la communauté des chimistes, tels que Gaussian, NAMD, VASP, ... – fait des utilisateurs de l'ISM des consommateurs significatifs de ces ressources spécifiques.

unité de recherche : **Institut des sciences analytiques et de physico-chimie pour l'environnement et les matériaux (IPREM)**, UMR 5254

<https://iprem.univ-pau.fr>

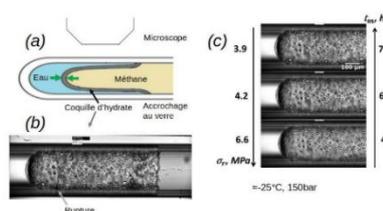
Correspondant : Karinne Miqueu (karinne.miqueu@univ-pau.fr)

L'IPREM est une Unité Mixte de Recherche CNRS/ UPPA (UMR 5254). Il s'intéresse au développement de connaissances fondamentales en physico-chimie, chimie analytique et microbiologie, en relation avec des applications concernant la structure du vivant, la gestion de l'environnement et les propriétés fonctionnelles de différentes classes de matériaux.

Ses compétences sont basées autour de stratégies analytiques, de la modélisation, d'approches physico-chimiques, d'études fines de structures et de réactivité, d'élaboration, caractérisation et mise en œuvre à différentes échelles. Elles permettent d'afficher une position originale dans le domaine des applications dans de nombreux secteurs industriels tant au niveau national qu'international.

I- Détermination de la tension de rupture de l'hydrate de méthane par une méthode sans contact (D. Broseta & R. Brown, CNRS/TOTAL/UNIV PAU & PAYS ADOUR-E2S, Lab. des fluides Complexes)

Les hydrates de gaz (principalement le méthane), sont des solides polycristallins analogues à la glace, mais contenant 100 à 1000 fois plus de gaz dissous que l'eau de mer. Des dépôts très répandus dans les sédiments des marges continentales sont de longue date vus comme une ressource énergétique potentielle, mais aussi comme un facteur contribuant à la stabilité mécanique des sédiments. Pourtant les propriétés mécaniques de l'hydrate de méthane sont très mal connues, particulièrement la résistance à la traction et encore moins les propriétés à l'échelle du pore sédimentaire. Dans ce travail, une fine pellicule d'hydrate de méthane ($\sim 25^\circ\text{C}$ à -5°C , 150 bar) est formée dans un capillaire en verre. Une variation de pression thermo-induite (sans contact) provoque la déformation de la pellicule, mettant en évidence le caractère plus ou moins fragile de l'hydrate et permettant l'estimation par une relation de thermodynamique, de la constante élastique et de la tension de rupture, sur des «éprouvettes» de quelques μm . Ce travail permet de corréliser les propriétés mécaniques avec la taille de grain du milieu polycristallin.



mûrissement pendant plusieurs heures.

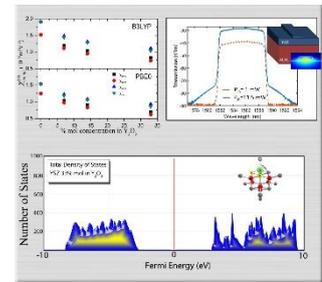
Détermination de la tension de rupture de l'hydrate de méthane par une méthode sans contact (a) une pellicule d'hydrate poussée à l'interface eau-gaz dans un capillaire de $200\mu\text{m}$ de diamètre intérieur à -25°C et 150bar. À cette température une légère augmentation de température provoque la contraction de l'eau, mettant la pellicule sous tension; (b) Le moment de rupture de la pellicule; (c) La tension de rupture varie en sens inverse de la taille de grain (effet Hall-Petch), contrôlée ici par

Les observations par vidéo-microscopie engendrent de grands volumes de données (plusieurs To), pour lesquelles les moyens de stockage du **MCIA (iRODS)** ont été essentiels: pérennité à moyen terme, accès à partir de postes de travail différents, partage,...

Article accepté : Contactless probing of polycrystalline methane hydrate at pore scale suggests weaker tensile properties than thought. D. Atig, D. Broseta, J.-M. Pereira & R. Brown. **Nature communications**, 2020, sous presse.

II- Susceptibilité non-linéaire du troisième ordre d'Yttria Stabilized Zirconia cristallin (H. Denawi, P. Karamanis & M. Rérat, CNRS/UNIV PAU & PAYS ADOUR, IPREM)

La technologie utilisant les propriétés d'optique non-linéaire des matériaux est une voie ultime pour le traitement ultra-rapide de signaux optiques dans les systèmes de communication de prochaine génération. De nouvelles fonctionnalités non linéaires doivent être mises en œuvre en photonique et les oxydes sont considérés comme des candidats prometteurs en raison de leur large éventail de caractéristiques. Dans ce contexte, le cristal cubique de dioxyde de Zirconium (ZrO_2) stabilisé par un pourcentage d'Yttrium (Yttria Stabilized Zirconia: YSZ) se distingue par sa capacité de croître par épitaxie sur du silicium en adaptant son réseau. Dans le cadre d'un projet ANR (FOIST), démarré en juin 2019, une étude théorique *ab-initio* de structures d'YSZ à 3 et 7 mol% de Y_2O_3 , dopé ou non par de l'erbium ou de l'hafnium, a été réalisée, en parallèle d'études expérimentales, afin d'en déduire les propriétés remarquables d'optique non linéaire du matériau, comme IDRI (Intensity-Dependent Refractive Index), pour la photonique. Grâce à l'auto-modulation de sa phase induite par le pourcentage d'Yttria et compte tenu de son orientation dans le guide d'onde, un coefficient expérimental Kerr effectif n_2 de YSZ égal à $4,0 \pm 2 \times 10^{-19} \text{ m}^2 \cdot \text{W}^{-1}$ pour 8% molaire de Y_2O_3 dans ZrO_2 a été mesuré. En accord avec la prévision théorique de $1,3 \times 10^{-19} \text{ m}^2 \cdot \text{W}^{-1}$, n_2 de YSZ est comparable à celui du nitrure de silicium, déjà utilisé en optique non linéaire. Ces résultats prometteurs constituent une nouvelle étape vers la mise en œuvre d'oxydes fonctionnels pour les applications d'optique non-linéaire.

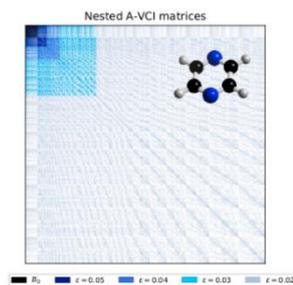


Les codes commerciaux de simulation numérique VASP, GAUSSIAN, ainsi qu'une version en développement du code CRYSTAL ont été utilisés sur **CURTA** et **PYRENE**. Nombre d'heures CPU utilisées: 3 millions, ~500 jobs ont été soumis, avec les paramètres : i) nodes=2 ou 8; ii) ntasks-per-nodes=8; iii) cpus-per-task=4 ; iv) mem-per-cpu=2G.

Article publié : [1] Third-order nonlinear optical susceptibility of crystalline oxide yttria-stabilized zirconia. G. Marcaud, S. Serna, K. Panaghiotis, C. Alonso-Ramos, X. Le Roux, M. Berciano, T. Maroutian, G. Agnus, P. Aubert, A. Jollivet, A. Ruiz-Caridad, L. Largeau, N. Isac, E. Cassan, S. Matzen, N. Dubreuil, M. Rérat, P. Lecoer, L. Vivien, **Photonics Research**, 2020, 8, 110.

III- Calcul de spectres de vibration Infra-Rouge (I. Baraille, D. Bégué, V. Lebris, M. Odunlami, CNRS/UNIV PAU & PAYS ADOUR, IPREM)

Une approche transversale basée sur la collaboration des chimistes théoriciens de l'IPREM avec les spécialistes du calcul scientifique de l'INRIA Bordeaux Sud-Ouest a permis le développement d'un algorithme pour le calcul de spectres de vibration IR au-delà de l'hypothèse harmonique : Adaptive vibrational configuration interaction (A-VCI) [avci2020]. Cet algorithme a permis de produire des calculs de référence dans le domaine, avec à la clé des gains conséquents en termes de taille mémoire et de temps CPU par rapport

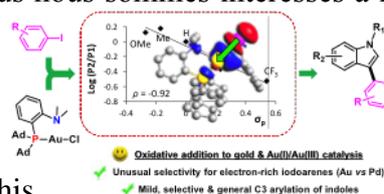


aux méthodes de calcul couramment utilisées en spectroscopie vibrationnelle. A-VCI a été implanté en C++ et les phases de mise au point du code et de production ont fait l'objet de travaux de simulation sur **CURTA** (MCIA) et **PYRENE** (UPPA). Face aux lourds besoins en mémoire (diagonalisation de grandes matrices), les nœuds bigmem ont principalement été utilisés pour une dizaine de calculs. La parallélisation du code en mémoire partagée ayant permis d'utiliser la totalité des ressources d'un nœud (64 cœurs, 3 To), les calculs ont été effectués assez rapidement (< 5 jours) sauf quelques exceptions (jusqu'à 15 jours). Le cluster PYRENE a principalement été utilisé pour de nombreux tests courts (< 2 heures) sur les nœuds de calcul standards (32 cœurs, 64 Go de RAM). Une vingtaine de tests de pré-production ont aussi été réalisés sur le nœud "bigmem" de PYRENE (64 cœurs, 1.5 To de RAM) dans des conditions calculatoires similaires aux calculs de production réalisés sur CURTA.

Article publié : Using computed infrared intensities for the reduction of vibrational configuration interaction bases. V. Lebris, M. Odunlami, D. Bégué, I. Baraille. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2020, 22, 7021.

IV- Catalyse à l'or. Rôle clé du ligand P^{AN} (E. D. Sosa-Carrizo, K. Miqueu, CNRS/UNIV PAU & PAYS ADOUR, IPREM en collaboration avec D. Bourissou, LHFA, Univ. Paul Sabatier Toulouse)

La réticence des complexes d'or à passer du degré d'oxydation Au(I) à Au(III) a longtemps empêché le développement de la catalyse à l'or pour notamment la formation de liaisons C-C. Cependant, des progrès spectaculaires ont récemment été réalisés, de sorte que la catalyse redox-or apparaît désormais comme un nouveau paradigme dans les réactions d'arylation. Dans ce contexte et en collaboration avec l'équipe de D. Bourissou, nous nous sommes intéressés à la capacité du ligand MeDalphos hémilabile (P^{AN}) à déclencher l'addition oxydante d'iodoarènes (Ar-I) différemment substitués en position para par des groupements donneurs et accepteurs d' e^- , par un couplage expérience-théorie. Les corrélations de Hammett ont confirmé une nette préférence pour l'or dans les substrats enrichis en e^- , réactivité différente de celle observée pour le palladium (préférence pour substrats pauvres en e^-). Sur la base de calculs de chemins réactionnels par DFT et d'une analyse détaillée des principaux TSs (NBO, CDA, ETS-NOCV via ADF), il a été proposé que le comportement



différent des deux métaux résultait d'un flux d'électrons inverse entre le substrat et le métal (Ph-I→Au versus Pd→Ph-I).

Le ligand (P[^]N) a également permis d'accéder à une large gamme de complexes π stables d'or(I) avec des alcènes neutres, riches et pour la première fois pauvre en e^- , intermédiaires clés dans de nombreuses réactions catalytiques. La situation de liaison a été analysée par couplage expérience-théorie (calculs DFT, CDA, NBO et AIM). Nous avons montré que la force de la coordination N→Au varie considérablement en fonction de l'alcène, suggérant que ce ligand P[^]N s'adapte à l'or et des variations notables ont été observées dans le rapport donation/retro-donation ligand/métal. Un examen détaillé des descripteurs de l'interaction Au/alcène et N→Au a révélé une corrélation intime entre les deux, avec une réponse linéaire du ligand (P[^]N) à la structure électronique de l'alcène, montrant que ce ligand présente un caractère non innocent et adaptatif.



GAUSSIAN a été utilisé ainsi que les logiciels CDA, NBO, AIM. Environ 500 jobs ont été soumis sur CURTA et PYRENE, avec les paramètres: i) nodes=2; ii) ntasks-per-nodes=8; iii) cpus-per-task =4; iv) mem-per-cpu=2G.

Articles publiés : ¹ Catalytic Au(I)/Au(III) Arylation with the Hemilabile MeDalphos Ligand: Unusual Selectivity for Electron-Rich Iodoarenes and Efficient Application to Indoles. J. Rodriguez, A. Zeineddine, E. D. Sosa Carrizo, K. Miqueu, N. Saffon-Merceron, A. Amgoune, D. Bourissou. *Chem. Sci.*, 2019, 10, 7183. ² Versatility and adaptative behaviour of the PN chelating ligand MeDalphos within gold(I) π -complexes. M. Navarro, A. Toledo, S. Mallet-Ladeira, E. D. Sosa Carrizo, K. Miqueu, D. Bourissou. *Chem. Sci.*, 2020, 11, 2750.

