

Rapport d'activités



2020 - 2024

Préambule

Dans une dynamique régionale et nationale renforcée, le Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain (MCIA) offre aux chercheurs un environnement technique de pointe ainsi qu'un espace d'échanges dédié à la mutualisation des savoir-faire et des compétences en calcul scientifique et calcul intensif.

Au cours de la période 2020-2024, le MCIA a su répondre aux défis d'une demande en constante évolution, portée par des besoins scientifiques croissants et la diversification des disciplines utilisant ses infrastructures. Bénéficiant du soutien du Conseil Régional de Nouvelle-Aquitaine et des contributions des établissements fondateurs et partenaires, le MCIA a consolidé son rôle stratégique en tant que plateforme régionale dédiée au calcul scientifique.

Ce rapport présente les réalisations majeures du MCIA entre 2020 et 2024, mettant en lumière l'évolution de ses infrastructures et de ses services ainsi que de nombreux exemples d'applications concrètes ayant bénéficié de ses ressources.

Sommaire

1	Présentation du Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain.....	6
1.1	Le calcul scientifique : objet et structuration.....	6
1.2	Historique du MCIA.....	7
1.3	MCIA actuel.....	8
2	Activités de l'unité sur la période 2020-2024.....	16
2.1	Indicateurs d'utilisation des moyens de calcul.....	16
2.2	Animation Scientifique.....	21
2.3	Formation.....	22
2.4	Réalisations.....	26
2.5	Économies d'énergie.....	29
2.6	Prolongation de la garantie de Curta.....	32
2.7	Implication dans MesoNET.....	34
3	Vers un mésocentre Nouvelle-Aquitaine : le projet DOREMI.....	36
3.1	Paysage régional en 2019.....	36
3.2	DOREMI - avance de phase : ouverture du MCIA au nord de la région.....	37
3.3	DOREMI - première phase : jouvence des matériels locaux.....	37
3.4	DOREMI - deuxième phase : mésocentre et supercalculateur néo-aquitain.....	38
4	Projets de recherche.....	40
4.1	Astrophysique (LAB).....	41
4.2	Biologie végétale (BFP).....	45
4.3	Biostatistique (BPH).....	47
4.4	Chimie théorique (ISM).....	50
4.5	Chimie théorique et computationnelle (IPREM).....	59
4.6	Fonctionnement du système littoral (LIENSs).....	63
4.7	Génération d'images (IMS).....	66
4.8	Imagerie médicale en neurosciences (IMN).....	68
4.9	Mathématiques (IMB).....	70
4.10	Mathématiques Appliquées (LMAP).....	75
4.11	Matière Molle (CRPP).....	79
4.12	Mécanique et Ingénierie (I2M).....	80
4.13	Modélisation à l'échelle atomique et cristalochimie (IRCER).....	89
4.14	Physique Computationnelle (LOMA).....	96
4.15	Physique du littoral (EPOC).....	101
4.16	Physique en champ intense (CELIA).....	105
4.17	Sciences de l'ingénieur (LaSIE).....	109
4.18	Sciences Physique et de l'Ingénierie (Institut Pprime).....	112
4.19	Thermodynamique (LFCR).....	120

1 Présentation du Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain

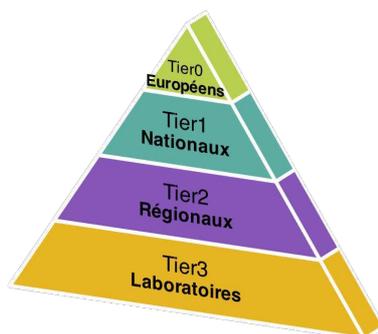
1.1 Le calcul scientifique : objet et structuration

1.1.1 Le calcul scientifique

Le calcul scientifique est une discipline à la frontière entre mathématiques appliquées et informatique qui offre des outils permettant la simulation numérique des phénomènes physiques, chimiques, biologiques voire des sciences humaines et de toute science appliquée en général. Ces simulations numériques sont effectuées sur des matériels informatiques spécifiques qui produisent ou analysent de très grandes quantités de données. Un autre aspect du calcul scientifique est l'analyse et le post-traitement de ces grandes masses de données, qui peuvent aussi être issues d'imagerie, de mesures, ou autre. La plupart de ces calculs sont aujourd'hui effectués sur des machines multiprocesseurs, avec des opérations traitées simultanément sur les différents processeurs. Certains calculs utilisent quelques dizaines de processeurs, quand d'autres en nécessitent plusieurs milliers (on parle alors de calcul haute performance ou intensif, ou encore HPC en anglais).

1.1.2 La pyramide du calcul

Depuis 2006, le paysage français autour du calcul scientifique s'est structuré de manière à prendre en compte l'ensemble des initiatives autour du HPC, du niveau international au niveau local afin d'éviter l'émiettement des ressources et des financements. Une structure pyramidale à 3 niveaux (« tier » en anglais) s'est mise en place :



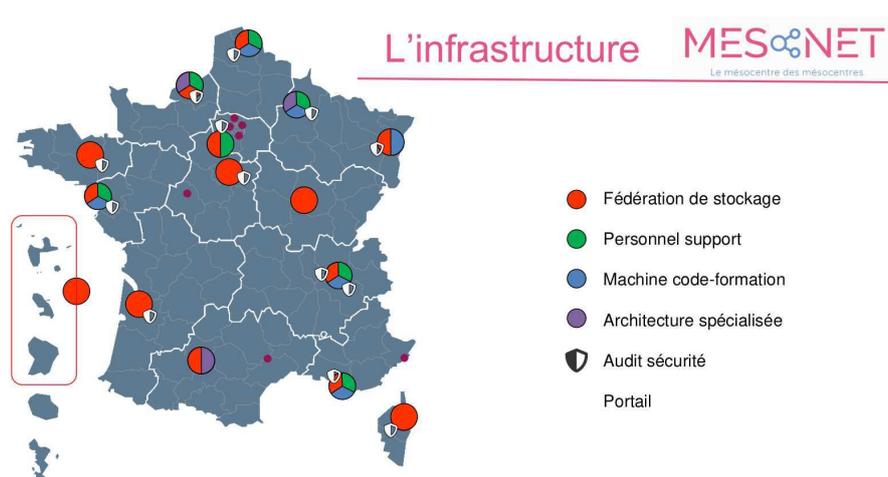
La pyramide du calcul scientifique

Le niveau 0 est formé des centres de calcul européens avec des machines à plusieurs centaines de milliers de processeurs, le niveau 1 est formé des centres de calcul nationaux avec des machines qui comportent quelques dizaines de milliers de processeurs, le niveau 2 est celui des moyens régionaux que sont les mésocentres, dont le MCI fait partie, avec une taille moyenne de quelques milliers de processeurs à leur disposition. Actuellement, une douzaine de mésocentres existent en France. Le niveau 3 est celui des machines de laboratoires : bon nombre d'entre eux se sont dotés de petits calculateurs spécifiques, mais à l'heure actuelle, la tendance est à rationaliser ces moyens et à pousser les laboratoires à se tourner vers les mésocentres pour répondre à leurs besoins futurs.

1.1.3 Les mésocentres

Les mésocentres sont des structures qui disposent de machines de calcul et de stockage et d'une équipe technique ouverte aux communautés scientifiques, issus de plusieurs entités (EPST, universités, industriels) d'une même région. Les mésocentres fournissent ainsi un environnement scientifique et technique propice au calcul scientifique et au calcul haute performance. Un mésocentre est piloté par un comité scientifique (plus ou moins structuré) et évalué régulièrement.

Dans le cadre du programme d'Investissements d'avenir géré par l'Agence Nationale de la Recherche, les mésocentres français se sont structurés en un réseau appelé MesoNET :



Selon le site web <https://www.mesonet.fr/>, ce réseau « a pour objet de répondre aux besoins des chercheurs universitaires et industriels avec le développement d'équipements numériques structurants. L'idée principale est de renforcer la structuration des offres nationales et régionales en simulation numérique, le calcul haute performance (HPC), associé aux méthodes d'intelligence artificielle (IA) avec également un accès à un simulateur quantique et à des formations sur le calcul quantique. L'objectif premier est de mettre en place une infrastructure régionale distribuée, en intégrant au moins un mésocentre par région, institués comme références et relais régionaux. L'infrastructure, intégrée à l'initiative European Open Science Cloud (EOSC), devrait avoir un impact significatif sur l'appropriation par les chercheurs des infrastructures numériques et IA publiques nationales et régionales ».

Pour la région Nouvelle-Aquitaine, c'est le MCIA qui représente tous les acteurs régionaux dans MesoNET.

1.2 Historique du MCIA

Le MCIA actuel est issu d'une suite de projets ayant permis le développement du calcul scientifique à Bordeaux et à Pau depuis les années 1990 : pôle MNI du centre de calcul de l'université Bordeaux 1 en 1993, puis projet M3PEC en 2003, et enfin le projet MCIA en 2011 financé par la région Aquitaine, le Fonds Européen de Développement Régional et les établissements et organismes fondateurs université de Bordeaux, université de Pau et des Pays de l'Adour, le CNRS, INRIA, Bordeaux INP et les principaux partenaires INRA et INSERM.

Suite à un financement acquis en 2015 dans le cadre d'un Contrat de Plan État-Région, le MCIA a pu se doter du supercalculateur Curta (acheté fin 2018), et l'université de Bordeaux a souhaité renforcer le mésocentre (structure et modèle économique), ce qui a abouti à la création de l'unité de services MCIA janvier 2021.

1.3 MCIA actuel

1.3.1 Unité de services MCIA

Après avoir été une structure dépendant de la Direction des Systèmes d'Information de l'université de Bordeaux, le MCIA est devenu au 1^{er} janvier 2021 l'unité de service interne US001 de cette université, rattachée au *département Sciences de l'Ingénierie et du Numérique*. La gouvernance de l'unité est décrite section 1.3.5.

Par ailleurs, le MCIA a été labellisé plateforme de recherche de l'université de Bordeaux en juillet 2019, pour une durée de 3 ans. Ce label reconnaît que la plateforme répond favorablement à certains critères comme le degré d'ouverture, les conditions pour répondre à la demande de service, l'offre de service et les conditions d'accès, la méthode d'actualisation de l'offre de service, l'implication dans la formation, la gouvernance de la plateforme, ou le modèle économique. Ce label a été renouvelé en 2023. Pour des raisons de synchronisation de la labellisation avec les nouvelles plateformes, il a fallu candidater à nouveau à ce label en 2024, la réponse est attendue courant 2025.

Enfin, au titre de ce label, le MCIA est membre de la *Fédération des plateformes de recherche* de l'université de Bordeaux.

1.3.2 Moyens matériels

Cette section décrit les moyens matériels mis à disposition des utilisateurs du mésocentre. Notons que le MCIA a accordé une attention particulière aux enjeux de sobriété numérique et de résilience, en adoptant une approche proactive pour optimiser l'efficacité énergétique de ses infrastructures et promouvoir des pratiques responsables (voir la section 2.5 dédiée à ce sujet).

Curta

Le Cluster HPC Curta a fait l'objet de l'appel d'offres avec dialogue compétitif 2017-012. La procédure de consultation a été conduite par un groupe technique rassemblant 14 personnes issues de la communauté et animée par Pierre Gay, directeur technique du MCIA. Intégré par la société Axians, le matériel de marque LENOVO a les caractéristiques suivantes :

- Les nœuds interactifs frontaux *login* (x2) : machines sur lesquelles l'utilisateur se connecte pour mettre au point et lancer ses travaux, manipuler ses données et ses résultats.
- Les nœuds de calcul *compute* SD530 (x364). Ce sont les machines sur lesquelles les travaux sont exécutés (par l'intermédiaire du Gestionnaire de Travaux) :
 - 2 processeurs hexadécacœurs (32 cœurs par nœud) Intel® Xeon® Gold SKL-6130 @ 2,1 GHz
 - 92 Go RAM

- Les nœuds de calcul *bigmem* SR950 (x4). Ces nœuds ont plus de mémoire et plus de cœurs que les nœuds *compute* (processeurs identiques) :
 - 4 processeurs hexadécacœurs (64 cœurs par nœud) Intel® Xeon® Gold SKL-6130 @ 2,1 GHz
 - 3 To RAM
- Les nœuds *gpu* SD530 (x4) qui sont des machines dotées de cartes accélératrices GPU :
 - 2 processeurs hexadécacœurs Intel® Xeon® Gold SKL-6130 @ 2,1 GHz
 - 192 Go RAM
 - 2 cartes graphiques NVidia® P100 de 16Go chacune
- Réseau Intel® Omnipath® 100Gb/s (topologie Fat Tree avec un facteur de blocage de 2)
- Système de stockage Lenovo® DSS-G220 (basée sur IBM® SpectrumScale®, ex-GPFS) d'une capacité de 470 To

iRODS

Le MCIa met en œuvre un système de stockage basé sur le logiciel de gestion de données iRODS (<http://irods.org>). Il est destiné au stockage des données de recherche des utilisateurs du Mésocentre.

D'une capacité utile de 500 To, il est géographiquement réparti entre trois sites partenaires :

- MCIa Bordeaux – salle SHM1
- université de Pau et des des Pays de l'Adour – salle SHM2
- université de Poitiers – DSI

Le matériel est composé de 9 serveurs DELL® R740XD (20 cœurs, 96GB RAM, 12 disques 12 To) pour une capacité brute totale de 1,3 Po.

Poudlard

Le cluster de calcul Poudlard est principalement destiné aux étudiants des établissements de Nouvelle Aquitaine. Les chercheurs utilisateurs du MCIa peuvent y accéder sur demande, mais les étudiants sont prioritaires.

Ce cluster permet aux filières comprenant des activités de calcul scientifique d'inscrire leurs promotions afin de familiariser leurs étudiants à un environnement de calcul professionnel. Il est composé de matériel HPE®:

- Les nœuds interactifs *frontaux* (x2): machines sur lesquelles l'utilisateur se connecte pour mettre au point et lancer ses travaux, manipuler ses données et ses résultats
- Les nœuds de calcul *compute* Apollo2000® (x32):
 - 2 processeurs hexadécacœurs (32 cœurs par nœud) AMD® EPYC™ 7313 @ 3 GHz
 - 250 Go de mémoire RAM
- Réseau Ethernet 10Gb/s
- Système de stockage BeeGFS® avec serveurs HPE® DL385 ayant une capacité utile de 250 To

Hébergement

Les matériels informatiques du MCIA sont hébergés dans la salle machine SHM1 de l'université de Bordeaux (hors serveurs iRODS de l'UPPA et U. Poitiers).

Intégrés au système climatique de la salle, le MCIA a fait l'acquisition lors de l'installation du cluster Curta de la partie nécessaire à son hébergement qui a été rajoutée à l'environnement de la salle (voir Figure 2 ci-dessous).

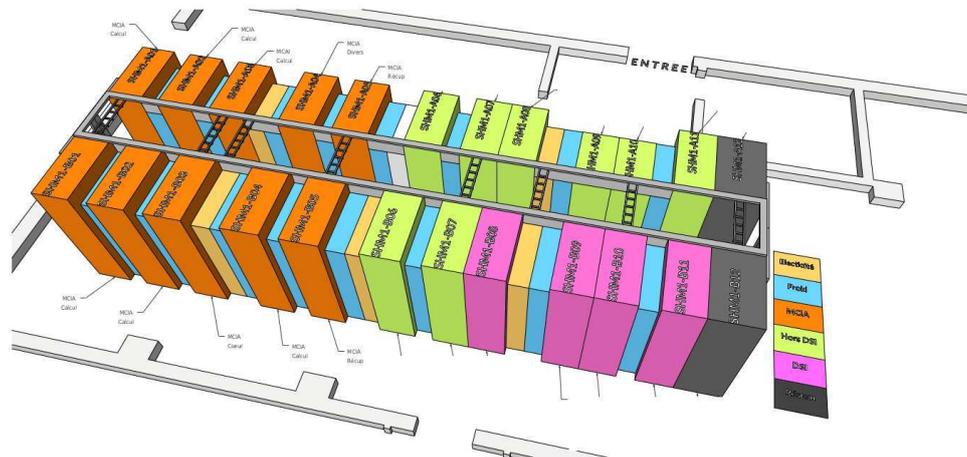


Figure 1 : hébergement des matériels du MCIA dans la SHM1

1.3.3 Équipe technique

L'équipe technique du MCIA était constituée jusqu'au printemps 2024 de trois ingénieurs de l'université de Bordeaux : Pierre Gay, qui est le directeur technique du MCIA, assisté d'Alexandra Darrieutort et de Nguyen Nguyen Ky qui administrent le matériel et les services du Mésocentre. Le support et conseil aux utilisateurs est prodigué par la même équipe.

Pour son travail quotidien, l'équipe technique dispose d'un bureau dans les locaux de l'Institut de Mathématiques de Bordeaux (bâtiment A33).

Un des ingénieurs a fait valoir ses droits à la retraite courant 2024 et ne sera pas remplacé. L'équipe est donc largement sous-dimensionnée pour répondre à toutes les missions d'un mésocentre. Étant réduite à 2 ETP depuis la fin 2024, l'équipe est dans une situation de grande fragilité. L'indisponibilité d'un membre de l'équipe met en péril immédiat le fonctionnement de la structure, car une seule personne ne peut à la fois administrer le calculateur et assurer le support utilisateurs, entre autres missions cruciales. À titre d'exemple, le mésocentre de Toulouse, qui a un périmètre similaire à celui du MCIA, a une équipe technique de 6,75 ETP.

Sur la période 2020-2024, le MCIA a pu compter sur le soutien d'un certain nombre d'ingénieurs de laboratoires utilisateurs pour assurer un certain nombre de missions qui sont présentées dans la suite du rapport :

- Formation
- Pilotage du projet de création d'un mésocentre régional (projet DOREMI)
- Participation aux groupes de travail du projet national MesoNET

1.3.4 Utilisateurs

Jusqu'à 2020, les services du MCIA étaient accessibles à tout chercheur des établissements ou instituts des sites de Bordeaux et de Pau. À partir de 2020, avec le projet DOREMI, le MCIA a été ouvert à tous les utilisateurs de Nouvelle-Aquitaine (voir la section 3 au sujet de cette ouverture). En 2024, le MCIA compte 603 utilisateurs actifs, provenant de 60 laboratoires, issus de tous les établissements de la région. Les disciplines concernées balayent la plupart des champs scientifiques.

Voici la liste des laboratoires utilisateurs en 2024 :

Bordeaux :

ARNA - ARN Régulations Naturelles et Artificielles - U1212
BFP - Biologie du Fruit et Pathologie - UMR 1332
BIC - Bordeaux Imaging Center - UAR 3420 - US4
BIOGECO - Biodiversité Gènes et Communautés - UMR 1202
BPH - Bordeaux Population Health - U1219
BRIC - Bordeaux Institute of Oncology - U1312
BSE - Bordeaux Sciences Économiques - UMR 6060
Bureau d'études Waeles Marine Consultants
CBIB - Centre de Bioinformatique de Bordeaux - UMR 5095
CBMN - Institut de Chimie & Biologie des Membranes & des Nano-objets
CELIA - Centre Lasers Intenses et Applications - UMR 5107
COMPTRASEC - Le Centre de droit comparé du travail et de la sécurité sociale
CRCTB - Centre de Recherche Cardio-Thoracique de Bordeaux - U1045
CRPP - Centre de Recherche Paul Pascal - UMR 5031
EABX - Écosystèmes aquatiques et changements globaux - UR 1454
EGFV - Écophysiologie et Génomique Fonctionnelle de la Vigne - UMR 1287
EPOC - Environnements et Paléoenvironnements Océaniques et Continentaux
ETTIS - Environnement
I2M - Institut de Mécanique et d'Ingénierie - UMR 5295
ICMCB - Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux - UMR 5026
IINS - Institut Interdisciplinaire pour les Neurosciences - UMR 5297
IMB - Institut Mathématique de Bordeaux - UMR 5251
Immunoconcept UMR 5164
IMN - Institut des Maladies Neurodégénératives - UMR 5293
IMS - Intégration du Matériau au Système - UMR 5218
INCLIA - Institut de Neurosciences Cognitives et Intégratives d'Aquitaine
INRAE Bordeaux - Institut National de Recherche pour l'Agriculture
INRIA Bordeaux
ISM - Institut des Sciences Moléculaires - UMR 5255
ISPA - Interactions Sol Plante Atmosphère - UMR 1391
ISPED - Institut de santé publique
LAB - Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux - UMR 5804
LaBRI - Laboratoire Bordelais de Recherche en Informatique - UMR 5800
LCTS - Laboratoire des composites thermostructuraux - UMR 5801
LOF - Laboratoire du Futur - UMR 5258
LOMA - Laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine - UMR 5798

LP2I - Laboratoire de Physique des Deux Infinis de Bordeaux - UMR 5797
LP2N - Laboratoire Photonique
Neurocentre Magendie - U1215
Passages - UMR 5319
POREA - Pluridisciplinarité au service de l'Observation et de la Recherche en Environnement et Astronomie - UAR 2567

Pau :

IPREM - Institut des Sciences Analytiques et de Physico-Chimie pour l'Environnement et les Matériaux - UMR 5254
LFCR - Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs - UMR 5150
LMAP - Laboratoire de Mathématiques et de leurs Applications de Pau
SIAME - Laboratoire des Sciences pour l'Ingénieur Appliquées à la Mécanique et au Génie Électrique

La Rochelle :

DSI La Rochelle Université
LIENSs - Littoral ENvironnement et Sociétés - UMR 7266
LaSIE - Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement
L3i - Laboratoire Informatique
MIA - Laboratoire Mathématiques
PELAGIS - Laboratoire Observatoire Pelagis - UAR 3462

Poitiers :

CIC - Centre d'Investigation Clinique de Poitiers - 1402 INSERM
EBI - Ecologie et Biologie des Interactions - UMR 7267
ENSMA - École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique
IC2MP - Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers - UMR 7285
Institut P' - Recherche et Ingénierie en Matériaux
LMA - Laboratoire de Mathématiques et Applications Université de Poitiers
PALEVOPRIM - Laboratoire de Paléontologie Evolution Paléoécosystèmes et Paléoprimateologie - UMR 7262

Limoges :

DSI Université de Limoges
EpiMaCT U1094 Inserm UMR270 IRD
IRCER - Institut de Recherche sur les Céramiques - UMR 7315
P&T - Pharmacology & Transplantation - UMR 1248
XLIM - UMR 7252

Pour accéder aux services du MCIA, il faut demander une ouverture de compte sur le site web du MCIA. L'équipe technique vérifie l'affiliation du demandeur, et le cas échéant, lui ouvre un compte, en général le jour même de la demande. Le compte est ouvert pour une durée d'un an. Le renouvellement du compte n'est effectué qu'après une demande de l'utilisateur à l'issue de cette durée. Des personnes extérieures à la Nouvelle-Aquitaine peuvent, après discussion, et de façon non automatique, obtenir un compte au MCIA. Cela a pu être le cas du collaborateur extérieur d'un utilisateur pour des calculs ponctuels.

Une fois le compte ouvert, l'utilisateur peut utiliser les moyens de calcul du MCIA, sans appel à projet ni quota d'heures allouées. Cette souplesse est assez originale dans le paysage national, mais les centres nationaux commencent à s'y intéresser (la partie du calculateur national Jean Zay dévolue à l'IA est ainsi utilisable de la même façon pour des demandes inférieures à 50 000 heures GPU).

Le MCIA utilise un logiciel permettant de définir un système de priorité afin que le temps de calcul soit partagé équitablement entre tous les utilisateurs. Tout utilisateur a la possibilité de signaler un problème rencontré lors de son utilisation de ressources du MCIA en utilisant un système de tickets (gérés par l'équipe technique), un forum de discussion et une mailing-list rassemblant tous les utilisateurs. En outre, lors des réunions du comité utilisateur (voir ci-dessous), les membres du comité sont là pour faire remonter les suggestions et autres remarques des utilisateurs de leurs laboratoires respectifs.

Pour un industriel désirant utiliser les moyens du MCIA, nous proposons systématiquement une première réunion pour discuter de ses besoins (en termes de puissance et de temps de calcul, de gestion des données, de confidentialité). Dans un second temps, un compte peut être ouvert à un ingénieur de l'entreprise pour étudier la faisabilité du projet (cette phase peut faire l'objet d'une prestation payante de la part du MCIA). L'industriel ne peut véritablement utiliser le MCIA qu'après un accord sur la facturation du temps calcul.

1.3.5 Gouvernance

Le MCIA est dirigé par un *directeur* (PR, DR, ou ingénieur de recherche HDR) nommé par la vice-présidence recherche de l'université de Bordeaux. Depuis la création de l'unité de services au 1^{er} janvier 2021, ce poste est occupé par Luc Mieussens (PR CE2 à Bordeaux INP, membre de l'Institut de Mathématiques de Bordeaux), qui a aussi dirigé le MCIA de 2017 à 2021. Son mandat a été renouvelé en 2022 pour 5 ans supplémentaires.

Le directeur est assisté par un *comité de direction* formé de l'équipe technique et de trois représentants d'unités de recherche utilisatrice, qui sont : Philippe Depouilly (ingénieur de recherche CNRS de l'Institut de Mathématiques de Bordeaux), Stéphane Glockner (ingénieur de recherche Bordeaux INP de l'Institut de Mécanique et d'Ingénierie), Raphaël Méreau (ingénieur de recherche CNRS de l'Institut des Sciences Moléculaires). Le MCIA bénéficie aussi d'un *soutien administratif* avec une aide de Karine Lecuona, ingénieure d'études CNRS et administratrice de l'Institut de Mathématiques de Bordeaux.

Le *comité des partenaires* regroupe l'ensemble des tutelles des unités et partenaires participant au financement et à l'utilisation du MCIA. Il définit la stratégie à moyen terme de la plateforme et les moyens associés. Ses membres décident de la clé de répartition des dépenses de l'année à venir et des apports éventuels en moyens humains, financiers, ou techniques de chacun.

Les orientations scientifiques du MCIA sont discutées et décidées par le *comité scientifique*, composé de représentants des laboratoires utilisateurs et de deux personnalités extérieures expertes en calcul intensif (assurant des fonctions dans le paysage national du HPC), et présidé

par le directeur du MCIA. En lien avec le comité des partenaires, le comité scientifique organise la politique de renouvellement des équipements, il organise les réponses aux appels d'offre et dossiers d'infrastructures. En relation avec le comité des utilisateurs, il décide du choix des services offerts. Il organise l'animation scientifique de la plateforme et en particulier les journées scientifiques du MCIA. Il interagit avec le tissu économique régional pour susciter des collaborations.

Les aspects concernant le fonctionnement des moyens de calcul sont discutés en *comité utilisateurs*, qui rassemble des représentants des usagers de la plateforme ainsi que les membres de l'équipe technique du mésocentre. Le comité recueille l'avis des utilisateurs sur le fonctionnement actuel des équipements du MCIA et leurs propositions d'évolution. En relation avec le conseil scientifique, le comité des utilisateurs définit la nature et le contenu des services offerts aux usagers de la plateforme (formations, logiciels installés, etc.). Ce comité est actuellement animé par Stéphane Glockner.

1.3.6 Financement

Nous détaillons ici les différentes sources de financement du MCIA.

Équipements

Le super ordinateur Curta a été acquis via un financement du CPER 2015-2020, obtenu en 2018, pour un montant de 2,7 M€.

Le ordinateur Poudlard a été acquis en 2022 via un financement du laboratoire Institut de Mécanique et d'Ingénierie (I2M) de 100 k€, et étendu en 2024 via un financement du volet DOREMI du CPER 2021-2027, pour un montant de 100 k€.

Les machines de stockage iRODS ont été acquises en 2020 via un financement CNRS inclus dans le projet MCIA du CPER précédent (2014-2020), pour un montant de 98 k€.

Budget de fonctionnement

En tant qu'unité de services de l'université de Bordeaux, le MCIA est doté chaque année d'un budget de fonctionnement : 5 k€ (2020), 4,75 k€ (2021 et 2022), 8 k€ (2023), 5 k€ (2024).

Appels à projets

Chaque année, la fédération des plateformes de recherche de l'université de Bordeaux lance deux appels à projets. Dans ce cadre, le MCIA a bénéficié d'un financement de 5 k€ en 2023 pour acquérir une licence du logiciel EnergyScope.

Salaires du personnel

Les salaires des ingénieurs de l'équipe technique sont tous payés par l'université de Bordeaux.

Frais d'hébergement

Tous les matériels sont hébergés dans la SHM1 de l'université de Bordeaux (sauf les parties du système iRODS hébergées à Pau et à Poitiers). Les frais associés sont tous payés par l'université de Bordeaux. Parmi ces frais, le plus important correspond à la consommation électrique de Curta (de l'ordre de 1 million de kWh par an).

Prolongation de la garantie de Curta

La garantie de Curta a été prolongée en juin 2024 pour une durée d'un an (voir la section 2.6 à ce sujet), pour un montant de 47 478 €. Ce montant a été partagé entre les établissements suivants : université de Bordeaux (51%), université de Pau et de pays de l'Adour (15%), université de Poitiers (24%), université de Limoge (10%).

1.3.7 Positionnement local, régional et national

Sur le site de l'université de Bordeaux, le MCIA est la seule plateforme consacrée au calcul scientifique pour l'ensemble des disciplines scientifiques. En revanche, il existe sur le site un certain nombre d'autres plateformes spécialisées pour des problèmes de calcul spécifiques :

- *Plateforme Fédérative pour la Recherche en Informatique et Mathématiques (PlaFRIM)* : cette plateforme, mutualisée INRIA Bordeaux Sud-Ouest, LaBRI, IMB, est dédiée au développement et à l'expérimentation d'architecture en avance de phase (GPGPU, co-processeurs, etc.).
- *Centre de Bioinformatique de Bordeaux (CBiB)* : fournit un accès à des ressources de calcul de haute performance, assure l'analyse des données et dispose d'une expertise en programmation. Ces ressources sont au service des scientifiques académiques et des laboratoires privés pour leur permettre de répondre à leurs besoins en bioinformatique de manière efficace et rentable.
- *Labo in the Sky with Data (LSD)* : cette plateforme fournit une infrastructure BigData pour le stockage et le traitement de données volumineuses. Elle s'appuie sur Apache Hadoop pour fournir des ressources mémoire et processeur unifiées et une capacité de stockage à partir d'un cluster de serveurs.
- *Pôle Modélisation de l'ISM* : plate-forme mutualisée gérée par des membres du groupe Chimie théorique et modélisation de l'Institut des Sciences Moléculaires. Cette plate-forme basée sur le calcul haute performance fournit des ressources matérielles et logicielles adaptées à la modélisation moléculaire, une expertise dans leur utilisation et un environnement de travail simple, efficace et performant.
- *Centre d'Imagerie de Bordeaux (BIC)* : fournit des services, des formations et des innovations technologiques en imagerie cellulaire aux communautés scientifiques académiques et privées, principalement dans les domaines des sciences de la vie, de la santé et des plantes.
- *Centre de recherche et développement en informatique médicale (CREDIM)* : positionné comme un centre de ressources informatiques pour les aspects scientifiques de traitement des données médicales et de santé pour l'unité Bordeaux Population Health.
- *Archéovision* : centrée sur l'utilisation de la 3D, sous toutes ses formes, au service des sciences archéologiques, du patrimoine et des Industries Créatives et Culturelles.

Au niveau de la région Nouvelle-Aquitaine, le MCIA s'intègre dans l'offre DOREMI qui préfigure le futur mésocentre régional (voir <https://www.mcina.fr/> et la section 3 consacrée à ce projet). L'ensemble des utilisateurs du MCIA ont ainsi accès aux machines suivantes :

- *CALI 3* : Plateforme dédiée au calcul sur accélérateur GPU (IA, Machine Learning, calcul intensif GPU, etc.), localisée sur le campus de l'université de Limoges. Elle intègre aussi les GPUs du projet précédent CALI 2 pour un nombre global de 44 GPUs allant de la GTX 1080 Ti à la H100.
- *Jarvis* : machine dédiée au calcul sur architecture de type « Single System Image » permettant d'adresser indépendamment et de façon transparente une quantité de RAM à travers un nombre de processeurs, localisée sur le campus de l'université de Poitiers.
- *Pyrene* : serveurs dédiés au calcul avec grosse capacité mémoire, plateforme de l'université de Pau et des Pays de l'Adour. Dans le cadre de DOREMI, cinq nœuds à grosse capacité mémoire sont mis à disposition ; ces machines sont accessibles depuis les serveurs interactifs de CURTA.

Au niveau national, le MCIA est partenaire du projet MesoNET qui a pour but de mettre en place une infrastructure régionale distribuée, en intégrant au moins un mésocentre par région, institués comme références et relais régionaux. Ce projet renforce la structuration des offres nationales et régionales en simulation numérique, calcul haute performance, associé aux méthodes d'intelligence artificielle (IA) avec également un accès à un simulateur quantique et à des formations sur le calcul quantique.

1.3.8 Site internet

Les utilisateurs peuvent retrouver l'ensemble des services du MCIA sur le site internet <https://www.mcia.fr/> (voir ci-dessous) :

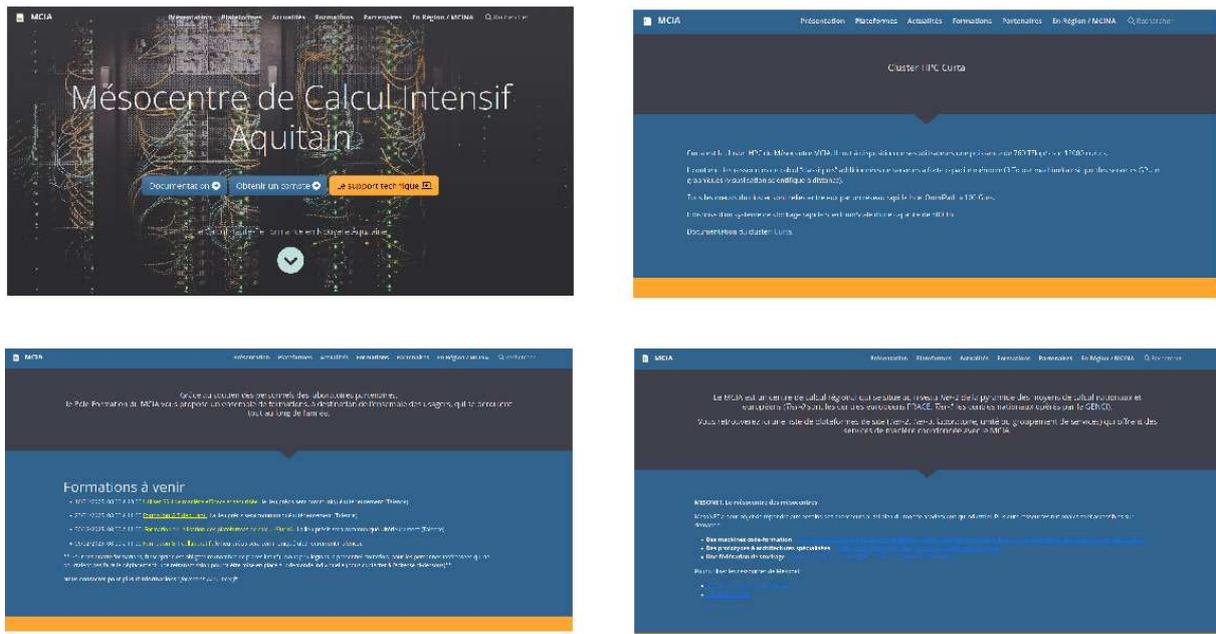


Figure 2 : site web du MCIA

2 Activités de l'unité sur la période 2020-2024

2.1 Indicateurs d'utilisation des moyens de calcul

Nous donnons ci-dessous quelques indicateurs qui montrent l'évolution de l'utilisation des moyens du MCIA sur la période étudiée.

2.1.1 Cluster Curta

L'évolution de la consommation annuelle sur la période 2020-2024 est représentée sur la Figure 3. En 2024, un total de **65 444 333 heures CPU** a été consommé sur le cluster Curta. L'utilisation atteignait **70 415 629 heures** en 2020 et culminait à **85 299 142 heures** en 2022, démontrant une réduction significative de la charge en 2024, liée aux facteurs évoqués ci-après.

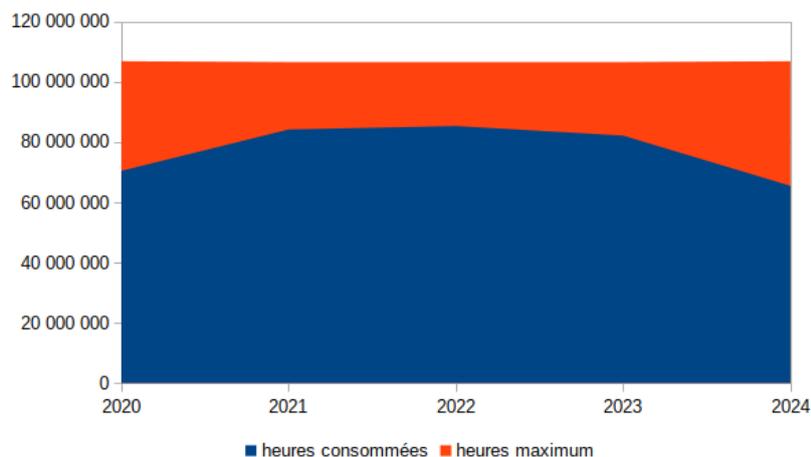


Figure 3 : consommation annuelle sur Curta

La charge brute du cluster, mesurée par le rapport entre les heures consommées et le maximum théorique disponible, a également diminué en 2024, atteignant **61,3 %**, contre **77 %** en 2023 (cf Figure 4).

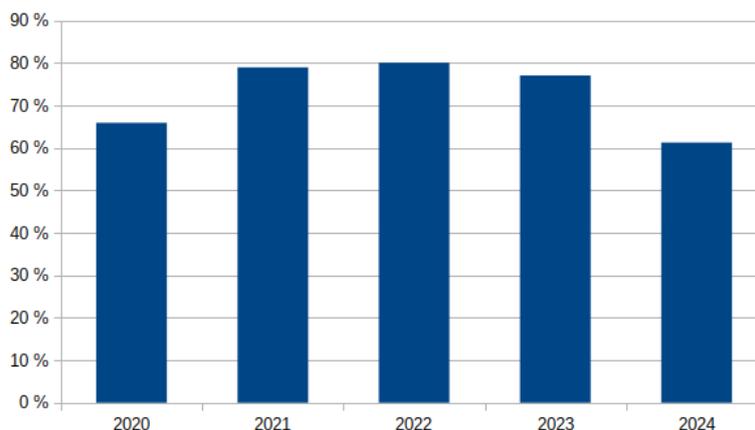


Figure 4 : taux de charge annuel de Curta

Pour la période de 2021 à 2023, la charge a atteint près de 80%, ce qui est le niveau attendu pour un supercalculateur.

La charge était moindre en 2020, probablement en raison de la mise en service de Curta assez récente et de l'impact de l'épidémie de COVID19 sur les travaux scientifiques.

La diminution observée en 2024 s'explique principalement par des arrêts de production prolongés liés à la mise à jour du système d'exploitation du cluster ainsi qu'à des pannes rendant inutilisables 10 % des nœuds de calcul durant le second semestre. Les nœuds de calcul du cluster n'étant pas pris en compte dans l'extension de garantie 2024/2025, ces nœuds ne seront pas réparés et la capacité du système ne pourra que diminuer lorsque les autres nœuds tomberont en panne.

2.1.2 Système de stockage iRODS

Depuis la mise à jour vers iRODS version 4 en avril 2022, le système de gestion des données du MCIA a permis une optimisation notable de l'accès, du suivi et de l'organisation des données des utilisateurs. Ce système de stockage distribué offre une solution robuste et évolutive pour répondre aux besoins en gestion sur le long terme des données scientifiques des utilisateurs du Mésocentre.

En termes de capacité utilisée, l'année 2022 a enregistré une moyenne de **118 To** de données stockées, reflétant une adoption progressive des nouvelles fonctionnalités introduites avec la mise à jour. Cette tendance a poursuivi sa croissance en 2023, atteignant une moyenne de **128 To**, témoignant d'une augmentation significative des volumes de données manipulés par les utilisateurs. En 2024, la capacité utilisée s'est légèrement stabilisée, avec une moyenne de **127 To**, indiquant peut-être une saturation progressive des besoins. Cette utilisation représente un tiers de la capacité totale du système (**500 To** utiles).

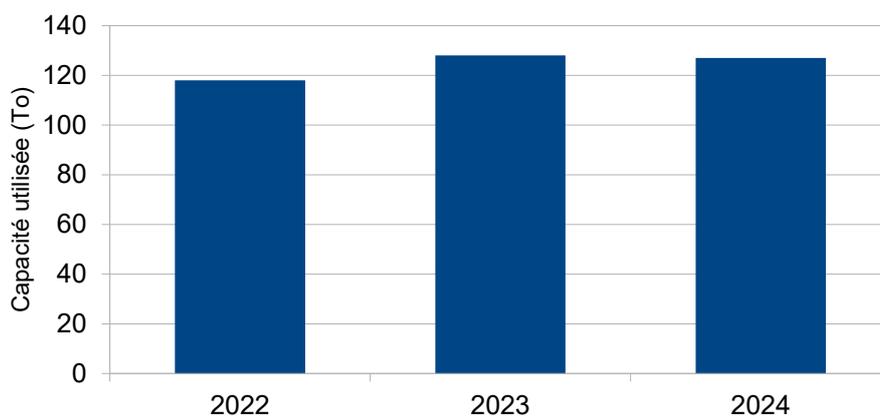


Figure 5 : système de stockage iRODS

Il faut noter que seule une centaine d'utilisateurs du MCIA (sur les 600 inscrits) ont déposé des données dans le système iRODS. Il s'agira dans l'avenir de déterminer si cette sous-utilisation est due à une inadéquation du système aux besoins des utilisateurs, si le système doit être amélioré ou bien changée pour une solution plus adaptée à définir.