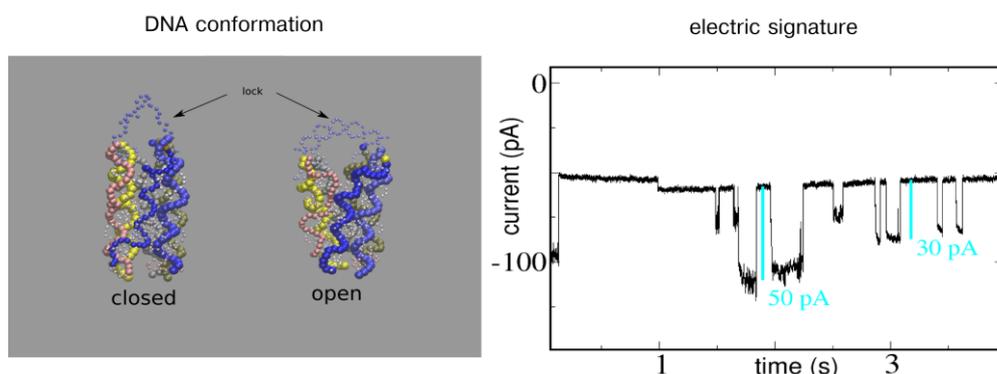
unité de recherche : **Chimie & de Biologie des Membranes & des Nano-objets (CBMN)**,
UMR5248,

correspondant : J. Elezgaray

Nanostructures à base d'ADN: dynamique, design.

L'ADN est la molécule qui conserve l'information génétique. Mais c'est aussi une molécule aux propriétés structurales étonnantes. Du fait de la grande spécificité des interactions Watson-Crick, l'ADN peut être utilisé comme un polymère permettant d'obtenir des structures nanométriques résolues à 2-3 nanomètres, et ceci sans faire appel à des techniques lourdes (mais standard) nécessaires dans d'autres domaines, tels que l'électronique. Même si des travaux autour de structures cristallines (N. Seeman) à base d'ADN ont été effectués depuis les années 90, ce sont les travaux de P. Rothemund (2006) qui ont permis un véritable essor de la technique dite 'origami ADN'. L'idée de base est d'obtenir une structure nanométrique par 'pliage' d'un long brin d'ADN (provenant du virus M13mp18) à l'aide de courtes séquences d'ADN qui vont jouer le rôle d'agraffes moléculaires permettant de rapprocher deux régions du virus. La méthode permet de coordonner la position finale de ~7000 paires de bases avec une résolution nanométrique, avec un taux de réussite qui est proche de 99%, en faisant appel uniquement aux propriétés d'auto assemblage de l'ADN.

Même si la réalisation et le design de ces structures ne nécessite pas en général de calculs lourds, leur caractérisation et la compréhension de leur comportement fait appel à la simulation moléculaire. A CBMN, mon équipe travaille sur la caractérisation et le design d'origamis ADN depuis 2010, aussi bien au niveau expérimental que théorique (simulation numérique). Nous nous sommes focalisés sur le design de nanopores ADN: il s'agit de structures principalement cylindriques, obtenues par auto-assemblage d'une dizaine de brins ADN, en suivant les principes des origamis ADN.



Nanopore ADN dont on peut moduler la géométrie par hybridation d'un autre brin ADN. A gauche, illustration de ce changement de conformation. A droite, enregistrement temporel du courant traversant une bicouche lipidique dans laquelle les nanopores peuvent s'insérer, ce qui induit une augmentation du courant. Les sauts de courant renseignent sur la géométrie du nanopore qui s'insère. Publié dans " A

tensegrity driven DNA nanopore", Mendoza, O., Calmet, P. Alver, I., Lecomte, S., Raoux, M., Cullin, C., Elezgaray, J., Nanoscale 9 (2017), 9762-9769.

La figure ci-dessus montre (à gauche), un schéma permettant d'illustrer la structure de ces nanopores. On peut distinguer six doubles hélices formant les parois d'un cylindre dont la longueur est $\sim 14\text{nm}$. Cette structure, essentiellement hydrophile, peut être rendue partiellement hydrophobe par ajout de modifications cholesterol, qui permettent l'insertion du nanopore dans des bicouches lipidiques. La même figure montre que la géométrie de cette structure peut être modifiée par la présence d'une séquence ADN qui, par hybridation, peut faire augmenter le diamètre d'entrée du cylindre. Cette augmentation est de l'ordre de 2 nm, mais peut être mise en évidence en mesurant la conductivité électrique qui traverse le nanopore. La partie droite de la figure montre un enregistrement temporel où l'on observe des sauts en courant, dont l'intensité correspond, respectivement, à des pores ouverts (50pA) et fermés (30pA). Chacun de ces sauts correspond ainsi à l'insertion d'un unique nanopore: la méthode permet ainsi la détection d'un unique brin d'ADN.

Les schémas de la figure ci-dessus ont été obtenus par des simulations de dynamique moléculaire, à l'aide du programme oxDNA. Celui-ci permet d'étudier la dynamique des nanostructures telles que le nanopore, à un niveau de détail qui est moindre que celui des simulations classiques obtenues au niveau atomique. Ce logiciel travaille avec une représentation 'gros-grain' de l'ADN qui se prête mal à la parallélisation. Il s'agit donc de jobs scalaires, qui peuvent être parfois longs (quelques jours, typiquement). Nous travaillons actuellement sur d'autres types de représentation des nanopores dans lesquelles la structure secondaire est fixée, mais l'interaction avec des bicouches lipidiques est prise en compte de façon réaliste. Ces simulations sont effectuées avec le logiciel GROMACS, qui se prête bien à la parallélisation type MPI. Dans les deux cas, l'apport de la simulation numérique à l'étude des nanopores est cruciale, puisque pour ces structures les méthodes structurales telles que la cristallographie ou la RMN sont difficiles à mettre en place.

Les deux projets utilisant le plus le calculateur CURTA au travers de la file INRIA sont un projet qui consolide la pile logicielle développée (ADT Gordon) et l'équipe Flowers (intelligence artificielle).

1 ADT Gordon

Cette action a démarré en novembre 2018 et regroupe les équipes projets communes équipes [Hiepacs](#), [Storm](#), [Tadaam](#) et [PLEIADE](#). Le but de l'action de développement technologique (ADT) est d'être capable de résoudre un problème de classification d'individus (micro-organismes, eucaryotes) posé par nos partenaires de l'INRAE (équipe [PLEIADE](#)). Les échantillons pouvant varier de dizaine de milliers au million d'individus les méthodes robustes de classification basées sur de la décomposition en valeurs singulières (SVD) ne permettent pas de résoudre le problème en un temps raisonnable et sur une seule machine. L'utilisation de l'algèbre linéaire aléatoire permet aujourd'hui d'envisager la résolution de ce type de problème sur des grands jeux de données en faisant intervenir des algorithmes parallèles d'algèbre linéaire dense (produit de matrices, décomposition QR, SVD). Les équipes [Hiepacs](#), [Storm](#) et [Tadaam](#) mettent en œuvre depuis plusieurs années une pile logicielle permettant de résoudre de très grands systèmes linéaires sur des machines de calculs hautes performances, notamment pour des matrices denses. La bibliothèque [Chameleon](#) regroupe ces algorithmes et tire partie de la puissance du moteur d'exécution [StarPU](#) et de la bibliothèque de communication [NewMadeleine](#).

Les objectifs de cette ADT sont :

- rendre interopérable et consolider la pile logicielle NewMadeleine, StarPU, Chameleon,
- la porter sur une application cible dimensionnante, le problème metabarcoding de PLEIADE,
- tester sur des supercalculateurs (entre 100 et 200 nœuds),
- optimiser la performance et le passage à l'échelle pour fournir à Inria et à la communauté HPC dans sa globalité une pile logicielle du meilleur niveau international,
- la problématique du passage à l'échelle en nombre de nœuds nous a amené à optimiser un cas de communication particulier : lorsqu'un nœud envoie une même donnée à plusieurs nœuds (broadcast).

Les principaux résultats que nous avons obtenus sont les suivants. Tout d'abord, la pile logicielle d'Inria et FMR (SVD basée sur la random projection développé dans [Hiepacs](#)) ont été intégrée avec succès au logiciel de metabarcoding **Diodon** développé conjointement par l'INRAE et l'INRIA. De plus, pour assurer le contrôle et la reproductibilité des expérimentations nous nous sommes appuyés sur [Guix-HPC](#). Dans ce cadre, nous avons pu installer facilement l'ensemble des programmes avec leurs dépendances via Guix en générant une image Singularity. N.B : Curta fourni l'outil Singularity via un module. Cela permet de lancer les expériences dans le même environnement sur les machines de PlaFRIM, du MCIA et du GENCI. Les optimisations sur les communications collectives de type broadcasts mises en place dans ce on conduit à des améliorations des performances allant jusqu'à 30 % sur des décompositions de Cholesky. Les résultats sont visibles sur la page web [ADT-Gordon](#).

Des expériences sur supercalculateur comme [PlaFRIM](#) et [MCIA CURTA](#) ont permis de montrer que la pile était capable de résoudre efficacement un problème de grande taille (400 000 individus) par la méthode de « Multidimensional Scaling » (MDS) via une méthode de random SVD avec un rang de 960 en 20 minutes sur 40 nœuds (Tab-1).

Number of nodes	ReadH5	Pre	RSVD
20	1441	32	54
40	978	33	39

Table 1 : Performances (temps CPU en s) de chaque étape de la MDS - Curta, nombre d'individus N = 426 548, Rang de la matrice de projection R= 960.

La figure 1 montre la heatmap de la projection sur les deux premiers axes du nuage de points. La couleur représente le logarithme du nombre de reads projetés sur un même pixel. L'organisation en clusters de forte densité candidats à être des OTU (Operational Taxonomic Units) est visible.

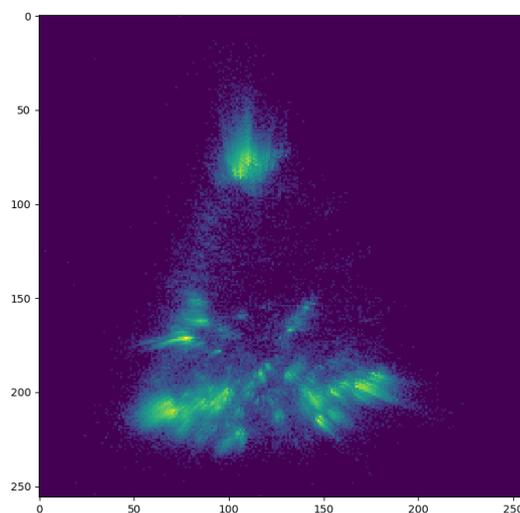


Figure 1 : Heatmap de la projection sur les deux premiers axes d'un nuage de points de 400 000 séquences (diatomées du Lac Léman) par MDS – Produit par l'ADT Gordon.

Ces expérimentations sur différents jeux de metabarcoding ont mis en exergue que pour ces tailles de problèmes la gestion des I/O, entrées sorties avec les disques, devient critique et domine les temps de calcul. Ces questions sortent du cadre de cette ADT et devront être résolues dans le cadre d'un autre projet.

Dans le cadre de ce projet, le moteur de communication NewMadeleine devait être en mesure de pouvoir établir des canaux de communications sur un grand nombre de nœuds (> 200) en un temps raisonnable. Pour se faire, les développements ont été réalisés de manière incrémentale :

- le calculateur PlaFRIM a permis de mettre en place et déboguer les premières mécaniques ;
- CURTA a permis de réaliser une première montée en puissance et de porter le code sur une architecture différente ;
- les développements se sont terminés sur un supercalculateur plus conséquent permettant de réaliser des tests sur un nombre de nœuds plus élevé.

Curta s'est donc inscrit dans une logique de montée en puissance progressive et de diversification de plateforme pour les développements de [NewMadeleine](#).

2. Flowers

IMAGINE [1] - Cédric Colas & Tristan Karch

Ce projet a pour but d'utiliser la compositionnalité du langage pour faciliter la découverte de nouveaux comportements lorsqu'un agent autonome explore son environnement.

Nous avons conduit des expériences numériques qui modélisent les interactions sociales entre un agent autonome et un partenaire social permettant à l'agent d'apprendre à manipuler des objets dans un environnement 2D. Nos expériences montrent que l'agent parvient à développer un répertoire de tâches à partir de descriptions en langage naturel fournies par le partenaire social. Nous prouvons également que l'agent peut recomposer les descriptions fournies pour découvrir de nouveaux comportements.

ALP-GMM [2] - Rémy Portelas & Cédric Colas

Ce projet a pour but d'expérimenter l'utilisation de méthodes de génération autonome de curriculum de tâches basées sur la curiosité pour des réseaux de neurones apprenants par renforcement. L'algorithme développé, ALP-GMM, a été testé en simulation, sur un espace de tâches dont les paramètres contrôlent la génération procédurale de parkour 2D. Nos expériences montrent qu'utiliser ALP-GMM couplé à un réseau de neurones apprenants par renforcement dans cet environnement améliore significativement les performances de l'apprenant comparée à l'utilisation d'anciennes approches ou de curriculum aléatoires.

HOLMES [3] - Mayalen Etcheverry

Ce projet a pour but de développer des algorithmes d'apprentissage incrémental de représentations à partir des observations collectées par un agent artificiel qui explore un environnement. Nous visons d'appliquer ces algorithmes comme outils d'aide à la découverte de nouvelles structures dans des systèmes dynamiques complexes. Nous avons développé une nouvelle architecture hiérarchique et dynamique qui permet à l'agent artificiel de progressivement organiser ses différentes découvertes dans différents modules et d'apprendre une hiérarchie de représentations diverses. Combiné à des algorithmes d'exploration intrinsèquement motivés, nos expériences montrent que ce système forme un assistant de découverte qui peut adapter efficacement sa recherche de diversité aux préférences d'un utilisateur externe.

Bibliographie

[1] Language as a Cognitive Tool to Imagine Goals in Curiosity-Driven Exploration - Cédric Colas, Tristan Karch, Nicolas Lair, Jean-Michel Dussoux, Clément Moulin-Frier, Peter Ford Dominey, Pierre-Yves Oudeyer (<https://arxiv.org/abs/2002.09253>)

[2] Teacher algorithms for curriculum learning of Deep RL in continuously parameterized environments - Rémy Portelas, Cédric Colas, Katja Hofmann, Pierre-Yves Oudeyer (<https://arxiv.org/abs/1910.07224>)

[3] Progressive growing of self-organized hierarchical representations for exploration - Mayalen Etcheverry, Pierre-Yves Oudeyer, Chris Reinke (<https://arxiv.org/abs/2005.06369>)

Imagerie Neurofonctionnelle (IMN)

unité de recherche : **Institut des maladie Neurodégénératives (IMN)**, UMR5293 / Equipe 5 :
GIN : Groupe d'imagerie Neurofonctionnelle, UB / CNRS/CEA

Projet. Traitement de la cohorte de Neuroimagerie MRi-Share

Contexte. La cohorte MRi-Share (sous-échantillon de la base I-Share, <http://www.i-share.fr/>) est une base de données de neuro-imagerie cérébrale d'Imagerie par Résonance Magnétique (IRM) acquise à Bordeaux sur 1870 participants. Dans cette base de données, différentes modalités d'IRM ont été acquises pour chaque participant, dont une séquence d'imagerie de l'anatomie du cerveau et une séquence d'imagerie fonctionnelle au repos. L'analyse de ces 2 séquences d'acquisitions a été réalisée sur CURTA.

Méthode. Pour le traitement du volume 3-dimensionnel (3D) anatomique (volume 3D 192x256x256 voxels de 1mm³) on utilise le logiciel en accès libre *Freesurfer* (<https://surfer.nmr.mgh.harvard.edu/>). Ce dernier est un outil d'analyse d'images IRM qui permet d'extraire des indices de volumétrie dans le cerveau comme le volume total de matière grise, de matière blanche et le volume total de la boîte crânienne. Ce logiciel réalise également une modélisation par triangle de la surface du cerveau et une parcellisation régionale de la matière grise (Figure 1.A.B.C) par déformation de l'atlas anatomique *Desikan*. La préparation des données, l'analyse et le contrôle qualité sont réalisés ensemble dans un même pipeline python, à l'intérieur d'un conteneur *singularity*. La séquence d'imagerie fonctionnelle consiste en l'acquisition de 1048 volumes 3D en 15 minutes (1048 volumes de 88x88x46 voxels de 2.4x2.4x2.4 mm³). Cette séquence permet l'étude de l'hémodynamique cérébrale pendant une activité cognitive dite de « Repos » qui correspond à une période où le participant n'a aucune tâche particulière à accomplir. Chaque volume étant acquis très rapidement (0.850 s) et le participant ne pouvant rester parfaitement immobile pendant toute la durée de l'acquisition, la procédure de traitement implémente de nombreuses étapes pour corriger les déformations géométriques, l'effet du mouvement et augmenter le rapport signal sur bruit. Les résultats obtenus par cette procédure sont les données individuelles de connectivité entre les régions de l'atlas AICHA (384 régions), soit 75451 biomarqueurs de connectivité entre chaque paire de régions (Figure 1.D). Ces biomarqueurs permettent de mesurer l'organisation cérébrale fonctionnelle en termes de réseaux. Le pipeline de traitement utilise la librairie python *nipype*, qui est compatible avec *slurm*, qui sert d'interface à plusieurs outils de neuroimagerie (FSL, SPM, AFNI...), tous contenus dans un conteneur *singularity*.

Calcul. Pour un volume anatomique la procédure complète prend environ 12 heures de calcul sur un processeur tel que ceux constituant CURTA et cette procédure n'est pas parallélisable. Sur la base d'une demande de 200 processeurs tournant en simultanée, le traitement des images morphologiques a été réalisé sur 5 jours (environ 110 heures de calcul). Pour la séquence fonctionnelle les temps de calcul pour les données d'un participant varient de 9 à 12h. Au total,

le calcul sur la cohorte a duré 2 semaines. Au vu des résultats pour affiner la procédure, le calcul a été réalisé 3 fois. Du fait du temps de transfert et du temps de calcul des données d'acquisition, 60 participants étaient calculés en parallèle sur la grille en moyenne. Les jobs ont utilisé les nœuds de calcul « *compute* » de la partition ubx2.

Publications. Compte tenu de la fin des traitements au début 2020, les 3 premiers articles sont en cours de finalisation et seront soumis dans le courant de l'année.

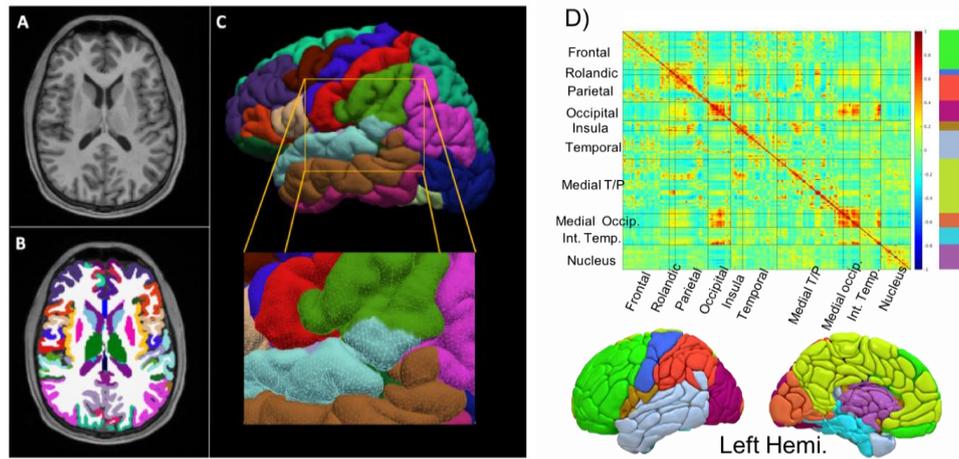


Figure 1 : A) Coupe axiale de l'IRM cérébrale morphologique d'un participant, B) même coupe avec une parcellisation du ruban cortical, C) Rendu 3D et maillage de modélisation, D) Matrice de connectivité intrinsèque calculée sur les 384 régions et rendu 3D de l'hémisphère gauche de l'atlas fonctionnel.

unité de recherche : **Laboratoire des Composites ThermoStructuraux (LCTS)**, UMR5801

1. Projet de recherche

La plateforme de calcul intensif du MClA a été utilisée dans le cadre des travaux de la thèse de Xavier Lamboley concernant l'ablation de matériaux carbonés lors de rentrées atmosphériques. Cette thèse a été menée de 2016 à 2019 au sein du LCTS à Bordeaux, sous la direction de G. Vignoles et J. Mathiaud.

Il a été observé sur plusieurs échantillons de matériaux carbonés de protection thermique pour la rentrée atmosphérique, récupérés après vol ou testés au sol, que la consommation due à l'oxydation, la sublimation ou à la nitruration du carbone ne se fait pas de manière uniforme sur la surface de l'objet. Sous certaines conditions relatives à la nature de l'écoulement d'une part et à l'état de surface du matériau d'autre part, des creusement réguliers se forment sur la paroi du corps de rentrée. Ces structures caractéristiques sont appelées des « coups de gouge », ou « scallops » en anglais, et sont étudiées du fait de l'impact qu'elles peuvent représenter sur la trajectoire de la rentrée atmosphérique.



Le sujet de la thèse était donc d'identifier quels sont les paramètres susceptibles d'amener la formation de ces creusements, afin de pouvoir anticiper leurs dimensions au cours du vol en fonction des paramètres identifiés.

2. Besoin en calcul intensif

Les calculs ont concerné la résolution des équations de Navier-Stokes pour la description d'écoulements en 2D, incluant une description de la turbulence par modèle dit « γ - Re_θ », lui-même bâti sur des équations de type « k - ω », amenant à 8 ddl par point de résolution ; de plus, ces équations (fortement non-linéaires) étaient couplées avec une description du transport d'une espèce responsable de l'ablation par oxydation et une gestion du recul de la surface (et du maillage qui l'accompagne).

Les paramètres qui interviennent dans la formulation du couplage entre l'écoulement et la récession de paroi sont nombreux ; la vitesse de l'écoulement (caractérisée par le nombre de Reynolds), la réactivité du matériau ainsi que la rugosité de la surface en sont les exemples les plus marquants.

Une étude paramétrique a donc été envisagée dans un contexte bidimensionnel simplifié (notamment en considérant un écoulement incompressible), afin d'étudier l'influence des

paramètres physiques sur la croissance ou la récession d'une perturbation initiale de la surface. À cela sont venus s'ajouter des paramètres numériques afin de vérifier la pertinence des résultats obtenus. En effet les écoulements pariétaux qui ont été simulés avec la méthode des Volumes Finis sont particulièrement exigeants en termes de qualité de maillage près de la paroi.

Le travail effectué a donc consisté à lancer un grand nombre de calculs en faisant varier un ou plusieurs paramètres entre chaque calcul. Pour ce faire, la plateforme du MCI s'est révélée particulièrement adaptée.

3. Utilisation de la plateforme

3.1. Codes de calcul

Le code de calcul utilisé sur le cluster de calcul est *OpenFOAM*, un logiciel open-source de CFD (Computational Fluid Dynamics), qui implémente la méthode des Volumes Finis et qui permet en outre l'introduction facile d'équations supplémentaires à résoudre ou d'algorithmes à utiliser. Les extensions nécessaires ont donc été développées afin de coupler l'écoulement instationnaire à une paroi récessive, dont la vitesse de récession locale est déterminée par la réactivité du matériau et la concentration en oxydant en chaque point de la surface.

Afin de faire varier les paramètres au sein du cas de calcul mis en place, le code *SURRF* (Surface Recession under Reactive Flow) a été développé en *Python*. Ce code a pour but de générer les cas de calcul qui seront ensuite traités par *OpenFOAM*.

3.2. Lancement des calculs

Dans le détail, l'utilisation de *SURRF* pour un seul cas de calcul consiste à prendre en entrée un unique fichier de configuration (.ini) et qui permet de générer le cas de calcul *OpenFOAM* correspondant. Ce code peut également être utilisé en décrivant toujours dans le fichier de configuration la liste des valeurs que doit prendre un paramètre, et les différents cas de calcul *OpenFOAM* seront alors générés en fonction. Enfin, *SURRF* permet également de récupérer certains résultats intéressants de l'étude paramétrique décrite dans le fichier d'initialisation pour exploitation, qui sont ensuite renvoyés sur une machine locale.

Une fois les cas de calcul *OpenFOAM* créés, le gestionnaire de calculs *SLURM* permet de lancer les calculs sur les nœuds du cluster. Chacun des cas de calcul pris séparément ne nécessite pas énormément de ressources ; en effet, les simulations sont bidimensionnelles et les domaines de calcul ne sont pas démesurés.

Les capacités de parallélisme d'*OpenFOAM* ont été mises à profit : le maillage de chaque cas de calcul est partitionné en 4 de manière équilibrée. L'étude du gain d'efficacité en augmentant le nombre de processeurs (speed-up) a montré qu'il était inutile d'augmenter au-delà de 4 en raison des communications entre processeurs (sur un même nœud). La mémoire utilisée n'a pas été une contrainte pour les calculs bidimensionnels envisagés.

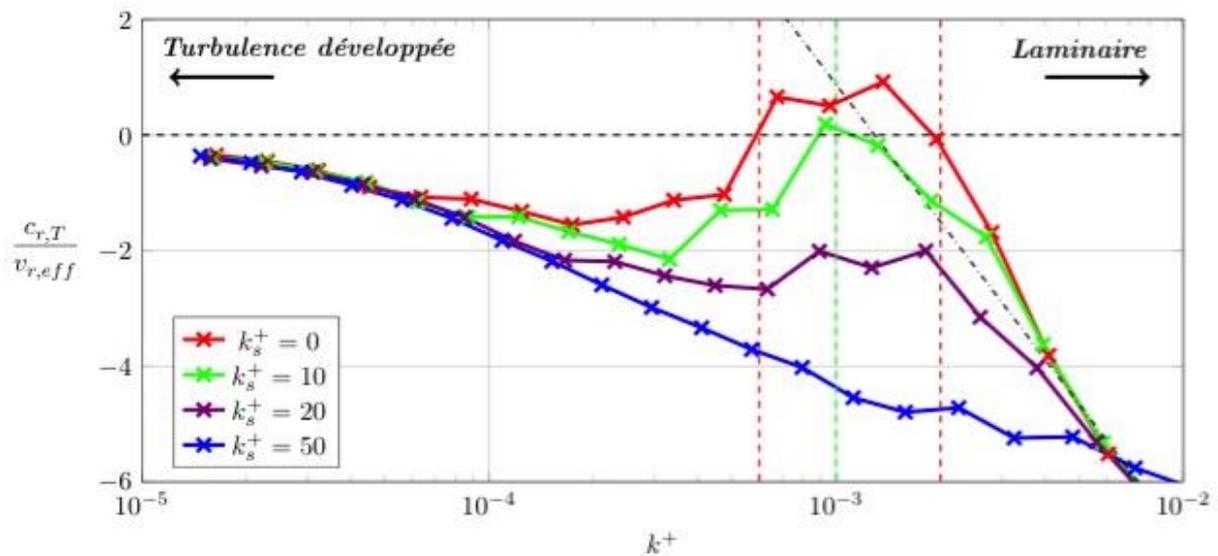
3.3. Ressources utilisées

La grande disponibilité de la machine (en particulier lors de la migration de *avakas* vers *curta*) a permis de lancer un grand nombre de jobs sur les nœuds : il a par exemple été possible, sur une étude paramétrique, de faire varier deux paramètres, chacun prenant entre 10 et 20 valeurs, ce qui a représenté jusqu'à 200 jobs simultanés chacun utilisant 4 processeurs. Afin de limiter les communications au mieux, un job doit n'utiliser que des processeurs d'un même nœud.