2.1.3 Évolution du nombre de chercheurs et du nombre de laboratoires utilisateurs

Le tableau ci-dessous montre une augmentation du nombre d'utilisateurs ainsi que du nombre de laboratoires utilisateurs chaque année. Entre 2020 et 2025, ces deux nombres ont doublé.

	2020	2021	2022	2023	2024
Utilisateurs	285	400	450	510	603
Laboratoires	27	36	45	54	63

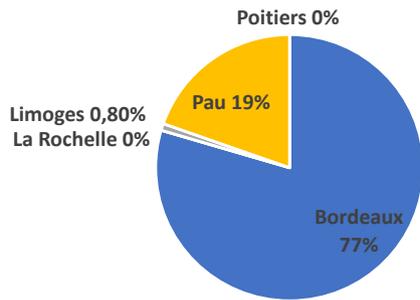
2.1.4 Consommation par site

Nous présentons page ci-contre une étude de l'évolution de la consommation des heures de calcul sur Curta répartie sur les différents sites de la région Nouvelle-Aquitaine (voir Figure 6).

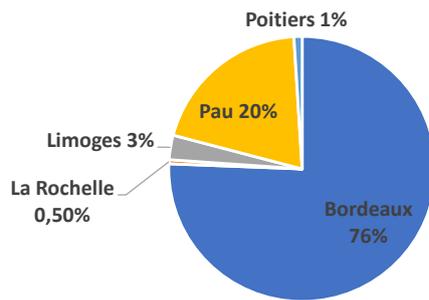
En 2020, 4 % des heures consommées n'apparaissent pas dans la répartition, car consommées par des utilisateurs invités, membres d'une structure non rattachée à l'un des sites ou à un site hors région ou en entreprise. Depuis 2021, la consommation de la plupart de ces personnes est affectée à l'utilisateur invitant, donc à un laboratoire et à un site ; le reste d'heures non attribuées compte pour moins de 0,5 %.

Globalement, on peut observer la part très majoritaire du site de Bordeaux pour la consommation, avec plus de 70% tous les ans, suivi par le site de Pau entre 10 et 20%. Par ailleurs, comme on pouvait s'y attendre, on observe l'augmentation progressive de la consommation des sites du nord de la région, à partir de l'ouverture de Curta à ces sites en 2020. En 2024, la consommation des sites hors Bordeaux est montée à 30%.

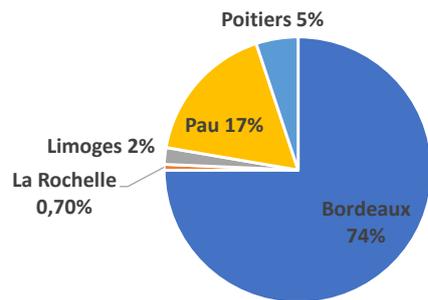
2020



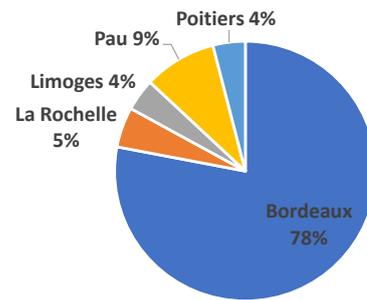
2021



2022



2023



2024

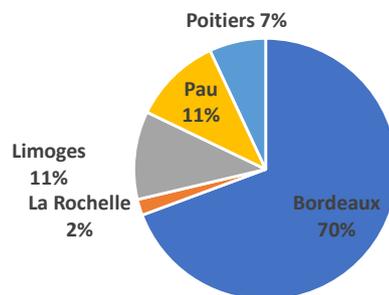


Figure 6 : répartition par site de la consommation des heures de calcul sur Curta de 2020 à 2024

2.1.5 Consommation par discipline scientifique

Nous présentons ci-dessous (Figure 7) une analyse de la consommation des heures de calcul sur Curta en fonction des disciplines scientifiques. Les consommations des utilisateurs ont été réparties dans un nombre de disciplines volontairement réduit et cette répartition permet (1) de repérer les disciplines qui utilisent le plus les outils de calcul scientifique, et (2) d'observer que les besoins de certaines disciplines sont croissants au cours du temps.

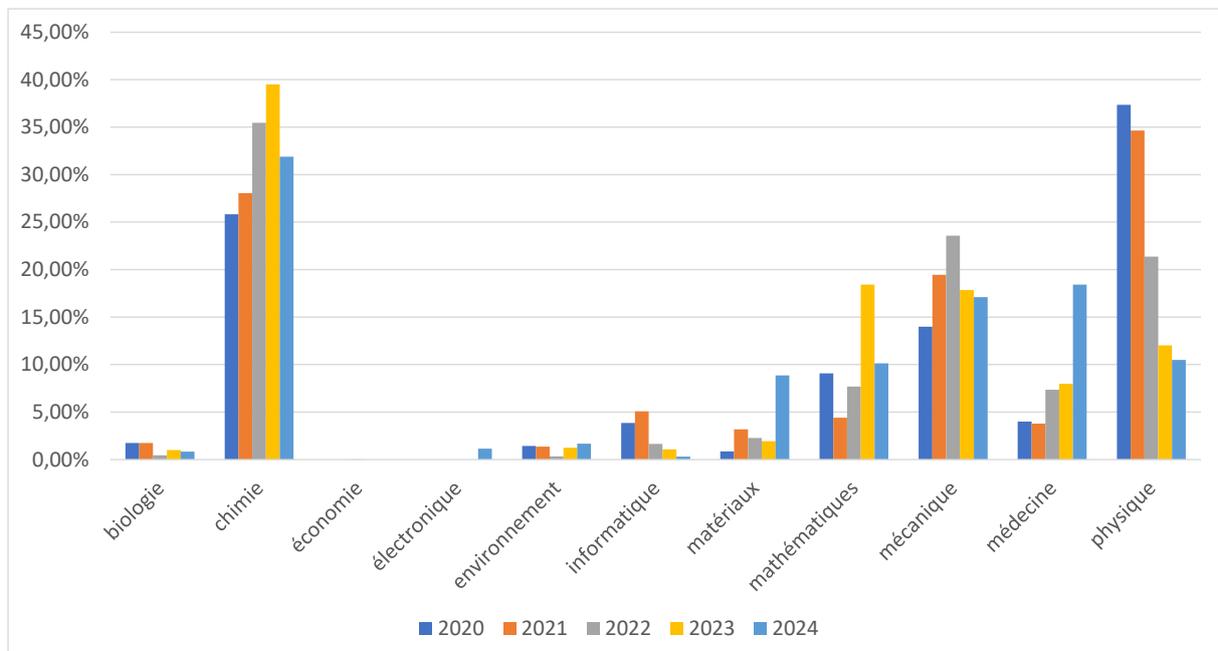


Figure 7 : répartition par discipline de la consommation des heures de calcul sur Curta

Nous observons tout d'abord une grande hétérogénéité dans la consommation par disciplines : l'utilisation de Curta est bien plus élevée pour certaines disciplines que pour d'autres. Les disciplines les plus consommatrices sur Curta sont sans surprise les disciplines historiquement les plus liées au calcul scientifique (chimie, physique, mécanique, mathématiques). L'informatique est peu consommatrice, sans doute en raison d'une utilisation privilégiée de la plateforme PlaFRIM par les utilisateurs bordelais. Enfin, on observe une consommation plus faible, mais tout de même significative, des disciplines comme l'environnement, la biologie, ou la médecine.

Par ailleurs, la consommation d'une même discipline peut varier fortement : voir par exemple la physique qui passe de 37% en 2020 à 10% en 2024. Certaines disciplines comme la chimie ou la mécanique ont des consommations plus stables, alors que la consommation des utilisateurs en médecine augmente chaque année.

2.2 Animation Scientifique

Le MCIa a organisé une journée scientifique en octobre 2022 qui a permis de rassembler et de favoriser les échanges scientifiques au sein de la communauté du calcul scientifique en Nouvelle Aquitaine autour d'exposés scientifiques et de présentations de posters (voir <https://jsmcia2022.sciencesconf.org/>). Cette journée a rassemblé 49 participants pour assister à des exposés donnés par des collègues de Bordeaux (4), Poitiers (1), Pau (3), Limoges (2), plus un exposé du GENCI et un du mésocentre de Grenoble (Gricad) :



Figure 8 : bannière du site web de la journée scientifique 2022 du MCIa

Le MCIa était l'organisateur local des JCAD 2024, Journées Calcul Données : Rencontres scientifiques et techniques autour du calcul et des données, avec le soutien de l'université de Bordeaux, du 04 au 06 novembre 2024 sur le Domaine du Haut-Carré (voir <https://jcad2024.sciencesconf.org/>) :



Figure 9 : bannière du site web des JCAD 2024

Ces journées sont organisées tous les ans par Le GIS FRANCE GRILLES, SLICES-FR/Grid'5000, le Groupe Calcul, le GDR RSD, GENCI et les mésocentres de MesoNET. Elles sont dédiées à la fois aux utilisateurs et aux experts techniques des infrastructures et des services associés. Les objectifs de ces rencontres sont de présenter des travaux scientifiques, dans toutes les disciplines, réalisés grâce au soutien des infrastructures de grilles de calcul, de mésocentres ou de cloud, les travaux de la recherche en informatique associée et les évolutions techniques et travaux des administrateurs de ces infrastructures. Ces journées associent exposés pléniers, tables rondes et posters sur des sujets d'actualité. En 2024, nous avons ainsi accueilli 120 participants venus de la France entière.

2.3 Formation

Lors du comité de direction du MCIA du 8 septembre 2023, la proposition de création d'un Pôle Formation animé par Laurent Facq (IMB) et Philippe Parnaudeau (Insitut Pprime) a été validée afin de mieux structurer cette mission du MCIA.

Ses objectifs sont :

- Promouvoir l'utilisation des ressources de calculs du MCIA à l'échelle de la Nouvelle Aquitaine, en particulier dans les communautés non encore utilisatrices (ex : SHS)
- Promouvoir une utilisation efficace des moyens de calcul

Les actions cibles prévues sont la mise en place de :

- Formations de proximité pour les nouveaux usagers
- Formations à l'optimisation, sensibilisation à l'efficacité énergétique et à la sobriété pour l'ensemble des usagers
- Relais locaux de diffusion de formations nationales pertinentes pour la communauté des usagers du MCIA

Actions réalisées qui sont détaillées dans des sections suivantes :

- Constitution d'un groupe de travail « formation » à l'échelle de la Nouvelle Aquitaine
- Recensement des dispositifs existants
- Recensement des besoins de formation des usagers du MCIA
- Formations réalisées
- Perspectives

2.3.1 Groupe de travail « formation »

Un appel à manifestation d'intérêt a été lancé auprès de l'ensemble des pôles universitaires de la région, afin de constituer un groupe de travail chargé d'organiser la mise en place de formations à l'échelle de la Nouvelle-Aquitaine. Les objectifs de ce groupe sont les suivants :

- Recenser et faire remonter les besoins locaux en matière de formation,
- Servir de relais local pour des formations hybrides,
- Prendre en charge l'organisation et la mise en œuvre de formations adaptées.

Suite à cet appel, neuf ingénieurs, répartis sur les cinq pôles universitaires (Bordeaux, La Rochelle, Pau, Poitiers et Limoges), ont répondu favorablement.

Pour marquer le lancement de cette initiative, une journée de travail a été organisée le 4 décembre 2023 à Poitiers. Cet événement a bénéficié du soutien financier de la Fédération Margaux, fédération des laboratoires de mathématiques en Nouvelle-Aquitaine, qui a exprimé un fort intérêt pour ce projet. Cette journée a été complétée par plusieurs visioconférences en amont et en aval, permettant d'assurer un suivi et une coordination optimale des actions.

2.3.2 Recensement des dispositifs existants

Avant de proposer de nouvelles formations, il était essentiel de procéder à un état des lieux des initiatives déjà existantes sur le territoire. Pour cela, l'ensemble des écoles doctorales de Nouvelle-Aquitaine a été contacté afin d'identifier d'éventuelles formations axées sur :

- Le calcul scientifique et la programmation
- Le calcul haute performance et l'optimisation
- L'utilisation de clusters de calcul HPC.

Toutefois, nos recherches ont été peu fructueuses, montrant sans que nous l'expliquions le peu d'offre de ce type hors Bordeaux. Afin de comprendre, il nous a semblé nécessaire de recenser les besoins.

2.3.3 Recensement des besoins de formation des usagers du MCIA

Afin de cerner avec précision les besoins en formation des usagers du MCIA, un sondage a été conçu et diffusé aux utilisateurs du MCIA, sous couvert des VP recherche/numérique des établissements ESR néo aquitains dans le cadre de la coordination INFRANUM (voir section 3). Les questions étaient structurées autour de plusieurs thématiques :

- Leur statut professionnel,
- Leur domaine de recherche,
- Leur mode d'utilisation des ressources (du centre),
- Leur niveau de connaissances et de compétences (en programmation, optimisation ...),
- Leurs priorités en matière de formation,
- Leurs modalités de formation préférées (présentiel/distanciel, durée),
- Les thématiques et niveaux de formation souhaités (langages de programmation, paradigmes de programmation parallèle, optimisation).

2.3.4 Principaux enseignements du sondage

Forte participation et intérêt marqué pour la formation : un taux de réponse d'environ 1/3 des 520 utilisateurs du MCIA, en cohérence avec les effectifs et la consommation par département, garantissant une bonne représentation territoriale.

Répartition équilibrée entre personnels permanents et non permanents : 50 % chacun, dont :

- doctorants : 25 %,
- contractuels : 10 %,
- post-doctorants : 8 %,
- stagiaires : 7 %.

Renouvellement annuel des utilisateurs : estimé entre 125 et 150 nouveaux usagers, majoritairement en demande de formation.

25 % de débutants en HPC, Unix et programmation.

Une majorité d'utilisateurs développant leur propre code de calcul : 71 %.

Préférence pour des formations courtes (1 à 3 jours), avec des différences selon le statut :

- **1 jour** pour les personnels permanents
- **à 3 jours** pour les non permanents.

2.3.5 Formations dispensées et à venir

Dates	Durée	Formation	Affiliation Formateur	Participation	Remarques
2023					
Juin	1j	Panorama Optimisation	Lenovo	~50	visio
Octobre	3j	Calcul Parallèle MPI	IMB	~12	
2024					
Janvier	2h	SSH	IMB	37	dont 28 EDMI
Janvier	3h	GIT Débutant	IMB	42	dont 35 EDMI
Février	3h	GIT collaboratif	IMB	34	dont 29 EDMI
Février	3h	Slurm	IMB	30	dont 21 EDMI
Mars	1j	Energyscopium	Denergium	5	Formation expert
Septembre	1h	Kokkos C++ CPU/GPU HPC	CEA	30	+visio
Octobre	1h	StarPU	Inria	12	+visio
Décembre	2h	Unix	PPrime	33	
Décembre	2h	MCIA + iRods	MCIA	56	
2025					
Janvier	2h	SSH	IMB		
Janvier	3h	GIT Débutant	IMB		
Février	3h	GIT Collaboratif	IMB		
Février	3h	Slurm/HPC	IMB		
En préparation	?	Séminaire Optimisation	PPrime		
En préparation	~3j	Calcul Parallèle MPI	IMB		

2.3.6 Perspectives

Les perspectives du pôle formation sont nombreuses et visent à renforcer la maîtrise et la diffusion des outils de calcul intensif dont nous disposons :

- **Pérenniser et enrichir l'offre de formation existante :**
Continuer à proposer des formations dans la lignée de celles organisées ces deux dernières années, en s'appuyant sur les retours et besoins identifiés à l'aide du questionnaire.
- **Développer les partenariats avec les centres de calcul nationaux :**

Jouer un rôle de relais local pour certaines formations nationales, en facilitant la venue de formateurs spécialisés sur des thématiques clés (exemple : programmation sur architectures spécialisées...)

- **Intégrer le dispositif « Gray Scott School » de l'IN2P3 :**
Explorer la possibilité de devenir un site satellite de ce programme. Organiser à Bordeaux une formation HPC d'une semaine, hybride (présentiel et distanciel), offrant un contenu à la fois très complet et actualisé.
- **Étudier de nouvelles thématiques en collaboration avec MesoNet :**
Réfléchir à l'opportunité d'organiser des formations sur des sujets émergents, comme le calcul quantique.
- **Mettre en place un support technique avancé :**
Étudier la pertinence et les modalités d'un service de support avancé pour accompagner les utilisateurs dans leurs projets.

2.4 Réalisations

Nous présentons ici quelques-unes des réalisations importantes de l'équipe technique du MCIA.

2.4.1 Système de gestion des utilisateurs

Le MCIA s'appuyait historiquement sur l'infrastructure de gestion des identités numériques de l'université de Bordeaux pour les comptes de ses utilisateurs. Avec un périmètre encore accru avec les établissements du nord de la Nouvelle Aquitaine, cette solution n'était plus maintenable.

L'équipe technique du MCIA a entrepris en 2021-2022 le développement d'une solution de gestion des comptes autonome permettant la prise en compte de la politique complète des comptes utilisateurs du mésocentre.

Basé sur un service Web développé en interne, ce système alimente un annuaire LDAP pour l'authentification sur les clusters, ainsi que la synchronisation de différents services non compatibles avec LDAP (iRODS par exemple) :

L'implémentation maison de ce système permet la gestion fine du cycle de vie des comptes utilisateurs tel que défini par la politique du mésocentre, ainsi que la composition des divers groupes d'utilisateurs (par exemple pour définir des collaborations, contrôler l'accès à des logiciels, etc.). Le système permet ainsi de configurer automatiquement des services tels que :

- les clusters
- le système de stockage iRODS
- les mailing-lists du Mésocentre
- l'accès au site web de documentation et d'assistance

L'interface web accessible aux utilisateurs leur permet de :

- demander le renouvellement de leur compte lorsqu'il arrive à expiration
- changer leur mot de passe clusters et iRODS
- configurer des clefs d'identification SSH
- consulter les groupes auxquels ils appartiennent
- gérer la composition de groupes dont ils sont administrateurs
- gérer les utilisateurs extérieurs qui sont leurs invités
- consulter la liste des ressources disponibles

Dans le cadre du projet d'extension régionale (voir le projet DOREMI en section 3), le système de gestion des comptes du MCIA est maintenant utilisé pour les accès aux clusters Poudlard (MCIA), CALI (Limoges), Pyrene (Pau) et Jarvis (Poitiers).

2.4.2 Cluster à destination des étudiants

Le cluster Poudlard (voir la présentation technique dans la section 1.3.2) constitue une ressource accessible aux étudiants des formations des établissements ESR de Nouvelle Aquitaine dont un professeur a demandé l'inscription.

Il est destiné à fournir une ressource de calcul similaire à un environnement professionnel dans le contexte de leur formation, que ce soit lors de TP ou de travaux de projet, voire de stage.

Mis en place en 2023 et administré depuis par l'équipe technique du MCIA, il accueille 90 étudiants et leurs enseignants.

Originellement modeste (environ 400 cœurs), le cluster a été étendu dans le cadre du projet DOREMI par l'acquisition de près de 600 cœurs supplémentaires. Dans ce contexte, le cluster est aussi accessible aux utilisateurs du MCIA qui en font la demande.

2.4.3 Services Web pour les utilisateurs

Dans le cadre de l'amélioration continue des services proposés aux utilisateurs, le MCIA a déployé un service web basé sur Grafana (<https://grafana.com/>) dédié à la consultation des statistiques d'utilisation des ressources de calcul et de stockage. Cette interface intuitive offre aux utilisateurs un accès personnalisé à des indicateurs clés, tels que les heures de calcul consommées ou encore l'occupation des espaces de stockage. Grâce à des visualisations claires et interactives, ce nouvel outil favorise une meilleure compréhension et gestion des ressources, tout en permettant aux utilisateurs d'optimiser leurs workflows scientifiques, voir la capture d'écran ci-dessous :

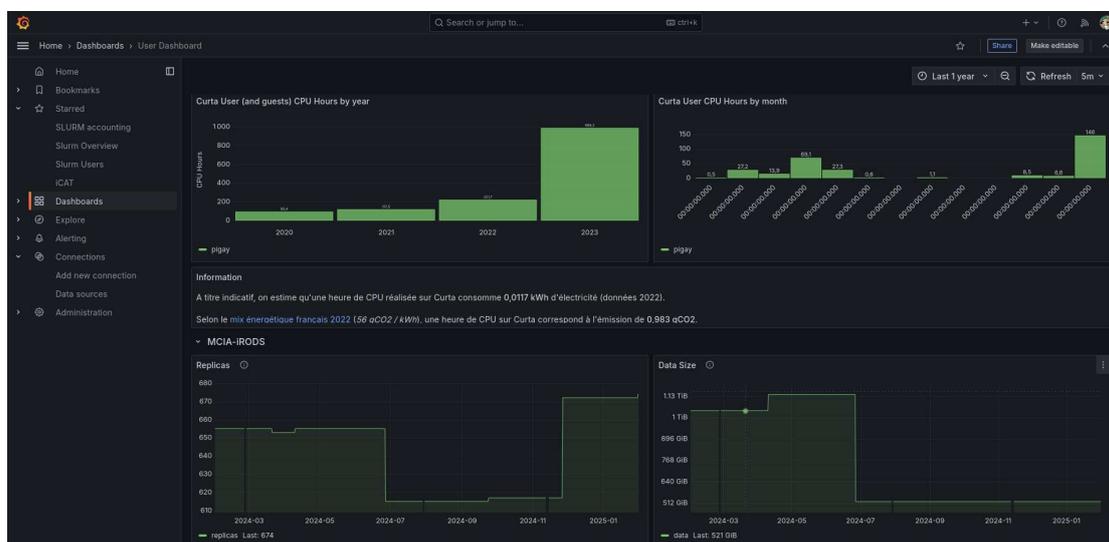


Figure 10 : interface Grafana pour les statistiques d'utilisation des ressources

Les utilisateurs peuvent aussi, grâce aux informations fournies, évaluer l'empreinte carbone de leurs calculs. Cette initiative s'inscrit dans une démarche d'accompagnement renforcé et de transparence vis-à-vis des membres de la communauté.

Par ailleurs, le MCIA a intégré en 2024 Open OnDemand (<https://openondemand.org/>), une interface web open-source pour simplifier l'accès des utilisateurs au cluster Curta. Cette

plateforme permet de soumettre et de gérer des tâches, d'accéder aux fichiers et d'exécuter des applications interactives via un navigateur web, sans nécessiter de client spécifique. Elle facilite notamment le lancement de sessions de visualisation déportée et offre une interface dédiée à l'exécution de notebooks Jupyter. Cette implémentation vise à améliorer l'efficacité et la productivité des chercheurs en leur fournissant des outils conviviaux pour interagir avec les ressources HPC. A titre d'illustration, un exemple d'affichage de l'interface est présenté ci-dessous :

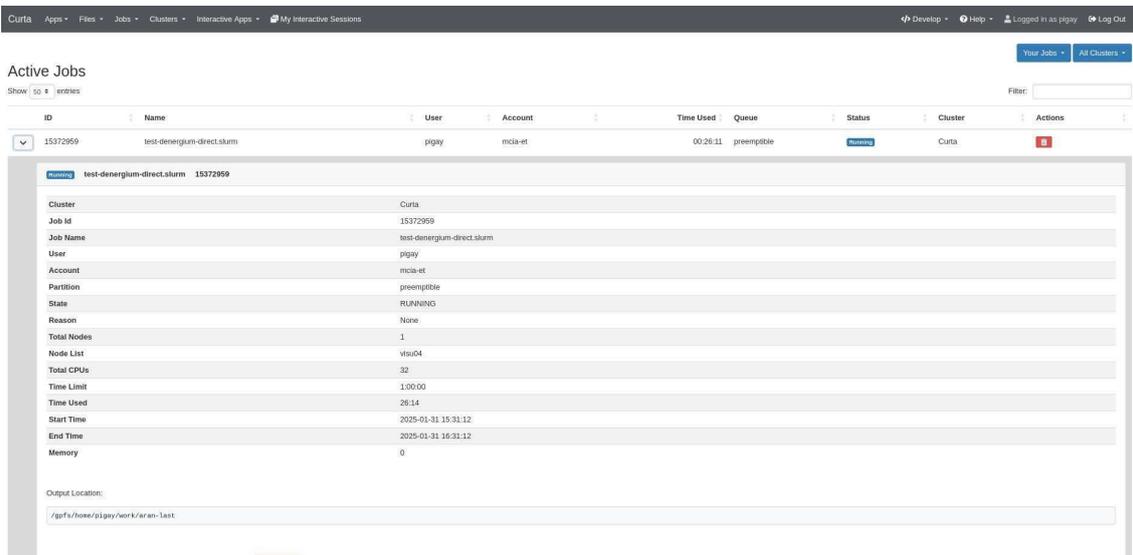


Figure 11 : interface Open OnDemand pour un accès web au cluster Curta

2.5 Économies d'énergie

À l'automne 2022, en raison du fort accroissement des tarifs de l'électricité, l'université de Bordeaux a demandé à toutes ses structures de mettre en place des plans d'économie d'énergie et de se préparer à des coupures potentielles. Le comité de direction du MCIA, en liaison avec le conseil scientifique et le comité utilisateurs, a lancé une série de réflexions et d'actions pour répondre à cette demande. La première section ci-dessous présente les solutions retenues car efficaces et possibles à mettre en œuvre rapidement. Les autres sections font le point sur trois actions effectivement mises en œuvre.

2.5.1 Liste des solutions étudiées

Nous présentons ci-dessous la liste de solutions étudiées :

- **Baisser la fréquence des nœuds** : plus la fréquence d'un processeur est élevée, plus la consommation d'énergie associée est importante. L'idée consiste donc à diminuer cette fréquence tout en évitant de pénaliser les utilisateurs. Cette solution a fait l'objet d'une étude décrite dans la section ci-dessous.
- **Sensibiliser les utilisateurs à la sobriété** : un message a été envoyé aux utilisateurs pour les inciter à modérer leur usage des moyens du MCIA, et les alerter sur les risques de lancer un job sur une longue durée. Nous avons aussi prévu un autre message à envoyer en cas de période orange ou rouge.
- **Former les utilisateurs à l'optimisation de code** : de nombreux outils et méthodes existent pour optimiser un code de calcul, ceux-ci sont généralement utilisés pour diminuer le temps d'exécution. Dans une certaine mesure, une telle optimisation induit aussi une baisse de la consommation énergétique. Le MCIA souhaite donc proposer aux utilisateurs des formations à l'utilisation de ces outils. À l'heure actuelle, l'équipe technique n'a cependant pas les ressources humaines pour de telles formations. Ces formations ont donc été organisées à l'aide de prestataires :
 - Formation à l'optimisation de jobs par l'entreprise Lenovo, dans le cadre du contrat passé lors de l'achat du cluster Curta ;
 - Achat d'une licence d'un an de l'outil EnergyScopium de diagnostic énergétique d'un job (développé par la startup Denergyum du centre INRIA de l'université de Bordeaux) et organisation d'une session de formation à l'outil : ce projet a été financé par la fédération des plateformes de recherche dans le cadre de l'appel à projet automne 2022. Ce contrat a été renouvelé sur fonds propres du MCIA en 2024 (voir les détails ci-dessous).
- **Éteindre les nœuds non utilisés** : cette solution efficace n'a pu être mise en œuvre qu'après la mise à jour logicielle du cluster, au printemps 2024.
- **Éteindre une partie des nœuds pendant une période définie** : cette solution est simple à mettre en œuvre. Une extinction de 10% des nœuds du cluster induit une baisse de la consommation du MCIA de l'ordre de 10%. La baisse de la consommation est de l'ordre de 80 kWh par nœud éteint. Pour éviter la perte de jobs longs, ceux-ci ont été confinés à une partie identifiée du cluster qui sera préservée de l'extinction partielle. Cette solution peut être mise en œuvre à tout moment à la demande de l'université de Bordeaux (un préavis de 4 jours nous permettrait d'attendre la fin de tous les calculs s'exécutant à ce moment-là). Le cas échéant, si cela nous est demandé, il est aussi possible d'éteindre la totalité des nœuds (par exemple pendant la période entre Noël et le premier de l'an).

2.5.2 Logiciel EnergyScopium

Ce logiciel a été acquis auprès de Denergyum et installé sur le calculateur Curta courant 2023, avec un financement de la fédération des plateformes de recherche de l'université de Bordeaux.

Tous les nœuds de calcul sont maintenant surveillés par cet outil en permanence, et tous les utilisateurs peuvent obtenir une analyse détaillée de leur consommation électrique, calcul par calcul. L'outil a été présenté en conseil scientifique du MCIA ainsi que devant le comité utilisateurs.

Une formation à l'utilisation a été organisée au printemps 2024 pour 10 personnes. Pour le moment, les quelques utilisateurs qui ont manifesté un intérêt pour ce logiciel sont des spécialistes du HPC qui le voient plutôt comme un outil de recherche, et pas comme un moyen de réduire leur empreinte énergétique. À ce jour, l'ensemble de la communauté des utilisateurs ne s'est pas encore emparée de cet outil, ce qui n'est pas très étonnant, car la mise à disposition du logiciel est bien trop récente pour cela.

Nous avons négocié avec Denergyum le renouvellement de notre collaboration pour l'année 2024-2025. Avec une nouvelle session de formation, nous espérons sensibiliser d'avantage d'utilisateurs à la question de la consommation énergétique des calculs.

2.5.3 Étude sur la baisse de fréquence des processeurs du supercalculateur Curta

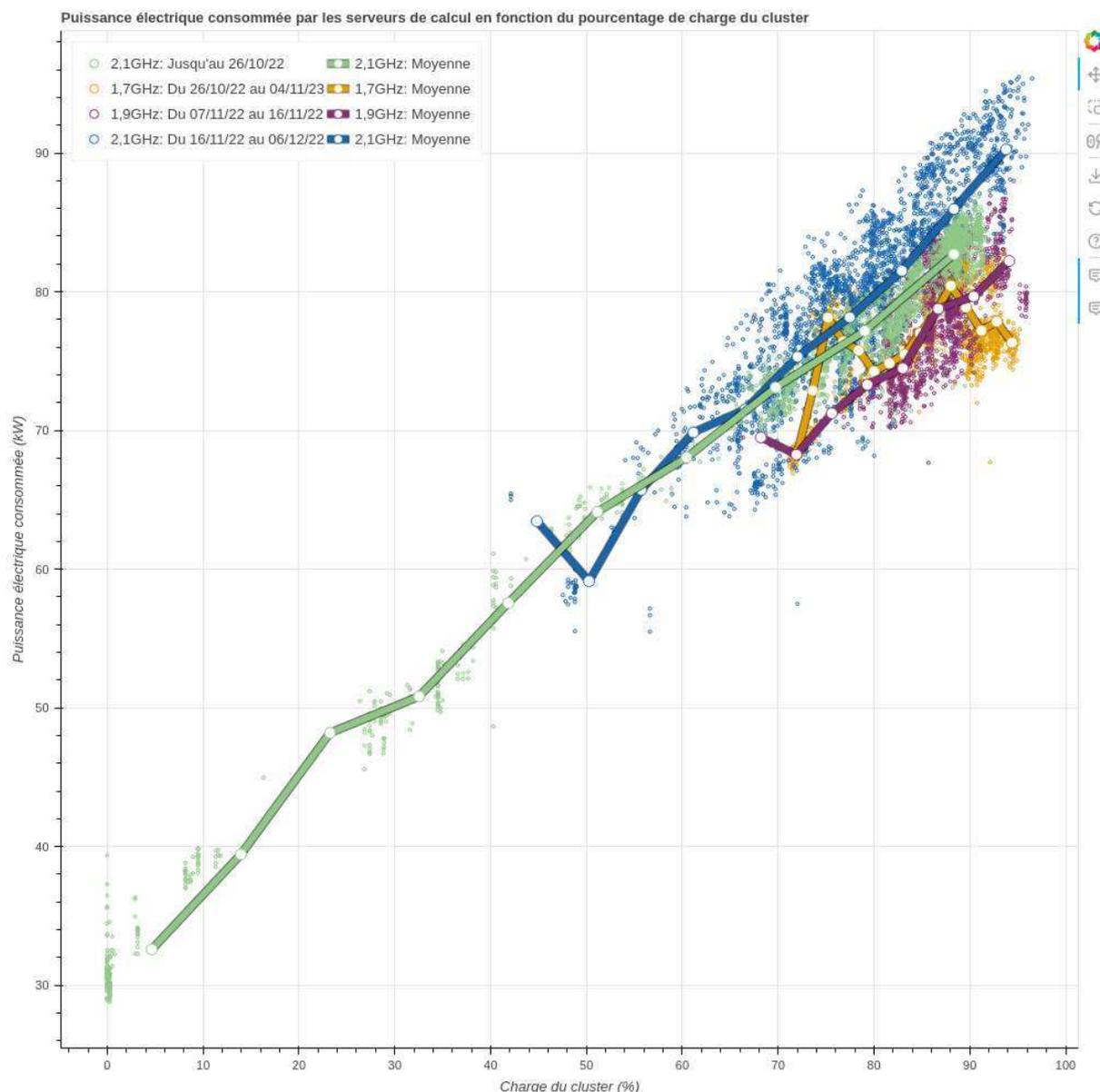
À partir de l'automne 2022, diverses expériences ont été menées pour déterminer la fréquence la plus adéquate pour obtenir une économie d'énergie et impacter le moins les utilisateurs.

La fréquence maximale de nos processeurs étant de 2,1 GHz, les expérimentations se sont donc déroulées de la manière suivante :

- Passage à 1,7 GHz du 26/10/2022 au 04/11/2022
- Retour à 2,1 GHz le 04/11/2022
- Passage à 1,9 GHz du 07/11/2022 au 16/11/2022
- Retour à 2,1 GHz le 16/11/2022

Depuis mi-octobre 2022, nous récupérons la puissance électrique consommée par les serveurs de calcul, toutes les 10 minutes. Cette donnée ne comprend que la puissance électrique consommée par les processeurs, la mémoire, ainsi que par d'autres composants internes aux serveurs, mais elle ne prend pas en compte les alimentations et les ventilateurs des châssis de calcul.

Le résultat de ces expérimentations est représenté dans le graphique ci-contre dans lequel nous donnons la puissance électrique consommée en fonction de la charge du cluster. Noter que pour le fonctionnement avec la fréquence de 2,1 GHz, nous donnons les données relevées de mi-octobre jusqu'au 26/10, car celles relevées du 04/11 au 07/11 ne sont pas assez nombreuses.

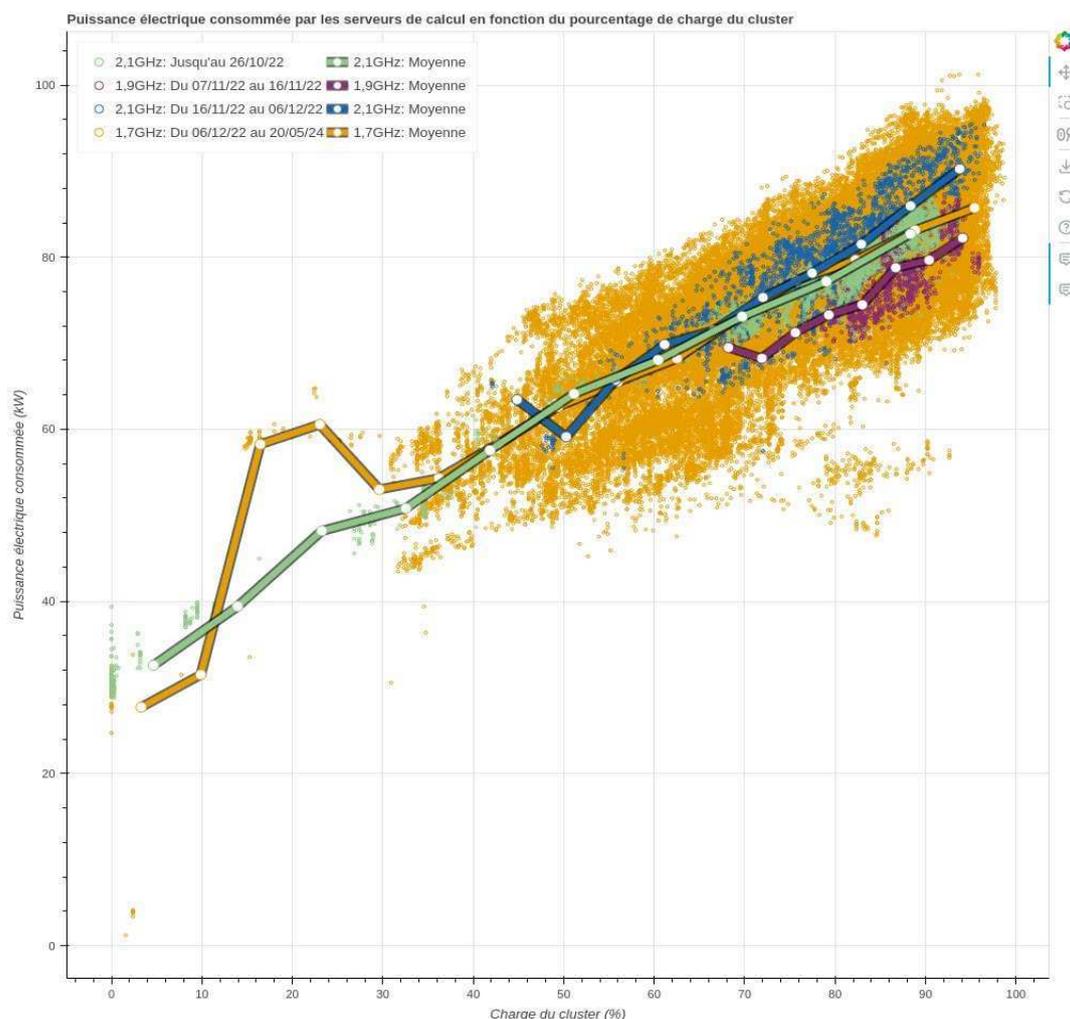


À la suite de ces expérimentations, nous avons pu déterminer le gain de la puissance électrique instantanée dû à la diminution de fréquence par rapport à la fréquence nominale de 2,1GHz (un gain de +2% indique que la puissance a diminué de 2%) :

Pourcentage charge du cluster	Fréquence 1,7GHz	Fréquence 1,9GHz
60 % - 70 %	N/A	+3,06 %
70 % - 80 %	+2,84 %	+6,24 %
80 % - 90 %	+4,71 %	+5,64 %
90 % - 100 %	+11,78 %	+7,09 %

L'utilisation du cluster oscillant majoritairement entre 85 % et 95 % de charge et au vu des pourcentages de gain recensés, il était plus intéressant de partir sur la fréquence à 1,7GHz. Après discussion en comité utilisateurs, il a alors été décidé de baisser la fréquence à 1,7 GHz à partir du 6 décembre 2022 et cette configuration est restée en place jusqu'à la mise à jour du cluster le 20 mai 2024.

Voici le graphique actualisé avec les données du 06/12/22 au 20/05/24 :



En calculant à nouveau le gain, nous obtenons les valeurs suivantes :

Pourcentage charge du cluster	Fréquence 1,7GHz
50 % - 60 %	+1,28 %
60 % - 70 %	+2,6 %
70 % - 80 %	-0,03 %
80 % - 90 %	+1,32 %
90 % - 100 %	+1,73 %

Nous constatons que le gain est bien moindre que ce que nous avons identifié lors des expérimentations. Toutefois, nous ne pouvons pas prendre ces valeurs à la lettre car la quantité de données recueillies pour 2,1GHz (5535 enregistrements) est très faible par rapport à celle pour 1,7GHz (68535 enregistrements). Si nous avions autant de données pour 2,1 GHz, nous pouvons imaginer que le gain mesuré serait sûrement plus significatif.

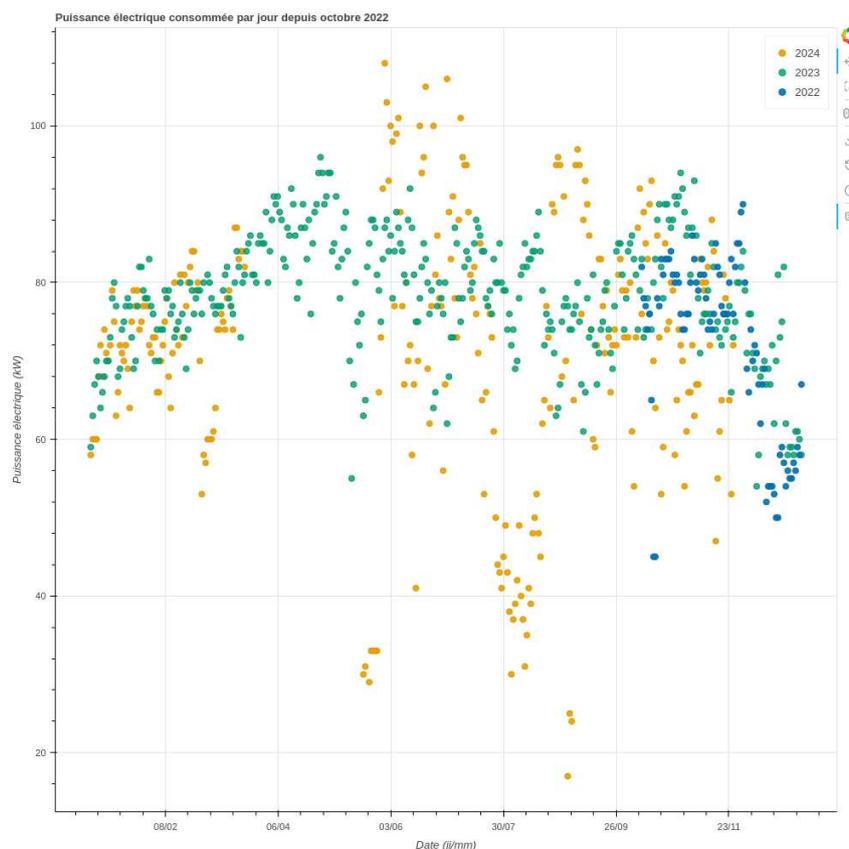
2.5.4 Procédure d'arrêt des nœuds inactifs

En mai 2024, suite à une mise à jour du système d'exploitation du supercalculateur et des logiciels installés, nous avons pu mettre en place une procédure d'extinction des nœuds lorsqu'ils ne sont

pas utilisés. Cette fonctionnalité a été introduite dans la configuration de l'ordonnanceur de tâches. Tout nœud non utilisé pendant 1h sera éteint jusqu'à ce que les ressources soient redemandées.