Tous les jeux de paramètres ne représentent pas le même temps de calcul, mais leur durée moyenne se situe autour des 12 h, et ont pu monter jusqu'à 48 h dans certains cas. Des nœuds standard (c6100) ont été utilisés.

4. Principaux résultats obtenus

Les études paramétriques réalisées dans le cadre de ce travail ont permis de mieux comprendre les mécanismes à l'œuvre dans la formation des coups de gouge. En particulier, il a été mis en évidence une gamme de nombre de Reynolds pour laquelle une perturbation initiale de la surface va croître, ce qui est donc un indicateur d'une surface instable.



Taux de croissance adimensionné en fonction du nombre de Reynolds (basé sur le nombre d'onde de la perturbation) pour différentes valeurs du paramètre de rugosité de la surface k_s^+

Nous avons également montré que la microrugosité du matériau tend à faire disparaître cette zone d'instabilité. Ces résultats illustratifs sont en bon accord avec ce qui a pu être observé expérimentalement.

Ces résultats ont été publiés lors de différentes conférences (HT-CMC10 à Bordeaux, Matériaux 2018 à Strasbourg, CFM2019 à Brest) et sont détaillés dans mon mémoire de thèse « Apparition de rugosités de surface lors de l'ablation d'un matériau composite en régime de transition entre laminaire et turbulent » (X. Lamboley, soutenue le 11/12/2019). Ils vont enfin faire l'objet d'une publication, actuellement en cours de rédaction.

Mathématiques (IMB)

unité de recherche : **Institut de Mathématiques de Bordeaux (IMB)**, UMR 5251

Différentes équipes de l'IMB exploitent les ressources du MCI, notamment Curta, afin de mener à bien des projets scientifiques, dont ceux décrits ci-dessous.

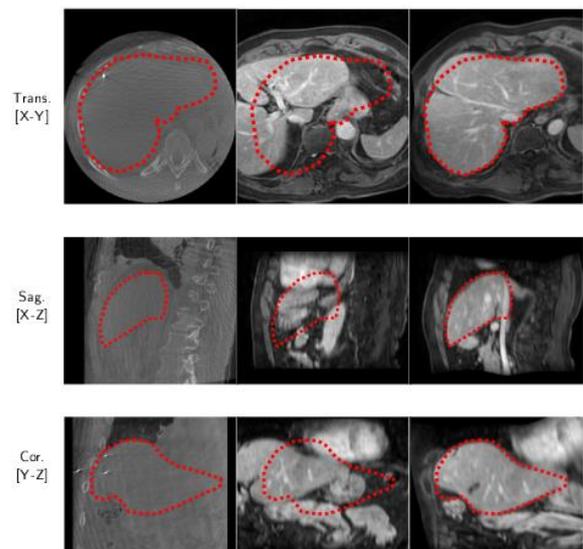
Equipe Image Optimisation et Probabilités :

Recalage multi-modal d'images (Baudoin Denis de Seneville)

Afin de mener à bien des procédures médicales interventionnelles dans le contexte de thérapies en oncologie mini- ou non-invasives (ablation thermique ou radiothérapie) guidées en temps réel, plusieurs tâches (telles que des calculs de dépôts de dose ou la propagation de délimitations déterminées par le radiologue) requièrent une cohérence spatiale entre les images de planification et celles acquises à des divers moments du traitement. Pour répondre à ce besoin, nous avons proposé un nouvel algorithme de recalage multi-modal, basées sur une approche variationnelle, compatible avec les contraintes cliniques d'un cadre interventionnel, baptisé **EVolution (Edge-based Variational method for non-rigid multi-modal image registraTION)**.

Voici une image avec un recalage de deux images 3D d'un foie (humain) obtenues par un CBCT (1ere colonne) et un IRM (2eme colonne). La 3ème colonne montre les images IRM recalées avec l'algorithme développé (on voit bien que le contour du foie dessiné sur la première colonne est bien superposé au foie sur l'IRM dans la colonne de droite).

Dans ce contexte, le MCI permet également de travailler sur des méthodes innovantes de deep learning destinées à compenser des artefacts d'imagerie dont la modélisation explicite est extrêmement difficile.



Synthèse de textures via le transport optimal de patches (A. Houdard, A. Leclaire, N. Papadakis, J. Rabin)

La synthèse de textures consiste, à partir d'un échantillon de texture donné, à produire une image éventuellement beaucoup plus grande ayant les mêmes caractéristiques perceptuelles (le même aspect) en évitant autant que possible les recopies pixel à pixel. Cette problématique intervient notamment en graphisme dans la création d'images de synthèse, qui nécessite des algorithmes rapides et parallèles.

Pour synthétiser une texture, on cherche alors à créer une image de taille arbitrairement grande, dans laquelle on contraint la distribution des patches à être proche de celle observée

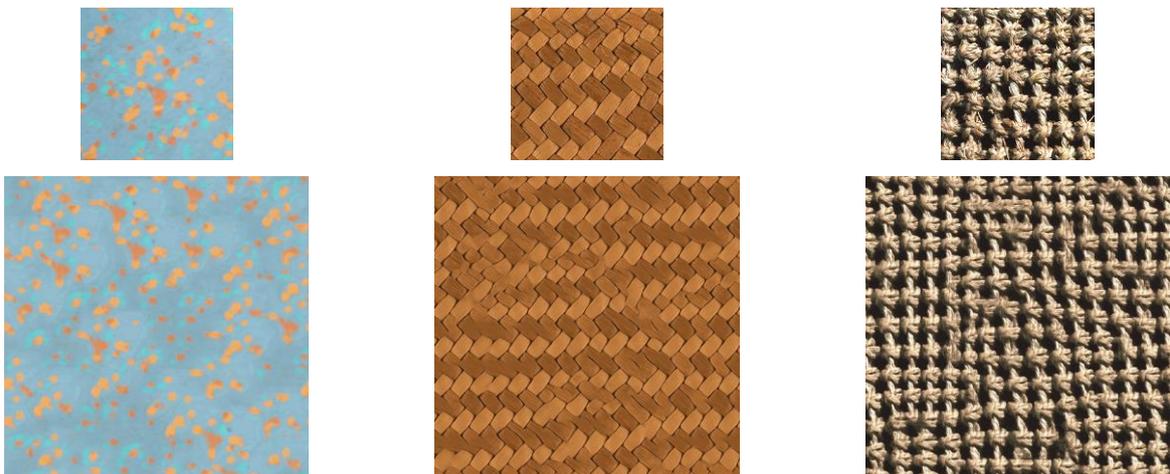
dans la texture originale. Mathématiquement, on peut traduire cette contrainte en utilisant des distances de transport optimal entre distribution de patches. Les patches constituant une grande masse de données en haute dimension, le calcul de ces distances de transport peut être effectué par des algorithmes stochastiques qui vont naturellement exploiter les redondances des données tout en étant hautement parallélisables sur GPU.

En 2020, nous avons ainsi conçu une méthode de synthèse de textures par optimisation de distances de transport par patch à plusieurs résolutions. Cette méthode s'adapte à l'estimation d'un réseau de neurones convolutionnel génératif permettant de synthétiser une texture donnée en un temps record. La gestion des paramètres pour ce type de modèle étant très délicate, le soutien du MClA nous a permis de lancer un très large panel d'expériences de synthèse en tirant un grand profit des ressources de calcul des clusters GPU à disposition.

Type de nœud :GPU : Tesla P100-PCIE

RAM utilisée : environ 1,5 Go (sur GPU)

Temps de calcul : 700h (environ 30' pour estimer le réseau génératif d'une texture).

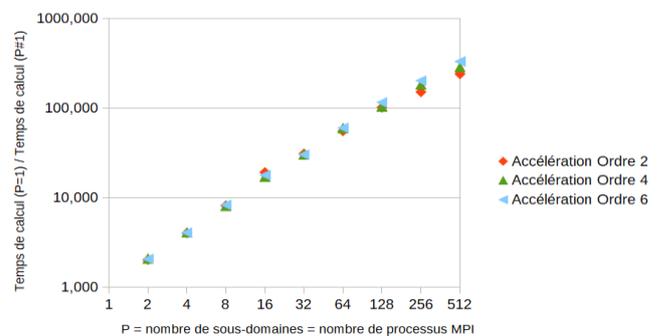


Exemples de synthèse par réseau convolutionnel (1ère ligne originaux, 2ème ligne synthèses)

Equipe Calcul Scientifique et Modélisation

Code VFDIAM 2D, Méthodes de volumes finis d'ordre très élevé pour l'électrophysiologie cardiaque. Équations résolues : réaction diffusion. Fortran 90 / OpenMP / MPI (Yves Coudière, Khodor Khadra, Rodolphe Turpault)

Le code est exploité avec différents maillages non structurés et différents ordres de schéma.



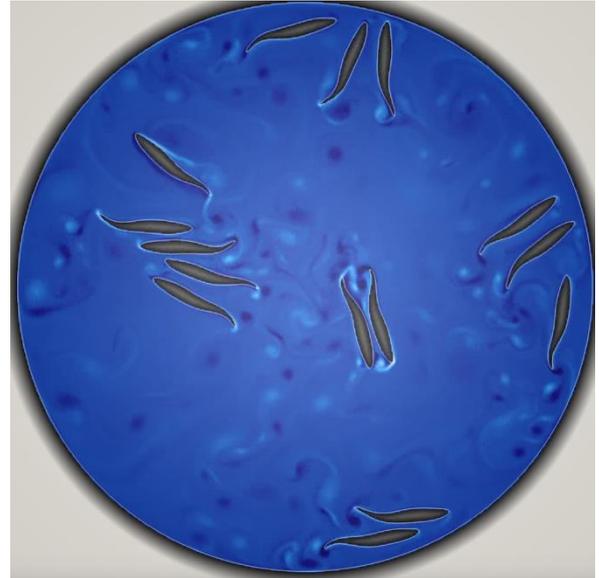
Cette figure (échelle logarithmique) montre une très bonne accélération du code MPI jusqu'à 512 coeurs de calcul et pour un nombre de mailles dans le domaine global égal à 151740.

Quatre maillages de plus en plus fins et trois ordres de schéma de plus en plus élevés sont testés.

Pour un maillage et un ordre de schéma fixés, l'exécutable a tourné sur 2^P coeurs de calcul ($0 < P < 10$). Ainsi 132 jobs de calcul ont été effectués pour mener à bout une première campagne de résultats, nécessitant jusqu'à 32 noeuds et 1024 coeurs de calcul.

Michel Bergmann (équipe INRIA Memphis)

La première application est une étude des interactions entre plusieurs poissons qui nagent dans un enclos fermé, éventuellement perméable ou élastique. Un point central est la modélisation numérique des collisions. Typiquement, ces simulations sont effectuées sur 2 noeuds de 32 coeurs, sur 24 heures. Les maillages Cartésien utilisés sont de 512×512 . A ce stade, nous avons simulé un temps physique suffisant pour voir apparaitre des agglomérats de nageurs.



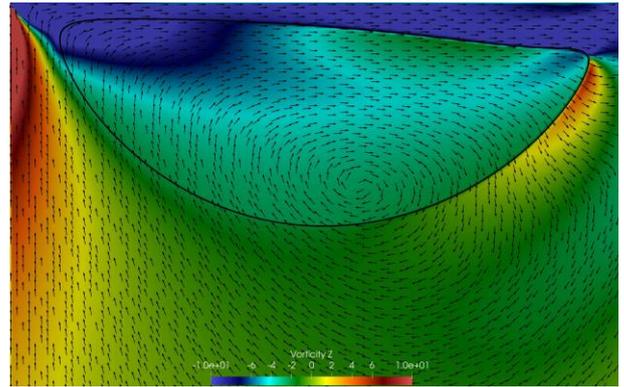
Une seconde application est la simulation numérique d'un saut de dauphin. Le déplacement du dauphin incluant le saut n'est pas imposé mais résulte des interactions fluide-structure. Uniquement le mouvement de déformation du corps du dauphin est imposé. Cette simulation fait en effet intervenir le traitement de plusieurs interfaces (bi-fluide eau-air et fluide-structure). Ce type de simulations peut atteindre plusieurs centaines de degrés de liberté sur maillage Cartésien, et dans ce cas précis, elle a été effectuée sur 8 noeuds de 32 coeurs pour 72 heures de calcul.



Antoine Fondanèche (équipe INRIA Memphis)

Nous développons une méthode versatile entièrement Eulérienne pour la simulation numérique de problèmes d'interaction fluide-structure (FSI) en deux dimensions. Les équations du modèle sont résolues de manière monolithique en utilisant un schéma volumes finis sur maillages adaptatifs dynamiques.

Calculs parallèles habituels: 2-3 jobs par jour sur 3-4 noeuds pendant 3 à 4h.