Cette procédure simple et efficace n'impacte pas les performances des jobs, et elle a été privilégiée à la baisse de fréquence qui a donc été remontée à 2.1 GHz. Nous avons également activé sur les processeurs le mode turbo, dans le but de diminuer le temps d'exécution des jobs.

Finalement, nous avons tenté d'estimer l'influence de cette action avec différentes mesures. La puissance électrique consommée par jour par le cluster depuis fin 2022 est présentée dans le graphique suivant :



Pour 2022, nous n'avons pas beaucoup d'enregistrements car le dispositif n'a été mis en place qu'à partir de mi-octobre. Pour 2023, la moyenne de la puissance électrique instantanée est aux alentours de 78kW. Et en ce qui concerne 2024, la moyenne est aux alentours de 63kW.

De plus, à partir du logiciel de supervision, Data Center Expert, fourni par la DSI de l'Université de Bordeaux, nous avons pu comparer les données de consommation électrique entre 2022, 2023 et 2024. Nous avons remarqué que le cluster a consommé 34 000 kWh de moins en 2023 qu'en 2022 et 61 000 kWh de moins en 2024 qu'en 2023 sur la même période (01/01 au 22/11). La consommation totale du cluster est ainsi :

2022	2023	2024 (au 22/11)
933 215 kWh	904 011 kWh	756 482 kWh

Toutefois, il est difficile d'attribuer la baisse de consommation en 2024 uniquement à la procédure d'extinction des nœuds, car un dixième du cluster est en panne depuis août 2024 et deux arrêts de production ont eu lieu au cours de l'année.

2.6 Prolongation de la garantie de Curta

Le marché public relatif à l'acquisition du cluster Curta a couru de juin 2019 à juin 2024.

Le projet CPER INFRANUM de renouvellement des moyens de calcul régionaux n'ayant encore pas abouti à cette date, les universités de Bordeaux, Pau, Limoges et Poitiers ont convenu de prolonger la garantie du cluster pour une année jusqu'en juin 2025.

L'extension de garantie reprend les termes du marché initial, sauf les nœuds de calcul eux-mêmes qui ne seront pas remplacés lors des pannes.

Fin 2024, 40 nœuds de calcul étaient en panne (non récupérables), constituant une diminution de la capacité de calcul de plus de 10 %, ce qui objective le risque encouru avec l'utilisation d'une machine au-delà de la période de garantie initiale.

2.7 Implication dans MesoNET

Le réseau de mésocentres MesoNET (voir section 1.3.7) fonctionne avec un grand nombre de comités et de groupes de travail qui rassemblent des collègues désireux de participer à la mise en place du projet. À la demande du MCIA, un certain nombre de collègues (personnel MCIA ou ingénieurs/chercheurs de laboratoires partenaires) ont accepté de participer à ces groupes :

- Assemblée générale : Luc Mieussens (IMB et MCIA, Bordeaux)
- Comité de pilotage : Marc Odunlami (DSI, Pau), Philippe Parnaudeau (Pprime, Poitiers, suppléant)
- GT Machine Code-Formation : Pierre-André Wacrenier (LaBRI, Bordeaux), Mickaël Geguen (ENSMA, Poitiers)
- GT architectures vectorielle, quantique, ARM : B. Goglin (INRIA, Bordeaux) et P. Parnaudeau (Pprime, Poitiers)
- GT Stockage : Philippe Aurel (ISM, Bordeaux), Alexandra Darrietort (MCIA, Bordeaux)
- GT Portail : P. Depouilly (IMB, Bordeaux)
- GT sécurité : Philippe Aurel (ISM, Bordeaux)
- GT GES : David Benaben (INRAE Bordeaux)

Notons enfin que le MCIA est représenté au Conseil Scientifique de MesoNET par le vice-président numérique de l'université de Bordeaux (K. Belabas).

3 Vers un mésocentre Nouvelle-Aquitaine : le projet DOREMI

Depuis 2010, le MCIA renouvelle ses matériels régulièrement en faisant appel aux appels à projets région et contrats de plan État-Région (CPER). Dès 2019, en vue du CPER 2021-2027, la région Nouvelle-Aquitaine a demandé à tous les établissements de se concerter pour ne faire remonter qu'une seule demande de financement pour les futurs besoins en calcul scientifique, et plus largement en infrastructures numériques. Les établissements se sont alors organisés pour porter le projet INFRANUM, découpé en 3 volets : le réseau (campus@THD), les services numériques (campus@datacentre), et le calcul scientifique (DOREMI). Le MCIA a alors été chargé par le vice-président en charge du numérique de l'université de Bordeaux de coordonner cette réponse, sous la supervision du comité de pilotage du projet INFRANUM. Ce projet est décrit ci-dessous.

3.1 Paysage régional en 2019

En 2019, les équipements de calcul scientifique en Nouvelle-Aquitaine étaient organisés de la façon suivante (voir la figure ci-dessous) :

- 5 sites universitaires : Bordeaux et Pau au sud, et La Rochelle, Poitiers, et Limoges au nord.
- 4 centres de calcul : le centre SPIN (commun aux sites de Poitiers et La Rochelle), le centre CALI de l'université de Limoges, le centre Pyrene de l'université de Pau et des Pays de l'Adour, et le MCIA à Bordeaux (utilisé conjointement par les sites de Bordeaux et de Pau).
- 1 mésocentre : le MCIA était le seul mésocentre reconnu au niveau national

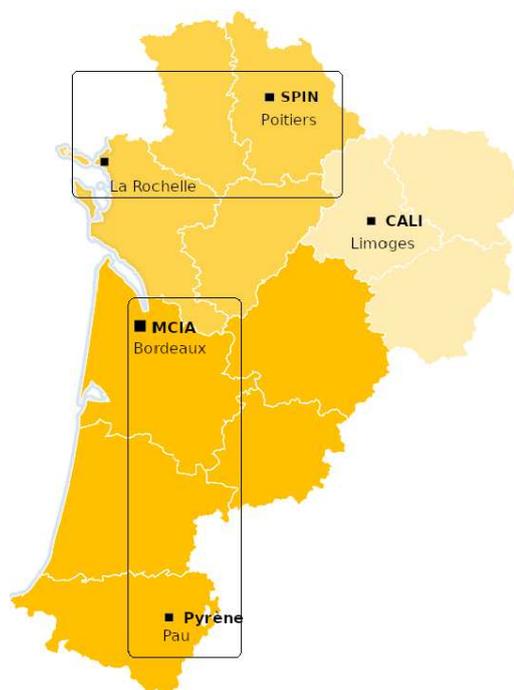


Figure 12 : sites universitaires de Nouvelle-Aquitaine et centres de calcul associés

3.2 DOREMI - avance de phase : ouverture du MCIA au nord de la région

En juillet 2020, le MCIA a organisé une réunion pour des échanges informels entre chercheurs et ingénieurs de tous les établissements de la Nouvelle-Aquitaine. Cette réunion a permis que chacun prenne connaissance de ce qui existait chez les autres et de discuter sur ce projet de mutualisation. Il en est ressorti que les machines de La Rochelle et Poitiers (SPIN) et Limoges (CALI) étaient en fin de vie, et que les chercheurs avaient un fort besoin de trouver de nouveaux équipements. L'idée de mésocentre régional a suscité un vif intérêt.

Par la suite, les chercheurs du nord ont rencontré leurs directions pour leur faire part du projet, puis les vice-présidents de La Rochelle et Poitiers ont contacté Guy Mélançon (vice-président en charge du numérique de l'université de Bordeaux) et Luc Mieussens pour en discuter. Après deux réunions en septembre et novembre 2020, ces deux universités ont confirmé leur souhait de rejoindre le MCIA. L'université de Limoges a aussi manifesté ce même souhait un peu plus tard.

Suite à ces réunions, il a donc été décidé que l'accès aux services du MCIA serait ouvert à tout chercheur du nord de la région qui en ferait la demande. Cette ouverture est effective depuis fin 2020, et de fait, de nombreux chercheurs du nord de la région sont maintenant utilisateurs des moyens du MCIA (voir la section 2.1.4 à ce sujet).

3.3 DOREMI - première phase : jouvence des matériels locaux

La première phase du projet DOREMI consistait à renouveler un certain nombre d'équipements de calcul des différents sites de la région.

Un premier besoin de renouvellement émanait des différentes plateformes spécifiques du site bordelais : PlaFRIM (machines à nouvelle architecture), CBiB (génomique), BIC (imagerie), CREDIM (santé publique). Le MCIA a donc synthétisé l'ensemble de ces demandes.

Un autre objectif était de renouveler de façon urgente les matériels en fin de vie des centres de calculs mutualisés des différents établissements, en cohérence avec le projet à long terme de création d'un futur mésocentre néo-aquitain. Il a donc été décidé d'équiper quelques sites en matériels spécifiques, accessibles à toute la communauté régionale :

- *CALI 3* : plateforme dédiée au calcul sur accélérateur GPU (IA, Machine Learning, calcul intensif GPU, etc.), localisée sur le campus de l'université de Limoges. Elle intègre aussi les GPUs du projet précédent CALI 2 pour un nombre global de 44 GPUs allant de la GTX 1080 Ti à la H100.
- *Jarvis* : machine dédiée au calcul sur architecture de type « Single System Image » permettant d'adresser indépendamment et de façon transparente une quantité de RAM à travers un nombre de processeurs, localisée sur le campus de l'université de Poitiers.
- *Pyrene* : serveurs dédiés au calcul avec grosse capacité mémoire, plateforme de l'université de Pau et des Pays de l'Adour. Dans le cadre de DOREMI, cinq nœuds grosse capacité mémoire sont mis à disposition ; ces machines sont accessibles depuis les serveurs interactifs de Curta.
- *Poudlard* : machine du MCIA à base de processeurs AMD à vocation de formation pour les étudiants qui accueille aussi des utilisations plus expérimentales et de développement pour les chercheurs en Nouvelle Aquitaine.

Cette première phase s'est achevée en 2024 avec l'ouverture de toutes ces machines aux utilisateurs de toute la région Nouvelle-Aquitaine.

3.4 DOREMI – deuxième phase : mésocentre et supercalculateur néo-aquitain

La deuxième phase du projet DOREMI consiste à acquérir un supercalculateur qui viendrait remplacer le calculateur Curta du MCIA, et à créer une structure administrative adéquate pour un futur mésocentre néo-aquitain.

Pour le supercalculateur, l'objectif est d'acquérir un supercalculateur de taille suffisante pour accueillir les utilisateurs actuels et faire face à l'augmentation des besoins dans toutes les disciplines scientifiques, en particulier dans le domaine du traitement des données massives et de l'intelligence artificielle. Ce projet d'acquisition d'un supercalculateur est porté par un groupe de travail dédié, coordonné par Philippe Depouilly (Ingénieur de recherche CNRS, Institut de Mathématiques de Bordeaux), avec des participants des établissements de Bordeaux, La Rochelle, Limoges, Pau et Poitiers.

Le processus d'appel d'offre devrait commencer en 2025, et sera mené par un groupe technique constitué de chercheurs et ingénieurs de recherche des différents sites de la région, en collaboration avec le service des achats de l'université de Bordeaux.

Ce projet nécessite aussi une solution d'hébergement du futur supercalculateur : fin 2024, une solution sur le site de l'université de Bordeaux a été validée, en collaboration avec la direction des systèmes d'information et le pôle patrimoine et environnement de l'université de Bordeaux.

Pour le futur mésocentre néo-aquitain, une structure du type Unité d'Appui à la Recherche (UAR) du CNRS est envisagée. Une note en ce sens a été cosignée par les établissements et envoyée aux organismes de recherche (CNRS, INRIA, INSERM, INRAE) fin 2024, son objectif étant la diffusion d'éléments de contexte afin d'aboutir à une décision collégiale sur la forme juridique que prendra la mutualisation régionale des moyens de calcul scientifique, sur sa gouvernance opérationnelle (organe exécutif) et sur les ressources qui y sont associées, tant humaines que financières.

4 Projets de recherche

Cette section présente quelques projets de recherche ayant bénéficié des moyens de calcul et de stockage du MCIA. Les projets présentés donnent un aperçu de la variété des usages et des disciplines scientifiques des utilisateurs du MCIA.

La plupart des sections ont été rédigées par les membres du conseil scientifique du MCIA. Chaque section est consacrée à une thématique scientifique propre à un laboratoire. Le titre de la section est le nom de la thématique scientifique, suivie de l'acronyme du laboratoire. La section contient ensuite une présentation rapide du laboratoire ou de l'équipe de recherche, puis la présentation de quelques projets. Il y a ainsi plusieurs sections correspondant à des thématiques scientifiques identiques ou proches.

Les sections sont organisées dans l'ordre alphabétique des thématiques scientifiques.

4.1 Astrophysique (LAB)

unité de recherche : Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux, Pessac

correspondant : Pierre Gratier

Les recherches qui sont menées au LAB couvrent une large gamme de l'étude du milieu interstellaire diffus à la formation des étoiles et des systèmes planétaires, des propriétés atmosphériques et de surface des planètes aux questions de climat, d'habitabilité et de recherche de la vie. Aux plus grandes échelles, les équipes du laboratoire s'intéressent aux amas d'étoiles, à l'histoire des populations stellaires de la Galaxie et aux systèmes de référence fournis par les quasars. D'un point de vue technique, le laboratoire a développé un savoir-faire unique en électronique pour la radio-astronomie et le pilotage d'instruments embarqués sur des sondes spatiales. Il possède également un fort potentiel de fabrication mécanique de précision pour l'instrumentation au sol et dans l'espace.

Simulations des propriétés des étoiles dans la Galaxie avec le modèle de la Galaxie de Besançon

De l'archéologie Galactique à l'évolution stellaire, le modèle de synthèse de populations stellaires de la Galaxie de Besançon développé au LAB (BGM2.0), nous permet de simuler les propriétés des étoiles de notre Galaxie en prenant en compte les mécanismes de mélange dans les étoiles et dans la Galaxie. Ce modèle a été essentiel dans deux études que j'ai pu mener : d'abord, pour tester l'efficacité du mélange thermohaline dans les étoiles géantes rouges observées par *Kepler* et *Gaia*, et ensuite, pour étudier l'évolution séculaire du disque Galactique en comparant les observations de *Gaia*, *Kepler* et APOGEE avec des simulations du BGM2.0. Les simulations du BGM2.0 sont aussi utilisées pour comprendre les populations stellaires de la Galaxie telles qu'elles sont observées par le satellite *Gaia* ; ou pour affiner notre compréhension de la chimie des étoiles évoluées. Ce sont des travaux en cours qui devraient être publiés courant 2025 dans deux articles Lagarde et al (in prep). Enfin, les simulations sont aussi utilisées dans le cadre de stage de master (M1 en 2022 et M2 en 2025).

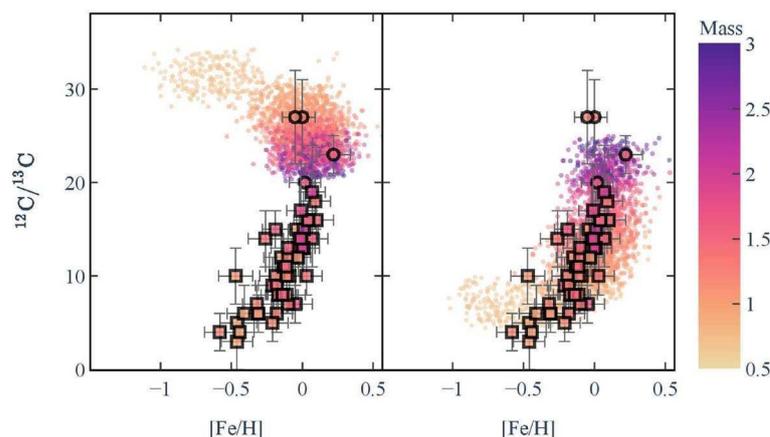


Fig.1: $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ vs. $[\text{Fe}/\text{H}]$ pour les étoiles du clump (carrés) et de la RGB (cercles) de notre échantillon, comparées aux simulations BGM2.0 (points) pour les seules étoiles du clump, avec ou sans prise en compte du mélange thermohaline (panneaux droit et gauche).

Les jobs lancés avec le BGM sont très variables en temps et en mémoire. De quelques heures à plusieurs jours ; le fichier résultats allant de quelques Mo à quelques Go

Références :

Lagarde et al. 2024 *A&A*, 684, A70

Lagarde et al. 2021 *A&A*, 654, A13

Contact : Nadège Lagarde nadege.lagarde@u-bordeaux.fr

Détermination des masses des étoiles en utilisant le code SPiNs amélioré pour intégrer les modèles d'évolution stellaire STAREVOL développés et calculés au LAB

Pour un échantillon d'étoiles de référence Gaia, nous avons déterminé la masse et le rayon de ces étoiles en utilisant l'outil the Stellar Parameters INferred Systematically (SPiNS). Cet outil caractérise les étoiles à l'aide d'une approche Monte Carlo par chaînes de Markov (MCMC), en utilisant différents ensembles possibles de grandeurs observables en entrée et en utilisant des modèles d'évolution stellaire.

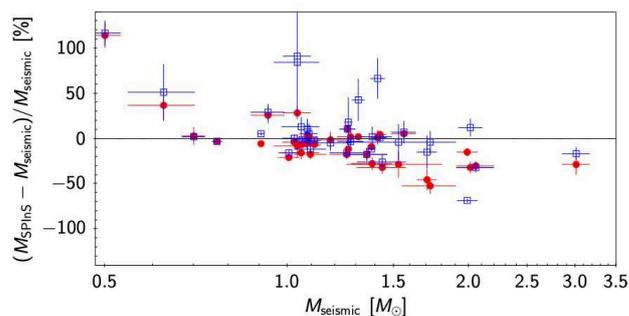


Fig. 2: Comparaison entre les masses calculées avec SPiNS (points bleus avec les modèles STAREVOL ; rouges pour les modèles BASTI) et les masses déduites de l'asterosismologie. Figure extraite de Soubiran et al 2024.

Les jobs lancés vont de quelques heures à quelques jours sans dépasser la semaine et le fichier résultat n'excède pas plus que quelques Mo.

Références :

C. Soubiran, O. Creevey, N. Lagarde et al. 2024 *A&A*, 682, A145

Lagarde, N et al. 2024 *A&A*, 684, A70

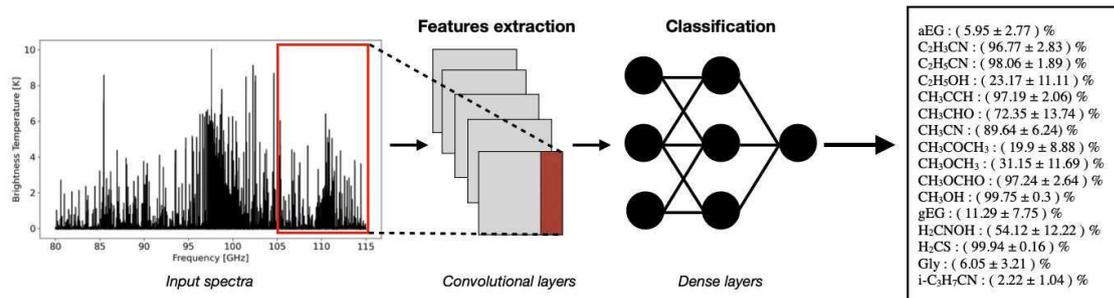
Casamiquela et al (*in prep.*)

Contact : Nadège Lagarde nadege.lagarde@u-bordeaux.fr

Détection et identification de molécules dans le milieu interstellaire par apprentissage machine

Une fraction substantielle de molécules organiques complexes (COMs) est considérée se synthétiser à la surface de grains de poussière et dans leur manteau de glace, pour ensuite être désorbée thermiquement à proximité des protoétoiles. De ce fait, les spectres (sub)millimétriques

des coeurs chauds sont généralement riches et peuvent nous renseigner sur la chimie du milieu. L'émission thermique de ces molécules est un moyen de tracer la distribution du gaz dans les régions les plus proches de la protoétoile et de déduire leurs caractéristiques physiques. La détection de ces espèces chimiques et la détermination de leurs paramètres physiques sous-jacents sont basées sur des méthodes itératives d'ajustement de modèles à l'équilibre thermodynamique local. Cependant, cette procédure peut s'avérer longue et contraignante surtout dans un contexte où la quantité des données d'observation ne cesse d'augmenter avec l'amélioration des radiotélescopes. Afin de répondre à cette demande, nous avons développé une méthode basée sur l'apprentissage machine permettant de détecter et d'identifier la signature moléculaire de COMs. Il est ainsi possible de réaliser des statistiques sur le contenu moléculaire de régions de formation stellaire observées dans le domaine (sub)millimétrique.



Dans le cadre de ce projet, j'ai utilisé le cluster CURTA pour le développement d'une méthode d'apprentissage machine basée sur un réseau de neurones artificiels. Il a fallu construire un jeu de données d'entraînement et trouver une architecture de réseau de neurones adéquates pour la détection et l'identification de signatures moléculaires au sein de spectres typiques des régions de formation stellaire. La phase de développement a donc été itérative afin de trouver l'approche la plus efficace pour répondre à notre problématique. Les demandes slurm effectuées impliquaient un GPU avec 100G de mémoire ainsi que 8 CPU avec 20G de mémoire par CPU et ce pendant 32 heures, sachant que souvent l'utilisation effective du temps demandé pouvait varier entre 3 heures et 24 heures. J'ai aussi demandé des sessions interactives avec le même type de configuration pour des durées allant de 24 à 48 heures. En tout, ce sont plus de 50 demandes qui ont été faites.

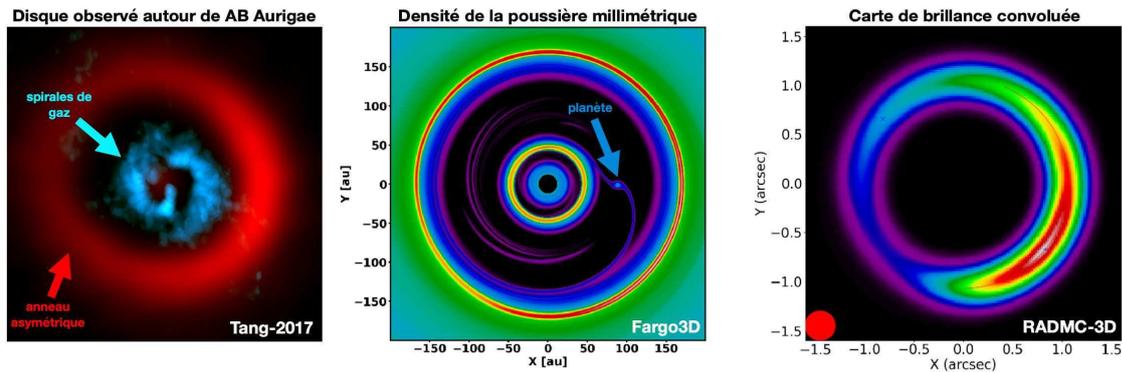
Les résultats obtenus font sujet d'un article en préparation qui sera publié dans la revue *Astronomy and Astrophysics* : Kessler, N., Csengeri, T., Cornu, D., and Bontemps, S. (in prep). Investigating molecular complexity using Convolutional Neural Networks.

Contact : Nina Kessler nina.kessler@u-bordeaux.fr

Étude des propriétés orbitales d'une protoplanète autour de l'étoile jeune AB Aurigae

L'objectif est de reproduire certaines observations du disque protoplanétaires autour de l'étoile jeune AB Aurigae afin de contraindre les propriétés orbitales d'une protoplanète pouvant être à l'origine des différentes structures observées. Pour cela, nous utilisons le code hydrodynamique Fargo3D (Benítez-Llambay & Masset 2016) afin de réaliser des simulations multifluides (gaz et poussières) de disques (~600 000 heures CPU). Nous partons d'un disque présentant des propriétés similaires à celles observées (Piétu 2005, Tang 2017), et simulons son interaction avec une planète dont on fait varier les paramètres orbitaux, créant différentes structures au sein du disque. Nous simulons ensuite l'émission de ces disques avec le code de transfert radiatif RADMC-3D (Dullemond 2012), et convoluons les cartes de brillance ainsi obtenue par la réponse

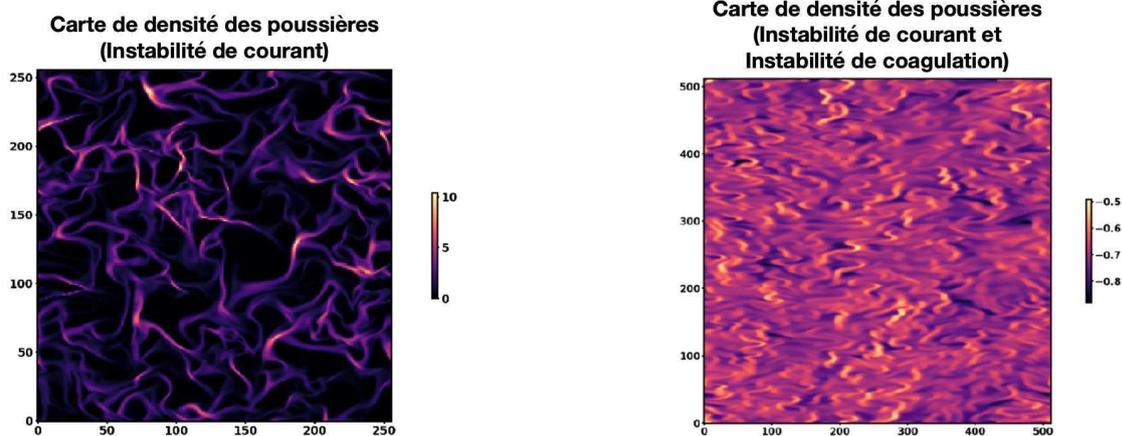
instrumentale du télescope afin d'obtenir une image. Les propriétés des structures observées permettent ainsi de contraindre les caractéristiques d'une potentielle planète présente dans ce système



Contacts : Thomas Collin-Dufresne thomas.collin-dufresne@u-bordeaux.fr , Emmanuel Di Folco emmanuel.di-folco@u-bordeaux.fr

Étude de la croissance des planétésimaux dans les disques protoplanétaires

L'objectif est d'étudier comment des petits grains (<cm) peuvent grossir en planétésimaux (~km) au sein d'un disque protoplanétaire, franchissant ainsi la barrière du mètre (Whipple 1972). Avec une version modifiée de Fargo3D considérant la coagulation des grains, nous simulons localement une petite section d'un disque (Shearing Box, ~50 000 heures CPU). Cela permet d'étudier les instabilités se déclenchant à très haute résolution, sans avoir à simuler tout le disque, réduisant grandement le coût computationnel. Nous explorons ainsi la possibilité que l'instabilité de coagulation (Tominaga 2021) puisse déclencher l'instabilité de courant (Johansen 2007), cette dernière étant le mécanisme privilégié pour déclencher l'effondrement gravitationnel des grains en planétésimaux.



Contacts : Thomas Collin-Dufresne thomas.collin-dufresne@u-bordeaux.fr , Emmanuel Di Folco emmanuel.di-folco@u-bordeaux.fr

4.2 Biologie végétale (BFP)

Unité de recherche : INRAE Nouvelle-Aquitaine Bordeaux, Unité Biologie du Fruit et Pathologie (UMR 1332 BFP)

Correspondant : David Benaben

*L'UMR 1332 BFP, acteur majeur de la recherche en **biologie végétale** dans la région Nouvelle-Aquitaine, est un partenariat entre les départements Biologie et Amélioration des Plantes (BAP) et Santé des Plantes et Environnement (SPE) d'INRAE et le département Sciences de l'Environnement de l'université de Bordeaux. Sa stratégie scientifique est (1) d'**explorer les frontières du vivant**, (2) d'**obtenir une vision intégrée du développement des plantes et des fruits** et (3) de **comprendre comment les plantes s'adaptent au changement climatique et aux pathogènes**. Son but est de générer des connaissances fondamentales tout en proposant des pistes pour une agriculture à la fois résiliente et respectueuse de l'environnement.*

Étude de la distribution et de l'activité transcriptionnelle des éléments transposables dans le génome de l'abricot - équipe Prunus, Adaptation, Diversité, Amélioration (PrADAm)

Originaire d'Asie centrale, l'abricotier est cultivé depuis environ 3 000 ans. On le trouve encore aujourd'hui à l'état sauvage dans sa région d'origine, mais également sous forme domestiquée dans le monde entier. Parmi les espèces cultivées, il constitue un pilier économique important, avec une production mondiale atteignant 3,5 millions de tonnes par an. Cependant, la production d'abricots est menacée par la maladie de la sharka, causée par le Plum pox virus (PPV). La sharka est l'une des maladies les plus destructrices touchant toutes les espèces du genre *Prunus*. Bien que les mécanismes de résistance au PPV ne soient pas encore complètement élucidés, plusieurs loci impliqués dans le phénotype résistant ont été identifiés. De nombreux éléments suggèrent que les éléments transposables jouent un rôle important dans la défense et l'adaptation des plantes en raison de leur capacité de déplacement au sein du génome ainsi de leur activité transcriptionnelle. L'objectif de ce projet est de répondre à ces questions : 1) quelle est la distribution des éléments transposables (TE) dans le génome de l'abricot et son interaction avec l'organisation du génome ? 2) quels sont les effets de la domestication et de l'infection virale sur l'activité TE des plantes ? L'exploration des interactions entre les TE et les gènes chez les abricots sauvages et cultivés ainsi qu'entre les abricotiers résistants et sensibles s'est révélée particulièrement prometteuse. Les résultats ont mis en évidence des événements d'insertion et de suppression de deux types spécifiques de TE, directement liés à la résistance au PPV. Plus largement, il apparaît que les TE pourraient jouer un rôle dans la régulation de certains gènes, leur influence étant amplifiée par leur proximité avec ces gènes.

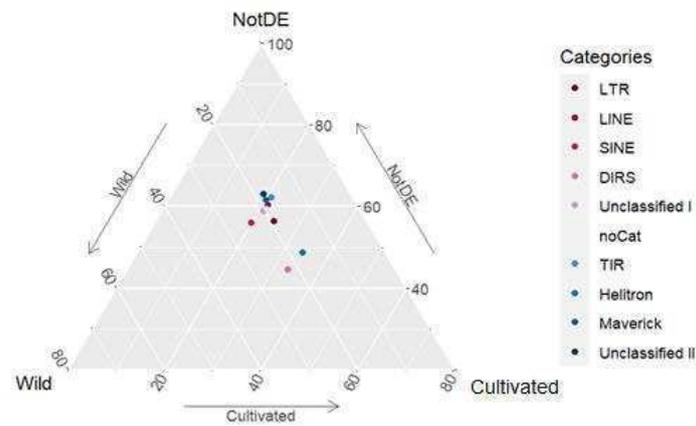


Fig 1. TE présents à proximité et en amont des gènes différentiellement exprimés dans les abricots sauvages et cultivés

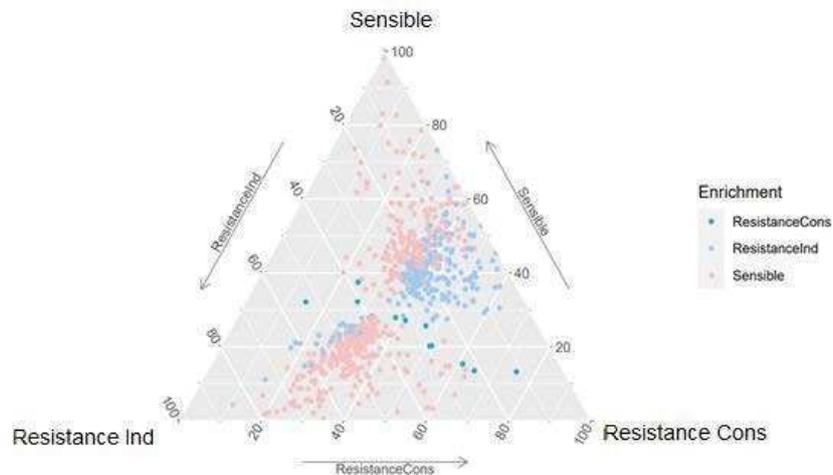


Fig 2. Gènes différentiellement exprimés dans les abricots résistants et sensibles avec des TE à proximité

Ressources utilisées

De l'ordre de 35000 heure.CPU sur le MCIA ont été utilisées pour ce projet. Les jobs sont de taille modérées (~10Go Mémoire, ~8 CPU, ~10h). iRODS@MCIA est également utilisé pour archiver les données du projet, soit environ 17To.

Référence

Comparative Transcriptomics of Cultivated and Wild Apricots: Insights into Transposable Elements' Role in Gene Expression and Domestication (QT. Bui, M. Lefebvre, J. Tran, M-H. Lefèvre, M. Caballero, G. Roch, V. Decroocq). In preparation

Contact:

BUI Quynh Trang, quynh-trang.bui@inrae.fr

4.3 Biostatistique (BPH)

unité de recherche : Bordeaux Population Health, Bordeaux

correspondant : Cécile Proust-Lima, suppléant Robin Genuer

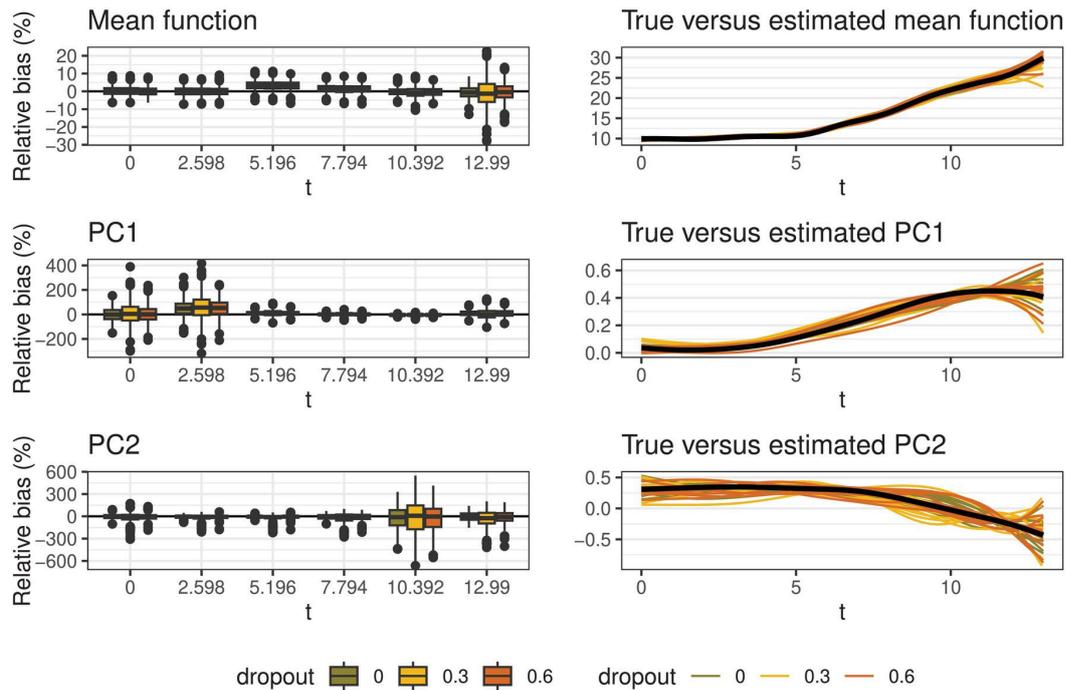
Les deux équipes du centre de recherche Bordeaux Population Health (BPH, UMR1219) utilisant le plus CURTA sont l'équipe Biostat et l'équipe SISTM (rattachée aussi au Centre INRIA de l'université de Bordeaux). Ces deux équipes de recherche en Biostatistique développent des méthodes statistiques très variées 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 document 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).

Comportement de l'analyse en composantes principales en présence de données manquantes

Corentin Segalas (post-doctorant affilié aux équipes Biostat et SISTM) a utilisé Curta pour étudier le comportement des méthodes d'analyse en composantes principales fonctionnelles en présence de données manquantes. Ce travail a donné lieu à une publication en 2024 (<https://doi.org/10.1002/sim.10214>). Il a mené des simulations pour évaluer les performances de cette approche et la comparer à des approches basées sur des modèles linéaires mixtes sur une quinzaine de scénarios de génération de données (voir page ci-après figure 1 issue de l'article montrant le bon comportement de l'analyse en composante principale fonctionnelle pour différents pourcentages de données manquantes et dans deux scénarios différents de génération de données manquantes). Pour chaque scénario, 1000 répliques ont été réalisées, et pour chaque réplique environ 5 heures de calcul sur un cœur étaient nécessaires. Il a pour cela utilisé un lancement en batch de ces 1000 jobs. Vu le paramétrage par défaut de la mémoire à 1Go par cœur, il a dû être adapté à environ 10Go pour éviter les problèmes de saturation de celle-ci.

MCAR scenario



Increasing MAR scenario

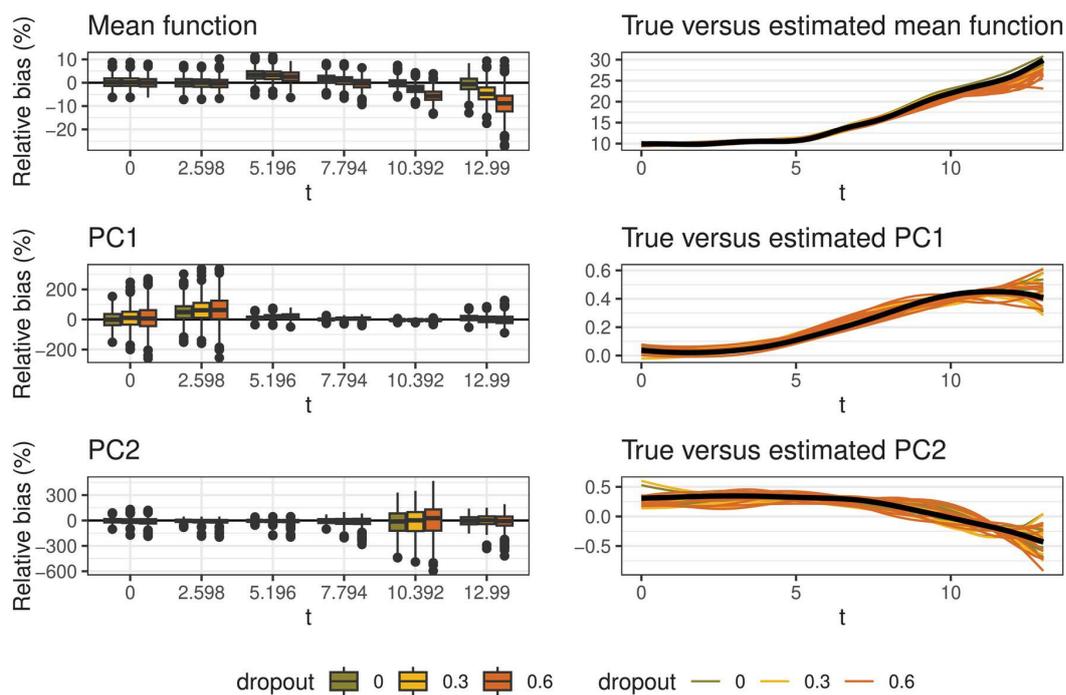


Figure 1 : relative bias over 1000 replicates (left panel), and true plus 10 randomly estimations (right panel) for the mean function and each of the two functional principal components in MCAR and MAR scenarios. The settings are a measure every 2 years for 12 years with a dropout rate of 0 (no dropout), 30% or 60%.

Introduction des forêts aléatoires de Fréchet pour des données dans des espaces métriques généraux

Robin Genuer (maître de conférence de l'équipe SISTM) a utilisé le MCIA pour une application de la méthode en développement des forêts aléatoires de Fréchet sur des données publiques. Ce travail venait en complément de simulations qui avaient été réalisées les années précédentes. L'article contenant l'introduction de la méthode des forêts aléatoires de Fréchet, les simulations illustrant son comportement ainsi que l'application sur données réelles a été publié en 2024 (<https://jmlr.org/papers/v25/20-1173.html>). Pour un essai à hyper-paramètres fixés, 30 minutes de calcul sur un nœud compute de Curta (32 coeurs et 92Go de RAM) étaient nécessaires. Et compte-tenu des hyper-paramètres à régler, plusieurs dizaines de runs ont été effectués.

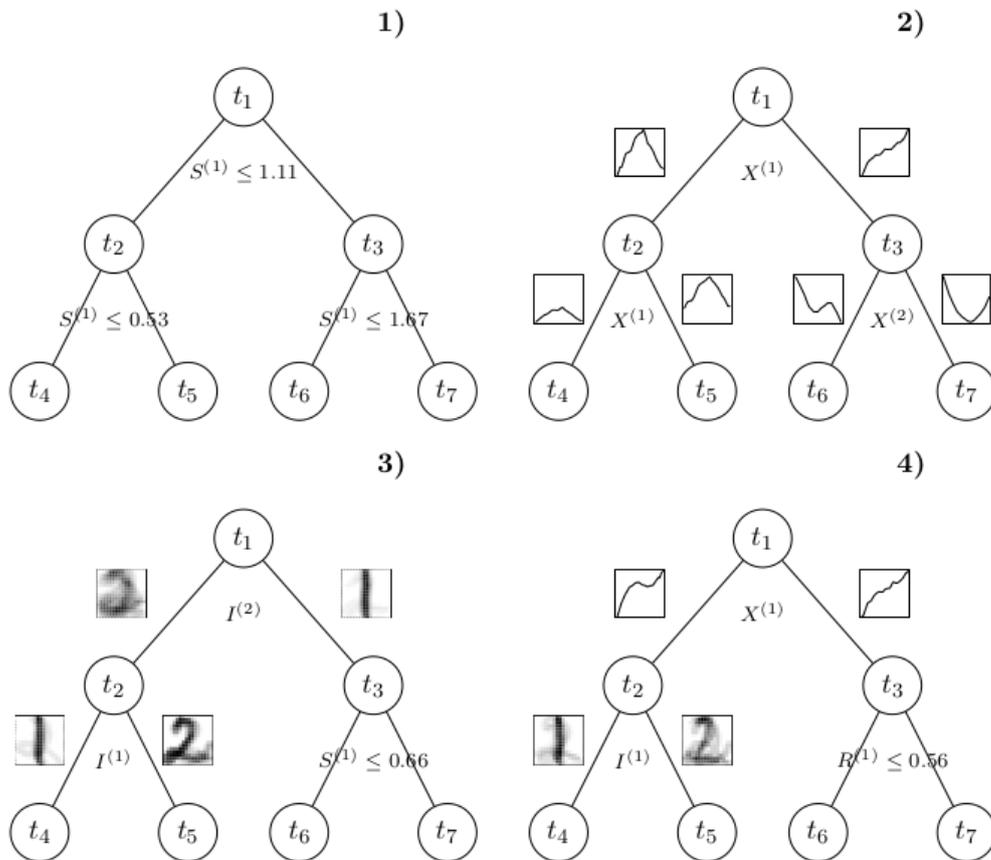


Figure 9: Examples of 4 extremely randomized trees of depth 2 built on $n = 100$ simulated observations according to the second scenario. The 4 trees are constructed from the input variables of: 1) scalars only; 2) curves only; 3) images and scalars; 4) curves, images and scalars. Below each node is indicated the split variable. To the left and right of each node are indicated the representative elements of the right and left child nodes for the split variable in question. For example for model 3) the split variable of the root node is $I^{(2)}$, the images of the variable $i^{(2)}$ which are closer to the image on the left (for the Euclidean distance), a blurred 2, go into the node t_2 while those closer to 1 go into the node t_3 .

4.4 Chimie théorique (ISM)

unité de recherche : Institut des sciences moléculaires (ISM), Bordeaux

correspondant : Jean-Marc Leyssale

Le groupe de chimie théorique a une longue expérience dans les simulations de mécanique statistique de la matière condensée, de la chimie quantique et d'autres méthodes de chimie théorique et computationnelle. Cette expertise permet de couvrir un large champ d'activités, allant de l'étude des réactions chimiques élémentaires à la chimie supramoléculaire et aux simulations de phases condensées. Par ailleurs, le groupe gère et anime un centre de calcul (« Pôle Modélisation ») rassemblant les théoriciens et expérimentateurs de l'institut et coordonne le laboratoire commun transfrontalier QuantumChemPhys.

Simulations atomistiques de carbones poreux naturels

Les carbones poreux, naturels ou synthétiques, permettent l'adsorption de nombreuses espèces – hydrocarbures, CO₂, polluants – et sont au cœur d'enjeux fondamentaux pour l'énergie et l'environnement. Afin de mettre en place des modèles réalistes à l'échelle nanométrique nous avons proposé une approche de simulation couplant la dynamique moléculaire réactive à une technique d'échange de réplique (REMD) qui permet de simuler l'évolution de précurseurs de carbone dans les conditions du sous-sol. Simuler de nombreuses répliques du système en parallèle à des températures différentes et échanger ces répliques à l'aide d'un algorithme de Monte Carlo approprié permet de simuler la conversion en carbone et en fluide de ces précurseurs en quelques nanosecondes de temps simulé, contre des échelles de temps géologique dans la nature, et d'appréhender les liens entre l'évolution du squelette carboné, le fluide produit, et le développement de la porosité et de la rigidité du carbone.

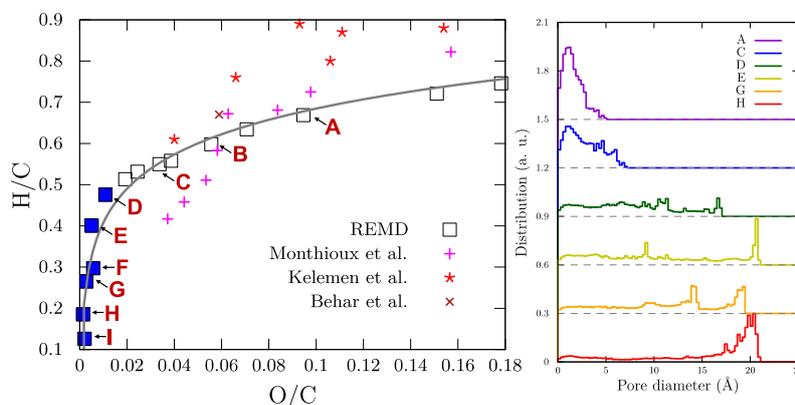


Figure 13: Evolution d'un carbone poreux issu de la décomposition géologique de la lignine. (Gauche) Représentation de différents modèles (carrés) sur un diagramme de van Krevelen (rapports atomiques H/C et O/C); (Droite) Évolution de la distribution de tailles de pores [1,2].

Cette technique a été appliquée à des précurseurs ligno-cellulosiques (riches en O) [1,2] et d'acide gras (riches en H) [3], ainsi qu'au problème de la nucléation de carbone graphitique dans un fluide hydrothermal simple (CO₂/CH₄) dans les conditions de la basse croûte terrestre [4]. Dans toutes ces études le coût calculatoire est très conséquent et a nécessité l'utilisation massive du cluster Curta. Une simulation REMD utilise entre 100 et 150 répliques, chacune occupant 4 à 16 CPUs avec des vitesses de simulation de l'ordre de 10-20 ps/jour, les calculs nécessitant typiquement de 1-10 ns.

Les modèles structuraux de carbones poreux ainsi générés sont maintenant utilisés dans le cadre de simulations hybrides Monte Carlo dans l'ensemble Grand Canonique (GCMC) / dynamique moléculaire dans l'ensemble isotherme isobare (NPT-MD) afin de simuler l'adsorption de gaz avec prise en compte des déformations induites par adsorption (couplages poromécaniques) [5].

Enfin, suite à ces travaux, nous avons maintenant porté les simulations REMD sur les architectures GPU massivement parallèles du GENCI pour lesquelles nous arrivons à des vitesses de simulation de l'ordre 500 ps/jour avec 2 répliques par GPU, nous permettant d'étudier des systèmes plus volumineux et/ou des temps plus longs.

Références :

[1] Atmani L., Valdenaire P.-L., Pellenq J.-M., Bichara C., Van Damme H., van Duin A. C. T., Ulm F. J., Leyssale J.-M. Simulating the geological fate of terrestrial organic matter : Lignin vs Cellulose, *Energy & Fuels* (2020), vol. 34, p. 1537-1547.

[2] Leyssale J.-M., Valdenaire P.-L., Potier K., Pellenq R. J.-M. Replica Exchange Molecular Dynamics simulation of organic matter evolution : from lignin to overmature type III kerogen, *Energy & Fuels* (2022), vol. 36, p. 14723-1473.

[3] Leyssale J.-M., Valdenaire P.-L., Potier K., Pellenq R. J.-M. Replica exchange molecular dynamics simulation of the natural evolution of a model type I kerogen, *Energy & Fuels* (2023), vol. 37, p. 14811-14823.

[4] Leyssale J.-M., Valdenaire P.-L., Pellenq R. J.-M., van Duin A. C. T., Galvez M. Atomic-scale mechanism of carbon nucleation from a deep crustal fluid by replica exchange reactive molecular dynamics simulation, *Geochimica et Cosmochimica Acta* (2022), vol. 329, p. 106-118.

[5] Potier K, Ariskina K, Obliger A, Leyssale J.-M. Molecular Simulation of Argon Adsorption and Diffusion in a Microporous Carbon with Poroelastic Couplings, *Langmuir* (2023), vol. 39, p. 9384-9395.

Contact : Jean-Marc Leyssale (jean-marc.leyssale@u-bordeaux.fr)

Réactivité : Aminolyse régiosélective de carbonates cycliques tétrasubstitués

Cette étude concerne l'aminolyse par ouverture de cycle facile et régiosélective de carbonates cycliques tétrasubstitués à base de CO₂ à température ambiante dans des conditions **sans catalyseur**. La substitution du cycle par un atome de soufre a non seulement amélioré la réactivité du carbonate d'éthylène tétrasubstitué, mais a également assuré une régiosélectivité totale dans l'ouverture de cycle, produisant des oxazolidones hautement substituées. Une étude de modélisation moléculaire approfondie (**calculs DFT, analyse QTAIM**) a confirmé l'impact significatif de l'atome de soufre sur la structure chimique du carbonate cyclique tétrasubstitué et a permis de déterminer les mécanismes d'ouverture de cycle ainsi que leur énergétique. Ce concept a été appliqué à la dégradation de thermoplastiques contenant des motifs carbonate cyclique tétrasubstitué, produisant des oxazolidones et des thiols, réutilisés dans une boucle de recyclage pour la synthèse (facile) de thermodurcissables adaptables avec des liens N,S-acétaliques dynamiques. En plus d'ouvrir de nombreuses perspectives pour la préparation de nouveaux synthons organiques de type oxazolidone, ce nouveau processus d'aminolyse constitue une nouvelle stratégie pour ouvrir des systèmes fortement substitués et renforce l'importance de la conception moléculaire dans la réalisation de transformations chimiques efficaces et sélectives, d'un grand intérêt pour la chimie organique et la chimie des polymères.

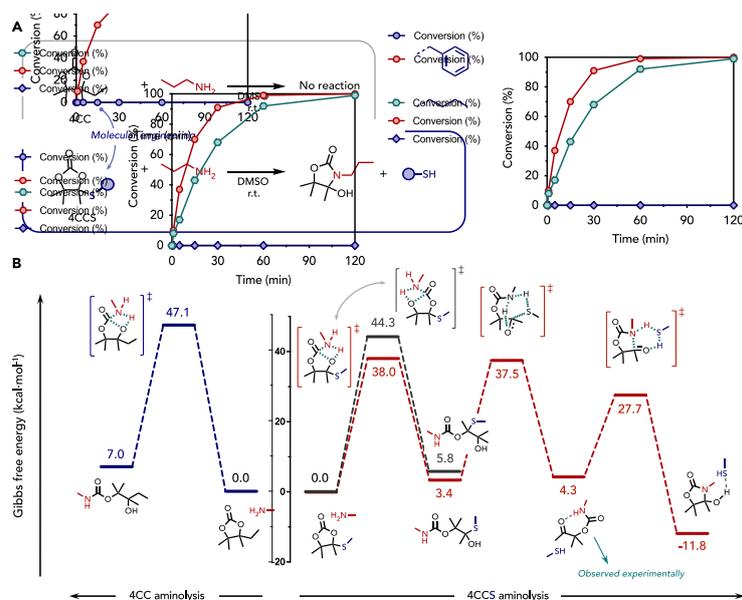


Fig : (A) Déshydratation de 4 en systèmes alkylidènes 5 et 6 (dans le cas de 4d). (B) Recyclage de 4d et de 3a en un thermodurcissable recyclable.

Les structures et les énergies des points stationnaires des surfaces d'énergie potentielle (réactifs, intermédiaires réactionnels, produits et états de transition) ont été déterminées par calculs DFT (M062X/6-311++G(d,p), PCM(DMSO)) à l'aide du logiciel gaussian 16 rev. B.01. Ces calculs, réalisés sur curta, ont nécessité les ressources suivantes : 1 nœud GPU (32 CPU + 2 GPU + 190 Go RAM) pour un temps d'exécution (elapsed time) d'une dizaine d'heures par calcul.

Référence : ACS Macro Lett. 2024, 13, 1425–1432
<https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.4c00570>

Contact : Raphaël Méreau (raphael.mereau@u-bordeaux.fr)

Dynamique des réactions gaz-surface

Les interactions gaz-surface, d'une importance primordiale pour un large éventail d'applications telles que le stockage de l'hydrogène, la catalyse hétérogène ou la fusion nucléaire contrôlée, font l'objet d'intenses recherches fondamentales et appliquées. En ce qui concerne la fusion nucléaire, le tungstène (W) est utilisé comme matériaux de protection faisant face au plasma d'isotopes d'hydrogène dans les réacteurs par confinement magnétique. Cette technologie, actuellement mise en œuvre dans le cadre du programme international ITER, est espérée constituer une source d'énergie durable et propre pour les années à venir. En conséquence, la dynamique des réactions élémentaires hydrogène/tungstène est actuellement très étudiée tant expérimentalement que théoriquement.

D'un point de vue théorique, les simulations sont complexes car il est nécessaire de prendre en compte la réactivité chimique ainsi que la possible dissipation de l'énergie aux phonons et électrons du métal. Plusieurs approches sont utilisées pour ce faire. La première est basée sur la description classique du mouvement des atomes et s'appuie sur un calcul « on the fly » des interactions (résolution de l'équation de Schrodinger électronique à chaque pas de temps de la dynamique des noyaux). Ce calcul nécessite des ressources informatiques importantes (typiquement 5min sur 16 cœurs avec 32 Gb de mémoire) et doit être répété plusieurs centaines de fois par évènement collisionnel (approximativement toutes les femtosecondes). En conséquence, cette approche ne permet la simulation que de quelques centaines d'évènements.

Cependant, elle est très utile pour déterminer des tendances sur des observables moyennées. La figure 1 illustre par exemple l'évolution de la probabilité de dissociation de l'hydrogène moléculaire sur une surface de Tungstène en fonction du taux de couverture en Oxygène et montre la passivation de cette dernière. Le MCIA a été massivement utilisé pour des calculs de ce type. [1,2]

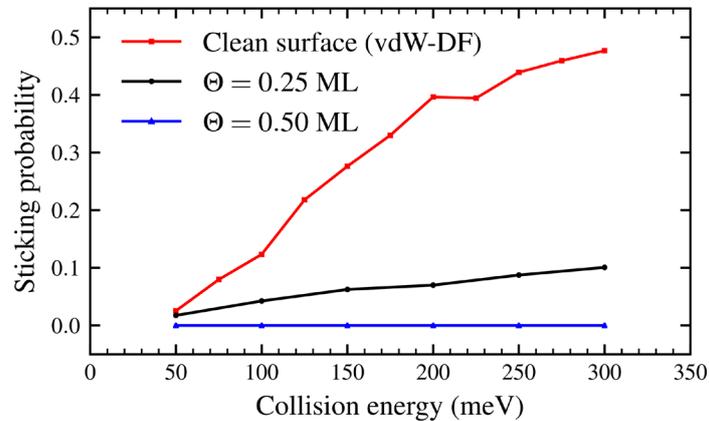


Figure 14: Probabilités de dissociation de H₂ sur la surface de Tungstène W(110) en fonction de l'énergie de collision (sticking curve) pour une surface propre (rouge) et recouverte par 0.25 ML (noir) et 0.50 ML (bleu) d'oxygène. [1]

Une autre approche est de construire préalablement une hypersurface multidimensionnelle décrivant les interactions (Surface d'Énergie Potentielle SEP) en fonction de la position des atomes, basée sur diverses méthodes d'interpolation, et par la suite, utiliser cette fonction mathématique pour intégrer les équations classiques du mouvement pour les atomes. Une fois la SEP construite (ceci nécessite quelques milliers de calculs des interactions préalablement décrits), il est possible de simuler un grand nombre d'événement collisionnels (typiquement plusieurs millions) et donc de décrire des observables très fines. Ces événements étant indépendants et ne requérant que des ressources limitées, les calculs sont parallélisés « à la main » en lançant des ensembles de petits nombres d'évènements (1000) sur un seul processeur (10 min avec 2Gb de mémoire). La figure 2 illustre cette approche. Elle représente la distribution d'énergie perdue par un atome d'hydrogène réfléchissant sur une surface de tungstène recouverte d'atomes d'hydrogènes préalablement adsorbés dans la direction spéculaire (angle de réflexion égal à l'angle incident). De nombreux calculs utilisant cette approche ont été effectués grâce aux ressources du MCIA. [3-9]

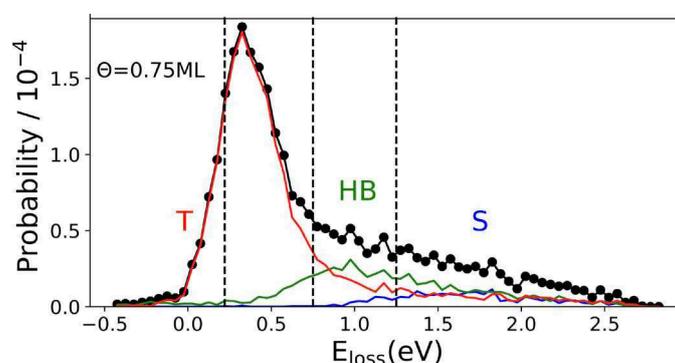


Figure 2: Distribution de l'énergie dissipée lors de la collision d'un hydrogène avec une surface de Tungstène recouverte de 0.75ML d'hydrogène (noir) pour une énergie de collision de 2.76 eV. Les contributions de 3 mécanismes de collisions sont illustrées en rouge, vert et bleu (voir [8]).

Références :

- [1] A. Rodriguez-Fernandez, L. Bonnet, P. Larregaray and R. Diez-Muino , How Adsorbed Oxygen Atoms Inhibit Hydrogen Dissociation on Tungsten Surfaces, *J. Phys. Chem. Lett.* (2023) doi : 10.1021/acs.jpcllett.2c03684
- [2] A. Rodriguez Fernandez, L. Bonnet, P. Larregaray, R. Diez Muino, Ab-initio Molecular Dynamics of Hydrogen on Tungsten, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2021) doi : 10.1039/d0cp05423b
- [3] L. Viaud, C. Ibarguen Becerra, C. Crespos, L. Bonnet, P. Larregaray, Revisiting the H₂ Chemisorption Dynamics on the W(100) Surface (2024) *J. Phys. Chem. C*, doi: 10.1021/acs.jpcc.4c04679
- [4] R. Martin Barrios, N. Omar, O. Galparsoro, C. Crespos, P. Larregaray, On the specular scattering of H atoms off pristine and H-covered tungsten surfaces doi: 10.1021/acs.jpcc.4c03231
- [5] R. Martin-Barrios, O. Galparsoro, A. Martinez-Mesa, Ll. Uranga-Piña, C. Crespos and P. Larregaray, Inelastic Scattering of Hydrogen Atoms off Pristine and hydrogen-Covered W(100) Surfaces, *Eur. Phys. J Spec. Top.* (2023), doi : 10.1140/epjs/s11734-023-00933-2
- [6] R. Martin-Barrios, N. Hertl, O. Galparsoro, A. Kandratsenka, A. M. Wodtke and P. Larregaray, H atom scattering from W(110): A benchmark for molecular dynamics with electronic friction, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2022) doi : 10.1039/D2CP01850K
- [7] N. Hertl, R. Martin-Barrios, O. Galparsoro, P. Larregaray, D. J. Auerbach, D. Schwarzer, A. M. Wodtke, and A. Kandratsenka, Random Force in Molecular Dynamics with Electronic Friction, *J. Phys. Chem. C.* (2021) doi : 10.1021/acs.jpcc.1c03436
- [8] R. Martin Barrios, O. Galparsoro, A. Martinez Mesa, Ll. Uranga-Pina, C. Crespos, P. Larregaray, Translational Inelasticity of Hydrogen Atoms Scattering off Hydrogen-Covered W(110) Surfaces, *J. Phys. Chem. C.* (2021) doi : 10.1021/acs.jpcc.1c03211
- [9] A. Rodriguez Fernandez, L. Bonnet, C. Crespos, P. Larregaray, R. Diez Muino, When Classical Trajectories Get to Quantum Accuracy: II. The Scattering of Rotationally Excited H₂ on Pd(111), *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2020) doi:10.1039/d0cp02655g

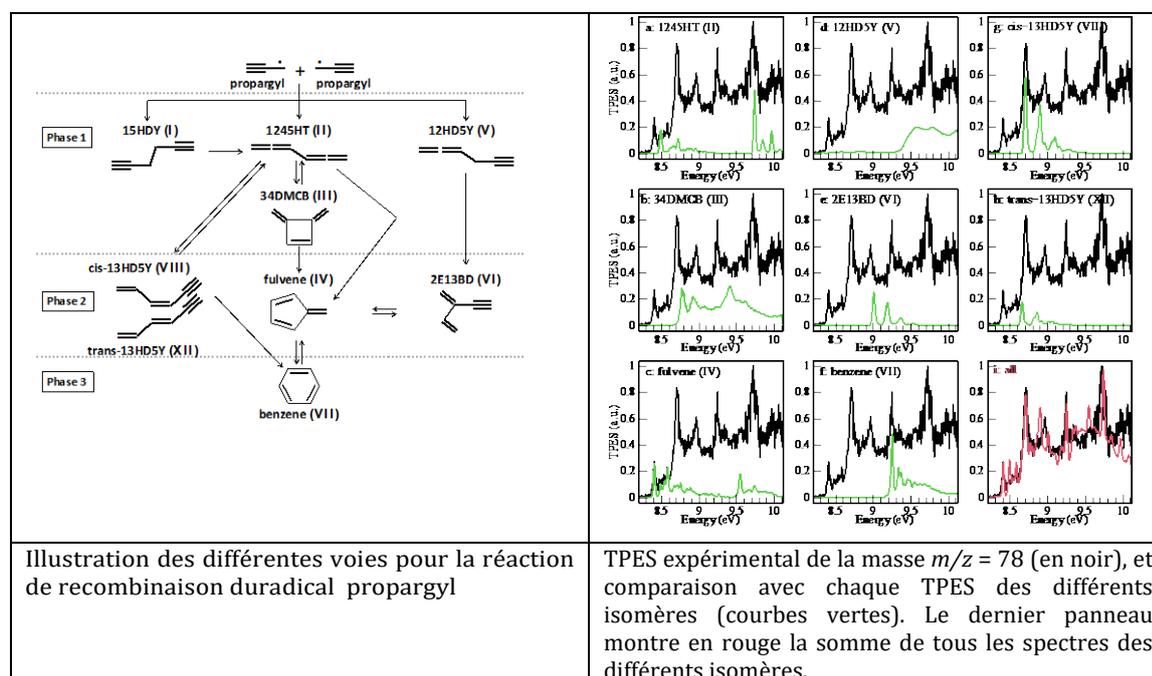
Contact : Pascal Larregaray (pascal.larregaray@u-bordeaux.fr)

Spectroscopie et détection d'intermédiaires réactifs critiques

Le but est de détecter et caractériser les produits critiques et les intermédiaires de réactions importantes en phase gazeuse. Il s'agit notamment du produit C₆H₆ de la recombinaison du radical propargyl (C₃H₃),¹ de petits intermédiaires réactifs tels que les radicaux silicatés²⁻⁴ ou et phosphorés,⁵ ou des dérivés benzéniques.⁶ Les spectres sont enregistrés au synchrotron SOLEIL grâce au dispositif combiné SYNCHROKIN et SAPHIRS permettant l'acquisition des spectres de photoélectrons (PES) de radicaux réactifs. Comme chaque espèce ou isomère possède une structure électronique unique, le PES est à son tour unique et agit comme une empreinte structurelle. Les calculs théoriques, en particulier le calcul des facteurs Franck-Condon, permettent d'identifier les différentes structures associées à chaque masse (les spectres de photoélectrons sont enregistrés en coïncidence avec la détection des masses en utilisant la technique PEPICO).

Les structures et les énergies des points stationnaires ont été déterminés la plupart du temps par calculs DFT (M062X/AVTZ) à l'aide du logiciel gaussian 16 rev. B.01. Ces calculs, réalisés sur curta, ont nécessité les ressources suivantes : 1 nœud CPU (16 CPU + 40 Go RAM) pour un temps

d'exécution variant entre quelques minutes et quelques heures suivant les systèmes. Certains systèmes nécessitent une approche multiconfigurationnelle (méthode MRCI). Dans ce cas les calculs sont réalisés à l'aide du logiciel Molpro 2024 nécessitant des ressources similaires aux calculs gaussian (16 CPU + 80 Go RAM, temps d'exécution de quelques heures).



Références :

1. Hrodmarsson, H. R.; Garcia, G. A.; Bourehil, L., et al., *Communications Chemistry* **2024**, *7*, 156. <https://doi.org/10.1038/s42004-024-01239-7>
2. Chen, N. L.; Gans, B.; Hartweg, S., et al., *Molecular Physics* **2023**, *121*, e2140721. <https://doi.org/10.1080/00268976.2022.2140721>
3. Chen, N. L.; Gans, B.; Boyé-Péronne, S., et al., *The Journal of Chemical Physics* **2024**, *160*. <https://doi.org/10.1063/5.0198424>
4. Jacovella, U.; Ruscic, B.; Chen, N. L., et al., *Physical Chemistry Chemical Physics* **2023**, *25*, 30838-30847. <http://dx.doi.org/10.1039/D3CP04244H>
5. Mukhopadhyay, D. P.; Gerlach, M.; Hartweg, S., et al., *Physical Chemistry Chemical Physics* **2022**. <http://dx.doi.org/10.1039/D2CP01082H>
6. Karaev, E.; Gerlach, M.; Theil, K., et al., *Physical Chemistry Chemical Physics* **2024**. <http://dx.doi.org/10.1039/D4CP00688G>

Contact : jean-christophe.loison@cnrs.fr

Nouvelles classes de matériaux organiques pour électrodes éco-compatibles : Etude du potentiel de composés à base de *pyrano[3,2]pyrane-2,6-dione* []

Ces recherches se focalisent sur la découverte et l'étude de matériaux organiques innovants possédant des propriétés optimisées pour le concept et la promotion d'accumulateur électrochimique à faible impact environnemental et la compréhension des processus microphysiques sous-jacents (relation structure-propriétés). Les approches de modélisation par calculs DFT appliquées à des composés prometteurs, que ce soit sous la forme moléculaire ou dans leur structure cristalline, combinées à des approches d'analyses topologiques sophistiquées de

type analyse de Bader (formalisme QTAIM) permettent d'apporter un éclairage sur la nature des interactions (liaisons chimiques, partition d'énergie moléculaire), de procéder à une analyse quantitative de la **structure électronique** afin d'accéder aux **indices de délocalisation**. Ces analyses se sont révélées fondamentales pour une compréhension fine de la liaison chimique permettant de rationaliser quantitativement les relations structure-propriétés d'oxydo-réduction pour diverses classes de matériaux organiques.

Nous allons à présent illustrer ces études spécifiques par le biais d'une brève présentation d'une récente étude portant sur les propriétés structurales et électroniques de composés organiques de **pyrano[3,2-b]pyran-2,6-dione (PPD, noté A0)**. Cette étude a été étendue à ses dérivés (de type A) lorsque le composé A0 est fusionné avec différents types de cycles, i.e. benzène, benzène fluoré, thiophène ou de la fusion thiophène/benzène. Nous avons aussi étudié l'influence de l'inclusion d'un atome d'oxygène sur le cycle 6MR de l'unité centrale A0 (commune à tous les dérivés de type A, cf. Schéma YD1) à proximité du centre redox (carbonyle) sur les propriétés électroniques de ces composés de type A en réalisant une analyse comparative avec les composés de type B correspondants et obtenus par la substitution de l'atome d'oxygène de l'unité centrale A0 par un groupe >CH (cf. Schéma YD1).

La première étape a consisté à la détermination par calculs DFT des propriétés structurales, énergétiques et électroniques de ces dérivés organiques **PPD(-A/-B)**. L'évaluation du potentiel redox caractérisant le processus de réduction (simple et double réduction) par interaction des ions alcalins Li⁺ et Na⁺ avec les groupements carbonyles (centres redox) de ces composés permet clairement d'identifier les systèmes susceptibles de posséder une forte capacité conjointement à une valeur (haute/basse) du potentiel redox souhaitable pour les matériaux d'électrodes (positives/négatives). En considérant l'ensemble des dérivés PPD-A et PPD-B, les potentiels redox des composés de type A présentent systématiquement pour tous les composés (A1, A3, A5 et A5_ext) des valeurs inférieures à celles de l'unité centrale A0 (égaux ou inférieurs à 1,2 V vs Li⁺/Li). La fusion des cycles benzène, benzène fluoré, thiophène et thiophène/benzène sur l'unité centrale A0 conduit à l'obtention de **composés organiques de type A** intéressants pour les **électrodes négatives**. Pour cette série, les potentiels redox évalués satisfont la hiérarchie: VA5 > VA3 > VA1 > VA5_ext.

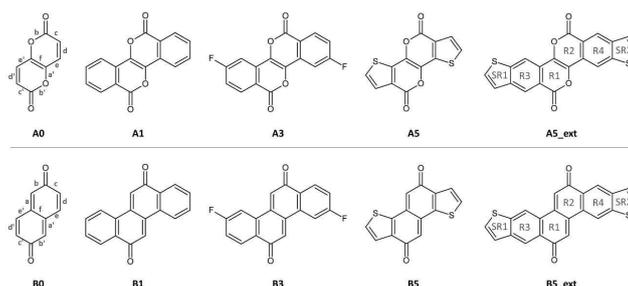


Schéma YD1. Pyrano[3,2-b]pyran-2,6-dione (PPD); Haut: dérivés de type A, Bas: dérivés de type B.

L'un des principaux inconvénients attendu lors de la fonctionnalisation de ces composés PPD-A0, résulte de l'ajout, par l'insertion des cycles fusionnés, d'une forte teneur en carbone, souvent en lien avec un déficit de conductivité électronique. L'analyse des 'niveaux d'énergies HOMO-LUMO ($E_g = |\Delta E_{(HOMO-LUMO)}|$) évalués pour les deux séries de composés montre que cette relation structure-propriété de conductivité n'est pas suivie. La fonctionnalisation du composé PPD-A0 par fusion de cycles thiophéniques et/ou benzéniques conduit à un effet moins important sur les valeurs du potentiel redox, alors que l'adjonction d'un cycle benzénique fusionné entre le noyau entre le noyau (PPD-A0) et le cycle thiophénique (composé PPD-A5_ext) conduit à un

système π -conjugué dont la bande interdite obtenue est la plus faible conjointement à une basse valeur du potentiel redox.

Finalement, l'utilisation du **noyau de PPD-A0 comme unité centrale redox-active** conduit plutôt à des valeurs de **potentiel redox faibles** permettant de les classer parmi la catégorie des **matériaux d'électrodes négatives**.

révèle le composé PPD-A5_ext comme étant le candidat potentiellement le plus intéressant de la série, la force motrice permettant d'obtenir un potentiel d'oxydoréduction modulé par la fusion des cycles aromatiques et thiophéniques pouvant se résumer selon le schéma 1 ci-dessous.

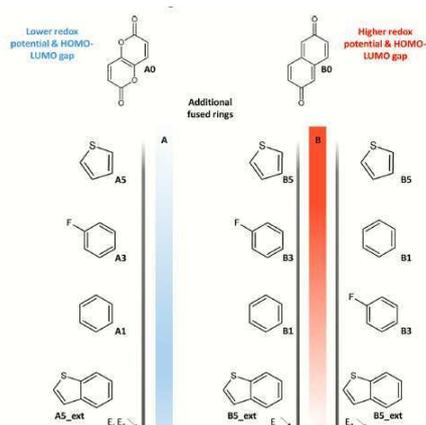


Schéma YD2: Evolution des potentiels redox et des gaps HOMO-LUMO pour les séries A/B des dérivés PPD.

Aspects techniques

Les structures moléculaires calculées sur le MCIA ont été réalisées par les méthodes de DFT (TD-DFT) à l'aide du programme Gaussian16 implémenté en 'multithreading' sur la machine curta. Ils nécessitent en général, des ressources effectuées sur 1 nœud de calcul (24 'shared proc') et un mémoire de 16-32 Gb. Les temps de calculs varient en fonction de la taille du système et les propriétés recherchées, notamment lorsque que l'on s'intéresse aux propriétés de transfert de charge dans les états électroniques excités (vertical excitations) [3-4] ainsi que leur évolution vers leur structure relaxée pour un état excité donné (structures diabatiques). Pour un certain nombre d'études, les systèmes étudiés par DFT à l'échelle moléculaire ont été poursuivis à l'échelle cristalline sur l'architecture HPC de la machine Jean-Zay de l'IDRIS du GENCI pour des calculs périodiques à l'aide du code VASP.

Références

- [1] F. Lambert, Y. Danten, C. Gatti, B. Bocquet, A. Franco, C. Frayret, 'Carbonyl-Based Redox-Active Compounds as Organic Electrodes for Batteries: Escape from Middle-High Redox Potentials and Further Improvement?' J. Phys. Chem. A 2023, **127**, 5104–5119. doi.org/10.1021/acs.jpca.3c00478.
- [2] F. Lambert, A.L.Hetzel, Y. Danten, A. Franco, C. Gatti, C. Frayret, 'Investigating the potential of pyrazine dioxide based-compounds as organic electrodes' Dalton Trans. 2023, **00**, 1-20. doi.org/10.1039/d4dt01144a.
- [3] C. Gatti, Y. Danten, and C. Frayret, 'Atomic Group Decomposition of Charge Transfer Excitation Global Indexes' J. Phys. Chem. A (2022) **126** (36), 6314-6328. special issue "Vincenzo Barone Festschrift" doi.org/10.1021/acs.jpca.2c04607.

[4] Y. Danten, C. Gatti, and C. Frayret, '*Seeking for Optimal Excited States in Photoinduced Electron Transfer Processes The Case Study of Brooker's Merocyanine*', J. Phys. Chem A (2022) **126**, 9577-9593. doi.org/10.1021/acs.jpca.2c04269.

[5] F. Lambert, Y. Danten, C. Gatti and C. Frayret, '*A tool for deciphering the redox potential ranking of organic compounds: the case study of biomass extracted quinines for sustainable energy*' Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 20212. doi.org/10.1039/D0CP02045A.

Contact : **Y. Danten** (yann.danten@u-bordeaux.fr)

Collaborations : Drs C. Frayret, (LRCS, UMR 6007, Université de Picardie Jules Verne, Amiens), C. Gatti (CNR-ISTM, Istituto di Scienze e Tecnologie)

4.5 Chimie théorique et computationnelle (IPREM)

unité de recherche : Institut des sciences analytiques et de physicochimie pour l'environnement et les matériaux (IPREM), Pau

correspondant : P. Karamanis

L'IPREM est une Unité Mixte de Recherche (UMR 5254) associant le CNRS et l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA). L'institut mène des recherches fondamentales et appliquées dans les domaines de la physicochimie, de la chimie analytique et de la microbiologie, avec des applications majeures dans la structure du vivant, la gestion de l'environnement et les matériaux fonctionnels. Au sein de l'IPREM, le groupe de chimie théorique et computationnelle se spécialise dans le développement et l'application de méthodologies avancées pour l'étude des propriétés électroniques, spectroscopiques et réactionnelles des systèmes moléculaires et des matériaux complexes. Pour mener ces études, le groupe s'appuie sur des ressources de calcul haute performance, notamment le cluster URTA, qui permet d'effectuer des simulations de grande envergure avec une précision accrue.

Élimination réductrice C(sp³)-C(sp³) assistée par un acide de Lewis sur l'or.

L'étude du ligand phosphine-borane $iPr_2P(o-C_6H_4)BFxyl_2$ (F_{xyl} = 3,5-(F₃C)₂C₆H₃), noté 1-F_{xyl}, a révélé son rôle clé dans la promotion de l'élimination réductrice de l'éthane à partir du complexe $[AuMe_2(\mu-$

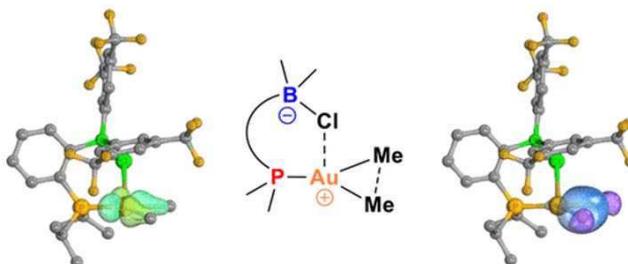


Fig. 1. Élimination réductrice C(sp³)-C(sp³) assistée par un acide de Lewis sur l'or

$Cl)]_2$. Le suivi par résonance magnétique nucléaire a mis en évidence la formation intermédiaire du complexe $(1-Fxyl)AuMe_2Cl$, suggérant un mécanisme réactionnel impliquant une activation séquentielle par la partie borane du ligand. Les calculs de chimie quantique, réalisés dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), ont identifié une voie zwitterionique comme le chemin réactionnel le plus favorable, avec une barrière d'activation globale réduite de plus de 10 kcal/mol par rapport au même processus sans assistance borane. Le mécanisme proposé repose sur l'abstraction initiale du chlorure par l'acide de Lewis boroné, générant un complexe zwitterionique d'or(III), qui favorise alors efficacement le couplage C(sp³)-C(sp³). Le chlorure est ensuite transféré du bore vers l'or, rétablissant l'équilibre électronique du système. L'analyse des orbitales intrinsèques de liaison a permis d'élucider les propriétés électroniques de cette élimination réductrice assistée par un acide de Lewis. La suffisance de l'acidité de l'entité borane est un facteur déterminant dans l'activation du ligand ambiphile pour initier le couplage C(sp³)-C(sp³), comme en témoignent des études complémentaires menées avec deux autres phosphine-boranes. En outre, la présence de chlorures en excès ralentit significativement l'élimination réductrice de l'éthane, soulignant ainsi l'importance des interactions ioniques dans la modulation de la réactivité. Ces travaux offrent une compréhension approfondie des mécanismes d'élimination réductrice assistée par un acide de Lewis dans les complexes d'or, ouvrant la voie à la conception rationnelle de nouveaux ligands ambiphiles pour la catalyse homogène et les transformations sélectives impliquant des espèces métalliques à haut degré d'oxydation.

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) ntaskspernodes=8; iii) cpuspertask =4; iv) mempercpu=2G.

Référence :

Theulier, C. A., García-Rodeja, Y., Miqueu, K., Bouhadir, G., & Bourissou, D. (2023). Lewis Acid-Assisted C(sp³)-C(sp³) Reductive Elimination at Gold. *Journal of the American Chemical Society*, 145(19), 10800–10808. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.3c01974>

Contact : karinne.miqueu@univ-pau.fr

Études de propriétés matériaux.

Les matériaux bidimensionnels (2D) sont des matériaux dont l'épaisseur ne dépasse que quelques couches atomiques, offrant ainsi des propriétés uniques par rapport à leurs homologues tridimensionnels. Le graphène, composé d'une seule couche d'atomes de carbone arrangés en réseau hexagonal, est l'exemple le plus emblématique. Grâce à leur flexibilité et leur conductivité exceptionnelle, ces matériaux révolutionnent la nanotechnologie et la science des matériaux. Dans ce cadre, nous nous intéressons particulièrement à leurs propriétés électroniques et à leurs propriétés optiques non linéaires, en explorant leurs interactions avec la lumière et leur réponse aux champs électriques. Nos travaux visent à comprendre et modéliser ces phénomènes afin de concevoir des matériaux aux performances optimisées pour des applications en photonique, en électronique avancée et en dispositifs optoélectroniques de nouvelle génération. Un exemple récent de ces recherches est l'étude des rides (*wrinkles*) dans le graphène, qui sont des déformations hors-plan couramment observées dans le graphène obtenu par dépôt chimique en phase vapeur (CVD). Ces corrugations unidimensionnelles, principalement dues aux différences de dilatation thermique entre le graphène et son substrat, modifient considérablement les propriétés électroniques et électriques locales du matériau. Ces résultats ont été corroborés par des calculs de chimie quantique avancés basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'étude théorique et expérimentale a mis en évidence un ensemble de mécanismes interdépendants, incluant la polarisation, la séparation du substrat et les gradients de contrainte, conduisant à une augmentation spectaculaire de la conductivité verticale. Ces résultats ouvrent de nouvelles

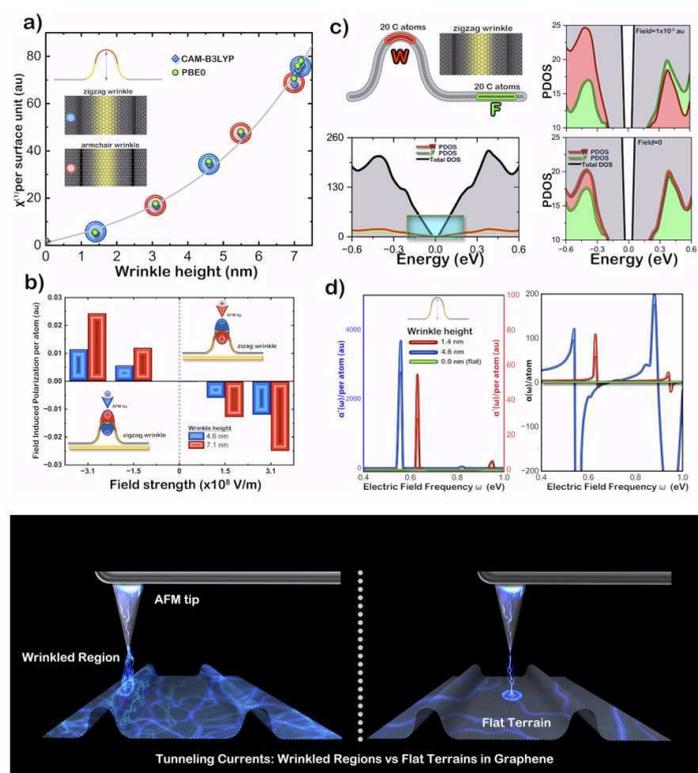


Fig 2. a) Evolution of the first order off-plane electric susceptibility ($\chi^{(1)}$) per unit surface (Bohr²) as a function of the wrinkle height (nm)

perspectives pour l'ingénierie des rides dans le graphène, permettant un contrôle précis de la conductivité hors-plan ainsi que la formation contrôlée de canaux conducteurs.