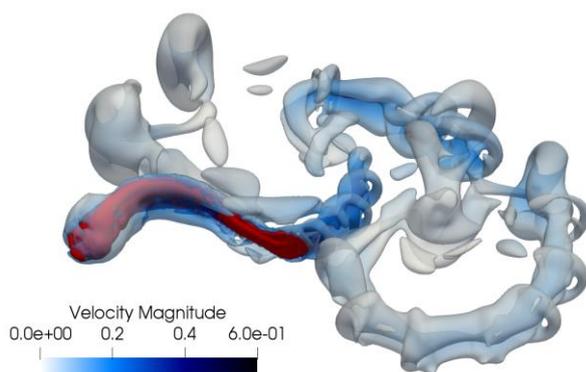


Déformation d'un cylindre mou immergé dans une cavité entraînée

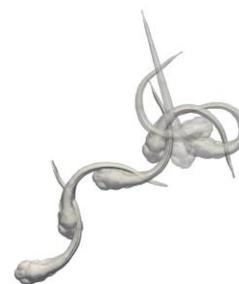
Guillaume Ravel (équipe INRIA Memphis)

Simulation numérique tri-dimensionnelle de la nage de fuite du poisson-zèbre basée sur sa réaction de fuite expérimentale

La simulation numérique de la nage de fuite du poisson-zèbre comprend la reconstruction tri-dimensionnelle d'un poisson-zèbre réel ainsi que de sa déformation expérimentale. Le but de ce calcul est de reproduire une nage de fuite expérimentale afin d'assister des biologistes travaillant sur la locomotion du poisson-zèbre. Une gamme de simulations massivement parallèles a été lancée afin de traiter différents régimes d'écoulements (Reynolds compris entre 10 et 900). L'ensemble de ces simulations représente plus d'une vingtaine de cas tests. Ressources utilisées : Real time : 57.5 ms, Wall time : 32 556s soit 9h2m36s, sur 256 coeurs, maillage cartésien : 420x420x70, maillage surface poisson-zèbre : 180x300 nœuds.



Isocontour du Q-criterion (coloré par la vitesse) représentant la vorticit  et les vortex g n r s dans le sillage de la fuite du poisson-z bre (color  en rouge)



Locomotion num rique du poisson-z bre lors de sa nage de fuite bas e sur sa d formation exp rimentale

Laboratoire de mathématiques et de leurs applications de Pau (LMAP, UMR CNRS 5142)

<https://lma-umr5142.univ-pau.fr/>

Correspondant : Stéphanie Delage Santacreu (stephanie.delage@univ-pau.fr)

Le LMAP est une unité mixte de recherches rattaché à l'UPPA et au CNRS (UMR5142). Il est partenaire d'Inria Bordeaux Sud-Ouest au travers de 2 équipes communes Magique3d et Cagire. Il est membre de l'Institut Pluridisciplinaire de Recherche Appliquée (IPRA - FR CNRS 2952) et de l'Institut Carnot-Isifor. Depuis les mathématiques pures jusqu'aux mathématiques appliquées, ses domaines d'applications concernent les géo-ressources, l'aérothermodynamique, l'environnement, la santé, la sûreté de fonctionnement, l'optimisation de structures. La recherche pluridisciplinaire étant au coeur de son activité, il a aussi des compétences en mécanique des fluides et en thermique. Bénéficiant d'un tissu industriel particulièrement favorable dans les domaines de l'ingénierie pétrolière et de l'aérothermodynamique, le LMAP développe un fort partenariat industriel avec aussi bien des entreprises multinationales, des PME locales.

Simulation numérique 3D d'écoulements multiphasiques réactifs en milieu poreux

Depuis quelques années, le Groupe Milieux Poreux du LMAP travaille sur la modélisation et simulation numérique d'écoulements multiphasiques réactifs. Nous avons ainsi développé le simulateur [Reactive-DuMu^x](#) (A Collaborative Platform for Numerical Simulation of Multiphase Multicomponent Flow with Reactive Transport in Porous Media). Dans le cadre de la thèse de M. Id Moulay [1], nous avons développé une stratégie totalement couplée, totalement implicite pour traiter des cas impliquant des fortes interactions gaz-eau-roche sur des longues périodes, l'application mise en avant étant le stockage géologique du CO₂. Ainsi, nous avons considéré un cas complexe 3D proposé dans la littérature puis comparé les résultats avec ceux obtenus par une approche séquentielle développée par l'équipe. Des calculs ont été effectués sur CURTA en utilisant jusqu'à 768 processeurs. La figure 1 (gauche) représente la molalité en CO_{2(l)} au bout de 2000 ans de simulation tandis que la figure 1 (droite) représente l'efficacité forte en fonction du nombre de processeurs. Trois tailles de problèmes ont été considérées (640'000, 1.44 10⁶ et 5.7 10⁶ éléments avec 12 inconnues par élément) [2].

Personnes impliquées : E. Ahusborde , B. Amaziane , M. El Ossmani, M. Id Moulay (LMAP)

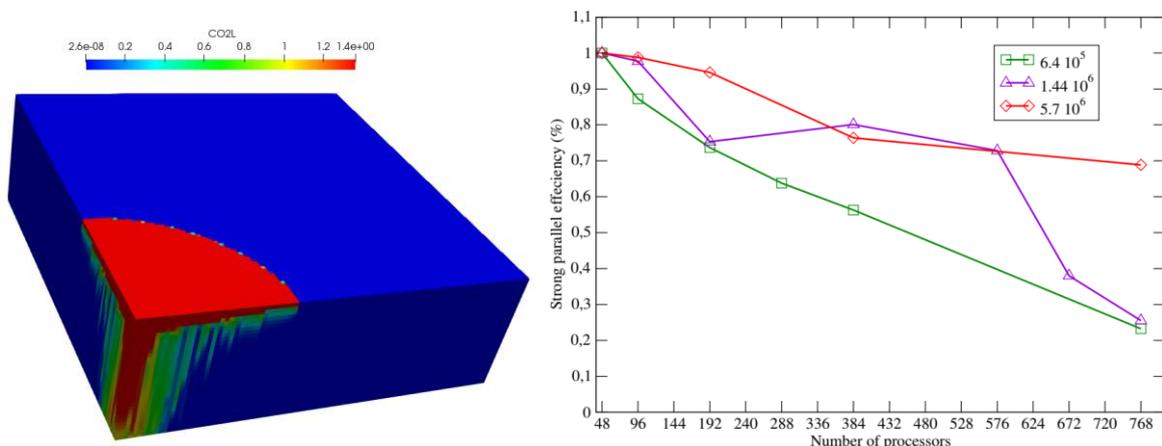


Figure 1 : Molalité du CO_{2(l)} au bout de 2000 ans (gauche) et efficacité forte (droite).

Publications

[1] Id Moulay M., *Simulation numérique 3D d'écoulement multiphysiques réactifs en milieux poreux*, Thèse de Doctorat, UPPA, soutenue le 09 décembre 2019.

[2] Ahusborde E., Amaziane B., Id Moulay M., *High Performance computing of reactive multiphase flows in porous media*, à soumettre, 2020.

L'entropie résiduelle pour délimiter le comportement liquide/gaz des fluides supercritiques.

Les diagrammes de phases permettent de cartographier de façon précise les différentes phases des fluides en deçà du point critique. Soumis à de fortes pressions et hautes températures (au delà du point critique) le fluide devient supercritique et acquiert alors des propriétés intermédiaires entre celles d'un fluide et celles d'un gaz. Ce projet a consisté à proposer une théorie, basée sur le lien entre entropie d'excès et viscosité, pour démarquer les comportements liquides des comportements gazeux dans la zone supercritique. Pour cela, nous avons réalisé de nombreuses simulation de dynamique moléculaire (NEMD et Monte Carlo) sur divers modèles moléculaires (sphères dures, chaînes de Lennard-Jones, fluides loi puissance inverse) et dans de nombreuses conditions thermodynamiques. Les simulations NEMD concernant le modèle de Lennard-Jones ont été réalisées grâce au code maison "Transpore" parallèle (MPI) sur le cluster Curta (MCIA, sur 32 processeurs). Ceci a permis d'établir un scaling de l'entropie et de la viscosité et de mettre en évidence une modification du comportement des fluides lorsque la viscosité translationelle atteint 50% de la viscosité totale. De plus, il a été montré que ce changement de comportement est lié à un minimum de l'entropie d'excès. Ainsi, il devient possible de définir une courbe de délimitation liquide/gaz dans la région supercritique des fluides simples. [1]

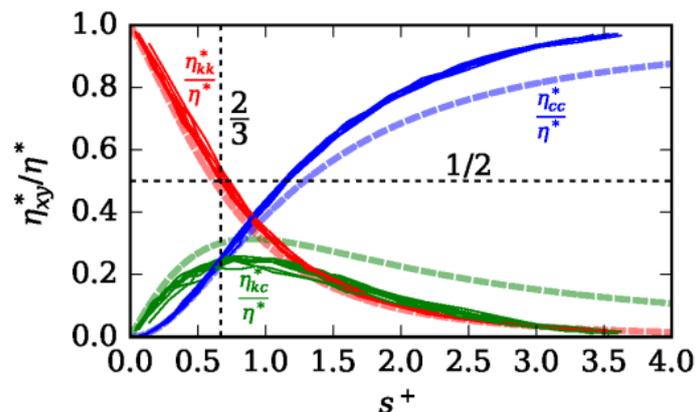


Fig: Contribution relatives des viscosités (kk, kc et cc) pour le modèle de sphères dures (courbes en pointillés) et le modèle de Lennard-Jones (courbes en trait plein).

Personnes impliquées:

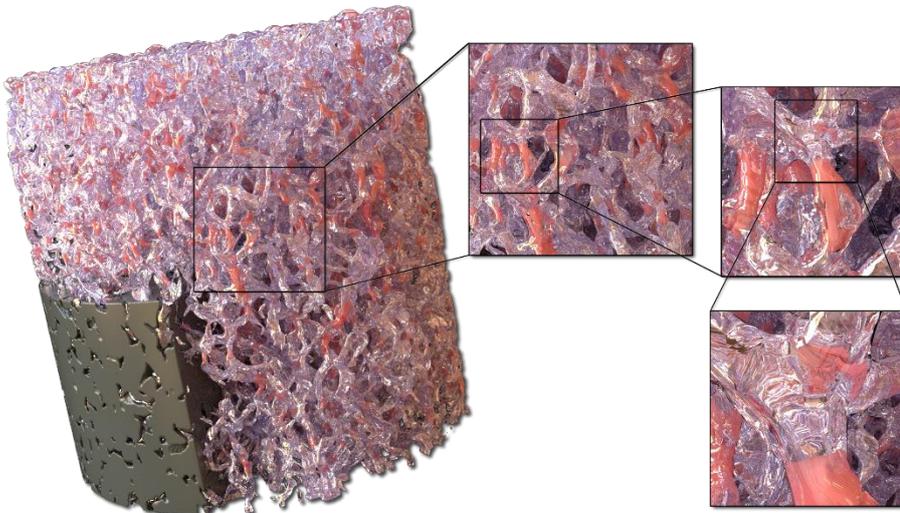
Ian H. Bell (Applied Chemicals and Materials Division, National Institute of Standards and Technology, Boulder, USA), Guillaume Galliéro (LFCR), Stéphanie Delage Santacreu (LMAP), Lorenzo Costigliola (Department of Science and Environment, Roskilde University, Denmark).

Publications

[1] Ian H. Bell, Guillaume Galliéro, Stéphanie Delage Santacreu, Lorenzo Cotigliola, *An entropy scaling demarcation of gas- and liquid-like fluid behaviors*, *J. Chem. Phys.* **152**, 191102 (2020); <https://doi.org/10.1063/1.5143854>.

Estimation de perméabilité et upscaling à haute résolution

On s'intéresse dans ce projet au calcul à haute résolution des écoulements monophasiques incompressibles dans les roches poreuses réelles. Ces écoulements sont à l'échelle du micromètre. Un des challenges de ce projet est d'estimer la perméabilité, c'est-à-dire le ratio entre le débit et la force motrice, qui est très sensible à la résolution et aux erreurs géométriques. Nous avons développé une méthode vitesse-tourbillon qui travaille directement sur des données issues de micro-tomographie aux rayons X, et qui peut à la fois satisfaire les conditions d'incompressibilité (divergence nulle) et de vitesse nulle dans la matrice rocheuse. L'utilisation de cette méthode numérique a été réalisée sur le cluster Pyrene, sur les nœuds standards puis sur les nœuds à forte mémoire (bigmem) pour les simulations fines. Le modèle a d'autre part été enrichi pour l'écoulement d'un matériau rhéo-fluidifiant hétérogène et miscible se transportant dans ce milieu, dont la viscosité varie de 5 ordres de grandeur sur quelques microns.