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: 1 millions, ~500 jobs ont été soumis, avec les paramètres : i) nodes= 8 ou plus; ii) ntaskspernode=1; iii) cpuspernode=4-30 ; iv) mempercnode=2G.

Référence :

Dimitropoulos, M., Papasouli, E., Manikas, A. C., Tsakonas, C., Rérat, M., Koukaras, E. N., Karamanis, P., & Galiotis, C. (2025). Colossal vertical conductivity enhancement in graphene by wrinkle engineering. *Materials Today Nano*, 29, 100575. 10.1016/J.MTNANO.2025.100575

Contact : pkaraman@univ-pau.fr

Simulations atomistiques : électrocatalyse et étude théorique de la réduction du CO.

La réduction électrochimique du CO₂ (CO₂RR) est une stratégie prometteuse pour transformer le dioxyde de carbone en produits chimiques à forte valeur ajoutée, notamment le monoxyde de carbone (CO), essentiel pour diverses applications industrielles. Parmi les travaux réalisés dans ce domaine à IPREM, un exemple représentatif est le développement d'un catalyseur à base de clusters d'argent auto-assemblés,

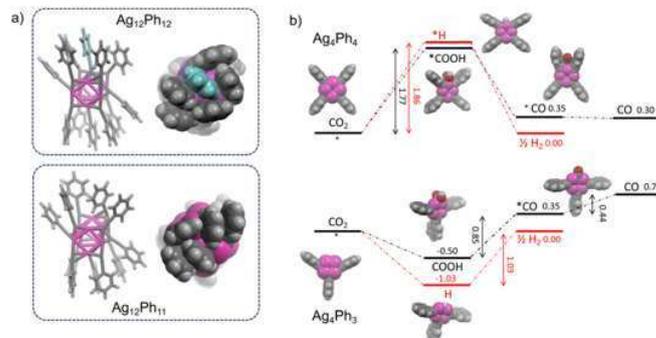


Fig.3 Structures énergétiquement minimisées des modèles de clusters Ag₁₂Ph₁₂ et Ag₁₂Ph₁₁.

possédant une structure tubulaire infinie, conçu pour la réduction électrochimique du CO₂. Ce catalyseur présente une sélectivité élevée (>95%) et une stabilité exceptionnelle à des densités de courant atteignant 350 mA cm⁻², ce qui le rend particulièrement adapté aux applications industrielles. L'étude computationnelle, basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), a permis d'éclairer les mécanismes sous-jacents à ses performances catalytiques. Les calculs révèlent que la réduction locale de Ag(I) en Ag(0) génère des sites actifs pour la réduction du CO₂, favorisant la formation de CO tout en limitant la réaction parasite d'évolution de l'hydrogène (HER). De plus, la structure infinie du cluster assure une stabilisation efficace des charges, garantissant la durabilité du catalyseur en conditions opératoires. En associant techniques expérimentales avancées (telles que la diffraction électronique 3D) et modélisation théorique, ce travail contribue à la conception rationnelle de nouveaux catalyseurs pour la conversion durable du CO₂ en ressources carbonées valorisables. Ce travail présente un catalyseur à base de clusters d'argent auto-assemblés, dont la structure tubulaire infinie garantit une sélectivité élevée (>95%) et une stabilité exceptionnelle à des densités de courant allant jusqu'à 350 mA cm⁻². L'étude computationnelle basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) a permis d'expliquer les performances remarquables de ce catalyseur. Les calculs révèlent que la réduction locale des sites Ag(I) en Ag(0) crée des centres actifs pour la réduction du CO₂, favorisant la formation de CO tout en limitant la réaction parasite d'évolution de l'hydrogène (HER). De plus, la structure infinie du cluster permet une stabilisation efficace des

charges, garantissant la durabilité du catalyseur sous conditions industrielles. Ce travail associe expérimentation avancée (diffraction électronique 3D) et modélisation théorique, ouvrant la voie au développement de nouveaux catalyseurs pour la conversion durable du CO₂ en ressources valorisables.

Référence :

Curet, L; dit-Hauret, WL; Benet-Buchholz, J; Martínez-Belmonte,; Foix, D; Palomares, E, [3] ; Billon, L; Begué, D; Viterisi, A Self-assembled infinite silver cluster with atomic precision as a scalable catalyst for CO₂-electroreduction under industry-relevant reaction rates, EES Catalysis, (2024) DOI10.1039/d4ey00160e

Contact : Didier Bégue (didier.begue@univ-pau.fr)

4.6 Fonctionnement du système littoral (LIENSs)

unité de recherche : Littoral, environnement et sociétés (LIENSs), La Rochelle

correspondant : Simona Flavoni

Le projet de l'équipe Dynamique Physique du Littoral (DPL) vise à mieux comprendre la dynamique physique des littoraux, tant du point de vue des processus physiques contrôlant la dynamique hydro-sédimentaire et leurs évolutions morphologiques que des changements environnementaux récents qui modifient ces systèmes : les variations absolues et relatives du niveau de la mer, les changements climatiques et la pression anthropique croissante. Les outils de modélisations reposent sur le développement du code SCHISM -WWM (Zhang et al.,2016), WaveWatch III (Tolman et al., 1991) et de Telemac-3D.

Dynamique hydro-sédimentaire et de la morphodynamique littorales (S.Flavoni, X.Bertin)

Le Service National d'Observation (SNO, labélisée en 2014) DYNALIT est un réseau d'observation nationale qui vise à caractériser le fonctionnement physique et l'évolution morphologique du littoral sur le long terme. La communauté DYNALIT utilise soit les données des houlographes du réseau CANDHIS opéré par le Cerema, soit les sorties de simulations numériques rétrospectives. Ces deux types de données ont chacun ses points faibles : les données issues des houlographes soient en général très fiables mais parfois trop éloignés des sites-atelier (DYNALIT), les modèles numériques d'état de mer permettent de produire des séries continues au large de chaque site-atelier mais leur précision est rarement vérifiée près de la côte (figure 1A) et des biais ou discontinuités importantes peuvent être présents d'une simulation à l'autre (figure 1B).

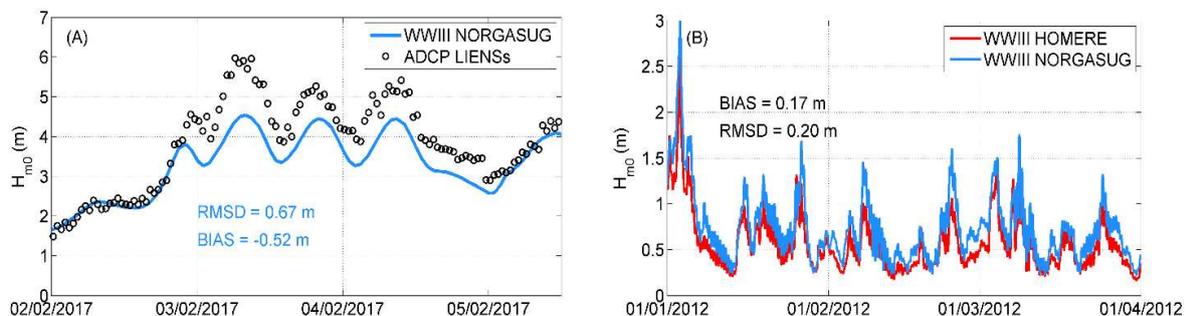


Figure 1. (A) Comparaison entre la hauteur des vagues mesurée lors de la tempête Kurt au large du site-atelier "Pointe de Gatseau" et simulée à l'aide du modèle WWIII NORGASUG montrant un fort biais négatif. (B) Comparaison entre les simulations numériques rétrospectives HOMERE (1994-2016) et NORGASUG (2008-2019) au large du site-atelier « Porsmilin », montrant une discontinuité importante lors de l'hiver 2012.

Ce projet concerne une simulation numérique rétrospective d'état de mer homogène pour l'ensemble des sites-atelier de plus de 30ans (depuis le début des observations d'évolution des plages, c'est-à-dire de la fin des années 90 à aujourd'hui). Cette simulation repose sur le modèle spectral d'état de mer WWIII (Tolman, 2009) et prend en compte les variations de hauteur d'eau et les courants liés à la marée. La configuration du domaine est sur une grille non-structurée avec une résolution spatiale de l'ordre du km au large de chaque site-atelier, la simulation prend en

compte les développements réalisés au laboratoire LIENSs, notamment en ce qui concerne le déferlement (ex. Pezerat et al., 2021).

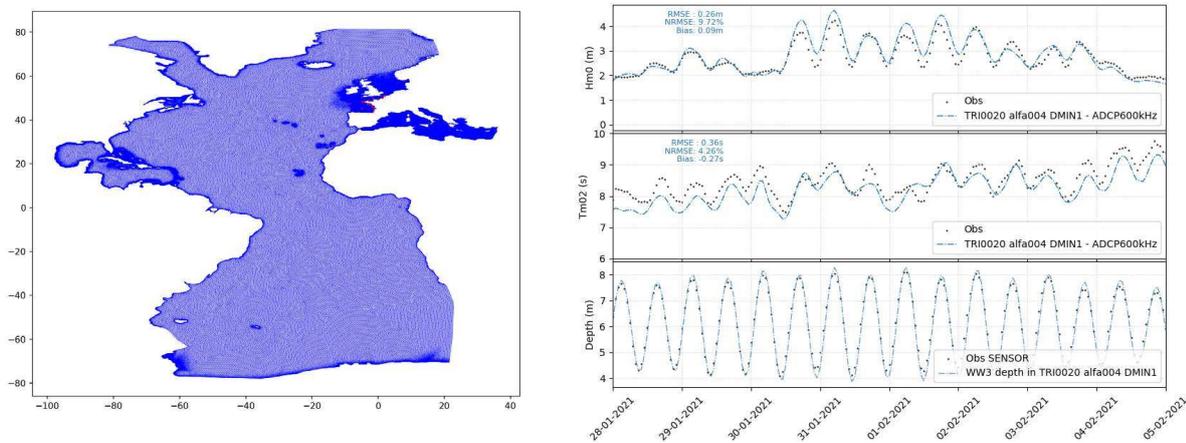


Figure 2. (A) Grille non-structurée de calcul du modèle spectral de vagues : WaveWatch-III (B) Comparaison entre la hauteur des vagues ($Hm0$), la période moyenne ($TM02$) et la profondeur ($Depth$) mesurées lors d'une campagne de mesures conduite au début de l'année 2021 dans la zone pré-littorale interne d'une plage dissipative du sud-ouest de l'île d'Oléron (France) (noir pointillée) et les sorties du modèle WaveWatch-III (bleu) (amélioration par rapport aux simulations disponibles). Mise en évidence de l'amélioration du biais.

- Dans ce projet, le MCIA a été utilisé pour réaliser les simulations préliminaires pour intégrer les développements du LIENS et le derniers développements sur le schéma implicite sur grille non structurées, avec des tests de durée de un à trois mois maximum. Les simulations réalisées ont besoin du forçage de vent (fichier réanalyse ERA5 modifié avec des script python) annuel de taille entre 3Gb et 4Gb, et du forçage de marées et des courants de marées, fichiers binaires interpolés partir de FES2014. Les simulations ont utilisées entre 200 et 600 cœurs (15nodes et 40 ntasks-per-node) pour une durée de 5h.

La consommation totale a été pour les années :

- 2022 : proc x hour : 8813
- 2023 : proc x hour : 69803
- 2024 : proc x hour : 15461

La suite du projet a été réalisée dans le cadre d'un projet DARI/GENCI avec une demande d'allocation Dynamique (demande renouvelée 3 fois de 100 000 HCPUs, de jobs de 800-1000 tasks par cœurs et 30 minutes pour réaliser 3mois de simulations). Les simulations sur Curta-MCIA nous ont permis de valider certains développements, pour passer sur les machines GENCI (Jean-Zay CPU) pour la simulation complète de plus de 30 ans n'est pas possible sur ce type de machine.

Contact : Simona Flavoni : simona.flavoni@univ-lr.fr

Effets des activités de dragage/clapage sur les flux du carbone

Les activités de dragage remobilisent une grande quantité de carbone stocké dans le compartiment sédimentaire.

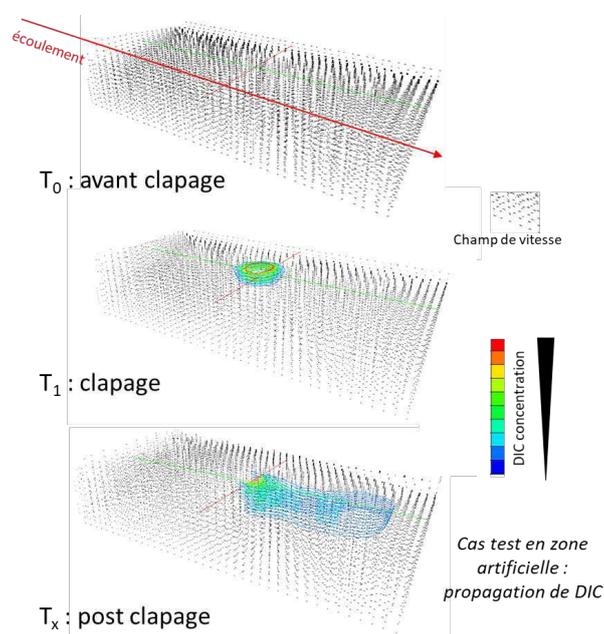


Figure 3. La figure décrit, dans un volume d'eau test, l'injection en surface puis diffusion de carbone inorganique dissous soumis à un débit d'eau Q .

Le projet a pour but de quantifier le transfert de carbone depuis le compartiment sédimentaire vers l'atmosphère lors du clapage de sédiment en zone d'immersion. Pour ce faire, un couplage entre hydrodynamisme de la zone d'étude via le modèle TELEMAC 3D (EDF) et biogéochimie liée à l'apport de carbone en zone d'immersion via le module « AED2 » (Hypse et al. 2013) est réalisé.

Le but de la simulation était de tout d'abord tester la possibilité du couplage entre le modèle hydrodynamique TELEMAC (avec forçage de marée à partir de FES2014) et le module AED2 de WAQTEL. La configuration du domaine est sur une grille non structurée avec une résolution spatiale de l'ordre du km au large et de la dizaine de mètres sur les zones d'intérêts.

Le MCIA a été utilisé pour réaliser les simulations, avec des tests de longueur variable (quelques heures à une semaine). Les simulations de tests ont permis de réaliser le couplage entre TELEMAC et AED2, mais au moment d'appliquer ce couplage sur la zone d'étude des difficultés ont été rencontrées dans le modèle concernant la gestion des bancs découvrant, les travaux sur le code sont encore en cours.

- Les simulations utilisent 1 nœud CPU avec 20 tasks-per-node, pour une durée de 10 heures. Pour ces simulations ont été utilisées :

2024 : proc x hour : 2500

Le stockage de 128 Gb a été insuffisant donc l'outil iRODS a été utilisé.

Contact : Raphaël Moncelon, raphael.moncelon1@univ-lr.fr

4.7 Génération d'images (IMS)

unité de recherche : Laboratoire de l'Intégration du Matériau au Système (IMS), Bordeaux

correspondant : Marc Donias

Désentrelacement faiblement supervisé au moyen d'une fonction de coût triplet (P. Coutinho, Y. Berthoumieu, M. Donias, S. Guillon).

Ce projet concerne l'étude des modèles génératifs d'images par des IA et la manière dont il est possible de désentrelacer des facteurs génératifs. Le désentrelacement (ou *disentanglement*) vise ici à décorrélérer les différentes composantes d'une variable dite latente à l'entrée d'un générateur et à les associer à des facteurs descriptifs. Un cas simple d'illustration du concept est la base de données MNIST qui contient des images de chiffres manuscrits. Dans ce contexte, les facteurs génératifs pourraient être le chiffre, la rotation, l'épaisseur du trait, etc. (voir Fig. 1). Afin d'obtenir une représentation désentrelacée, il faudrait que chacune de ces caractéristiques soit exprimée par une dimension différente du vecteur latent z utilisé en entrée de la génération de nouvelles données.

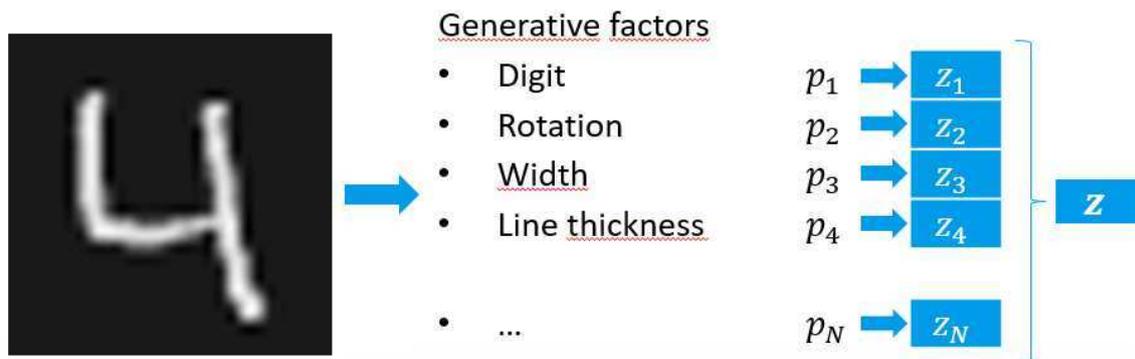


Figure 1 - Image issue de la base de données MNIST et décomposition en facteurs génératifs.

La démarche développée [1] est une approche faiblement supervisée comportant un réseau pré-entraîné sur des propriétés particulières à partir d'apprentissages par triplet d'images (voir Fig. 2) : deux images partagent une même propriété alors que la troisième image correspond à une propriété distincte.

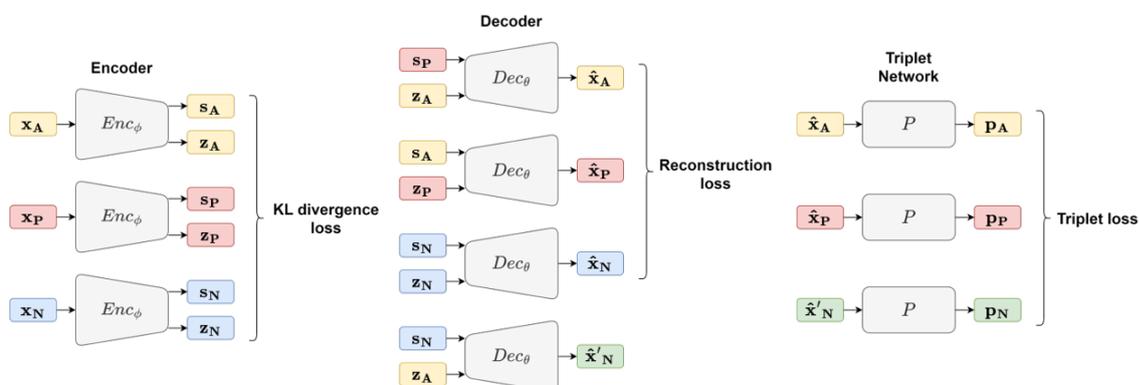


Figure 2 - Architecture proposée pour désentrelacement à partir d'un modèle type VAE (Variational Autoencoder).

Pour entraîner ce modèle, nous avons utilisé les nœuds de calcul Sirocco, particulièrement ceux offrant un GPU NVIDIA Quadro ou A100.

Références

- [1] Pedro Coutinho, Yannick Berthoumieu, Marc Donias and Sebastien Guillon. Weakly Supervised Disentanglement with Triplet Network. IEEE International Conference on Image Processing, 2023.
- [2] Diederik P. Kingma and Max Welling, “Auto-encoding variational bayes,” CoRR, vol. abs/1312.6114, 2013.
- [3] Irina Higgins, Loïc Matthey, Arka Pal, Christopher P. Burgess, Xavier Glorot, Matthew M. Botvinick, Shakir Mohamed, and Alexander Lerchner, “beta-vae: Learning basic visual concepts with a constrained variational framework,” in International Conference on Learning Representations, 2016.

4.8 Imagerie médicale en neurosciences (IMN)

Unité de recherche : Institut des Maladies Neurodégénérative (UMR5293)

Correspondant : Marc Joliot, PhD, Directeur de recherche au CEA

Le groupe d'imagerie fonctionnelle est une équipe multidisciplinaire de l'institut des maladies neurodégénératives rassemble des scientifiques de différents horizons. Ensembles, nous étudions l'anatomie et le fonctionnement du cerveau autour de trois grandes composantes :

- en établissant un lien entre les connexions cérébrales, le comportement et la cognition chez les personnes en bonne santé et les patients souffrant d'accidents vasculaires cérébraux
- en modélisant les différents phénotypes de l'anatomie et du fonctionnement du cerveau sain et déchiffrant l'impact de la variabilité sur le diagnostic et le pronostic des patients. Dans ce cadre nous sommes spécialisés dans l'acquisition et la gestion des très grandes bases de données d'imagerie médicales cérébrales.
- en combinant plusieurs approches pour cartographier la phylogénie du cerveau et de l'esprit et mieux comprendre l'évolution du cerveau et de la cognition chez l'homme et les primates

Construction d'un atlas commun de la substance blanche et grise

- **Description** : Au cours des deux dernières décennies, l'étude de l'imagerie par résonance magnétique fonctionnelle dans l'état de repos a révélé que la connectivité fonctionnelle au sein des réseaux et entre eux est liée aux états cognitifs et aux pathologies. Cependant, les connexions de matière blanche soutenant cette connectivité restent partiellement décrites. Nous avons développé une méthode permettant de cartographier conjointement la matière blanche et la matière grise qui contribuent à chaque réseau de l'état de repos (RSN). Nous proposons un atlas et un logiciel open-source pour explorer la contribution conjointe de la matière blanche et de la matière grise aux RSNs et faciliter l'étude de l'impact des lésions de la matière blanche sur ces réseaux. Dans une première application du logiciel avec des données cliniques, nous avons pu relier des patients ayant subi un AVC et les RSNs impactés, montrant que leurs symptômes correspondaient bien aux fonctions estimées des réseaux.

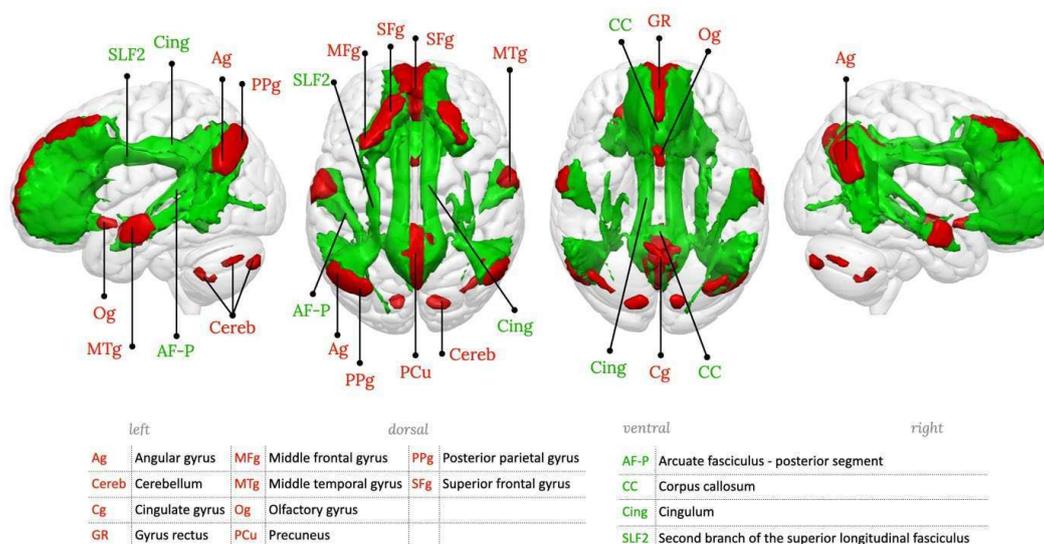


Figure 1 : Exemple du réseau du « mode de fonctionnement par défaut ». Participation cortical (rouge) et de la substance blanche associée (vert).

- Le projet a utilisé la capacité du mésocentre à traiter des cohortes de données en imagerie médicale. Dans ce cadre les données de 300 sujets issu de 2 bases de données (HCP et I-Share) ont été traité indépendamment.

- **Publication** : Nozais, V., Forkel, S.J., Petit, L., Talozzi, L., Corbetta, M., Thiebaut de Schotten, M., Joliot, M. (2023) Atlasing white matter and grey matter joint contributions to resting-state networks in the human brain. *Commun Biol*, 6:726.

- **Contact** : Marc Joliot, PhD, Directeur de Recherche au Commissariat à l'Energie Atomique (marc.joliot@u-bordeaux.fr)

4.9 Mathématiques (IMB)

unité de recherche : Institut de Mathématiques de Bordeaux, Bordeaux

correspondant : Michel Bergmann

L'Institut de Mathématiques de Bordeaux (IMB, UMR 5251) regroupe des chercheurs et enseignants-chercheurs autour de thématiques variées, incluant l'analyse, la géométrie, la théorie des nombres, l'optimisation, les probabilités, et le calcul scientifique et la modélisation. L'IMB se distingue par une forte collaboration interdisciplinaire, notamment avec les sciences de l'ingénieur, la physique, et la médecine.

Modélisation numérique des contacts pour des nageurs confinés dans un enclos [Michel Bergmann, collaboration avec Hamid Kellay (LOMA)]

Ce projet s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre l'IMB (Michel Bergmann) et le LOMA (Hamid Kellay). Il trouve sa motivation dans les expérimentations menées au LOMA, où plusieurs poissons-robots nagent activement dans une enceinte circulaire. Selon la perméabilité de l'enceinte et le nombre de nageurs, différents comportements collectifs émergent, avec des phénomènes tels que des regroupements de nageurs sur les bords de l'enceinte ou une inclinaison plus ou moins marquée des nageurs vers ces bords.

Afin de mieux comprendre ces phénomènes complexes, des simulations numériques sont réalisées à l'aide du solveur NaSCar, développé par M. Bergmann au sein de l'équipe "Calcul Scientifique et Modélisation" de l'IMB, et plus spécifiquement au sein de l'équipe MEMPHIS d'Inria. L'un des enjeux majeurs de ces travaux est la création d'un "jumeau numérique" des expériences réalisées, ce qui implique notamment la modélisation précise des contacts inévitables entre les nageurs, ainsi qu'entre les nageurs et les parois de l'enceinte.

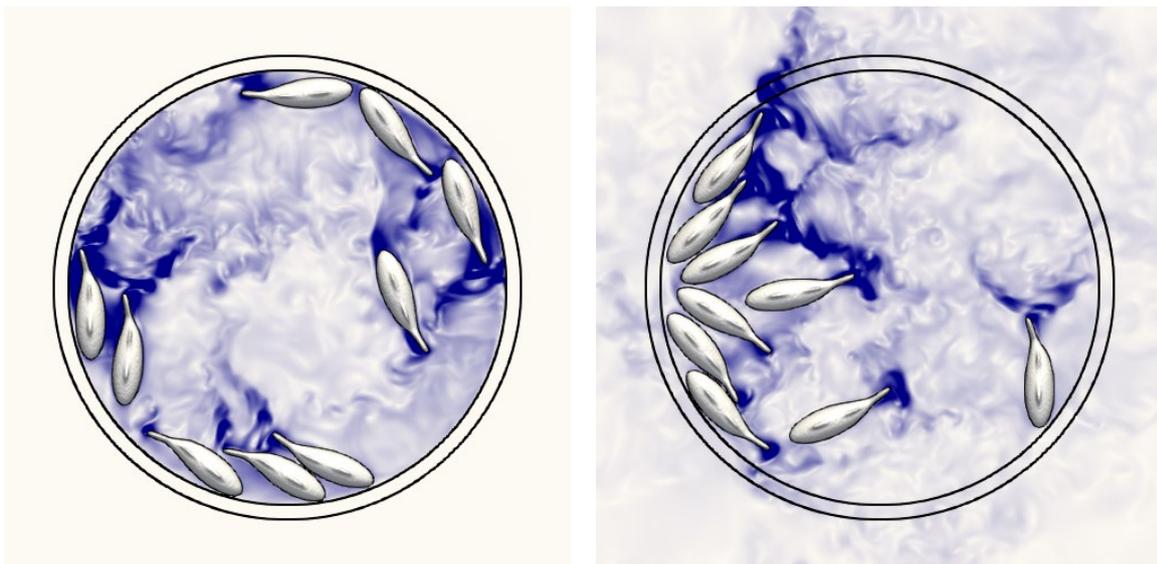


Figure 1 : snapshots pour un groupe de neufs nageurs dans le cas d'une enceinte imperméable (gauche) et perméable (droite).

Ces simulations nécessitent une grille de calcul extrêmement fine couvrant l'ensemble du domaine de simulation, car les nageurs se déplacent dans tout l'espace de calcul. Par exemple, les simulations illustrées sur la Figure 1 ont requis des maillages de plus de 100 millions de cellules. Les calculs ont été réalisés en utilisant entre 8 et 16 nœuds de calcul (256 à 512 CPUs), avec une durée totale de simulation variant entre 2 et 5 jours. Plusieurs dizaines de simulations ont été effectuées, pour différentes configurations de poissons et de modèles de contact.

[1] Bergmann M., *Fluid-structure interaction with multi-body collision: application to collective fish swimming in an impermeable or porous enclosure* The Eleventh International Conference on Computational Fluid Dynamics, Maui, Hawaii, US, July 11-15, 2022.

[2] J. F. Boudet, M. Bergman, A. Iollo, H. Kellay *High Reynolds number swimmers: effects of boundaries*, à soumettre.

Contact : michel.bergmann@math.u-bordeaux.fr

Stabilité du modèle de bulle à sommet gelé : convection bidimensionnelle de Rayleigh-Bénard sur la surface sphérique (Patrick Fischer, Xiaoqiu He, Khodor Khadra)

Nous développons le modèle de bulle à sommet gelé, un système bidimensionnel de convection de Rayleigh-Bénard (RBC) avec l'asymétrie inhérente entre les limites froides et chaudes. La bulle est chauffée à la base. Une zone gelée est imposée au sommet à l'aide de la méthode de pénalisation, où le fluide reste immobile et à une température plus basse. Cette configuration permet d'obtenir une cellule RBC sans frontière latérale. En raison de la forme de la bulle, la frontière froide de la cellule RBC est toujours plus courte que la frontière chaude. Cette asymétrie verticale influence fortement la stabilité du modèle. Les simulations numériques directes (DNS) sont basées sur les équations de Navier-Stokes avec approximation de Boussinesq :

$$\nabla \cdot u = 0 \quad \frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u = -\nabla P + \frac{1}{\sqrt{Ra/Pr}} \Delta u - T e_g \quad \frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)T = \frac{-1}{\sqrt{Ra \times Pr}} \Delta T$$

Les résolutions sur un temps physique très grand nous conduisent à des calculs numériques avec MPI jusqu'à 256 cœurs de calcul sur le cluster curta du MCIA.

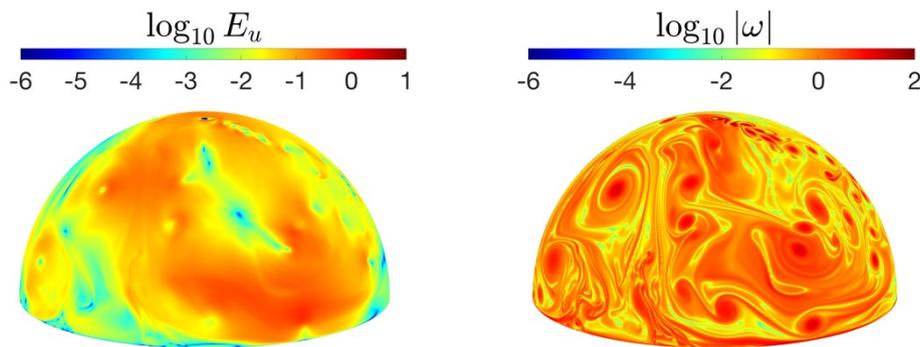


Figure 2 : Snapshots avec $Ra = 1.12 \times 10^{10}$: (a) énergie cinétique (b) vorticité.

Schémas volumes finis d'ordre très élevé appliqués à l'électrophysiologie cardiaque (Yves Coudière, Khodor Khadra, Rodolphe Turpault)

Nous nous intéressons à la simulation numérique de la propagation des potentiels d'action dans le muscle cardiaque. Les dysfonctionnements de cette propagation provoquent d'importantes maladies cardiaques. La tachycardie ou la fibrillation sont responsables de nombreux décès. Les modèles mathématiques sont basés sur les équations de réaction-diffusion avec différents modèles ioniques :

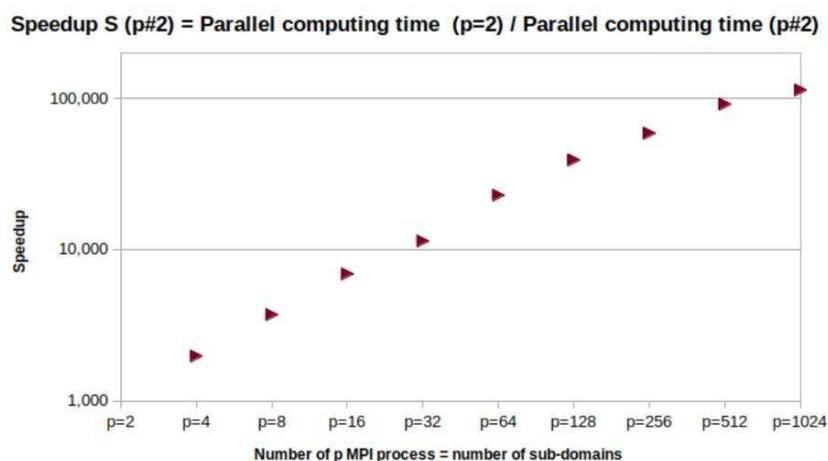
$$\begin{aligned}\partial_t V + J_{\text{ion}}(V, w) &= \text{div}(D \nabla V) \\ \partial_t w &= G(V, w)\end{aligned}$$

Les discrétisations sont effectuées sur des maillages non structurés 2D (triangles) et 3D (tétraèdres) avec des schémas volumes finis d'ordre très élevé. Le domaine global est partitionné en sous-domaines pour l'aspect calcul parallèle avec MPI dont voici un exemple en 2D :



Figure 3 : Exemple 2D de maillage partitionné

Des calculs numériques avec MPI sur différentes tailles de maillage (en 3D jusqu'à 14 millions de tétraèdres) et pour plusieurs ordres (de 2 à 10) sont effectués sur le cluster curta du MCIA jusqu'à 1024 cœurs de calcul. Voici un exemple de calcul de speedup (efficacité) du code en 2D avec le modèle ionique de Aliev-Panfilov :



Calcul de certificat de primalité par l'algorithme fastECPP (équipe théorie des nombres)

La théorie des nombres à Bordeaux est une longue tradition, portée par le laboratoire historique A2X qui a intégré l'IMB à sa création (2007). Les aspects algorithmiques et effectifs y sont importants, en particulier dans l'équipe-projet INRIA CANARI (Cryptography, ANalysis and ARithmetic), commune à l'IMB et au centre de recherche Inria Bordeaux Sud-Ouest. Le système de calcul PARI/GP a été créé ici en 1985, et développé continûment depuis. Enfin, l'équipe est très impliquée dans des domaines applicatifs tels que la cryptologie ou la théorie des codes.

L'algorithme fastECPP [1] est actuellement l'algorithme le plus performant pour prouver la primalité de grands nombres. Cet algorithme a aussi l'avantage de fournir un certificat, qui permet de vérifier indépendamment la primalité pour un moindre coût. Cet algorithme a été implanté dans PARI/GP[2] par Jared Asuncion et parallélisé par Bill Allombert [3].

À titre de validation, nous avons calculé les certificats [6] des nombres suivants, dont la primalité n'était pas encore prouvée :

- fibonacci(130021) (27173 chiffres) taille du certificat: 31 Mo [4]
- $(2^{95369} + 1)/3$ (28709 chiffres) taille du certificat: 35 Mo [5]
- fibonacci(148091) (30949 chiffres) taille du certificat: 40 Mo [4]

Nous avons utilisé simultanément le MClA (750 jobs ont été lancés, représentant 150.000 heures de calcul) et plafrim.

Références :

- [1] Franke, J., Kleinjung, T., Morain, F. and Wirth, T., Proving the primality of very large numbers with fastECPP. In "Algorithmic number theory," Lecture Notes in Comput. Sci. Vol, 3076, Springer, Berlin, 2004. pp. 194--207,
- [2] The PARI group, PARI/GP version 2.11, 2018, <https://pari.math.u-bordeaux.fr>
- [3] The PARI group, PARI/GP version 2.15, 2022, <https://pari.math.u-bordeaux.fr>
- [4] <https://t5k.org/top20/page.php?id=39>
- [5] <https://t5k.org/top20/page.php?id=67>
- [6] <https://pari.math.u-bordeaux.fr/pub/bill/primecerts>

Contact : laurent.facq@math.u-bordeaux.fr

Conception de la chaîne d'approvisionnement en sang dans la gestion des catastrophes : approches averse au risqué (équipe Optimisation Mathématique Modèle Aléatoire et Statistique - Optimal)

L'équipe OptimAl se concentre sur le développement d'outils mathématiques pour modéliser et analyser des systèmes complexes, souvent dynamiques ou aléatoires. Ses travaux couvrent l'inférence, l'analyse de données, l'optimisation combinatoire, la programmation mathématique, le contrôle stochastique et l'évaluation statistique des performances. L'objectif est d'optimiser ces systèmes selon divers critères (décision, prédiction, stratégie) en proposant des outils théoriques, des méthodes de résolution fiables et des algorithmes performants. L'équipe allie étude théorique et développement d'outils numériques pour traiter des problèmes pratiques à grande échelle.

Ce projet porte sur la conception d'une chaîne d'approvisionnement en sang dans le contexte de la gestion des catastrophes. Les catastrophes, qu'elles soient naturelles ou d'origine humaine, perturbent les systèmes en place et mettent à l'épreuve leur résilience. La chaîne d'approvisionnement en sang joue un rôle crucial dans les campagnes de réponse aux désastres,

où les besoins en sang augmentent considérablement pour soigner les victimes. Il devient donc essentiel de développer des politiques efficaces pour établir et gérer cette chaîne. En tenant compte de l'aspect humanitaire du problème, la mesure de risque CVaR a été utilisée pour déterminer les emplacements optimaux des centres de collecte de sang, afin de maximiser la satisfaction de la demande. Étant donné la difficulté de résolution numérique du problème, d'autres modèles approximatifs ont été proposés et comparés à ceux de la littérature existante.

D'un point de vue structurel, le problème réaliste modélisé comporte deux phases : la phase de préparation aux catastrophes et la phase de réponse. La phase de préparation se concentre sur les décisions stratégiques, telles que le positionnement et le dimensionnement des centres de collecte. La phase de réponse intervient après la survenue de la catastrophe et concerne les décisions opérationnelles, comme la gestion des flux de sang dans le réseau. La résolution numérique de ce problème se heurte à des difficultés de différents ordres. D'une part, les décisions de la phase de préparation doivent se faire en anticipant un grand nombre de scénarios incertains plausibles, la solution opérationnelle de chacun d'eux devant elle aussi être anticipée. D'autre part, l'ensemble des solutions réalisables à la première comme la deuxième étape n'est pas convexe, à cause de la nature discrète des décisions prises. Les résultats de cette étude ont donné lieu à la soumission de l'article [1].

Dans ce projet, le MCIA a été utilisé pour une campagne de tests numériques visant à estimer la qualité des solutions fournies par différents algorithmes. Afin d'obtenir des résultats robustes sur lesquels appuyer nos conclusions, un grand nombre d'instances de test aux caractéristiques variées a été généré. Selon une méthodologie de Sample Average Approximation, chacun des algorithmes a été lancé sur chacune des instances avec des échantillons aléatoires de différentes tailles, chaque configuration fournissant une solution pour la phase de préparation. Afin d'obtenir une estimation statistique de la qualité de ces solutions, une évaluation out-of-sample a été menée sur un grand nombre de scénarios aléatoire, les intervalles de confiance obtenus permettant la comparaison des solutions entre elles.

Chaque instance de calcul a été traitée sur 2 cœurs avec 16 Go de mémoire garantie, ce qui, compte tenu des caractéristiques des nœuds Curta, permettait le traitement simultané de 5 instances par nœud. Au total, 12.000 jobs ont été lancés en 2023, représentant 2.000.000 heures de calcul.

Références :

[1] Komlanvi Parfait Ametana, Mehdi Amiri-Aref, Olga Battaïa, François Clautiaux, Boris Detienne, et Laurent Facq. Blood supply chain design in disaster management: a comparison of risk-averse measures in robust optimization approaches. 2024. (hal-04634185)

Contact : laurent.facq@math.u-bordeaux.fr

4.10 Mathématiques Appliquées (LMAP)

Unité de recherche : Laboratoire de Mathématiques et de leurs applications de Pau, UMR CNRS 5142, Pau

Correspondant : Philippe Poncet

Le LMAP regroupe toute la communauté mathématique de l'UPPA, soit 54 chercheurs et enseignants-chercheurs, sur deux sites : Pau et Anglet. Ses thématiques relèvent essentiellement des mathématiques appliquées :

- en analyse mathématique : analyse des équations aux dérivées partielles déterministes ou stochastiques, optimisation, systèmes dynamiques, modélisation mathématique,*
- en analyse numérique et simulation : méthodes de discrétisation pour les EDP, approximation, problèmes inverses, optimisation de formes, incertitudes, calcul scientifique et calcul haute performance,*
- en probabilités et statistique : modélisation stochastique, analyse probabiliste, traitement statistique des données, big data, intelligence artificielle, inférence semi-paramétrique et non paramétrique.*

Les domaines d'applications concernent principalement les géo-ressources, l'aérothermodynamique, l'environnement, la santé, la sûreté de fonctionnement, l'optimisation de structures. De plus, le LMAP a des compétences en mathématiques fondamentales : géométrie algébrique projective, topologie en petite dimension. La recherche pluridisciplinaire étant au cœur de l'activité du LMAP, nous avons 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 que des PME locales.

Simulation numérique 3D d'écoulements multiphasiques réactifs en milieux poreux. Applications à des problématiques énergétiques et environnementales

Depuis plusieurs années, les personnes impliquées dans l'axe Milieux Poreux du LMAP travaillent sur la modélisation et la simulation numérique d'écoulements multiphasiques réactifs. Les applications mises en avant incluent le stockage géologique du CO₂ ainsi que le stockage profond des déchets radioactifs. Dans ce cadre, nous avons développé le simulateur Reactive-DuMuX (A Collaborative Platform for Numerical Simulation of Multiphase Multicomponent Flow with Reactive Transport in Porous Media). Ce simulateur est basé sur la plate-forme parallèle libre et opensource DuMuX [1, 2] (DUNE for Multi-{Phase, Component, Scale, Physics, ...} flow and transport in porous media) et l'environnement DUNE [3] (Distributed and Unified Numerics Environment).

Dans le cadre du 11th Society of Petroleum Engineers Comparative Solution Project (the 11th SPE CSP, <https://spe.org/csp>), trois benchmarks ont été proposés pour évaluer l'efficacité, la fiabilité et la durabilité du stockage géologique du CO₂ [4]. Des simulations nécessitant d'importantes ressources informatiques ont ainsi été réalisées sur CURTA pour le cas (b). La Figure 1 représente la géométrie du cas (b). Chaque face possède des propriétés physiques très différentes (porosité, perméabilité, pression capillaire). Du CO₂ sous forme supercritique est injecté par 2 puits pendant 50 ans et l'objectif du benchmark est d'étudier la migration du CO₂ et son devenir dans le domaine pendant 1000 ans. La Figure 2 présente la fraction molaire de CO₂ dans la phase liquide (en haut), la température (au milieu) et la saturation de gaz (en bas) après 1000 ans de simulation. On

observe que, suite à l'injection, le CO₂ a migré verticalement vers le sommet du domaine, où il a ensuite été bloqué par les zones peu perméables et s'est dispersé latéralement. L'injection de CO₂, à une température plus basse que celle initiale du réservoir, refroidit la zone proche des puits. Ces calculs ont été réalisés sur un maillage de 25200 éléments, utilisant 16 processeurs sur une durée d'environ un jour.

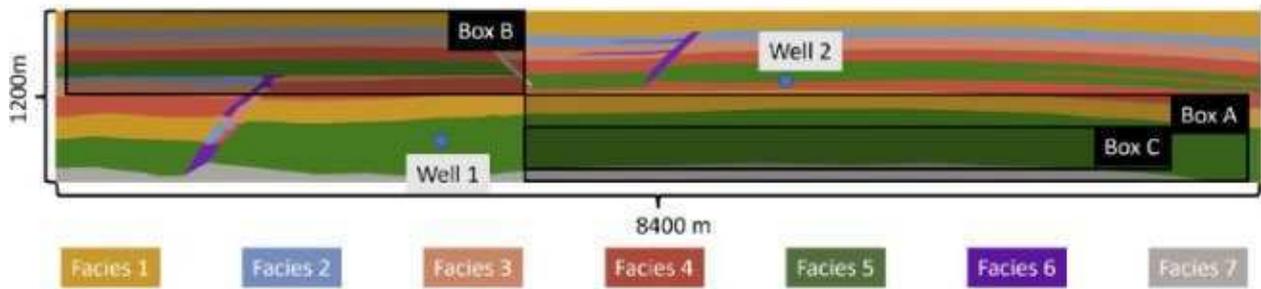


Figure 1 : Schéma de la géométrie du cas (b).

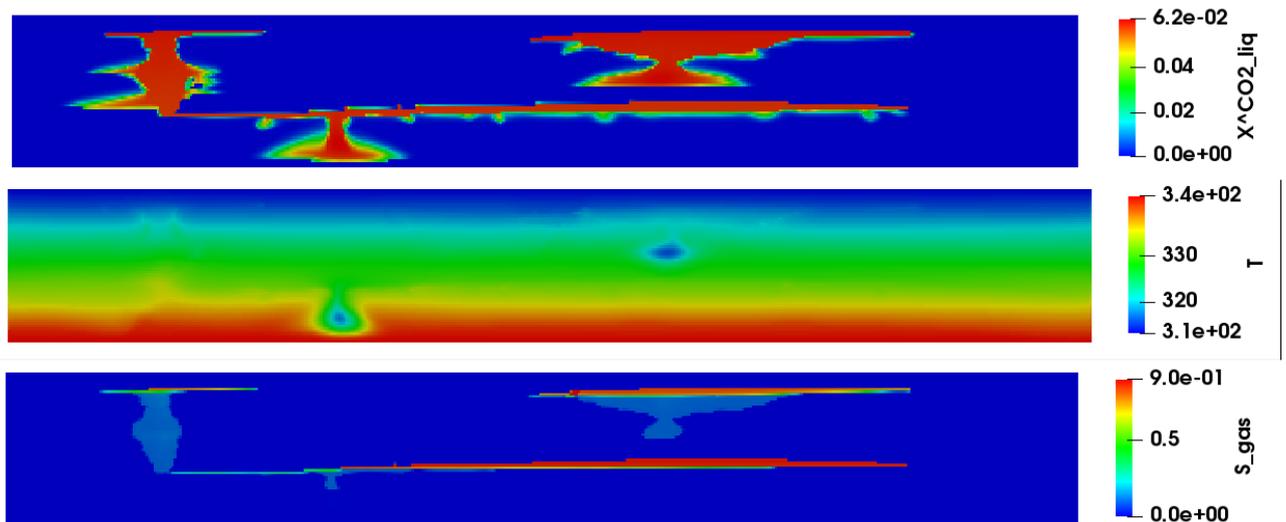


Figure 2 : Fraction molaire de CO₂ dans la phase liquide (haut), température (centre) et saturation de gaz à la fin de la simulation (t=1000 ans).

Références :

- [1] Koch T. et al. *DuMuX3 - an open-source simulator for solving flow and transport problems in porous media with a focus on model coupling*. Computers & Mathematics with Applications, 81, 423-443 (2020).
- [2] DuMuX web-page: <http://www.dumux.org/>
- [3] P. Bastian et al. *The DUNE Framework: Basic Concepts and Recent Developments*. Computers & Mathematics with Applications, 81, 72-112 (2020).
- [4] J.M. Nordbotten et al. "The 11th Society of Petroleum Engineers Comparative Solution Project: Problem Definition." SPE J., 29, 2507-2524 (2024).
- [5] SPE11th CSP, First participant virtual workshop, 14 Mars 2024.

Contact : Etienne AHUSBORDE (etienne.ahusborde@univ-pau.fr)

Méthodes d'IA pour les problèmes inverses en milieux poreux réactifs avec quantification d'incertitude

Nous développons une nouvelle stratégie d'assimilation de données dans l'imagerie à l'échelle du pore et démontrons qu'elle permet d'aborder de manière robuste les problèmes inverses réactifs incorporant la quantification de l'incertitude (UQ).

La modélisation de l'écoulement réactif à l'échelle du pore offre une opportunité précieuse d'étudier l'évolution des propriétés à macro-échelle soumises à des processus dynamiques. Cependant, ils souffrent de limitations d'imagerie dues au processus associé de microtomographie à rayons X (X-ray μ CT), qui induit des divergences dans les estimations des propriétés. L'évaluation des paramètres cinétiques pose également des problèmes, car les coefficients réactifs sont des paramètres critiques qui peuvent couvrir une large gamme de valeurs. Nous tenons compte de ces deux problèmes et assurons un étalonnage fiable de la modélisation à l'échelle du pore, basée sur des images dynamiques μ CT, en intégrant la quantification de l'incertitude dans le flux de travail.

La présente méthode est basée sur une formulation multitâche des problèmes inverses réactifs combinant des techniques guidées par les données et informées par la physique dans la dissolution de la calcite. Cela permet de quantifier les incertitudes morphologiques sur le champ de porosité et d'estimer les gammes de paramètres réactifs par le biais de modèles d'EDP prescrits avec un champ de concentration latent et un μ CT dynamique.

La stratégie d'assimilation des données repose sur un renforcement séquentiel incorporant successivement des contraintes supplémentaires liées à des EDPs et une formulation appropriée de l'opérateur différentiel de diffusion hétérogène, ce qui permet d'améliorer l'efficacité des calculs. Nous garantissons une quantification robuste et non biaisée de l'incertitude par une pondération adaptative simple des réseaux neuronaux bayésiens informés par la physique (BPINN), assurant des estimations fiables de l'évolution de la micro-porosité au cours des transformations géochimiques.

Nous avons démontré la réussite de l'inférence bayésienne dans la dissolution de la calcite en 1D+Temps sur la base d'images synthétiques μ CT avec une distribution postérieure significative sur les paramètres réactifs et les nombres adimensionnels. Nous appliquons ensuite ce cadre à un problème plus réaliste d'assimilation de données 2D+Time impliquant des niveaux de porosité hétérogènes et des observations dynamiques synthétiques μ CT.

D'un point de vue implémentation, les cluster Curta (Bordeaux), Pyrene (Pau) et Falcon (Dresden, Germany) ont été testé pour accueillir la production à une échelle modérée, le code s'appuyant sur la librairie PyTorch. Le cluster Falcon a finalement été retenu pour les simulations ayant été publiées.

Références :

- [1] Sarah Perez, Philippe Poncet. *Auto-weighted Bayesian Physics-Informed Neural Networks and robust estimations for multitask inverse problems in pore-scale imaging of dissolution*. Computational Geosciences, 2024, 28, pp.1175-1215. <10.1007/s10596-024-10313-x>. <hal-04191804v2>
- [2] Sarah Perez, Suryanarayana Maddu, Ivo F. Sbalzarini, Philippe Poncet. *Adaptive weighting of Bayesian physics informed neural networks for multitask and multiscale forward and inverse problems*. Journal of Computational Physics, 2023, 491, pp.112342. <10.1016/j.jcp.2023.112342>. <hal-04011497v2>

- [3] Sarah Perez, Suryanarayana Maddu, Ivo F. Sbalzarini, Philippe Poncet. *Robust Uncertainty Quantification and automatic weighting of multi-objective and multi-scale Bayesian Physics-Informed Neural Networks*. NG001: Advances in Data Assimilation, Data Fusion, Machine Learning, Predictability and Uncertainty Quantification in the Geosciences. AGU 2024, American Geophysical Union, Dec 2024, Washington (DC), United States. (hal-04743946)
- [4] Sarah Perez, Andreas Busch, Florian Doster, Philippe Poncet. *Ensuring reliability in CO2 leakage risk assessment through AI-driven uncertainty quantification across scales*. 5th EAGE Conference and Exhibition on Global Energy Transition - GET2024, EAGE Carbon Capture & Storage Conference, Nov 2024, Rotterdam, Netherlands. (hal-04677155)
- [5] Sarah Perez, Philippe Poncet. *Uncertainty Quantification and Automatic Task Balancing of Bayesian Physics Informed Neural Networks for Inverse Problems in Reactive Flows*. SIAM Conference on Uncertainty Quantification (UQ24), Feb 2024, Trieste, Italy. (hal-04650452)
- [6] Sarah Perez, Philippe Poncet. *Bayesian uncertainty quantification in pore-scale imaging: how to robustly infer porous media morphological properties through reactive inverse problems ?*. 22st Annual Conference of the International Association for Mathematical Geosciences (IAMG 2023), Aug 2023, Trondheim, Norway. (hal-04161896)
- [7] Sarah Perez, Philippe Poncet. *Chemical and morphological uncertainty quantification by auto-weighted Bayesian Physics-Informed Neural Networks for reactive two-scale porous media at the pore scale*. 15th Annual International conference on Porous Media - InterPore 2023, Heriot-Watt University, May 2023, Edinburgh (Scotland), United Kingdom. (hal-04159443)

Contact : Philippe Poncet (philippe.poncet@univ-pau.fr)

4.11 Matière Molle (CRPP)

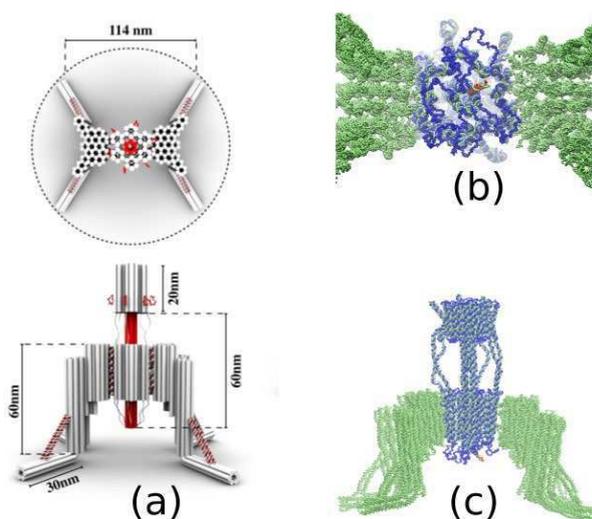
unité de recherche : Centre de Recherche Paul Pascal (CRPP – UMR5031), Bordeaux

correspondant : Etienne Ducrot

L'activité de modélisation moléculaire ici décrite est effectuée au sein du groupe Matière Molle : Structure et Dynamique (M2SD) du CRPP. Elle est centrée sur le développement de modèles structuraux d'assemblages ADN, en interaction potentiellement avec des bicouches lipidiques. Elle utilise des logiciels en accès libre, dont Gromacs et oxDNA.

Un nano-ressort ADN pour l'interaction contrôlée des membranes lipidiques

Ce projet, réalisé en collaboration avec G. Bellot (INSERM, Montpellier) [1], a permis de quantifier la force pouvant être exercée par un assemblage ADN illustré dans la figure 1. Cette construction peut exercer des forces de l'ordre de quelques piconewton sur des protéines membranaires insérées dans des bicouches lipidiques, permettant ainsi de déclencher de façon spécifique des processus de signalisation. La modélisation a été réalisée à l'aide de oxDNA, logiciel permettant de simuler des auto-assemblages d'ADN de quelques dizaines de nanomètres. La caractérisation expérimentale de la force exercée ne peut se faire que de façon indirecte, l'apport de la modélisation dans ce projet est donc essentiel.



Les simulations ont été faites sur les processeurs GPU de MCIA.

Figure 1 : (a) Caractéristiques géométriques d'un nano-ressort ADN, comportant deux pieds permettant l'arrimage sur une bicouche lipidique, et un ressort central (en rouge), élément actif du dispositif. (b) et (c) sont des configurations obtenues avec oxDNA : (b) montre la partie inférieure du nano-ressort (en bleu), entourée des deux pieds (en vert). (c) même structure, vue latérale.

Référence :

[1] A. Mills et al, modular spring-loaded actuator for mechanical activation of membrane proteins (2022), Nature Comm. Vol. 13, 3182.

Contact : Juan Elezgaray juan.elezgaray@crpp.cnrs.fr

4.12 Mécanique et Ingénierie (I2M)

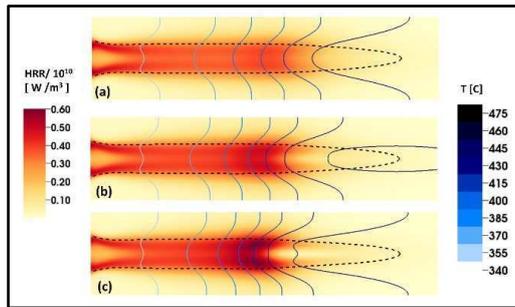
Unité de recherche : Institut de Mécanique et d'Ingénierie- Bordeaux, UMR CNRS 5295, Université de Bordeaux, ENSAM, Bordeaux-INP, INRAE

Correspondant : Stéphane Glockner

L'I2M est structuré autour de six départements de recherche qui sollicitent à différents degrés les ressources du MCIA. Ce rapport d'activités met l'accent sur les travaux du département TREFLE (Fluides, Transferts et Énergétique) et de ses groupes de recherche. Le groupe thématique Simulations avancées et Modélisation Numérique pour les Fluides et l'Ingénierie (SiMFI) aborde des problèmes complexes en mécanique des fluides exclusivement par la simulation numérique. Pour cela, il s'appuie sur le calcul intensif et le code de calcul Notus (<https://notus-cfd.org>) là où l'expérimentation en laboratoire peut connaître des limites. Le code open-source Notus, développé au laboratoire, est un socle commun aux différents chercheurs du groupe. Cette approche duale, intriquée, permet de faire concourir et de rejoindre les compétences des membres de l'équipe qui couvrent les champs de la modélisation physique, de la modélisation numérique et du calcul intensif. Les projets suivants relèvent principalement de ce groupe de recherche, à l'exception des deux derniers issus des groupes thématiques Milieux Poreux (réalisés à l'aide du code open source PATO) et E3BUS (Efficience Énergétique et Environnementale du Bâtiment, des Usages et des Systèmes).

Étude de l'apparition d'une flamme hydrothermale dans un procédé microfluidique d'oxydation hydrothermale

Le procédé d'oxydation hydrothermale (SCWO) est une technologie prometteuse pour le traitement des déchets organiques aqueux, car elle permet une dégradation rapide et efficace lorsque les processus de biodégradation conventionnels ne peuvent pas être utilisés. Cependant, la précipitation des sels dans des conditions d'eau supercritique entraîne des limitations inhérentes. Celles-ci peuvent être levées grâce à l'utilisation de flammes hydrothermales. Il a récemment été proposé d'envisager cette approche dans le contexte de l'exploration spatiale en tant que partie du processus critique pour le système de maintien de la vie à bord des missions spatiales. Les contraintes de poids et de taille pour les applications spatiales rendent inévitable la miniaturisation du procédé et son passage à l'échelle microscopique. Pour cela, en complément des premières preuves expérimentales pour développer un tel procédé, nous avons proposé, une étude numérique pour comprendre la physique sous-jacente conduisant à la formation de flammes hydrothermales à l'échelle microscopique. L'objectif principal est de comprendre l'impact de l'hydrodynamique (débits) sur la dynamique de la réaction et, par conséquent, la manière dont elle régit la formation des flammes hydrothermales, distinguant ainsi une simple réaction SCWO de la formation des flammes hydrothermales. Cette analyse a été réalisée pour deux températures d'entrée différentes, inférieures à la température critique de l'eau, pour une concentration fixe de combustible (éthanol) et d'oxydant (oxygène), en utilisant une chimie de réaction en une seule étape. Il a été observé qu'aucun noyau d'allumage n'était formé à des débits élevés et que la réaction était donc simplement une réaction SCWO. Cependant, à des débits plus faibles, en raison de la concentration de chaleur résultant de l'hydrodynamique du jet, l'augmentation de la température locale a finalement conduit à l'atteinte de l'auto-inflammation et donc à la formation d'une flamme hydrothermale. Dans ce projet, le MCIA a été utilisé pour réaliser l'étude paramétrique afin de déterminer les conditions opératoires permettant d'atteindre la flamme hydrothermale.



Champs du taux de dégagement de chaleur et courbes de niveau de la température (trait plein). La ligne en pointillé correspond la zone de réaction. La figure illustre la chaîne d'événements conduisant à la formation du noyau d'allumage.

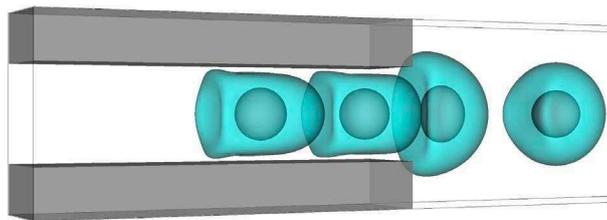
Collaborations : CNES - ICMCB

Référence : Sharma D., Nguyen O., Palencia F., Lecoutre C., Garrabos Y., Glockner S., Marre S., Erriguible A. Supercritical water oxidation using hydrothermal flames at microscale as a potential solution for organic waste treatment in space applications – A practical demonstration and numerical study (2024), *Chemical Engineering Journal*, 488, art. no. 150856

Contact : Arnaud Erriguible arnaud.erriguible@bordeaux-inp.fr

Simulation numérique de capsules avec noyaux

Ce travail concerne la modélisation et la simulation numérique de capsules aux propriétés élastiques dans un fluide incompressible. L'approche Eulérienne d'interaction fluide-structure développée permet de modéliser le fluide et le solide dans une même formulation de type 1-fluide. Une originalité de ce travail réside dans la prise en compte d'un noyau élastique à l'intérieur de la capsule dans nos simulations numériques. Nous avons étudié en détails à l'aide de nombreuses simulations numériques 3D l'influence de la géométrie et des propriétés mécaniques de la capsule et de son noyau sur le phénomène de relaxation dans un canal en T. Ce travail ouvre donc de nombreuses perspectives en médecine et en biomécanique.



Exemple de simulation numérique 3D de la relaxation d'une capsule avec un noyau élastique dans un canal en T

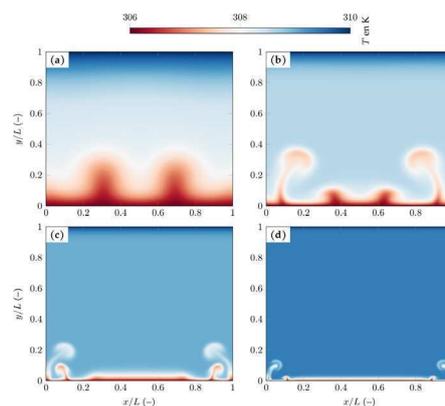
Le calcul présenté dans la figure 1 a été réalisé avec le code open source Notus de l'I2M sur la machine du MCIA avec 128 cœurs (4 nœuds de 32 cœurs) sur le maillage cartésien 512x128x64 = 4 194 304 cellules pendant 48h.

Référence : Fully Eulerian models for the numerical simulation of capsules with an elastic bulk nucleus, Florian Desmons, Thomas Milcent, Anne-Virginie Salsac, Mirco Ciallella, *Journal of Fluids and Structures*, Volume 127, June 2024

Contacts : Thomas Milcent thomas.milcent@u-bordeaux.fr et Mirco Ciallella ciallella@math.univ-paris-diderot.fr

Convection naturelle turbulente d'un fluide supercritique traversant la Widom Line

Ce projet étudie la turbulence d'un fluide supercritique dans un écoulement compressible subsonique en configuration de convection de Rayleigh-Bénard (RBC). Nous avons utilisé les ressources du MCI pour effectuer, sur plusieurs valeurs du nombre de Rayleigh, les premières simulations DNS bidimensionnelles d'un tel fluide en configuration de RBC avec effets de non-Oberbeck-Boussinesq, qui considère les fortes variations des propriétés thermodynamiques du fluide. Ces DNS ont servi de dimensionnement et de référence pour le montage d'un projet GENCI visant à considérer les écoulements tridimensionnels (projet de 5.7 + 7 millions d'heures CPU). Le code massivement parallèle de mécanique des fluides Notus, développé à l'IMM, a été utilisé pour la résolution des équations de Navier-Stokes compressible subsonique couplant les lois de conservations de la quantité de mouvement, de l'énergie, et de la masse, avec une équation d'état du fluide. Un algorithme spécifiquement développé pour ce type d'écoulement a été utilisé [1]. Nous soulignons d'ailleurs l'utilisation des ressources du MCI pour la vérification et la validation de l'algorithme. Nous considérons dans ce projet le dioxyde de carbone supercritique traversant la *Widom Line*. Similaire à la ligne de coexistence liquide/gaz, cette ligne "imaginaire" sépare la région supercritique en deux sous-régions où les propriétés thermodynamiques sont dominées par les effets *liquid-like* et *gas-like*. Au travers de cette "frontière", les propriétés thermodynamiques du fluide varient fortement et les phénomènes de transport massique et thermique s'en trouvent largement modifiés.



Champ de température au début de la phase de convection. a) $Ra=10^6$, b) $Ra=10^7$, c) $Ra=10^8$, d) $Ra=10^9$.

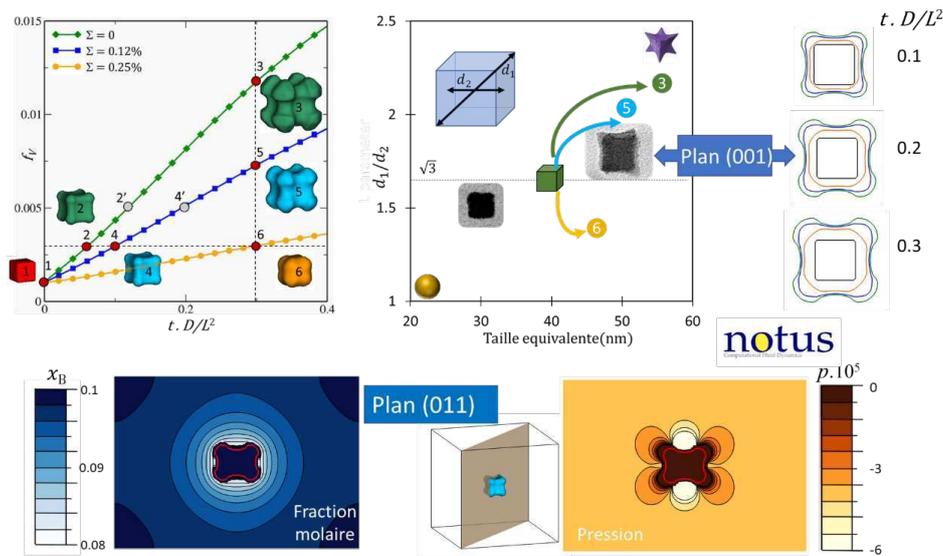
Référence : J. Jansen, S. Glockner, D. Sharma, A. Erriguible, Incremental pressure correction method for subsonic compressible flows, *under final preparation*, 2024.

Contact : Jérôme Jansen jerome.jansen@u-bordeaux.fr

Modélisation numérique du couplage mécano-chimique de la diffusion d'espèces et leur transfert aux interfaces

Une modélisation du transport d'espèces, basée sur l'expression de leur flux intrinsèque exprimés en fonction du potentiel chimique, est développée dans le code parallèle « Notus ». Son originalité tient dans la prise en compte du couplage mécano-chimique du transport des espèces et de leur transfert aux interfaces aussi bien solide/solide, solide/liquide que fluide/fluide et pouvant présenter un important saut de masse volumique. Elle a permis la simulation des processus de dissolution/précipitation sur des systèmes 3D et notamment la précipitation du nitrure de silicium dans la ferrite qui s'effectue dans un champ élastique généré par la transformation elle-même du fait du changement de volume molaire de l'espèce lors de son transfert à l'interface. Les résultats obtenus ont contribué à la compréhension de l'évolution morphologique atypique de ces

nitrides du cube vers une forme de type octopode. La parallélisation du code a permis de simuler des configurations 3D sur plusieurs centaines de processeurs.



Simulation de l'évolution morphologique de précipités initialement cubiques dans une solution solide sursaturée mettant en évidence l'influence du couplage mécano-chimique du transport des espèces dans la matrice et de leur transfert à l'interface. L'évolution du cube en morphologie de type octopode est favorisée par le champ de diffusion ③ ($\Sigma = 0$). Le champ élastique a un effet antagoniste sur cette évolution morphologique. Pour $\Sigma = 0.12\%$, la morphologie ⑤ se rapproche de celle observée expérimentalement dans les plans (001). Pour un champ élastique de plus forte intensité ($\Sigma = 0.25\%$), la morphologie de la particule cubique évolue vers une sphéroïdisation ⑥.

Références :

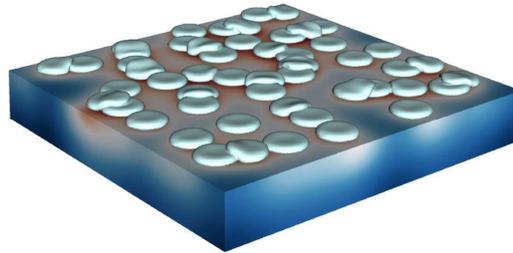
S. Bordère, S. Glockner. Numerical modeling of diffusion-controlled phase transformation using the Darken method: Application to the dissolution/precipitation processes in materials, *Comput. Mater. Sci.*, 2021, 184, p. 109944 (14).
 S. Bordère et al, Morphological and Dimensional Evolution of Nanosized Amorphous Silicon Nitride in α -Fe: Diffusional and Elastic Effects, *Metals* 2024, 14, 442.

Contact : Sylvie Bordere sylvie.bordere@u-bordeaux.fr

Vers un clone numérique du procédé SPS

La projection plasma de suspension (SPS) utilise un jet de plasma pour accélérer et fondre des particules submicroniques en suspension dans un liquide, pour réaliser des revêtements avec des microstructures fines, denses ou en forme de colonnes, aux propriétés supérieures à celles de la projection de poudre classique. Ce procédé présente un grand intérêt pour l'industrie et peut être utilisé pour diverses applications : barrières thermiques pour turbines terrestres et aéronautiques, revêtements anti-usure, biocompatibles pour implants, composants pour piles à combustible, centrales solaires et revêtements antimicrobiens. Mais sa complexité freine son usage industriel, en raison du nombre de paramètres opératoires et de la difficulté à revêtir des pièces aux formes complexes. Maîtriser ce procédé nécessite de comprendre les mécanismes de traitement de la suspension et l'interaction entre les paramètres opératoires, le comportement en vol du matériau et sa microstructure finale. Cependant, les outils de diagnostic en vol sont limités en raison de la petite taille des particules/gouttes. La simulation numérique est l'outil idéal pour accéder à un niveau de compréhension de la formation de la structure, mais nécessite une finesse

de résolution à cause de la très fine taille des particules (nanométrique) et des fortes vitesses et températures du procédé. Les travaux utilisant les moyens du MClA consistent à modéliser et simuler l'impact et la solidification de gouttes de zirconium yttré issues d'une torche à plasma pour étudier la morphologie des étalements, en tenant compte des interactions dynamiques et thermiques entre les gouttes et le substrat. Cette étude vise à pouvoir relier les conditions opératoires du procédé et la structure du revêtement ainsi formé.



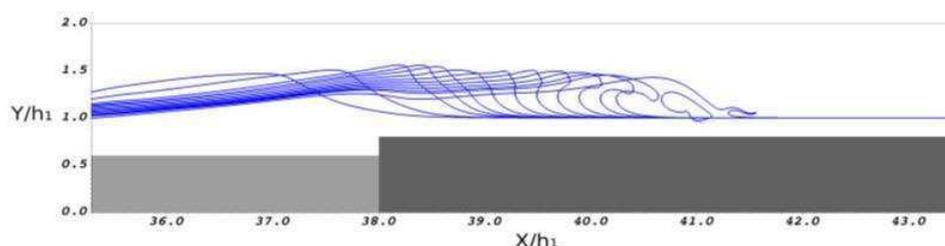
Simulation de l'impact et de la solidification de 52 gouttes de zirconium yttré (diamètre : 1 μ m, vitesse d'impact : 100 m/s et de températures initiales de 3800 K pour les fluides et 523 K pour le substrat) : 29 910 heures de calcul pour 34.56 million de cellules, et 512 processeurs sur Curta (MClA).

Référence : Asaph Palencia, Cédric Le Bot, Stéphane Glockner. Massively parallel multiphase simulation of the impingement and solidification of multiple extremely fine droplets in suspension plasma spraying process. *International Conference on Numerical Methods in Multiphase Flows 5* - July 26-28, 2024, Reykjavik, Iceland

Contacts : Stéphane Glockner glockner@bordeaux-inp.fr ; Cédric Le Bot cedric.lebot@bordeaux-inp.fr

Étude numérique du déferlement des vagues

Les travaux de thèse de Florian Desmons visent à analyser des phénomènes hydrodynamiques complexes à des échelles de temps et d'espace très fines, en surmontant les limites des méthodes numériques actuelles. Ces recherches nécessitent une grande précision numérique et un recours intensif au calcul scientifique. Un des axes principaux a été l'étude du déclenchement du déferlement des vagues, avec une cartographie détaillée des phénomènes. Cela a conduit à définir des critères pour détecter, quantifier, classer et prédire ces événements. Une attention particulière a été portée à la dynamique de surface des vagues et aux phénomènes associés. Par ailleurs, des simulations numériques ont été menées sur les interactions entre vagues et récifs immergés. Ces travaux ont permis d'expliquer la formation de vagues déferlantes massives sur des spots de surf emblématiques comme Teahupoo (Tahiti) et Mavericks (États-Unis), offrant ainsi de nouvelles perspectives sur ces phénomènes naturels. Ces travaux sont actuellement poursuivis dans le cadre de la thèse de M. LARGEN.



Profil de surface libre d'une vague déferlant sur un récif immergé (Desmons and Lubin, 2022).

Références

F. DESMONS, « Étude numérique du déferlement de vagues capillo-gravitaires », thèse de doctorat, Université de Bordeaux, avril 2021, sous la direction de P. Lubin, M. Kazolea (Inria Bordeaux Sud-Ouest).
F. Desmons, P. Lubin, Numerical simulations of waves breaking over a rectangular submerged reef consisting of a double step. Analogies with massive natural wave breaking over abrupt reefs. *Water Waves*, 4, 379–407, 2022.

Contact : Pierre Lubin pierre.lubin@bordeaux-inp.fr

Étude numérique de l'impact de gouttes

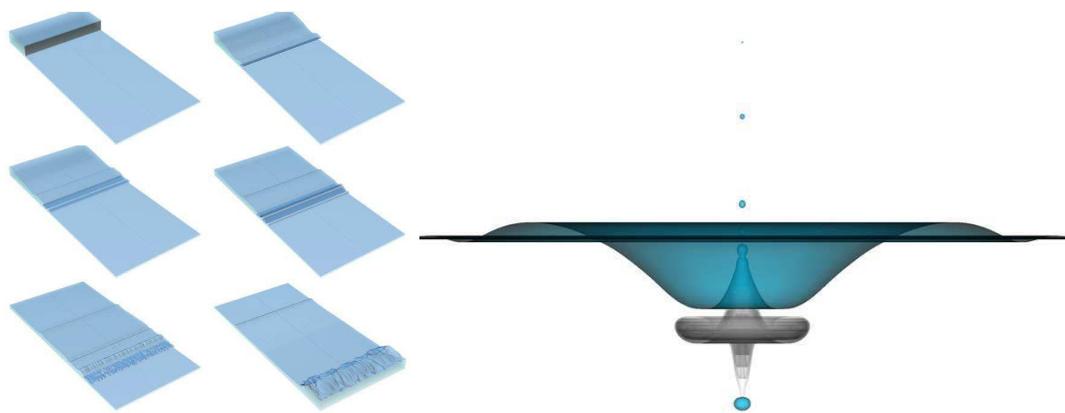
Dans le cadre du stage de MASTER 2 de Florian DESMONS et de la thèse de Félix HENRI, Ces travaux se sont focalisés sur le développement de méthodes numériques robustes, précises et efficaces pour la simulation d'écoulements diphasiques soumis à la gravité et aux effets capillaires. Ces méthodes sont des outils essentiels, tout particulièrement pour les applications faisant intervenir deux phases dont le rapport de masse volumique et de viscosité est grand, ce qui est le cas pour l'air et l'eau (exemple illustré dans la Figure ci-après). Les recherches ont ainsi visé à améliorer la simulation de phénomènes fortement dynamiques comme la chute et l'impact de gouttes de pluie et l'éclatement de bulles sur une surface libre, problèmes notamment complexes du fait des nombreux changements topologiques ainsi que de la prédominance des effets de tension superficielle. Pour ces deux points spécifiques, la précision et la robustesse du suivi de l'interface est indispensable. Pour l'impact de goutte, une campagne de calculs nécessite environ 4 nœuds et 4 jours de temps de calcul.

Références :

F. Henri, « Améliorations des méthodes Level Set pour l'impact de goutte de pluie », thèse de doctorat, Université de Bordeaux, décembre 2021, sous la direction de P. Lubin et M. Coquerelle.

F. Henri, M. Coquerelle, P. Lubin, Geometrical level set reinitialization using closest points method and kink detection for thin filaments, topology changes and two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 448, 110704, 2021.

Florian Desmons, Mathieu Coquerelle. A generalized high-order momentum preserving (HOMP) method in the one-fluid model for incompressible two phase flows with high density ratio. *Journal of Computational Physics*, 2021, 110322.



Simulation de la rupture de barrage 3D et de l'impact d'une goutte de pluie

Contacts : Pierre Lubin pierre.lubin@bordeaux-inp.fr, Mathieu Coquerelle mathieu.coquerelle@bordeaux-inp.fr

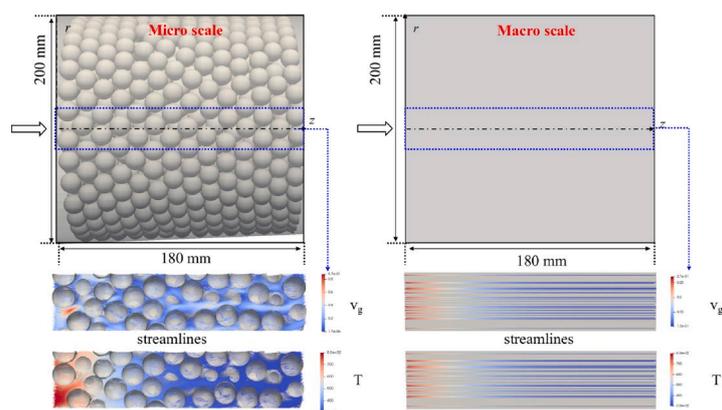
Simulation multiéchelle du stockage d'énergie thermique à haute température

Avec la hausse des coûts de l'énergie et l'importance croissante de la responsabilité sociale des entreprises, l'intérêt pour la récupération et le stockage de chaleur résiduelle à haute température augmente. Le stockage de chaleur sensible dans des lits fixes granulaires se distingue comme une solution économique et apparemment simple pour les systèmes de stockage d'énergie thermique (TES) à haute température. Cependant, les modèles d'ingénierie initialement développés pour les systèmes TES à basse température ont été utilisés pour concevoir cette nouvelle génération de systèmes, sans validation suffisante. Le MCIA a été utilisé pour proposer une méthodologie complète, partant de l'échelle des particules jusqu'au niveau du système, afin de fournir des modèles validés pour la conception de systèmes TES à haute température. Un modèle numérique multi-échelle a été développé pour explorer les transferts de chaleur et de quantité de mouvement dans les lits fixes :

- À l'échelle des particules : Les simulations prennent en compte l'écoulement d'un gaz compressible à haute température entre les particules, couplé à la conduction thermique transitoire à l'intérieur des particules. Les propriétés thermiques et physiques, comme la viscosité du gaz et la conductivité thermique, sont modélisées en fonction de la température.
- À l'échelle macroscopique : Un modèle macroscopique détaillé, se basant sur les méthodes de prise de moyenne volumique, prend en compte les conservations de la masse, de la quantité de mouvement, et de l'énergie des phases gaz et solide. L'enjeu est d'utiliser la simulation multi-échelle pour en déterminer les paramètres effectifs et le valider.

La stratégie multi-échelle a été appliquée à un lit fixe de particules sphériques généré avec le logiciel DEM LIGGGHTS. Les simulations ont été implémentées dans l'outil PATO (<https://pato.ac>), basé sur OpenFoam et distribué en open source par la NASA. Les simulations microscopiques, utilisant typiquement 100 à 1000 cœurs sur des durées de 24h, ont permis de déterminer les paramètres effectifs nécessaires au modèle macroscopique, comme la perméabilité, le coefficient de Forchheimer, les conductivités thermiques effectives et le coefficient de transfert thermique.

Le modèle macroscopique informé reproduit avec précision les champs de température moyenne observés dans le modèle microscopique. Les analyses à l'échelle des pores montrent des écoulements tridimensionnels complexes, avec des flux inverses et transversaux, ainsi qu'un couplage entre les champs de vitesse et de température. Ces phénomènes influencent la répartition des températures dans le fluide et les particules, impactant le coefficient de transfert thermique global. La méthodologie a été validée par des comparaisons avec des données expérimentales disponibles. Cette approche contribue à une meilleure compréhension et à une conception plus précise des systèmes TES à haute température.