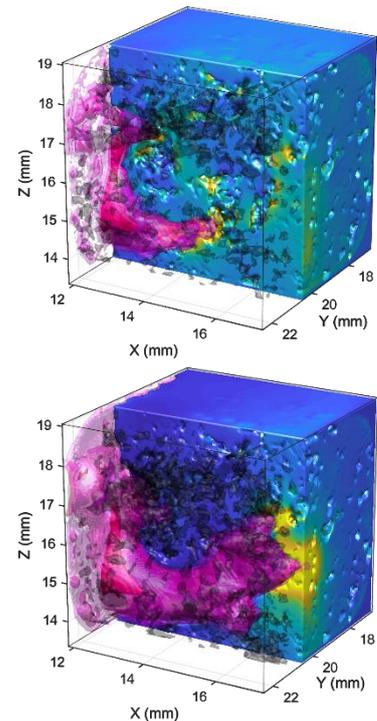
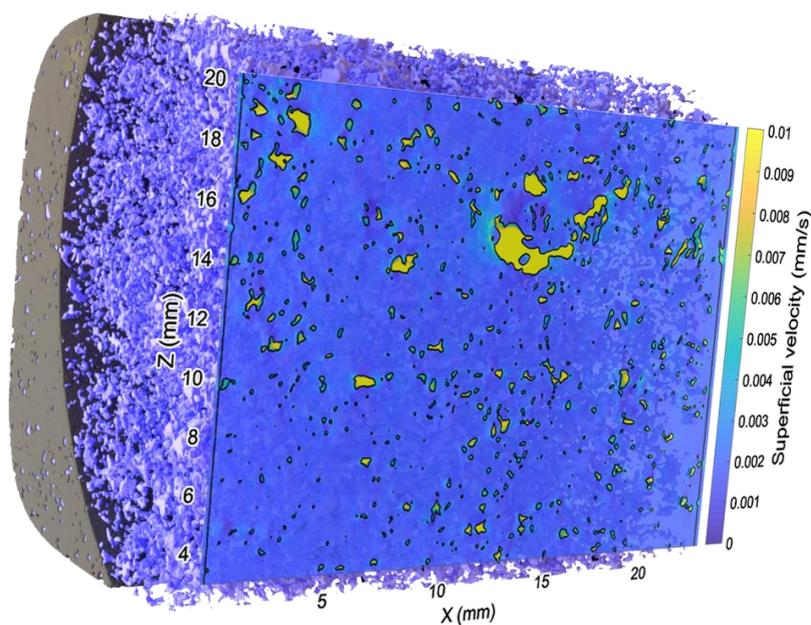
Calcul de la vitesse dans le réseau de pores à une résolution de 512^3 : ceci permet de déterminer avec précision la perméabilité du milieu. Les zooms illustrent le niveau de détail qu'on peut obtenir à cette résolution. Les zones en rouge représentent les lieux où la vitesse est supérieure à $1/4$ de la vitesse maximale.

Publications:

- [1] L. Hume, P. Poncet, A Velocity-vorticity method for highly viscous 3D flows with application to Digital Rock Physics, en revision pour J. Comput. Phys.
- [2] D. Sanchez, L. Hume, R. Chatelin, P. Poncet, *Analysis of non-linear Stokes problem coupled to transport-diffusion for shear-thinning heterogeneous microscale flows, applications to digital rock physics and mucociliary clearance*, ESAIM: Math. Model. Numer. Anal. 53(4):1083-1124 (2019).

Calcul CPU-GPU pour les écoulements réactifs à l'échelle des pores dans les roches réelles

On s'intéresse dans cette activité aux écoulements réactifs autour et dans des milieux poreux avec une région fluide (réseau de pores, inclusions fluides ou écoulements externes), altérant la géométrie du milieu par effet chimique. Ces modèles, impliquant une résolution numérique par méthode particulière et l'équilibre hydrodynamique décrit dans la section I, ont été confrontés et validés par comparaison avec d'autres codes/méthodes [1]. Ils ont été portés dans notre plateforme logicielle HySoP de calcul hybride CPU-GPU, utilisant le nœud GPU à deux carte P100 de Pyrene, et utilisés pour la simulation de l'altération de milieux peu percolant et l'obtention de temps caractéristiques de percée [2]. Le nœud hybride a ainsi permis le développement et la validation du logiciel afin de préparer sa mise en œuvre sur une machine Tier-1 à l'IDRIS sur laquelle nous utilisons l'intégralité des données de tomographie.



Milieu poreux dont une coupe est colorée par la vitesse superficielle (à gauche) et deux instantanés à des temps différents présentant un acide modifiant la géométrie du milieu et conduisant à une percolation chimique.

Publications:

- [1] J-M. Etancelin, P. Moonen, P. Poncet, *Improvement of remeshed Lagrangian methods for the simulation of dissolution processes at the pore-scale*, en révision pour *Advances in Water Resources*.
- [2] S. Molins, C. Soulaïne, N. I. Prasianakis, A. Abbasi, P. Poncet, A. J. C. Ladd, V. Starchenko, S. Roman, D. Trebotich, H. A. Tchepeli, C. I. Steefel, *Simulation of mineral dissolution at the pore scale with evolving fluid-solid interfaces: Review of approaches and benchmark problem set*, *Comput. Geosci.* (2020).

Homogénéisation de fluides à viscosité aléatoire

Le calcul de la viscosité effective de fluides complexes tels que les suspensions et les émulsions est un vieux problème étudié par Einstein et Taylor, parmi beaucoup d'autres contributions. De tels calculs ont des applications notamment en rhéologie. Le problème général est de trouver le lien entre le comportement rhéologique à grande échelle, principalement la viscosité du mélange, et les informations concernant la microstructure du fluide. Afin d'améliorer notre compréhension de l'homogénéisation de la viscosité, nous suivons ici la méthode dite stochastique qui est classique dans les domaines de l'aléatoire et des matériaux composites, ainsi qu'en hydrogéologie. L'idée clé est de considérer que le mélange peut être représenté par un seul fluide caractérisé par une viscosité locale, modélisée par une fonction aléatoire qui dépend de la position. Nous utilisons dans ce projet des techniques mathématiques qui vont de l'homogénéisation et des perturbations stochastiques aux techniques diagrammatiques de la physique théorique.

Afin d'obtenir les coefficients des lois de probabilité résultantes, une campagne intensive de simulations 3D à viscosité aléatoire a été menée sur Pyrene.

Publication :

- B. Noetinger, L. Hume, R. Chatelin, P. Poncet, *The effective viscosity of a random mixture of fluids*, *Phys. Review Fluids* 3, 014103 (2018).

unité de recherche : **Institut de mécanique et d'ingénierie (I2M)** , UMR 5295

L'équipe mécanique des fluides numérique du département TREFLE de I2M aborde la mécanique des fluides exclusivement par la voie numérique autour de projets allant de la modélisation aux méthodes numériques jusqu'aux simulations massivement parallèles. Ils reposent sur le développement d'outils et de méthodes numériques propres dans le code open-source Notus (<https://notus-cfd.org>). Sur la période 2019-2020, le MCIa a été sollicité principalement autour des 3 projets suivants.

Simulation de procédés en milieux fluides supercritiques (A. Erriguible, S. Glockner, A.M.D. Jost).

Ce projet concerne la simulation de procédés d'élaboration durable de matériaux en milieux fluides supercritiques. L'approche numérique apparaît aujourd'hui comme un outil de choix pour la compréhension fine des nombreux processus impliqués dans le procédé qui nécessite une très bonne résolution des phénomènes de la phase fluide, siège de la précipitation du matériau. Pour cela, des simulations numériques directes (DNS) d'écoulements turbulents dans des puces microfluidiques ont été effectuées afin de capter l'ensemble des longueurs caractéristiques du mélange CO₂/éthanol. A titre d'illustration, la figure suivante montre un rendu volumique du champ de concentration et l'isosurface du critère Q qui permet d'identifier les structures de l'écoulement. Les simulations de tels écoulements - supercritiques en microfluidique - sont à notre connaissance totalement inédites [1,2,3,4].



Figure 1 : mélange d'éthanol dans du CO₂ supercritique dans une puce microfluidique avec prise en compte des frontières immergées (gauche) ; isolement des structures turbulentes à l'aide de l'isosurface du critère Q (droite).

Dans ce projet, le MCIa a été utilisé pour réaliser les simulations préliminaires en régime laminaire ainsi que les premières simulations turbulentes jusqu'à 1024 processeurs. La suite du projet a été réalisée dans le cadre d'un projet DARI/GENCI (jusqu'à 4096 processeurs). Enfin, grâce à la maîtrise des simulations à cette échelle, nous poursuivons les travaux dans le cadre d'un grand challenge national organisé par le GENCI sur la machine Joliot-Curie avec l'objectif

très ambitieux de changement d'échelle du procédé. En utilisant les informations obtenues sur réacteur microfluidique nous proposons des simulations numériques jusqu'à plus de 100 000 cœurs avec la même finesse de résolution que précédemment pour des volumes beaucoup plus importants, avec pour objectif de montrer qu'il est possible, avec ce procédé, d'accroître considérablement la production. Ce projet illustre ainsi parfaitement la structure pyramidale du calcul intensif en France et l'importance des mésocentres.

[1] Zhang, F., Erriguible., Marre, S. Investigating laminar mixing in high pressure microfluidic systems (2019), *Chemical Engineering Science* 2019, vol. 205, p. 25-35.

[2] A. M. D. Jost, S. Glockner, A. Erriguible, Direct numerical simulations of fluids mixing above mixture critical point, accepted in *Journal of Supercritical Fluids*, 2020

[3] T. Jaouhari, F. Zhang, T. Tassaing, S. Fery-Forgues, C. Aymonier, S. Marre, A. Erriguible, Process intensification for the synthesis of ultra-small organic nanoparticles with supercritical CO₂ in a microfluidic system, *Chemical Engineering Journal*. 397 (2020).

[4] F. Zhang, S. Marre, A. Erriguible, Mixing intensification under turbulent conditions in a high pressure microreactor, *Chemical Engineering Journal*. 382 (2020).

Simulation du déferlement des vagues (P. Lubin, F. Desmons).

Le projet porte sur l'étude numérique du déferlement des vagues. Afin de faciliter la compréhension de ce phénomène diphasique complexe, des critères ont été créés pour caractériser, détecter et prédire le déferlement. Cependant, du fait de la complexité du phénomène (entraînement d'air, génération de turbulence), la simulation numérique détaillée devient un élément nécessaire pour étudier les petites échelles du déferlement.

Afin d'améliorer les critères de prédiction du déferlement déjà existant, 250 simulations ont été lancées sur le supercalculateur du MClA. Ces nombreuses simulations servent à faire une étude paramétrique du déferlement de vague. Les variables modifiées sont la longueur d'onde (L), la profondeur (d) et la cambrure de la vague (ϵ). Il existe plusieurs critères de déferlement reliant la longueur d'onde à la cambrure. Cependant, il n'existe à ce jour aucune étude sur l'influence de ces deux paramètres à la profondeur. Cette dernière variable influence le type de déferlement, l'échange air-océan et l'énergie dissipée au cours du processus.

Les simulations lancées permettent la caractérisation des différents types de déferlement mais aussi d'effectuer une étude de convergence en maillage pour chaque longueur d'onde étudiée. La majorité des simulations ont été lancées sur 64 processeurs pendant 72h à 144h (en utilisant un système de checkpoint/restart).

La figure ci-dessous représente l'évolution temporelle du déferlement de type Parasitic Capillary Wave (PCW) avec la création d'ondes capillaires plus rapides glissant le long de la face avant de la vague générant une accélération de la dissipation d'énergie et une modification de la surface.

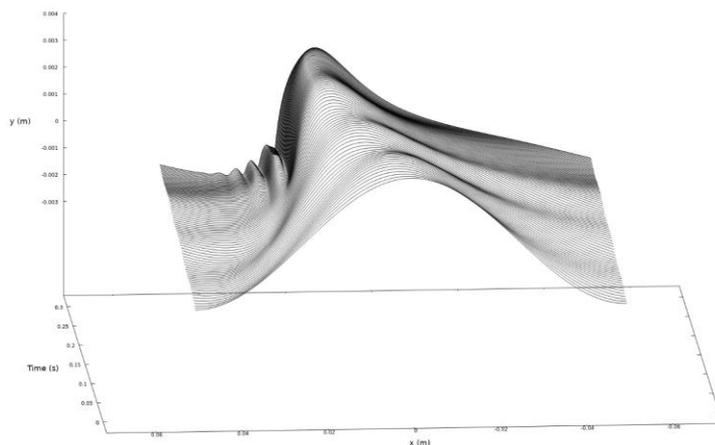


Figure 2 : déferlement de type *Parasitic Capillary Wave (PCW)*

En plus de la définition de nouveaux critères de déferlement, ces simulations vont être utilisées dans un projet collaboratif avec l'INRIA pour créer le premier critère de détection du déferlement grâce au deep learning. Ce critère aura pour but d'être utilisé dans des codes de type Boussinesq afin d'améliorer leur efficacité.

Simulation de la chute libre de gouttes de pluie (P. Lubin, M. Coquerelle, F. Henri).

Les ressources du MClA ont permis d'avancer sur un projet global d'étude de l'impact des gouttes de pluie sur la dynamique des océans. Lors de fortes précipitations il a été observé une atténuation des vagues océaniques ainsi qu'une augmentation importante des échanges gazeux à la surface. L'objectif des travaux actuels est d'améliorer la compréhension des phénomènes physiques lors de l'impact d'une goutte de pluie sur une surface d'eau. Les ressources ont été utilisées afin de mener des études préliminaires pour paramétrer des calculs de plus grande envergure réalisés sur les supercalculateurs nationaux (IDRIS Jean Zay, TGCC Irene SKL, CINES Occigen).

Dans un premier temps, les études se sont concentrées sur les conditions initiales de la goutte juste avant impact à vitesse terminale. D'un point de vue physique, nous avons aujourd'hui une meilleure compréhension de la dynamique de la chute. Et d'un point de vue numérique, nous avons identifié des limites des méthodes actuelles sur un cas diphasique et ce même pour des simulations proches de la DNS. Nous avons réalisé ces simulations 3D, en moyenne, de 1 à 10 millions de cellules, sur 128 à 256 processeurs, pendant 1 à 2 jours de calculs.

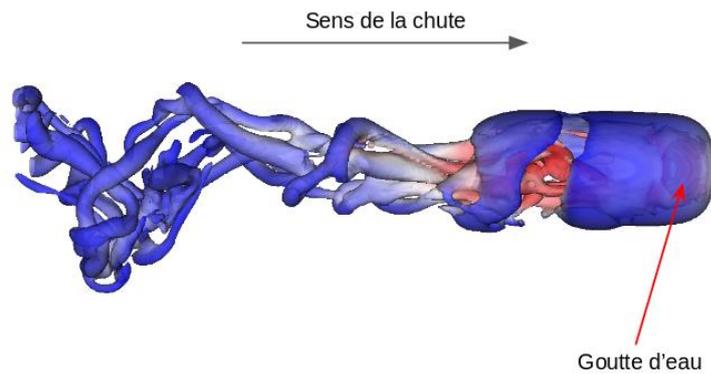


Figure 3 : isosurface du critère Q de l'écoulement d'une goutte d'eau en chute libre.

La seconde partie de nos travaux se sont focalisés sur une étude paramétrique en 2D axisymétrique d'impacts de goutte de pluie sur une surface d'eau. Nous avons réalisé ces simulations sur 500 000 à 1 million de cellules, sur 96 à 128 processeurs, sur des temps d'une journée. Cela nous a également permis d'affiner le paramétrage des simulations (nombre de cellules, taille du domaine, etc.) en fonction des phénomènes prédominants (création de vortex, apparition d'une goutte secondaire, création d'un jet) que nous souhaitons observer et analyser, ceci afin de réduire le coût des simulations sans impacter les résultats, avant le passage en production.

Mécanique des fluides (LFCR)

unité de recherche : **Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs (LFCR)** – UMR5150
UPPA-CNRS-TOTAL

<https://lfc.univ-pau.fr/fr/index.html>

Correspondant : Guillaume Galliero (guillaume.galliero@univ-pau.fr)

Du nanomètre à la centaine de kilomètre, de la nanoseconde au million d'années, de la physico-chimie des interfaces à la géologie des réservoirs en passant par la thermodynamique des fluides sous pression, la géomécanique et la géophysique, un statut d'UMR « industrielle » avec l'entreprise TOTAL comme tutelle en plus du CNRS et de l'UPPA, le Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs est une unité de recherche originale et remarquable à bien des égards. Son positionnement singulier, principalement autour de l'étude des géo ressources fossiles et totalement en phase avec l'environnement socio-économique local, lui donne une coloration très marquée par les applications et lui permet d'avoir des équipes reconnues à l'international.

Son activité, bien que largement expérimentale, possède une dimension numérique en particulier autour du développement et de l'utilisation d'outils de simulations moléculaires classiques pour décrire le comportement des fluides en milieux libre et en milieux confinés.

Projets en cours :

Propriétés thermophysiques de mélanges

Depuis de nombreuses années le LFCR a développé des outils de simulations moléculaires classiques (Monte Carlo et Dynamique Moléculaire) et des champs de force spécifiques afin de d'estimer les propriétés thermophysiques (équilibre et transport) de fluides en conditions de réservoirs en s'appuyant sur des comparaisons avec des mesures expérimentales. Ainsi, récemment durant la thèse d'Abdou Wahidou Saley Hamani, il a été possible de montrer qu'un modèle gros-grains (de type chaîne de Mie) permettait de décrire à la fois les propriétés d'équilibre et la viscosité d'alcane linéaires sous pression de manière plus précise qu'avec un champ de force de référence de type *United Atoms* (Trappe) [1]. De même, il a été montré que ce type de champs de force gros grains permettait de capter le phénomène de clustering qui apparaît lors que l'on ajoute un soluté (ici du n-heptane) à un solvant proche de son point critique (ici du CO₂), voir figure n°1. Ces simulations ont ainsi permis de mettre en évidence la nature faible du cluster et son temps de vie [2], confirmant ainsi son origine liée aux fluctuations de densité induite par la proximité du point critique.

Personnes impliquées : J.L. Daridon (LFCR), G. Galliero (LFCR), H. Hoang (IFAS, Vietnam), A.W. Saley Hamani (LFCR).

Publications :

[1] A.W. Saley Hamani, J.P. Bazile, H. Hoang, H.T. Luc, J.L. Daridon, G. Galliero, *J. of Mol. Liq.* (2020) **303**, 112663.

[2] A.W. Saley Hamani, H. Hoang, T.Q. Quoc Viet, J.L. Daridon, G. Galliero, *J. of Supercr. Fluids* (2020) **164**, 104890.

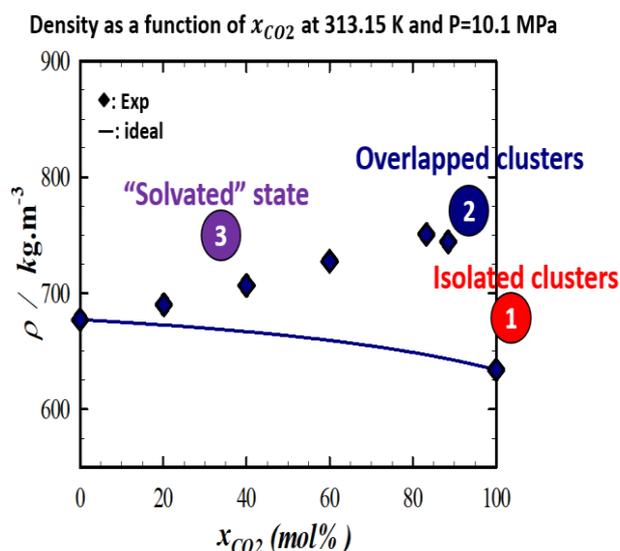


Figure 1 : Masse volumique du CO₂ en fonction de la concentration à 313K et 100 bars

Fractionnement des gaz rares dans un réservoir

Les gaz rares, et la façon dont ils se fractionnent, est une approche prometteuse pour mieux évaluer la distribution initiale des fluides dans les réservoirs de gaz et de pétrole. La thermodiffusion, est l'un des phénomènes pouvant impacter cette distribution. Cependant, cet effet, supposé être petit, est difficile à mesurer dans le pétrole et le gaz dans des conditions de réservoir. Ainsi, dans ce travail, des simulations de dynamique moléculaire ont été réalisées pour calculer la thermodiffusion de gaz rares, dans un gaz dense (méthane) et dans une huile (n-hexane) sous hautes pressions. De façon intéressante, il a été constaté que, dans une colonne 1D, la thermodiffusion due à un gradient géothermique typique avait un impact sur le fractionnement isotopique et élémentaire des gaz rares du même ordre de grandeur que la ségrégation par gravité, mais de signe opposé [3]. De plus, il a été montré que l'impact relatif de la thermodiffusion sur les isotopes et le fractionnement élémentaire dépendait du type de fluide ce qui est une autre caractéristique intéressante, voir figure n°2.

Personnes impliquées : G. Galliero (LFCR), H. Hoang (IFAS, Vietnam), M. Pujol (Total).

Publications :

[3] H. Hoang, P. Nguyen, M. Pujol, G. Galliero, Eur. Phys. J. E (2019) **42**, 62.

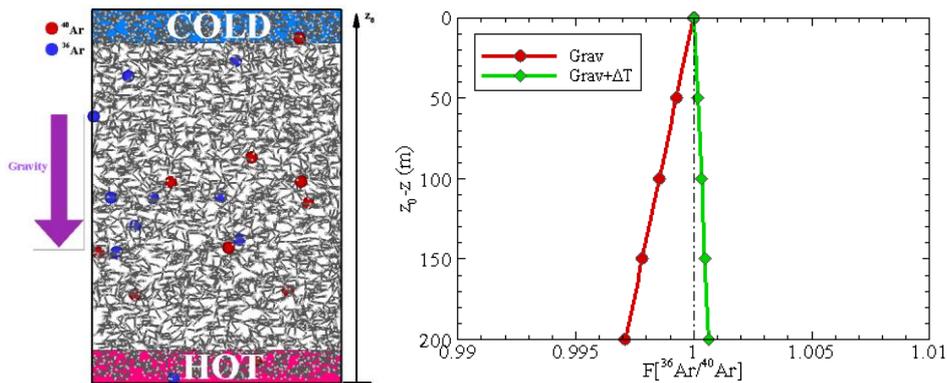


Figure 2 : Fractionnement isotopique de l'Argon en fonction de la profondeur dans un réservoir d'huile

Séparation de gaz par les graphènes nanoporeux

Les graphènes nanoporeux sont des matériaux prometteurs dans le contexte des procédés de séparation d'espèces chimiques en phase fluide, tels que la désalinisation de l'eau, le traitement de l'air ou des gaz. Leur épaisseur atomique permet d'obtenir des flux suffisamment élevés même pour des tailles de pore très faibles, ce qui constitue un avantage pour une séparation sélective. Dans cette étude nous nous intéressons plus particulièrement à la modélisation par simulations moléculaires du transport et de la séparation de mélanges gazeux (CO_2/CH_4 , O_2/N_2 , CO_2/H_2 , etc) à travers ce type de systèmes. Nous proposons un modèle théorique fondé sur la théorie cinétique des gaz permettant de prédire les coefficients de transport et les facteurs de séparation. Ce travail sera utile pour le design de structures de pores (géométrie, fonctions chimiques) optimisées pour la séparation de mélanges donnés.

Personnes impliquées : J. Guo (LFCR), R. Vermorel (LFCR), G. Galliero (LFCR).

Publications :

En cours de rédaction.

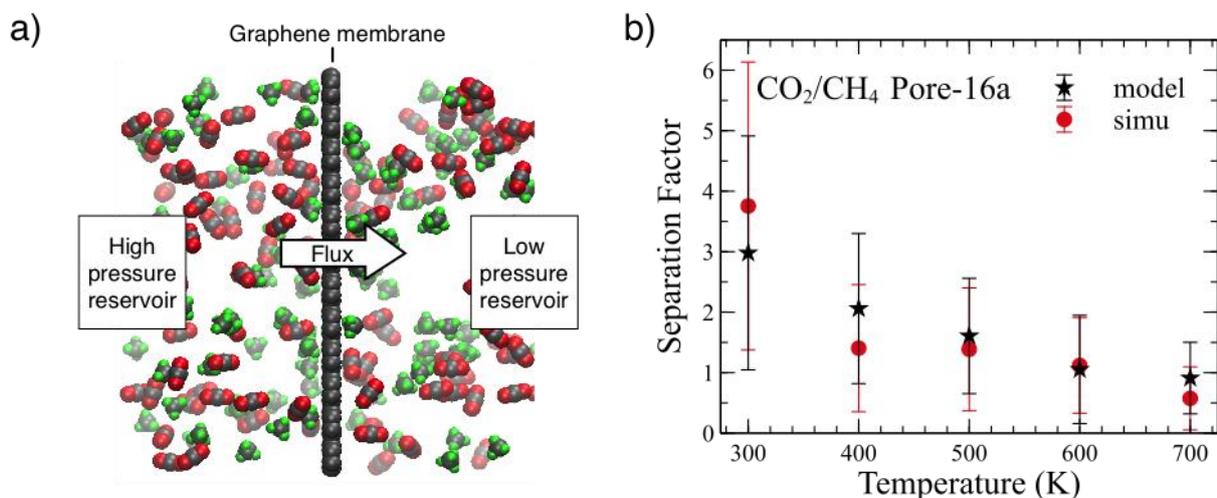


Figure 3 : a) Illustration du système. b) Facteurs de séparation de mélanges équimolaires CO_2/CH_4 par un graphène poreux : comparaison entre les simulations moléculaires et le modèle théorique proposé.

Diffusion dans la microporosité organique des réservoirs de roches mères

Les réservoirs de roches mères contiennent de la matière organique dont la majeure partie forme une matrice microporeuse amorphe. Cette dernière contient les hydrocarbures dont la production est issue de la dégradation thermique de cette matière organique. Ainsi, les propriétés de transport des réservoirs de roches mères sont pilotées par les mécanismes de diffusion au sein de cette matrice microporeuse. La thèse de Kristina Ariskina qui a débuté en octobre 2019 est dédiée à l'étude par simulations moléculaires du transport de méthane et de dioxyde de carbone dans des matrices microporeuses flexibles afin d'étudier l'effet du gonflement induit par l'adsorption. L'utilisation d'un champ de force atomistique adapté est au centre des simulations moléculaires réalisées. Ceci permet un traitement rigoureux des interactions solide-solide qui permet de prendre en compte correctement les propriétés mécaniques de la matrice. Contrairement aux matrices microporeuses rigides, ou traitées comme telles, le coefficient d'auto-diffusion augmente avec la concentration en fluide du fait du gonflement. De plus, il est montré qu'à basse concentration (faible porosité) les fluctuations thermiques du solide (vibrations de la matrice) jouent un rôle majeur dans le processus de diffusion (figure n°4).

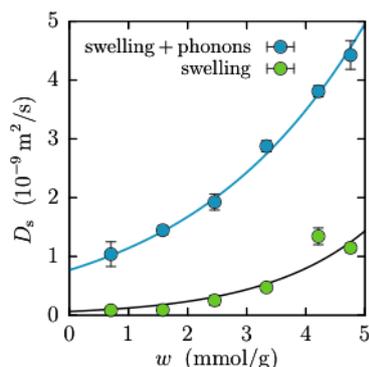


Figure 4 : Coefficient d'auto-diffusion du méthane dans une matrice carbonée microporeuse et flexible en fonction de la concentration en fluide (Bleu: gonflement + vibrations de la matrice, Vert: gonflement uniquement).