Références :

Liu, S., Ahmadi-Senichault, A., Levet, C., Lachaud, J. "Development and validation of a local thermal non-equilibrium model for high-temperature thermal energy storage in packed beds." *Journal of Energy Storage*, 2024. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.109957>

Liu, S., Ahmadi-Senichault, A., Pozzobon, V., Lachaud, J. "Multi-scale investigation of heat and momentum transfer in packed-bed TES systems up to 800 K." *Applied Energy*, 2024. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2024.123285>

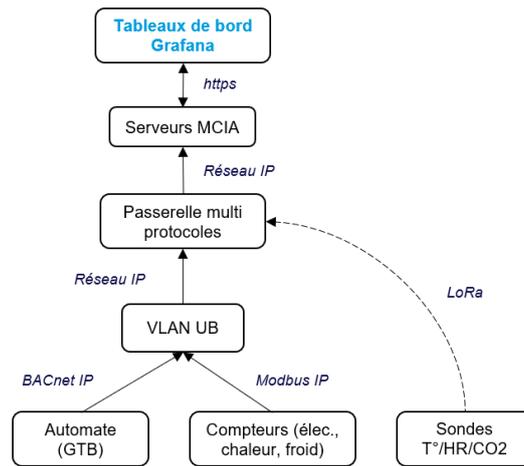
Liu, S., Ahmadi-Senichault, A., Ben-Abdelwahed, A., Yao, H., Lachaud, J. "Experimental investigation and DEM-CFD analysis of Darcy–Forchheimer flows in randomly packed bed systems of wood particles." *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2024. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126229>

Contact : Jean Lachaud, jean.lachaud@u-bordeaux.fr

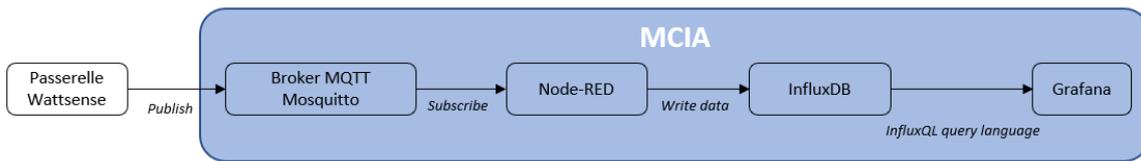
SMARTEES-U

Le projet SMARTEES-U (Suivre, Maîtriser, Agir, Réduire pour la Transition Énergétique et Environnementale des Sites Universitaires de Nouvelle-Aquitaine), financé par la Région Nouvelle Aquitaine dans le cadre de l'équipe commune GP2E avec Nobatek/INEF4, et par le programme ACT porté par l'université de Bordeaux, vise le développement de solutions pour les gestionnaires de sites universitaires pour les accompagner dans le choix des investissements et les mesures à appliquer pour améliorer la performance énergétique des bâtiments en particulier par une meilleure maîtrise du vecteur électrique. Ainsi le projet vise à développer des services basés sur les données mesurées et collectées sur les bâtiments des campus universitaires. L'université de Bordeaux, et plus particulièrement le site de Talence PEIXOTTO, a été retenu comme site pilote pour l'expérimentation des développements réalisés dans le projet.

Dans ce contexte, une infrastructure de communication a été mise en place et hébergée par le MCIA permettant de rendre accessible et exploitable les données collectées à l'ensemble de la communauté universitaire.



Infrastructure de communication mise en place



Flux de données

Contact : Laurent Mora (laurent.mora@u-bordeaux.fr) / Maxime Robillart (maxime.robillart@u-bordeaux.fr)

4.13 Modélisation à l'échelle atomique et cristalochimie (IRCER)

Unité de recherche : Institut de Recherche sur les Céramiques – IRCER UMR 7315
Limoges

Correspondant MCIA : Assil Bouzid

Le groupe de modélisation à l'échelle atomique et cristalochimie (ASM2C) est intégré à l'axe 3 de l'IRCER. Il se compose de 7 membres permanents, 1 CPJ, 3 doctorants et 1 postdoctorant. Les travaux de recherche de l'équipe se concentrent sur la modélisation d'une vaste gamme de matériaux, notamment les matériaux céramiques vitreux, vitrocéramiques, les nanoparticules, les surfaces et interfaces et les matériaux 2D, avec des applications dans l'optique non linéaire, la catalyse (hydrogène), les batteries, et bien d'autres domaines. Notre équipe maîtrise des techniques de modélisation classiques (cristalochimie, champs de force), ab initio (DFT, dynamique moléculaire, chimie quantique) et d'intelligence artificielle. L'objectif de nos recherches est de comprendre la relation entre la structure des matériaux et leurs propriétés, d'améliorer les performances des matériaux céramiques et d'identifier de nouveaux matériaux.

Modélisation d'oxydes complexes

La compréhension des matériaux complexes et l'étude de leurs propriétés physico-chimiques sont des prérequis au développement des matériaux fonctionnels. A ce niveau, la modélisation à l'échelle atomique permet à travers un ensemble de méthodes et d'outils de simulations avancés de contribuer au développement de nouveaux matériaux céramiques et à l'élucidation de leurs propriétés.

Les verres d'oxyde de tellure sont fréquemment étudiés en raison de leurs propriétés physiques distinctives, notamment un indice de réfraction élevé, de bonnes propriétés optiques non linéaires, une constante diélectrique élevée, et une large transmission optique dans le visible et le proche infrarouge, ce qui leur permet d'être utilisés dans une large gamme d'applications. Ces caractéristiques distinctives les rendent utilisables comme dispositifs de commutation optique, amplificateurs optiques, systèmes de conversion de fréquence ascendante et comme hôtes laser. De manière remarquable, les verres à base de TeO_2 présentent une susceptibilité optique non linéaire élevée comparée à d'autres verres d'oxyde, ce qui suscite un intérêt considérable pour cette famille de composés. L'origine de ces propriétés a été attribuée à la paire libre électronique ($5s^2$) des atomes de tellure (IV) et à l'hyperpolarisabilité des ponts Te-O-Te. Malgré le fait que plusieurs études antérieures aient examiné la structure du verre de TeO_2 , l'ordre à courte et moyenne distance dans ce matériau restent sujets à débat. En particulier, le nombre de coordinance de l'atome de tellure dans le verre pur de TeO_2 est un sujet de controverse persistante dans la littérature, nécessitant donc des études supplémentaires pour mieux comprendre les systèmes vitreux à base de TeO_2 .

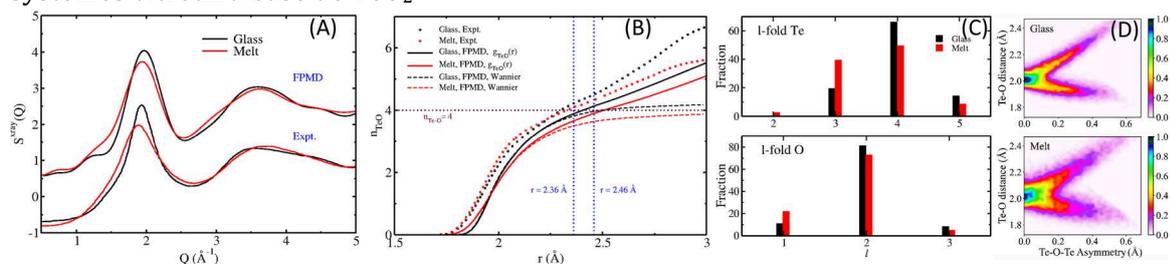


Figure 1: (A) Facteur de structure total rayons X calculé pour le TeO_2 et comparé aux résultats expérimentaux. (B) Évolution du nombre de coordination ($n_{\text{TeO}}(r)$) obtenu par intégration de la $g_{\text{TeO}}(r)$ et à partir des centres de Wannier. (C) Fractions des environnements locaux de Te et O dans le liquide et dans le verre. (D) Évolution de la distance Te-O en fonction de l'asymétrie des ponts Te-O-Te.

Dans le cadre de la thèse de R. Raghvender, nous avons travaillé sur la modélisation de la structure du verre TeO_2 pur ainsi que ces propriétés. Nous avons eu recours à la dynamique moléculaire *ab initio* (FPMD) et nous avons travaillé sur le choix de la fonctionnelle d'échange et de corrélation afin d'obtenir un bon accord avec les résultats expérimentaux pour la structure et la topologie du TeO_2 vitreux et fondu. Nos résultats montrent que seule la FPMD avec une fonctionnelle d'échange et corrélation hybride est capable de donner une description correcte de l'ordre à courte et moyenne portée dans le verre (Fig.1(A)). Sur la base d'une décomposition de la structure électronique basée sur les fonctions de Wannier, nous avons montré que le nombre de coordinance du tellure (n_{TeO}) est d'environ 4 et qu'il existe une fraction non négligeable d'atomes d'oxygène non pontants dans les phases amorphe et liquide (Fig.1(B,C)). Une analyse de la distribution de la charge atomique a montré qu'une augmentation de l'asymétrie des ponts Te-O-Te est fortement corrélée à la charge de l'atome d'oxygène. En outre, nous avons constaté que l'asymétrie des ponts d'oxygène augmente avec la température, ce qui renforce le désordre à courte portée dans le TeO_2 fondu et, par conséquent, diminue la coordinance des atomes de tellures (Fig.1(D)). Ces résultats fournissent une image beaucoup plus fine de la connectivité du réseau TeO_2 et de son évolution en fonction de la température.

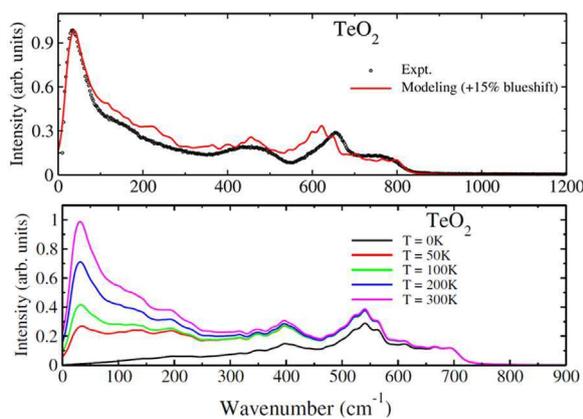


Figure 2: Spectres Raman calculés sur le verre de TeO_2 comparés aux résultats expérimentaux. Spectres Raman simulés du TeO_2 à différentes températures.

En parallèle de l'étude structurale des verres, nous nous focalisons sur leurs propriétés et en particulier sur les propriétés vibrationnelles et d'optique non-linéaire. Dans ce cadre, nous avons développé en collaboration avec Dr. E. Roginskii (Ioffe, Univ. St. Petersburg, Russie) un workflow de calcul qui combine la DFT (théorie de réponse linéaire) et la méthode des différences finies et qui permet de calculer des spectres Raman sur des grands modèles atomistiques périodiques de verres d'oxyde issus des simulations de dynamique moléculaire. En particulier, le spectre Raman calculé du TeO_2 amorphe est en excellent accord avec les données expérimentales (Fig.2). Un pic de forte intensité dans la gamme des basses fréquences du spectre Raman est observé et attribué au pic Boson. D'après l'analyse à l'échelle atomique des modes propres de vibrations, ce pic est attribué aux vibrations collectives de nanoclusters formés par les unités structurales du verre. Cette technique a été également appliquée avec succès pour étudier des spectres Raman des verres de TeO_2 modifiés et peut être facilement appliquée à d'autres systèmes amorphes. Enfin, afin de calculer les propriétés optiques non-linéaires des systèmes amorphes, nous avons également développé un workflow de calcul *ab initio* qui combine la théorie de réponse linéaire et la méthode de différence finie. Cette technique a été appliquée dans le cas des systèmes $(\text{TeO}_2)_x-(\text{Ti}_2\text{O})_y-(\text{TiO}_2)_{1-x-y}$ vitreux où nous avons obtenu un indice de réfraction calculé et une susceptibilité non-linéaire du troisième ordre (χ^3) en très bon accord avec les résultats expérimentaux.

Type de calcul : calcul parallèle MPI avec 4 à 6 nœuds avec le code CP2K. Plusieurs dizaines de calculs pour chaque système étudié. Le coût total de ces calculs est de l'ordre de plusieurs millions d'heures CPU (MCIA + GENCI).

Références :

- [1] Raghvender et al. Phys. Rev. B **106**, 174201 (2022). Structure of amorphous TeO₂ revisited: A hybrid functional ab initio molecular dynamics study. [Lien DOI](#)
- [2] Roginskii et al. Phys. Status Solidi RRL, **17**, 2200505 (2023). Ab Initio Study of the Raman Spectra of Amorphous Oxides: Insights into the Boson Peak Nature in Glassy TeO₂. [Lien DOI](#)
- [3] Page de couverture de Journal [Lien page](#)
- [4] Roginskii et al. Physica B: Condensed Matter, Accepted (2024). Nonlinear optical properties of glassy TeO₂: ab initio modeling of χ^3 and Hyper Raman spectra. [Lien DOI](#)

Contacts : Assil Bouzid, Sylvian Cadars, David Hamani, Olivier Noguera, Philippe Thomas et Olivier Masson.

Exploration d'une nouvelle phase cristalline AsTe₃ à propriétés thermoélectriques

Dans un contexte de demande énergétique mondiale en constante augmentation et d'accélération du réchauffement climatique, les dispositifs permettant de favoriser les pertes d'énergie thermique pour produire de l'électricité font partie des solutions technologiques qu'il faut urgemment combiner aux changements de pratiques nécessaires pour réduire notre impact environnemental. Les matériaux thermoélectriques ont par conséquent fait l'objet d'une grande attention au cours des dernières décennies, ce qui a conduit à des progrès significatifs dans les performances des matériaux et la compréhension des relations structure-propriété, et chaque nouveau matériau émergeant dans ce domaine offre de nouvelles opportunités pour améliorer l'un et l'autre de ces aspects. Très récemment, un matériau cristallin métastable à valence mixte de composition AsTe₃, identifié pour la première fois en 2018 [1], a finalement pu être obtenu dans une phase pure et entièrement cristalline par une voie de synthèse non conventionnelle impliquant une cristallisation congruente à partir du verre AsTe₃ parent. Les travaux décrivant cette méthode de synthèse, le matériau résultant et ses propriétés électriques et thermoélectriques, qui ont établi son potentiel pour les applications thermoélectriques, ont été publiés dans le Journal of Alloys and Compounds en 2004 [2]. Dans cet article, cependant, la structure cristalline atomique du matériau n'a pas été décrite en détail, car, à ce jour, elle n'a pas pu être résolue par des méthodes de diffraction des rayons X ou d'autres méthodes, probablement en raison de sa complexité intrinsèque (faible symétrie, éventuellement de grandes cellules), de la présence de désordre structural, de tailles de particules relativement petites et d'une faible stabilité sous un faisceau d'électrons.

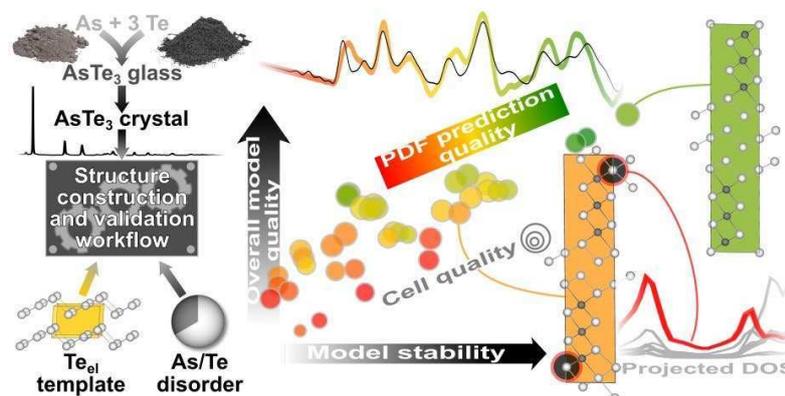


Figure.1 Résumé graphique de l'approche ayant conduit à la description à l'échelle locale de la phase cristalline à valence mixte de composition AsTe₃ (article soumis à Phys. Chem. Chem. Phys. en Juillet 2024).

Dans un article centré sur la modélisation soumis en Juillet 2024 à Phys. Chem. Chem. Phys [3], nous décrivons un protocole semi-automatisé conçu pour construire et évaluer des modèles cristallins structuraux d'AsTe₃ avec une modélisation à l'échelle atomique, d'un point de vue local. Un flux de travail en plusieurs étapes utilisant une plate-forme moderne à haut débit nous a permis de construire des modèles basés sur une superstructure dérivée du tellure élémentaire (Te_{el}), qui sont explorés du point de vue du désordre chimique As/Te, et évalués via une approche multicritère robuste intégrant leur compatibilité avec les données expérimentales de diffraction des rayons X et de diffusion totale et les stabilités prédites avec différents niveaux de DFT. Bien qu'ils ne puissent pas individuellement englober toute la complexité structurale du matériau cristallin AsTe₃, les modèles de plus haute qualité fournissent des descriptions satisfaisantes de ses structures locale et électronique, et partagent une caractéristique structurale commune importante : ils sont tous composés d'une inter-croissance de domaines Te et As₂Te₃ purs de tailles subnanométriques, qui correspondent aux environnements structuraux locaux des phases Te_{el} et α -As₂Te₃, respectivement. De plus, nous avons postulé que la diversité structurale parmi les modèles de stabilité et de qualité prédites similaires (selon la procédure d'évaluation mentionnée plus haut) est représentative du désordre structural local dans AsTe₃, et établi que les défauts structuraux associés peuvent être liés aux propriétés électroniques. La complexité, à une échelle de longueur aussi petite, entre les domaines d'inter-croissance de type Te_{el} et de type α -As₂Te₃ est d'autant plus intéressante à la lumière de la récente découverte [4] selon laquelle les interfaces entre de tels domaines de taille micrométrique ont un fort impact bénéfique sur les performances thermoélectriques du Te_{el} dopé avec As et d'autres cations M³⁺.

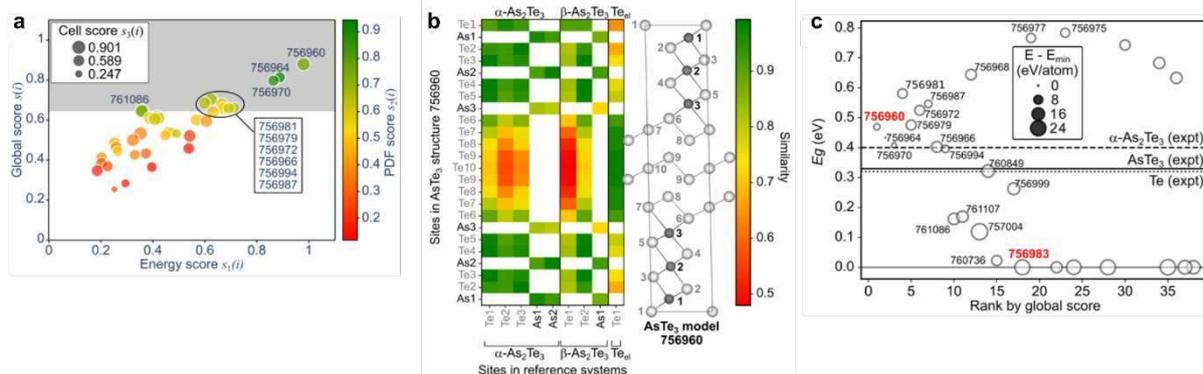


Figure.2 (a) évaluation multicritère de modèles AsTe₃. (b) Mesures de similarités entre les environnements locaux du meilleur modèle de AsTe₃ et ceux de systèmes cristallins connus : α -, β -As₂Te₃, Te_{el}. (c) Largeurs de bande interdite électronique prédites à partir des meilleurs modèles de AsTe₃.

Type de calcul : calcul parallèle MPI avec 1 à 2 nœuds avec le code VASP. Plusieurs centaines de calculs avec coût total de l'ordre du million d'heures CPU (MCIA + GENCI).

Références :

- [1] Vaney, J.-B.; Carreaud, J.; Piarristeguy, A.; Morin, C.; Delaizir, G.; Viennois, R.; Colas, M.; Cornette, J.; Alleno, E.; Monnier, J.; Bigot, M.; Gonçalves, A. P.; Branco Lopes, E.; Cuello, G. J.; Nassif, V.; Candolfi, C.; Lenoir, B.; Pradel, A. Stabilization of Metastable Thermoelectric Crystalline Phases by Tuning the Glass Composition in the Cu–As–Te System. *Inorg. Chem.* 2018, 57 (2), 754–767.
- [2] Vaney, J.-B.; Morin, C.; Carreaud, J.; Candolfi, C.; Piarristeguy, A.; Bigot, M.; Monnier, J.; Pradel, A.; Nassif, V.; Cuello, G.; Levinsky, P.; Lenoir, B.; Cadars, S.; Bouzid, A.; Masson, O.; Laval, J.-P.; Cornette, J.; Colas, M.; Alleno, E.; Delaizir, G. AsTe₃: A Novel Crystalline Semiconductor with Ultralow Thermal Conductivity Obtained by Congruent Crystallization from Parent Glass. *Journal of Alloys and Compounds* 2024, 1004, 175918.
- [3] Cadars, S.; Masson, E.; Laval, J.-P.; Shuaib, F. E.; Piarristeguy, A.; Delaizir, G.; Bouzid, A. Insights into the Structural Complexity and Local Disorder of Crystalline AsTe₃ from Semi-Automated First-Principles Modelling. submitted to *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2024.
- [4] An D. et al., *Nat. Commun.*, 2024, 15, 3177

Contacts : Sylvian Cadars, Olivier Masson et Assil Bouzid.

Modélisation de nanoparticules d'oxydes métalliques

Les nanocristaux d'oxydes métalliques suscitent un fort intérêt scientifique du fait des propriétés uniques qu'ils présentent par rapport aux matériaux conventionnels de dimensions micrométriques [1]. Lorsque la taille des particules diminue en deçà de quelques nanomètres, le nombre d'atomes de surface devient similaire voire supérieur à celui de cœur, ce qui modifie de façon significative la structure des particules vis-à-vis de celle du cristal périodique. Cette particularité qui caractérise les nanoparticules de faible taille est à l'origine d'une modification notable de la réactivité chimique des particules, au travers notamment de l'augmentation de la surface spécifique. En plus du phénomène de confinement quantique [2], les nanoparticules de faibles tailles sont alors susceptibles de développer des propriétés physico-chimiques différentes de celles du matériau massif et trouvent des applications dans des domaines aussi variés que la photocatalyse, l'électronique, l'imagerie, le médical, l'énergie et l'environnement.

Bien que d'un intérêt crucial pour la compréhension des relations taille / structure / propriétés, les modifications structurales qui caractérisent les nanoparticules de faibles tailles sont encore aujourd'hui mal connues, notamment parce qu'aucune technique expérimentale ne permet d'obtenir des informations structurales univoques. Le recours à la simulation numérique à l'échelle atomique, en complément des techniques de caractérisation, demeure donc indispensable afin d'apporter l'information manquante.

L'étude présentée ici, s'inscrit de façon plus large dans la thématique de recherche « synthèse, propriétés structurales et électroniques de nanoparticules d'oxydes métalliques (ZrO_2 , SnO_2 , TiO_2 ...) » du groupe « organisation structurale multi-échelle des matériaux » de l'IRCER qui cherche à améliorer les connaissances sur les relations taille/structure/propriétés de ces nano-objets [3-6].

Dans le cadre de la thèse de R. Kumar [7,8], nous avons réalisé une étude par modélisation numérique de nanoparticules de ZrO_2 de diamètre inférieur à 3 nm. Cette étude nous a permis de générer, par dynamique moléculaire ab-initio (FPMD), des modèles structuraux physiquement réalistes de nanoparticules de zircon de quelques nanomètres de diamètre (nanoclusters $(ZrO_2)_n$, n allant de quelques dizaines à un peu plus d'une centaine d'unités). Les modèles générés ont été employés afin d'étudier l'effet de la taille ainsi que du taux de passivation de la surface (avec un taux variable de molécules d'eau chimisorbées à la surface des nanoclusters $(ZrO_2)_n$) sur les propriétés structurales et électroniques de ces nanoparticules. Cette démarche tient compte du fait que les nanoparticules réelles peuvent difficilement être considérées comme des objets isolés dans le vide avec une composition chimiquement pure. Les méthodes de synthèse engendrent généralement la présence d'impuretés principalement localisées à la surface des particules, lesquelles induisent des effets plus ou moins prononcés sur la structure des nanoparticules [3].

La qualité des modèles structuraux, ainsi générés, a été testée à l'aune des nombreuses données expérimentales obtenues à l'IRCER, en particulier les fonctions de distributions de paires atomiques (PDF) mesurées par diffusion totale des rayons X sur des échantillons synthétisés par voie sol-gel non aqueuse [4-6]. Ces modèles ont par la suite permis de mettre en exergue l'effet de la taille (Fig. 1(A)) et de l'état de passivation (Fig. 1(B,C)) des nanoparticules de ZrO_2 sur leurs propriétés structurales et électroniques. L'analyse des PDF totales ainsi que les PDFs partielles calculées nous a permis de montrer que pour un taux de passivation élevé, les PDFs calculées présentent un meilleur accord (à la fois pour les hauteurs de pics et leurs positions) avec celles obtenues pour l'échantillon synthétisé en milieu aqueux. Cela montre clairement l'effet stabilisateur des impuretés sur la structure de ces nanoparticules. Une analyse plus fine nous a permis de découpler les contributions, à la PDF, des atomes de cœur de celle des atomes de surfaces de ces nanoparticules. Il a été montré que les atomes de cœur adoptent un arrangement similaire à la phase cubique (Zr

majoritairement en coordinance 7) tandis que les atomes de surface ont un arrangement proche de la phase monoclinique (Zr majoritairement en coordinance mixte 5 et 6).

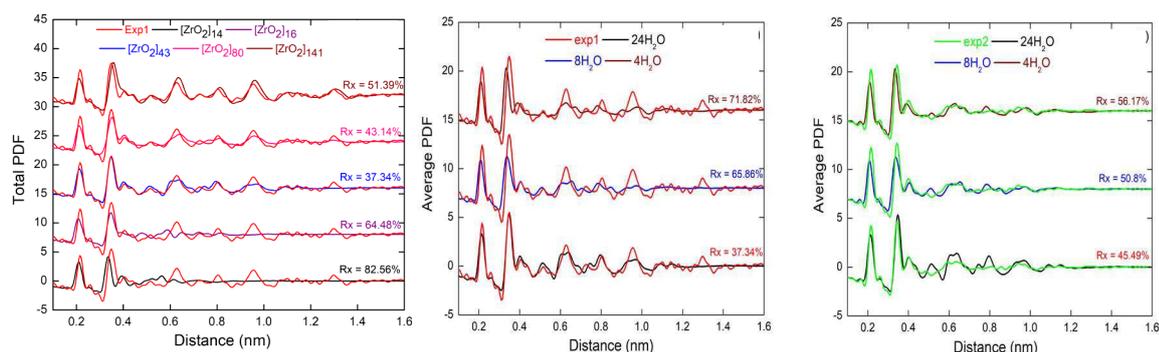


Figure 1 : PDFs calculées pour des nanoclusters de différentes tailles (A), pour différents taux de passivation de surface (B, C) comparées à la PDF expérimentale

Les densités d'états totales (TDOS) et partielles (PDOS) des nanoparticules de ZrO_2 étudiées ont été calculées, en employant deux fonctionnelles d'échange et de corrélation : PBE et la fonctionnelle hybride PBE0. Cette fonctionnelle hybride a permis, dans le cas des systèmes périodiques, d'obtenir une valeur de la largeur de la bande interdite (gap) calculée, en bon accord avec les données expérimentales. La figure 2 montre l'évolution de l'écart d'énergie du gap pour une nanoparticule (NP) par rapport à celle calculée pour le système périodique (bulk) $\Delta E_g = E_g(NP) - E_g(bulk)$ pour les différentes tailles et taux de stabilisation de surface des nanoparticules étudiées. Un effet de confinement quantique prononcé a été montré dans le cas des nanoparticules de ZrO_2 .

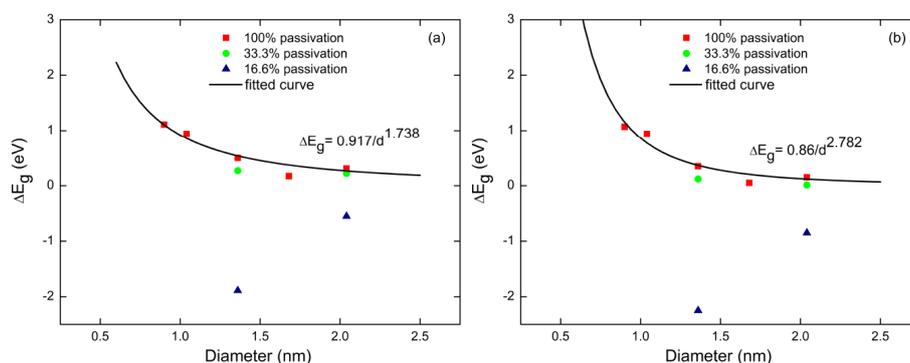


Figure 2 : Evolution de la largeur de la bande interdite $\Delta E_g = E_g(NP) - E_g(bulk)$ calculée utilisant l'approximation d'échange et de corrélation PBE (A) et PBE0 (B) en fonction de la taille et du taux de passivation de la surface des nanoparticules. Les courbes noires représentent un fit des valeurs obtenues utilisant la relation $\Delta E_g = \frac{\beta}{d^\alpha}$.

Type de calcul : calcul parallèle MPI avec 4 à 6 nœuds avec le code CP2K. Plusieurs dizaines de calculs pour chaque système étudié. Le coût total de ces calculs est de l'ordre de plusieurs millions d'heures CPU (MCIA + GENCI).

Références :

- [1] E. Roduner, Size matters: why nanomaterials are different, *Chem. Soc. Rev.*, vol. 35, no 7, p. 583-592, juin 2006.
- [2] H. Dosch, Some general aspects of confinement in nanomaterials, *Appl. Surf. Sci.*, vol. 182, no 3, p. 192-195, oct. 2001.
- [3] Grena R., Masson O., Portal L., Remondiere F., Berghout A., Jouin J., Thomas P., Stabilization Effect of Surface Impurities on the Structure of Ultrasmall ZrO_2 Nanoparticles: An Ab-Initio Study *Journal of Physical Chemistry C* 2015, 119, 27, 15618-15626
- [4] Gambe J., Jouin J., Remondiere F., Thomas P., Masson O., Solvent effect in the nonaqueous synthesis of ZrO_2 nanoparticles under alkaline conditions, *Journal of Materials Science* 2019, 55, 7, 2802-2814

[5] Gambe J., Remondiere F., Jouin J., Portal L., Thomas P., Masson O., Detrimental Effect and Neutralization of in Situ Produced Water on Zirconia Nanoparticles Obtained by a Nonaqueous Sol-Gel Method, *Inorganic Chemistry* 2019, 58, 22, 15175-15188

[6] Lemarchand A., Remondiere F., Jouin J., Thomas P., Masson O., Crystallization Pathway of Size-Controlled SnO₂ Nanoparticles Synthesized via a Nonaqueous Sol-Gel Route, *Crystal Growth and Design* 2020, 20, 2, 1110-1118

[7] Ab-initio study of the properties of metal oxide nanoparticles, C'Nano The Nanoscience Meeting C'NANO 2023 , Poitiers 15 au 17 mars 2023.

[8] Ab-initio study of the properties of metal oxide nanoparticles, International Symposium on Inorganic and Environmental Materials ISIEM 2023 , Montpellier du 19 au 23 juin 2023.

Contacts : Abid Berghout, Assil Bouzid, Philippe Thomas et Olivier Masson.

4.14 Physique Computationnelle (LOMA)

unité de recherche : Laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine (LOMA), Bordeaux

correspondant : Juho Lintuvuori

Les recherches au sein du laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine (LOMA) se concentrent sur la compréhension des propriétés physiques fondamentales des matériaux, selon des approches expérimentales, théoriques et numériques. Plus précisément, le laboratoire développe des axes de recherche dans les domaines de la matière condensée, matière molle et biophysique, ainsi que de la photonique. Des simulations numériques sont présentes dans chacun de ces domaines. Parmi les exemples récents, où les ressources du MCIA ont été utilisées, on peut citer les simulations de Monte Carlo de matériaux magnétiques, le mouvement brownien dans des géométries confinées, ainsi que les simulations hydrodynamiques de fluides colloïdaux hors équilibre. Ci-dessous, un exemple plus détaillé est fourni pour chacun de ces domaines.

Magnétisme Frustré (Ludovic Jaubert ; ludovic.jaubert@u-bordeaux.fr)

La thématique de Magnétisme frustré du groupe Théorie de la Matière Condensée du LOMA étudie les réseaux de spins avec interactions en compétition (frustration) qui empêchent, ou tout du moins gênent fortement, l'établissement d'un ordre magnétique à longue portée. Nous faisons principalement des simulations Monte Carlo pour reproduire la physique de ces systèmes à très basse température (typiquement de l'ordre du Kelvin ou en-dessous). Le challenge principal est la bonne thermalisation des simulations ; pour cela nous utilisons l'algorithme de "parallel tempering" qui nécessite des simulations parallèles.

Fractons dans les composés pyrochlores de terre rare

Les fractons sont des excitations topologiques immobiles de matériaux quantiques exotiques, avec des applications potentielles pour stocker des informations dans des ordinateurs quantiques. Cependant, un obstacle pour combler le fossé entre la théorie et les expériences est la complexité des modèles nécessaires pour les stabiliser. Nous avons proposé un modèle sur le réseau pyrochlore, avec des interactions réalistes proches de celles connues pour décrire le composé de terre rare $\text{Ba}_3\text{Yb}_2\text{Zn}_5\text{O}_{11}$, et avons montré que ce modèle peut être expliqué comme une forme artificielle d'électromagnétisme appelée théorie de jauge $U(1)$ de rang 2, qui est connue pour héberger des fractons. $\text{Ba}_3\text{Yb}_2\text{Zn}_5\text{O}_{11}$ n'est pas une solution parfaite, mais nous avons bon espoir que la pression chimique ou physique pourrait être suffisante pour induire les propriétés requises. La diffusion des neutrons pourrait alors être utilisée pour détecter des singularités caractéristiques dans le facteur de structure, ce qui confirmerait indirectement la présence de fractons.

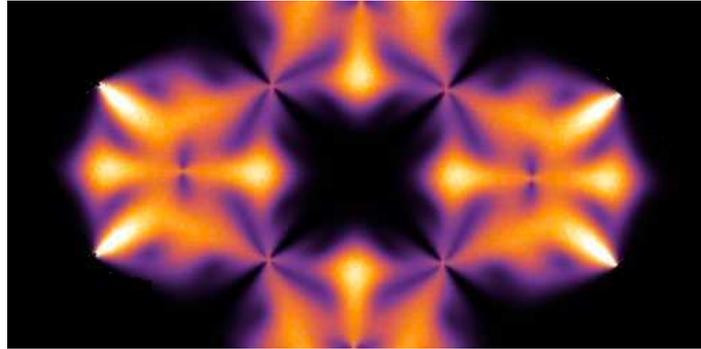


Figure 1 : simulations du facteur de structure de notre modèle de théorie de jauge $U(1)$ de rang 2, avec ses singularités à quatre branches.

Toutes les simulations de ce projet ont été réalisées sur CURTA du MCIA (sur la queue “compute”), avec deux types de calculs : soit des calculs courts (quelques heures) sur une centaine de processeurs en parallèle, soit des calculs longs (quelques jours) sur typiquement 4 ou 5 processeurs en parallèle. Ces simulations Monte Carlo requièrent peu de mémoire (typiquement 500 à 800 Mo par processeur).

[1] H. Yan, O. Benton, L.D.C. Jaubert & N. Shannon, Rank-2 $U(1)$ spin liquid on the breathing pyrochlore lattice, *Physical Review Letters* 124, 127203 (2020), mise en avant dans *Physics* 13, s40 (2020)

Mouvement brownien confiné (Élodie Millan, Juliette Lacherez, Maxime Lavaud, Yacine Amarouchene, David Dean, Thomas Guerin, Thomas Salez)

Le mouvement brownien correspond au déplacement aléatoire de particules microscopiques immergées dans un fluide. Grâce aux travaux d’Einstein et à ses successeurs, il est généralement possible de décrire le déplacement d’une particule brownienne comme un processus gaussien. La situation diffère lorsque la particule est confinée à proximité d’une paroi. Dans ce cas, le déplacement de la particule ralentit considérablement en raison de la friction du fluide entre la paroi et la particule. Cette modification locale de la mobilité engendre l’apparition d’effets non-gaussiens, difficiles à observer à tout temps. On a alors développé des simulations numériques optimisées et parallélisées sur le cluster CURTA afin d’étudier, à grande échelle, le mouvement brownien confiné entre des parois rigides. Ces travaux ont permis l’exploration des effets non-gaussiens [1, 2, 3] pour des temps longs, et de confirmer les prédictions théoriques.

Un autre exemple de confinement des effets sur le mouvement brownien est fourni par une étude en cours montrant l’amélioration de la diffusion à long terme d’un colloïde dans un piège périodique, grâce au couplage hydrodynamique avec un mode élastique [4] (Figure 2).

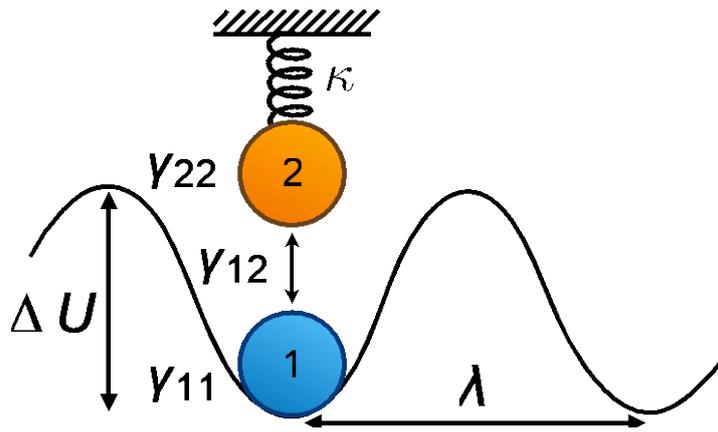


Figure 2.

Dans de nombreux systèmes physiques, les degrés de liberté sont couplés via des interactions hydrodynamiques, même en l'absence d'interactions énergétiques directes. Un exemple particulièrement important est la diffusion de colloïdes browniens en confinement élastique. Souvent, la frontière élastique est relativement rigide, ce qui signifie que son mouvement est rapide et de faible amplitude, rendant sa détection difficile expérimentalement. Ici, nous proposons un modèle jouet minimal montrant comment l'effet du couplage hydrodynamique d'une frontière souple à un traceur colloïdal peut être détecté par une modification de la constante de diffusion à long terme du colloïde en présence d'un potentiel périodique. Remarquablement, cela signifie que les effets des fluctuations à très courtes échelles de temps et de longueur deviennent mesurables dans un dispositif expérimental avec une résolution temporelle et spatiale faible. Nous montrons rigoureusement que la constante de diffusion à long terme de la particule traceuse dans ce modèle augmente lorsque la rigidité de la surface diminue.

Ces résultats théoriques sont confirmés par des simulations numériques réalisées sur le cluster CURTA.

[1] Élodie Millan. *Simulations numériques du mouvement brownien confiné*. Thèse, Université de Bordeaux, avril 2024.

[2] Élodie Millan, Maxime Lavaud, Thomas Amarouchene, et Yacine Salez. *Non-Gaussian diffusion near surfaces*. *The European Physical Journal E*, 46:24, 2023.

[3] Arthur Alexandre, Maxime Lavaud, Nicolas Fares, Élodie Millan, Yann Louyer, Thomas Salez, Yacine Amarouchene, Thomas Guérin, et David S. Dean. *Non-Gaussian diffusion near surfaces*. *Physical Review Letters*, 2023.

[4] *Enhanced long-term diffusion of a colloid in a periodic trap by hydrodynamic coupling to an elastic mode*. Juliette Lacherez, Maxime Lavaud, Yacine Amarouchene, David Dean, Thomas Salez; in preparation.

Simulations hydrodynamiques de rotateurs inertiels (Z. Shen, J. Lintuvuori)

Dans les systèmes liquides, les interactions hydrodynamiques (liées au mouvement des fluides) connectent entre elles les particules en mouvement. Dans les matériaux actifs, ces interactions jouent un rôle crucial dans la formation d'états instables : chaque particule adapte son comportement aux courants générés par ses voisines.

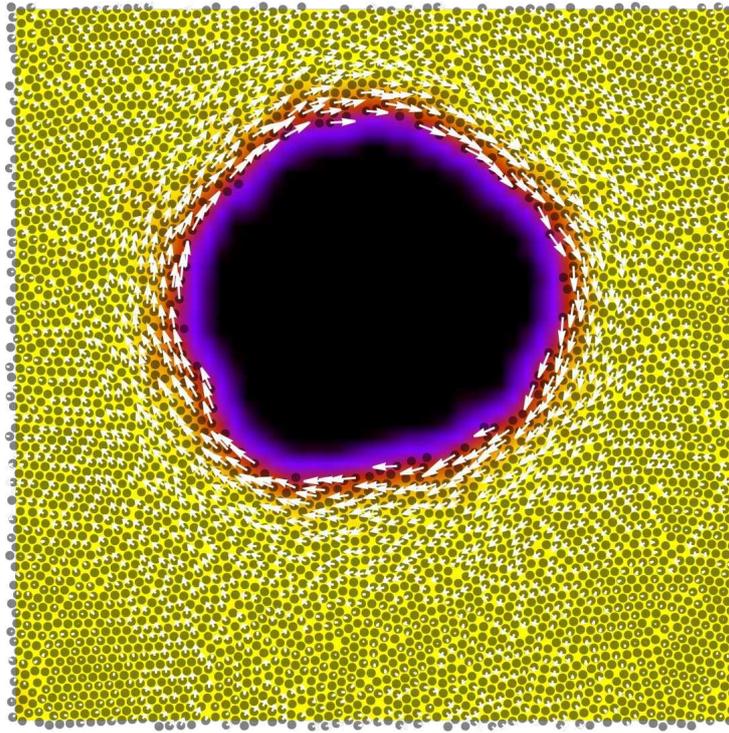


Figure 3. Les particules en rotation créent un flux tourbillonnaire à grande échelle, qui stabilise une cavité grâce à une force de portance active [2].

À faible nombre de Reynolds, qui correspond aux particules en mouvement lent dans un fluide, les interactions hydrodynamiques sur une particule dépendent uniquement des vitesses des autres particules. À des nombres de Reynolds plus élevés, lorsque les particules se déplacent plus rapidement, une force supplémentaire, appelée force de portance, peut apparaître. Cette force dépend non seulement de l'écoulement collectif du fluide, mais aussi de la vitesse de la particule elle-même.