Personnes impliquées : K. Ariskina (LFCR), G. Galliero (LFCR), A. Obliger (LFCR)

Physique des Plasmas (CELIA)

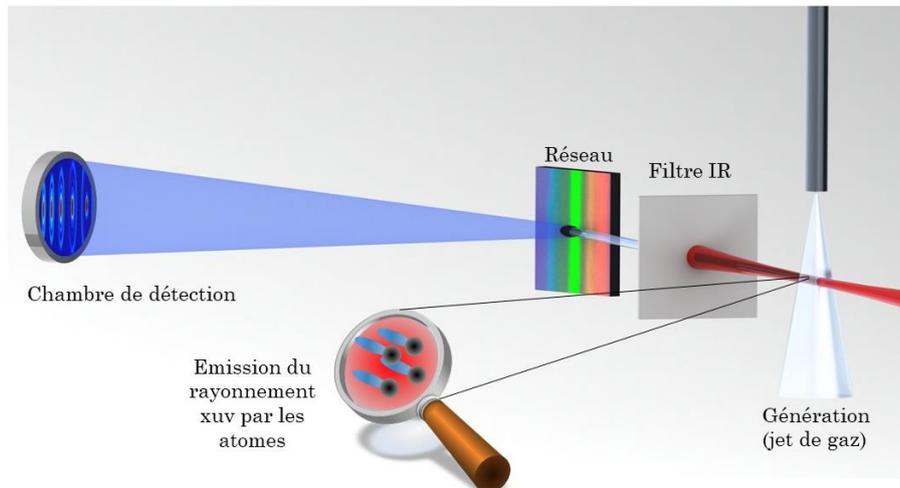
unité de recherche : **Centre Lasers Intenses et Applications (CELIA)**, UMR5107

Activité du CELIA au MCI : Interaction champs lasers intense et/ou bref avec des systèmes complexes ; Modélisation de la physique pour le médical

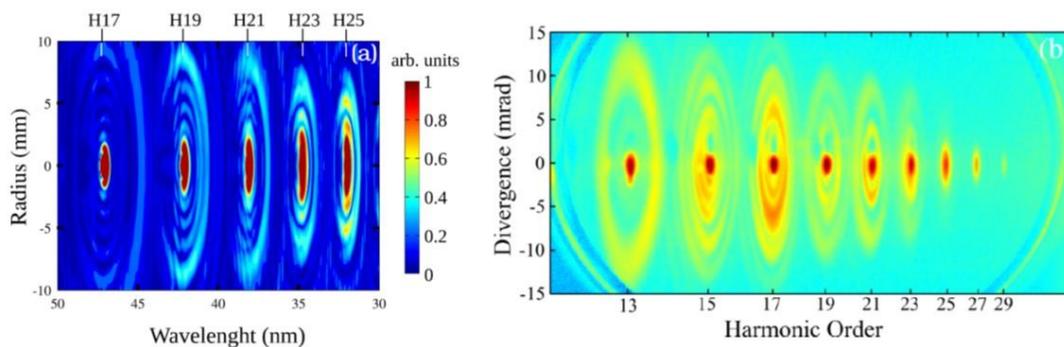
Le laboratoire CELIA a pour expertise l'étude des phénomènes physiques induits par les lasers intenses. Plusieurs groupes font appels au mésocentre pour effectuer des calculs relevant de cette physique. Deux thématiques principales seront présentées dans ce rapport. Une première concerne la physique des champs forts et une seconde est la physique appliquée au domaine médical. Ce second thème, qui a aujourd'hui sa pleine et entière dynamique, est la résultante d'une activité portant sur la propagation de particules dans les milieux ionisés.

i – Physique des champs forts et brefs

La physique des champs forts consiste à étudier l'interaction d'une onde électromagnétique dont l'amplitude du champ électrique est comparable à l'amplitude du champ électrique créé par le noyau sur les électrons environnants et constitutifs d'un atome ou d'une molécule. Sous l'effet de ce champ laser, l'électron le plus externe du système irradié peut alors être arraché. Cet électron ainsi libéré se retrouve en présence du champ laser oscillant et peut donc gagner en énergie cinétique. De plus il a une probabilité non nulle de revenir à proximité du noyau et de recombiner en émettant un photon dans la gamme xuv. Cette largeur spectrale est très intéressante car elle est compatible avec l'émission d'un rayonnement dont la durée est de l'ordre de la dizaine d'attoseconde (10^{-18} sec.). Ce rayonnement peut donc être utilisé pour sonder des dynamiques électroniques ultra-rapide dans les systèmes complexes. Il y a donc un intérêt certain à étudier en détail les mécanismes de production d'un tel rayonnement est ensuite de le caractériser, temporellement, spatialement, en fréquence et en polarisation. C'est à ce titre que les simulations deviennent primordiales car toutes ces caractéristiques ne sont accessibles, ou du moins partiellement, expérimentalement. Pour ce faire nous résolvons la dynamique de l'interaction du champ laser avec la cible au niveau quantique par l'intermédiaire de l'équation de Schrödinger dépendante du temps décrite dans toute sa dimensionnalité pour étudier la production du rayonnement xuv. La propagation du rayonnement est décrite par l'équation de Maxwell. C'est donc un code couplé équation de Schrödinger / équation de Maxwell qui est utilisé pour étudier en détail le rayonnement émis [Catoire2016]. Nous avons en particulier démontré des propriétés de focalisations qui sont fortement intéressantes car elles permettent d'obtenir des champs plus intenses [Quintard2019]. Ces propriétés de focalisation se font sans utiliser d'éléments optiques qui sont très difficiles à réaliser pour la large gamme xuv du rayonnement produit.



Dispositif expérimental simulé au MClA.



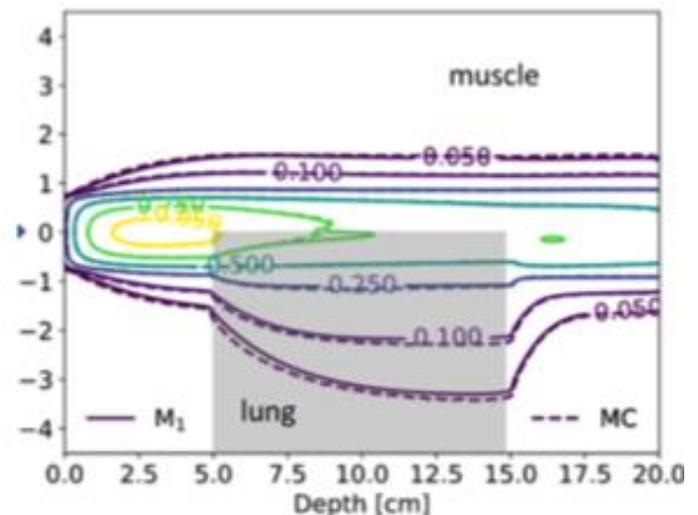
Distribution spatio-spectrales du rayonnement xuv suite à l'interaction d'un champ laser intense (quelque 10^{14} W/cm²). A gauche les simulations, à droite les résultats expérimentaux. Ceci montre le degré de précision obtenu par les simulations. Résultats issus de [Catoire2016]

Plus récemment, la génération d'ondes xuv produites dans des cibles solides ont été abordées théoriquement. Une dynamique induite très différentes du cas atomique et moléculaire est obtenu [Catoire2018]. En particulier le régime des champs intenses induit des dynamique dites intra-bandes et interbandes propres aux cibles solides et dont la contribution relative reste une controverse. Ceci se manifeste par des propriétés du champ rayonné xuv qui diffère sensiblement du cas atomique et moléculaire. Certaines propriétés tels que l'état de polarisation sont étudié sur des systèmes tels que le graphène.

ii – Physique appliquée à la médecine

La chirurgie, la chimiothérapie et la radiothérapie sont les principales techniques utilisées pour traiter les tumeurs cancéreuses. Plus précisément, la radiothérapie peut être externe, interne ou vectorisée. Dans le premier cas, on utilise un faisceau extérieur, composé d'électrons, de photons, de protons ou d'ions plus lourds, pour irradier la zone à traiter. La radiothérapie interne ou Curiethérapie est basée sur des sources radioactives scellées qu'on implante directement dans la tumeur. Enfin pour la radiothérapie interne vectorisée des sources non

scellées, transportées par des vecteurs (peptides ou anticorps) ciblent les tumeurs par association chimique. Quelle que soit la méthode, in fine, des particules ionisantes sont utilisées pour détruire les cellules cancéreuses. La difficulté du traitement réside dans le calcul du dépôt d'énergie induit par ces particules qui doit être maximisé dans les zones tumorales et le plus faible possible dans les tissus sains, afin d'éviter la survenue de cancers secondaires. Ce calcul de dose en 3 dimensions dans un milieu hétérogène peut être long en temps machine et loin du temps dit « réel », inférieur à la minute, nécessaire à la routine clinique. Les outils numériques existants pour traiter un patient sont généralement rapides mais peuvent manquer de précision dans les cas complexes comparés à des calculs détaillés, type Monte Carlo (MC), difficilement utilisables en pratique. Nous avons développé au Celia une méthode déterministe très rapide et aussi précise qu'un calcul MC qui pourrait être, à terme, utilisée en milieu hospitalier. Pour valider notre méthode des tests comparatifs 3D lourds, en milieu hétérogène ont été réalisés sur le centre de calcul de Bordeaux. Grâce à ces tests, les schémas numériques ont été optimisés et les temps de calculs sont passés sous la barre du temps réel. Un exemple de comparaison est présenté dans la figure ci-dessous. Les articles associés sont en cours d'écriture.



Dépôt d'énergie d'un faisceau de photons de 18 MeV venant de la gauche dans un milieu hétérogène composé de muscle et de poumon.

[Catoire2016] F. Catoire, A. Ferré, O. Hort, A. Dubrouil, L. Quintard, D. Descamps, S. Petit, F. Burgy, E. Mével, Y. Mairesse, and E. Constant, *Complex structure of spatially resolved high-order-harmonic spectra*, Phys. Rev. A 94, 063401 (2016)

[Quintard2019] L. Quintard, V. Strelkov, J. Vabek, O. Hort, A. Dubrouil, D. Descamps, F. Burgy, C. Péjot, E. Mével, F. Catoire, E. Constant, *Optics-less focusing of XUV high-order harmonics*, Science Advances 5, 7175 (2019)

[Catoire2018] F. Catoire, H. Bachau, Z. Wang, C. Blaga, P. Agostini, and L. F. DiMauro, *Wannier Representation of Intra-band High-Order Harmonic Generation*, Phys. Rev. Lett. 121, 143902 (2018)

Aspects numériques : Au celia les CPU sont principalement utilisés. Pour les calculs monte-carlo le nombre de cœurs est l'aspect primordial. Pour les équations couplées Maxwell/Schrödinger, le nombre de cœurs ainsi que la grande taille de mémoire vive sont nécessaires. C'est pour cela que les cœurs bigmem sont assez sollicités pour nos applications.

Thermique, Énergétique et Procédés (LaTEP)

unité de recherche : **Laboratoire de Thermique, Énergétique et Procédés (LaTEP)**,
<https://latep.univ-pau.fr>

Correspondant : Jean-Pierre Bédécarrats (jean-pierre.bedecarrats@univ-pau.fr)

Le LaTEP est une équipe d'accueil (EA 1932). Il est membre de l'Institut Pluridisciplinaire de Recherche Appliquée (IPRA - FR CNRS 2952) et de l'Institut Carnot-Isifor.

Le LaTEP travaille sur la problématique de la transition énergétique en effectuant des recherches en sciences pour l'ingénieur en Énergétique et Procédés pour l'environnement.

Ses compétences scientifiques reposent sur l'expérimentation, la modélisation et la simulation en thermodynamique des fluides et des systèmes énergétiques, transferts multiphasiques, changement de phase, et intensification des transferts et couplages de procédés. Elles sont mises en application pour répondre à des enjeux sociétaux d'importance focalisés autour de la transition énergétique : stockage de l'énergie (surface et sous-sol), optimisation et efficacité des systèmes énergétiques et des procédés, chaîne CTSC "Captage, Transport et Stockage du CO₂", traitement de l'air intérieur, valorisation des déchets, déshydratation des boues.

IGAR. Validation pré-industrielle de l'injection de gaz réducteur au haut-fourneau.

Dans ce projet (AMI ADEME) avec ArcelorMittal, le CORIA, l'IMFT, le Laplace, l'I2M, l'idée est d'utiliser des gaz sidérurgiques que l'on transforme en hydrogène par assistance plasma pour la réduction du minerai de fer dans les hauts Fourneaux.

Le LaTEP est en charge de la conception du réacteur de reformage où un plasma chaud est utilisé pour assurer la réaction de conversion du CO₂ et du CH₄ en CO et H₂ (reformage à sec). Les calculs qui sont effectués le sont principalement dans l'environnement Ansys Fluent. Une version logicielle « industrielle » a été implantée sur Pyrene et la doctorante Cassiane OLIVERA-MARTINS utilise massivement cette ressource pour ses calculs.

Personnes impliquées: *Frédéric MARIAS (LaTEP), Cassiane OLIVERA-MARTINS (LaTEP)*

Publications:

Cassiane OLIVERA-MARTINS, Frédéric MARIAS, Reformage des Gaz Sidérurgiques par Assistance Plasma: Étude du Modèle Cinétique, jspyrene2019, 26 novembre 2019, Pau.

Simulations de stockage thermique sensible de grande dimension afin d'étudier la re-stratification thermique

Stage Master 2 SIMOS de 6 mois (Mukesh Kumar). Il s'agissait de simulations CFD type RANS qui ont été réalisées avec Code-Saturne.

Les jobs, une vingtaine, ont tourné sur 16 cœurs pendant 1 à 5 jours selon les simulations.

Personnes impliquées: *Sylvain Serra(LaTEP), Mukesh Kumar(LaTEP)*