Nous avons exploré ce couplage à l'aide d'un système modèle de rotateurs simples [1, 2]. Les simulations montrent que, pour des spinners entraînés par un couple et sédimentés à une paroi sans glissement, les interactions hydrodynamiques à des nombres de Reynolds finis peuvent provoquer une cristallisation non uniforme et dépendante de la concentration. À des concentrations semi-diluées, une formation rapide d'une structure hexagonale uniforme dans la monocouche de spinners est observée. Nous attribuons cela aux interactions hydrodynamiques répulsives induites par le flux secondaire des particules en rotation. Une augmentation de la couverture de surface entraîne une transition vers un état avec deux densités de spinners coexistantes [1].

En étudiant une couche unique de rotateurs sans paroi [2], nous avons mis en évidence une instabilité remarquable : une suspension initialement homogène se scinde en zones denses en particules et zones sans particules (Figure 3). La région sans particules correspond à un vortex de fluide, généré par un courant de rotateurs situé en périphérie. Nos simulations montrent que cette instabilité résulte d'une force de portance hydrodynamique, issue d'une boucle de rétroaction positive entre la vitesse des particules et les écoulements collectifs du fluide. Ces résultats offrent une perspective nouvelle sur les interactions hydrodynamiques collectives et introduisent le

concept de *force de portance active*, une interaction qui transcende les comportements simples observés à des nombres de Reynolds très bas.

Les simulations ont été effectuées exclusivement sur le cluster Curta. Le code utilise l'algorithme Lattice Boltzmann (LBM) parallélisé avec MPI. Une simulation typique a mobilisé 64 processeurs pendant 48 heures.

[1] Two-phase crystallisation in a carpet of inertial spinners Z. Shen and J. S. Lintuvuori *Physical Review Letters* **125**, 228002 (2020). Highlighted as a cover article of the issue 22.

[2] Collective Flows Drive Cavitation in Spinner Monolayers Z. Shen and J. S. Lintuvuori *Physical Review Letters* **130**, 188202 (2023). Highlighted as a cover article of the issue 18.

4.15 Physique du littoral (EPOC)

unité de recherche : UMR 5805 EPOC, physique du littoral

correspondants : Aldo Sottolichio et Vincent Marieu

L'UMR 5805 EPOC travaille sur les sciences de l'environnement. C'est une unité très pluridisciplinaire avec des thèmes de recherche portant sur la sédimentologie, la géophysique, la paléoclimatologie, la chimie de l'environnement, l'écotoxicologie aquatique, l'écologie, etc. L'équipe METHYS se concentre sur la modélisation, la télédétection et la mesure in-situ pour l'étude de la physique du littoral, avec un axe principal portant sur les environnements dominés par la houle (plages sableuses), un autre sur les environnements dominés par la marée (estuaires et lagunes) et deux axes transverses. Les disciplines étudiées sont l'hydrodynamique, le transport sédimentaire et la morphodynamique à des échelles spatiales allant de la ride sableuse jusqu'au trait de côte et temporelles allant de la turbulence liée aux vagues jusqu'aux variations climatiques à l'échelle de plusieurs décennies. Le MCIA a été essentiellement utilisé pour ses ressources de stockage avec IRODS et pour son supercalculateur Curta.

Étude de la dynamique des dunes littorales

Ces travaux ont été initiés avec les projets ANR CHIPO puis ANR SONO portés par Bruno Castelle et sont actuellement poursuivis dans le cadre d'autres projets en collaboration avec le BRGM et l'ONF. Les dunes littorales sont des environnements riches et complexes, dont l'équilibre est fragile, et qui font office de tampon entre l'océan et l'arrière-pays. L'objectif est d'améliorer notre connaissance du fonctionnement des dunes, en particulier dans un contexte d'érosion chronique, et d'apporter aux gestionnaires des clés pour leur gestion. L'essentiel des travaux réalisés jusqu'ici a porté sur l'interaction entre la dynamique sédimentaire de la dune et sa végétation. Ces travaux ont été pour une grande part réalisés dans le cadre du doctorat de Quentin Laporte-Fauret [1, 2, 3, 4]. Dans le cadre de ce travail, le MCIA a été utilisé comme une ressource de stockage partagée par l'intermédiaire du système IRODS, pour des modèles 3D de la dune réalisés par photogrammétrie (Figure 1). Le comité des utilisateurs du MCIA a consenti à nous permettre d'utiliser 30 To de stockage partagé qui sont encore utilisés pour la suite du projet. Les travaux à venir dans ce domaine vont également porter sur de la modélisation pour laquelle le mésocentre va certainement être utilisé, notamment pour une étude paramétrique permettant d'optimiser les paramètres clé de l'évolutions de dunes littorales.

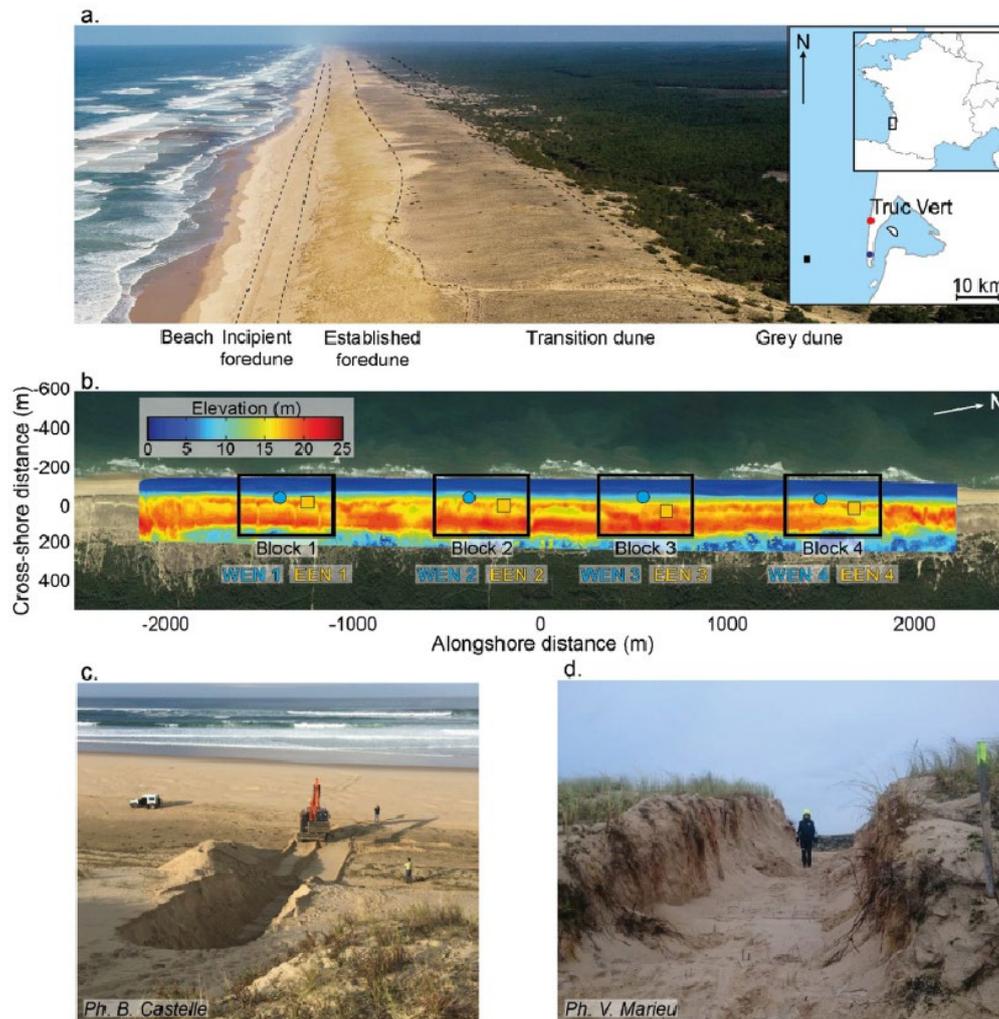


Figure 15. Présentation du dispositif expérimental de remobilisation des dunes, avec (a) une photo drone de la dune littorale au Truc Vert (Lège Cap-Ferret), (b) un modèle numérique de terrain des 4 km de dune réalisé par photogrammétrie drone montrant la position des 4 blocs expérimentaux, (c) des travaux pour réaliser une brèche dans l'avant-dune et (d) le résultat d'une des brèches au sommet de la dune. Figure tirée de [5].

Étude de l'hydrodynamique et du transport de microplastiques dans les estuaires

Durant la période de vie de Curta, l'équipe METHYS a beaucoup utilisé le supercalculateur pour réaliser des simulations d'hydrodynamique et de transport sédimentaire avec le code Open TELEMAC. Ce dernier est un code éléments finis pour la simulation numérique des écoulements à surface libre. Dans l'équipe il est généralement utilisé en 3D, et souvent couplés aux modules de propagation des vagues TOMAWAC et de transport sédimentaire GAIA. En général il s'agit de caractériser l'écoulement dans des embouchures tidales (estuaires de l'Atlantique sur les côtes françaises et brésiliennes). Le code tourne en MPI sur une configuration entre 32 et 96 cœurs. Du fait des saisons et des phases de la lune, il peut être nécessaire de simuler des longues périodes, jusqu'à 1 an, ce qui rend également les temps de simulation longs. Sur la période, les publications [5], [6] et [7] ont été réalisées à l'aide de Curta. Le modèle est actuellement en cours d'utilisation pour fournir des champs de courants nécessaire à la simulation lagrangienne de la trajectoire de particules micro-plastiques à l'aide du modèle TrackMPD. Ce dernier, bien que développé en MATLAB est également utilisé sur un noeud de Curta, jusqu'à 48 cœurs sur les noeuds « bigmem » avec la Matlab Runtime, après compilation. Le MCIA permet ici de lancer de multiples simulations représentant différents scénarios de pollution par les microplastiques, en utilisant les mêmes

champs de courant pré-calculés avec Open TELEMAC. Ce travail est notamment réalisé dans le cadre du projet ANR PLASTINEST piloté par Isabel Jalon Rojas et c'est l'objet du doctorat de Betty John Kaimathuruthy (Figure 2).

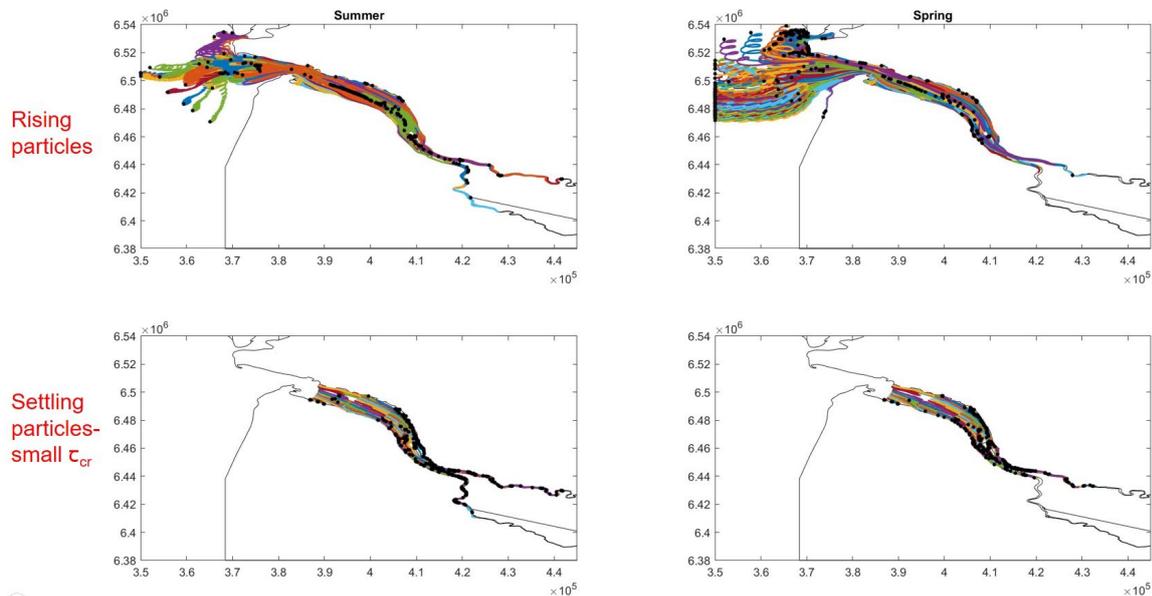


Figure 16. Variabilité de la trajectoire de particules microplastiques en fonction de la saison pour des particules flottantes et coulantes lors d'un lâché uniforme. Tiré de Kaimathuruthy et al., EGU (2024).

Étude de la propagation des ondes longues sur le plateau continental

Ce travail a été réalisé dans le cadre du doctorat d'Emilie Woussen dont l'objectif était d'étudier les interactions entre les processus hydro-sédimentaires associés à la houle, les ondes infragravitaires ainsi que la nappe phréatique, et les enrochements utilisés comme moyens de protection du littoral. En particulier, dans une des parties de ce travail elle s'est focalisée sur la propagation de la houle sur le plateau continental aquitain lors de conditions de tempête à l'aide du modèle numérique XBEACH. La particularité de ce modèle est de pouvoir simuler explicitement la propagation des ondes longues (ondes infragravitaires basse fréquence) alors que la propagation des ondes gravitaires (la houle) est simulée par une approche spectrale. La figure 3 met en évidence que la bathymétrie, au niveau du système de barres sableuses, a une influence importante sur l'excursion du *runup* en haut de plage et donc sur les potentiels dégâts qui pourraient être générés par la houle et les ondes longues.

Cette étude a nécessité l'utilisation de Curta en MPI, en général sur un seul nœud avec 32 cœurs. La taille du domaine dans la direction longitudinale à la côte (direction parallélisée dans le modèle) rendait inutile l'utilisation d'un plus grand nombre de cœurs mais ces simulations duraient entre 24 et 120 heures sur 32 cœurs. La mise au point des paramètres du modèle et les différents scénarios simulés ont générés beaucoup d'heures de calcul sur Curta et le MCIA a été indispensable à ce travail.

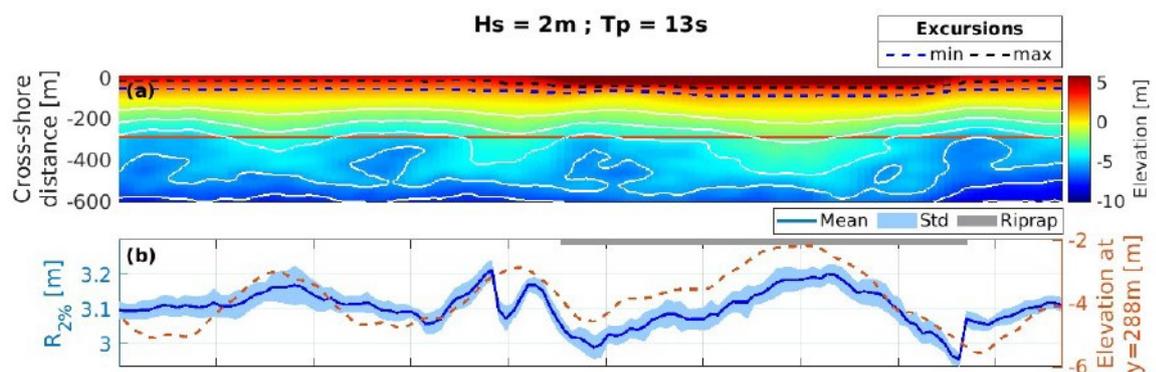


Figure 17. (a) Bathymétrie et excursion du *runup cross-shore* minimale (tirets bleus) et maximale (tirets noirs). (b) Evolution *longshore* du $R_{2\%}$ observé (trait plein bleu) et variations bathymétriques du transect *longshore* présentant la meilleure corrélation avec le $R_{2\%}$ (tirets oranges), avec symboliser la position de l'enrochement symbolisée par une zone grise.

- [1] Laporte-Fauret Q., Castelle B., Marieu V., Nicolae-Lerma A., Rosebery D., *Foredune blowout formation and subsequent evolution along a chronically eroding high-energy coast*, 2022, *Geomorphology*, vol. 414, p. 108398, doi: 10.1016/j.geomorph.2022.108398
- [2] Laporte-Fauret Q., Castelle B., Michalet R., Marieu V., Bujan S., Rosebery D., *Morphological and ecological responses of a managed coastal sand dune to experimental notches*, 2021, *Science of the Total Environment*, vol. 782, p. 146813, doi: 10.1016/j.scitotenv.2021.146813
- [3] Laporte-Fauret Q., Lubac B., Castelle B., Michalet R., Marieu V., Bombrun L., Launeau P., Giraud M., Normandin C., Rosebery D., *Classification of Atlantic coastal sand dune vegetation using in situ, UAV, and airborne hyperspectral data*, 2020, *Remote Sensing*, vol. 12, 14, p. 2222, doi: 10.3390/rs12142222
- [4] Laporte-Fauret Q., Marieu V., Castelle B., Michalet R., Bujan S., Rosebery D., *Low-Cost UAV for high-resolution and large-scale coastal dune change monitoring using photogrammetry*, 2019, *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 7, 3, p. 63, doi: 10.3390/jmse7030063
- [5] Franzen Maia, M., P. Dias Silva, N. Huybrechts, A. Sottolichio, E. Siegle, E. H. L. Fernandes. *Influence of long jetties on coastal and estuarine hydro-sedimentological patterns in a microtidal region: potential for mud deposit formation*. Soumis à *Regional Studies in Marine Science*.
- [6] Costi, J., N. Huybrechts, E. H. L. Fernandes, A. Sottolichio. *Investigating the contribution of waves on the sediment dynamics of the Southwest Atlantic Continental Shelf, off Río de La Plata and Patos Lagoon estuaries*. In prep.
- [7] Costi, J., N. Huybrechts, E. H. L. Fernandes, A. Sottolichio. *Investigating the contribution of waves on the sediment dynamics of the Southwest Atlantic Continental Shelf, off Río de La Plata and Patos Lagoon estuaries*. Proc. of the 29th TELEMAC-MASCARET Users Conference, 12-13 Oct. 2023, Karlsruhe (Allemagne), pp 148-153

4.16 Physique en champ intense (CELIA)

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

correspondant : Fabrice Catoire

Le laboratoire CELIA est composé de cinq groupes travaillant sur le sujet de l'interaction de laser intenses avec la matière et ses applications. Ces activités vont du développement lasers à l'étude fondamentale laser/matière avec différent type de cible (atome, molécule et solide). Deux groupes sont essentiellement concernés par le volet numérique à savoir le groupe Harmoniques et Applications (Resp. : Fabrice Catoire et Valérie Blanchet) et le groupe IFCIA (Interaction, Fusion par Confinement Inertiel et Astrophysique ; Resp. : Benoit Chimier et Matthieu Bardou). Les activités du CELIA revêt un caractère fondamental mais également applicatifs en lien avec les grandes infrastructures lasers (LMJ/PETAL), des objectifs sociétaux ou à fort potentiel de valorisation technologique.

Génération d'harmoniques d'ordres élevées et Applications

La génération d'harmoniques d'ordres élevées est un processus d'interaction laser/matière qui permet de produire des impulsions ultra-brèves allant de la dizaine d'attoseconde ($as = 10^{-18} s$) à 1000 as. Cette échelle de temps est l'échelle de temps caractéristique de la dynamique des électrons dans les édifices atomiques et moléculaire. Ces travaux de recherche ont valu le Prix Nobel à Anne l'Huillier, Pierre Agostioni et Ferenc Kraus en 2023. Anne l'Huillier est Docteur honoris Causa de l'université de Bordeaux dont la cérémonie a eu lieu en Mars 2024. Contrôler le rendement, l'état de polarisation, la longueur d'onde du rayonnement harmonique est crucial pour l'utilisation ultérieure et résoudre à très courte échelle de temps l'évolution temporelle de dynamiques. Pour modéliser ces caractéristiques, le processus fondamental de génération d'harmoniques d'ordre élevé est décrit par la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps (TDSE). Cette approche numérique permet de calculer le spectre rayonné d'un atome individuel (ou molécule ou maille élémentaire). Cette modélisation est ensuite couplée à l'équation de Maxwell permettant de résoudre la propagation des ondes dans le milieu générateur, ici un jet de gaz.

Deux niveaux d'approximation sont alors utilisés, i- soit le milieu est fin pour lequel on peut négliger la modification spatio-temporelle du faisceau générateur ii- soit le milieu est considéré comme « épais » alors le faisceau fondamental subit des déformations substantielles au cours de la propagation qui se manifeste dans le processus de génération d'harmonique. Dans le cas de la génération dans un milieu fin, nous avons montré qu'il est possible de contrôler les propriétés de focalisation des harmoniques [1,2]. Pour rappel, cette propriété est difficile à obtenir par les méthodes traditionnelles car il n'existe pas d'optiques permettant de réaliser la focalisation dans l'UVX sur une large gamme spectrale. Voir également [3] pour une présentation pédagogique de ces propriétés. Dans le cas du régime en milieu « épais », c'est-à-dire ici un milieu relativement long, nous avons montré qu'il est possible d'améliorer le rendement de production harmonique en contrôlant l'accord de phase entre l'onde fondamentale et les harmoniques d'ordres élevées [4]. Ce contrôle a été réalisé à l'aide d'une impulsion de pré-ionisation obtenue par décharge.

Enfin plus récemment, nous nous intéressons à la génération d'impulsions brèves ($< fs = 10^{-15} s$) et intenses dans la gamme de longueur de l'UV au DUV (entre 100 et 300 nm). Cette gamme est

particulièrement intéressante car elle constitue un domaine spectral d'intérêt pour le femtochimie. Pour ce faire, nous avons développé un code couplant équation de Maxwell guidée dans une fibre creuse remplie de gaz et de la TDSE. Dans ces conditions une onde solitonique se forme jusqu'à atteindre la longueur de fission (L_{fiss}) conduisant à la dislocation du soliton et permettant ainsi de produire un élargissement spectral entrant en résonance avec une onde dispersive dans la longueur d'onde d'intérêt. Ce processus est particulièrement efficace - 10 % de rendement bien supérieure au processus de génération d'harmoniques d'ordre élevés - et surtout un jeu subtil entre pression de gaz, intensité laser et durée d'impulsion permet de contrôler la longueur de l'onde dispersive dans la gamme 50-350 nm. Ce travail est illustré par la figure ci-dessous qui est en cour de publication.

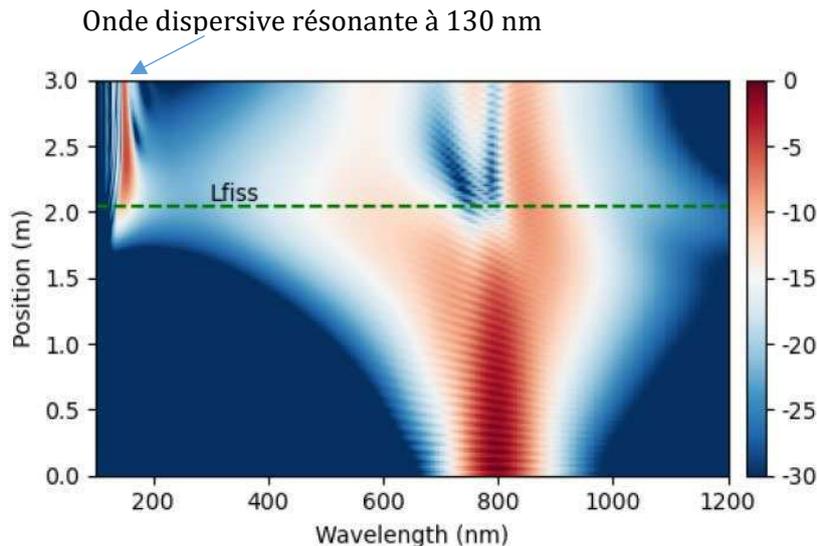


Fig. 1 : Tracé de l'évolution spectrale en fonction de la longueur de propagation (Position) dans une fibre creuse. Le laser incident a une énergie 400 μ J, une durée de 10 fs, et une longueur d'onde centrale de 800 nm. La fibre de cœur 250 μ m de diamètre est remplie de 400 mbar d'Hélium.

Références :

- [1] – L. Quintard, V. Strelkov, J. Vabek, O. Hort, A. Dubrouil, D. Descamps, F. Burgy, C. Péjot, E. Mével, F. Catoire, and E. Constant, Optics-less focusing of XUV high-order harmonics, *Science Advances* (2019), vol. 5, p. eaau7175
- [2] – K. Veyrinas, J. Vábek, C. Valentin, D. Descamps, C. Péjot, F. Burgy, E. Constant, E. Mével, and F. Catoire, Spectral filtering of high-order harmonics *via* optics-free focusing, *Opt. Exp.* (2021), vol. 29, p. 29813-29827.
- [3] – K. Veyrinas, J. Vabek, C. Valentin, É. Mével, É. Constant, F. Catoire, Quand les harmoniques d'un rayonnement extrême se focalisent, *Reflets. Phys.* (2022), Vol. 72, p. 10
- [4] – O. Finke, J. Vábek, M. Nevrkla, N. Bobrova, O. Hort, L. Jurkovičová, M. Albrecht, A. Jančárek, F. Catoire, S. Skupin, J. Nejd, Phase-matched high-order harmonic generation in pre-ionized noble gases, *Scientific Reports* (2022), vol. 12, p. 7715

Contact : Fabrice Catoire (fabrice.catoire@u-bordeaux.fr)

Création de paires électron/positron avec des particules accélérées par interaction laser-plasma à haute intensité

Le processus Breit-Wheeler linéaire, décrit pour la première fois en 1934, consiste en la création d'une paire électron-positon par la collision de deux photons de haute énergie. Il se produit naturellement aux échelles astrophysiques. Considérant que les photons de haute énergie provenant d'une étoile à une distance de $6,6 \cdot 10^{26}$ cm, avec des énergies de 0,1 – 50 TeV, entrent en collision avec les photons intergalactiques thermiques d'énergie de 1 eV, la probabilité maximale que le processus se produise est pour une énergie de photon de 1 TeV. De plus, l'absorption de photons γ de haute énergie d'un blazar par des photons infrarouges, qui entraîne la création de paires, peut être utilisée pour mesurer l'ampleur du champ de rayonnement infrarouge intergalactique. Jusqu'à présent, il n'a jamais été observé expérimentalement en laboratoire en raison de la faible intensité des sources de photons gamma disponibles. Grâce aux dernières avancées des technologies laser, des dispositifs expérimentaux pour la production et la détection du processus Breit-Wheeler linéaire en laboratoire ont été proposés, basés sur la génération de rayonnement à haute énergie dans l'interaction laser-plasma.

Lorsqu'un laser à ultra-haute intensité ($I > 10^{18}$ W/cm²) irradie une cible, les électrons sont accélérés jusqu'à des vitesses ultra-relativistes et émettent une quantité abondante de photons gamma synchrotron. En utilisant des simulations 2D Particle-In-Cell, nous avons réalisé une étude systématique incluant plusieurs paramètres de laser et de cible, dans le régime de densité quasi critique à ultra-haute intensité, pour trouver un cas optimal pour la détection du processus Breit-Wheeler linéaire. Dans la configuration optimale pour transférer l'énergie laser aux photons γ , nous avons considéré la collision entre les deux faisceaux de photons sous différents angles de collision et à une distance de 0,1 cm des sources du faisceau de photons gamma. Le processus Breit-Wheeler linéaire n'a jamais été observé en laboratoire en raison de l'absence de sources de photons gamma brillants et de la compétition avec d'autres processus de production de paires qui se produisent dans l'interaction laser-plasma. Dans cet article, nous avons estimé le nombre de paires produites par les processus Bethe-Heitler et Breit-Wheeler non linéaire, et nous avons trouvé la configuration optimale pour détecter les paires Breit-Wheeler linéaires. Ces résultats et les lois d'échelle obtenues seront utiles pour préparer des campagnes expérimentales sur les installations laser Apollon et ELI.

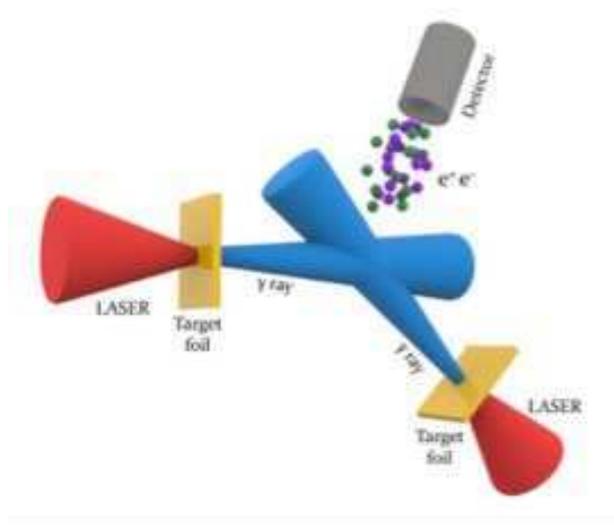


Fig. 2: Setup pour la production de paires Breit-Wheeler linéaire

Références :

- [1] I.-M. Vladisavlevici, X. Ribeyre, D. Vizman and E. d'Humières, Investigation of γ -photon sources using near-critical density targets towards the optimization of the linear Breit-Wheeler process, Plasma Phys. Control. Fusion (2024), vol.66, p. 035009
- [2] I.-M. Vladisavlevici, D. Vizman, E. d'Humières, Theoretical investigation of the interaction of ultra-high intensity laser pulses with near critical density plasmas Plasma Phys. Controlled Fusion (2023), vol. 65, p. 045012
- [3] I.-M. Vladisavlevici, D. Vizman, E. d'Humières, Laser Driven Electron Acceleration from Near-Critical Density Targets towards the Generation of High Energy γ -Photons, Photonics (2022), vol. 9, p. 953

Contact : Emmanuel D'Humières (emmanuel.dhumieres@u-bordeaux.fr)

4.17 Sciences de l'ingénieur (LaSIE)

Unité de recherche : Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement, UMR CNRS 7356 – La Rochelle Université

Correspondant : Antoine Falaize

L'équipe Méthodes mathématiques et Numériques (M2N) du LaSIE est à l'interface entre mathématique et mécanique au sein d'un laboratoire des sciences de l'ingénieur. Ses travaux portent sur le développement des modèles mathématiques et numériques en mécanique. De nombreux travaux de l'équipe portent sur les méthodes géométriques en mécanique, l'analyse des équations aux dérivées partielles non linéaires de la mécanique et méthodes et simulations numériques des problèmes de mécanique (mécanique des fluides, interaction fluide-structure, milieux poreux, ..), et des matériaux de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique.

Études par simulations atomistiques de l'impact des défauts sur les propriétés des matériaux (Najib Iskounen, Margot Lucas, Marie Landeiro Dos Reis)

Ce projet vise à étudier les défauts des matériaux et leur impact sur les propriétés macroscopiques, telles que la plasticité, l'élasticité et la diffusion. Nous nous sommes intéressé particulièrement à l'influence de l'hydrogène sur différents matériaux (Ni, Ni₃Al, Al, Fe, Au, Cu, Pd, Cr) et à son interaction avec divers défauts cristallins (dislocations [1, 2], lacunes [2], amas [3], etc.) et à l'impact des défauts de fautes d'empilement sur les mécanisme de plasticité [4]

Expérimentalement, détecter les défauts à l'échelle atomique reste extrêmement difficile, malgré leur rôle crucial dans les propriétés macroscopiques des matériaux. Quant à l'observation de leur mobilité, elle est pratiquement impossible avec les techniques actuelles. C'est pourquoi les simulations atomistiques sont essentielles : elles offrent une compréhension des mécanismes élémentaires et permettent de reconstruire les scénarios décrivant le comportement des défauts.

Nous utilisons la dynamique moléculaire, une méthode adaptée pour les systèmes de taille nanométriques (~jusqu'à 100 nm), raisonnable pour l'étude des défauts (voir Figure 1). Cette approche est particulièrement efficace et requiert un nombre relativement limité de processeurs.

Pour réaliser l'étude systématique nécessaire à une compréhension approfondie du comportement des matériaux en fonction de leurs compositions, du type de défauts, de la déformation, de la température et de la concentration en hydrogène, environ 3 000 calculs atomistiques ont été lancés sur le supercalculateur du MCIA sur la période 01/01/2023-01/01/2024 et de l'ordre de 5 000 calculs sur l'année 2024.

Les simulations lancées nécessitent généralement entre 15 et 64 processeurs. La durée des calculs varie de 20 minutes à 100 heures (en fonction du type (MD, MS, NEB) et de la taille de système), les cas dépassant cette limite restant rares. Une option de reprise (« restart ») est disponible pour relancer les calculs, le cas échéant.

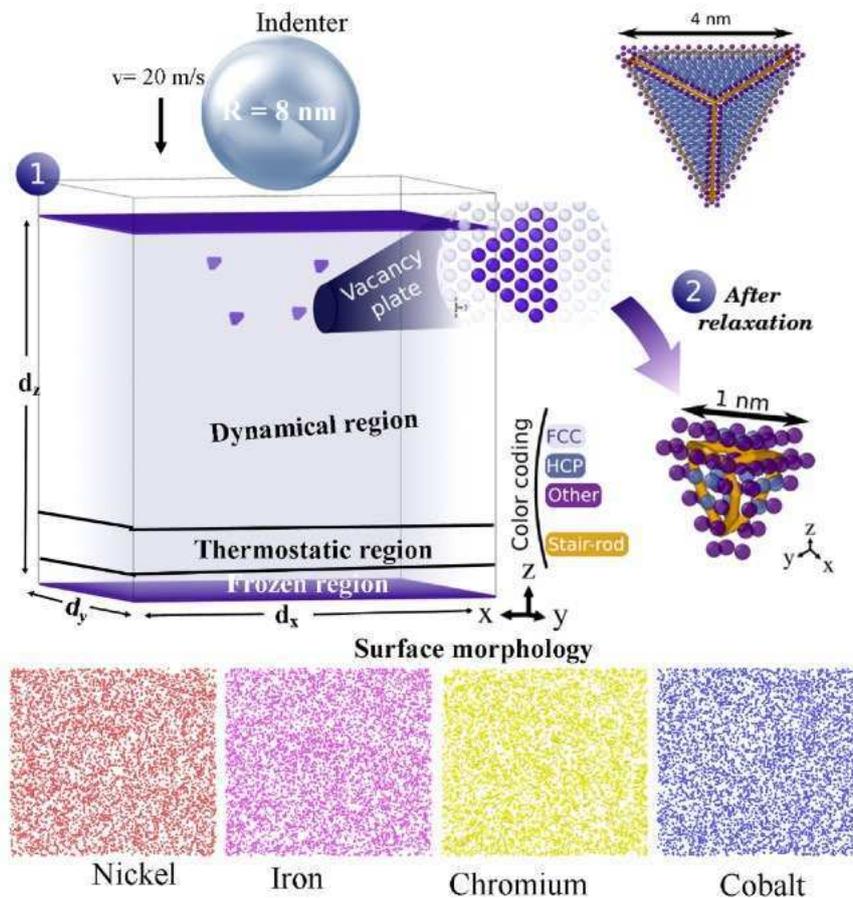


Figure 1 : Exemple d'une boîte de simulation d'un alliage fortement concentré en présence de défauts de type fautes d'empilement pour un essai de nanoindentation [4].

Références pour lequel le suercalculateur MClA a été utilisé :

- [1] M. Lucas, M. Landeiro Dos Reis, S. Queyreau, X. Feugas, Hydrogen segregation around a straight screw dislocation in bcc iron, Phys Rev Materials, (en cours)
- [2] N. Iskounen, M. Landeiro Dos Reis, A. Oudriss, J. Bouhattate, X. Feugas, Unravelling the distinctive effects of hydrogen and vacancies on elastic and plastic properties in nickel single crystals : atomistic simulation of nanoindentation, Phys Rev Materials, (en cours)
- [3] M. Landeiro Dos Reis, A. Oudriss, X. Feugas On the stability of nanovoids in fcc metals and the influence of hydrogen, Acta Materialia, 281, 120400 (2024)
- [4] F. J. Dominguez-Gutiérrez, A. Olejarz, M. Landeiro Dos Reis et al. Atomistic-level analysis of nanoindentation-induced plasticity in arc-melted NiFeCrCo alloys: The role of stacking faults, J. Appl. Phys. 135, 185101 (2024)

Contact : Marie Landeiro Dos Reis (mlandeir@univ-lr.fr)

Modélisation d'un échangeur de chaleur en régime transitoire avec un modèle d'ordre réduit obtenu par POD couplé à un réseau de neurones (C. Allery, C. Béghein, J. Marie)

Ce travail s'inscrit dans le cadre du dimensionnement du cycle thermique de la boucle propulsive des sous-marins. Chaque composant du cycle doit pouvoir être simulé en régime stationnaire ou transitoire. Il est nécessaire de développer une méthodologie pour simuler les phases transitoires en réduisant les temps de calcul. Pour obtenir des résultats en temps quasi-réel, des modèles d'ordre réduit basés sur la décomposition orthogonale aux valeurs propres, couplés à des réseaux de neurones, sont développés. Pour construire la base POD, des calculs avec des modèles complets sont nécessaires. Le modèle complet utilisé dans ce travail est OpenFoam. Un mini-échangeur a été modélisé. Nous présentons sur la figure 2 le champ de vitesses dans le mini-échangeur en régime établi. Le calcul avec le modèle complet est terminé. La base POD n'a pas encore été obtenue et le modèle d'ordre réduit n'a pas été construit. Les calculs sur la machine Curta nécessitent 32 coeurs, et entre 1 et 2 jours.

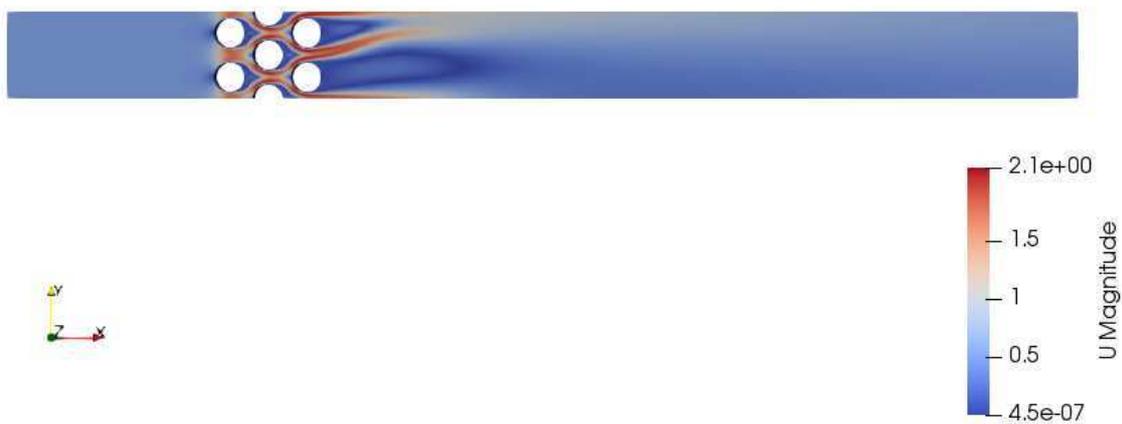


Figure 2 : Champ de vitesses dans un mini-échangeur.

4.18 Sciences Physique et de l'Ingénierie (Institut Pprime)

Unité de recherche : Institut PPrime, CNRS UPR 3346, Poitiers

Correspondants : Eric Lamballais, Philippe Parnaudeau

L'institut Pprime (P') est un laboratoire de recherche des domaines des Sciences Physiques et des Sciences de l'Ingénierie. Ses activités couvrent un large spectre de thématiques et de compétences complémentaires allant de la physique des matériaux à la mécanique des fluides et des matériaux, au génie mécanique et à l'énergétique. Les domaines d'application privilégiés sont les transports et l'énergie, en portant une attention particulière aux aspects environnementaux. Le laboratoire est composé de 572 personnes.

Propriétés mécaniques des matériaux à l'échelle du nanomètre (Département Physique et Mécanique des Matériaux. Auteurs : Laurent Pizzagalli, Sandrine Brochard, Julien Durinck, Julien Godet)

Lorsque les dimensions caractéristiques des matériaux diminuent pour atteindre les échelles nanométriques, la plupart de leurs propriétés sont modifiées. Par exemple, des nano-objets tels que les nanofils ou les nanoparticules deviennent de plus en plus résistants à la déformation, car il y a peu, voire pas du tout, de défauts déjà présents en volume pouvant faciliter la plasticité. Les expériences et les simulations montrent qu'il est nécessaire de créer de nouveaux défauts à partir des surfaces, ce qui nécessitent des contraintes appliquées très importantes. En conséquence, on observe que la limite d'élasticité, c.-à-d. la contrainte à partir de laquelle le matériau se déforme de manière irréversible, augmente lorsque les dimensions caractéristiques diminuent. Ce phénomène est très général et bien établi pour une gamme allant de quelques dizaines de nm jusqu'au micromètre. De plus, on note également une modification des mécanismes de plasticité aux petites échelles, du fait de l'influence des surfaces d'une part et des contraintes élevées d'autre part. Ainsi, il est constaté que des matériaux fragiles en massif se déforment de manière ductile en deçà d'une certaine taille. Enfin, la forme des nano-objets devient également un paramètre important.

Ces observations soulèvent de nouvelles interrogations, en particulier pour les échelles les plus fines. Par exemple, si on extrapole les limites élastiques mesurées ou calculées pour des dimensions de quelques nm, des valeurs supérieures aux limites théoriques sont prédites. Les modes de déformation plastique activés à ces échelles sont également difficiles à anticiper. L'exploration de ces échelles se heurte toutefois à deux problèmes majeurs. D'une part il est extrêmement ardu de réaliser des essais mécaniques contrôlés à ces dimensions. D'autre part, des simulations de type dynamique moléculaire sont faisables, qui nécessitent l'emploi de potentiels interatomiques. Or, ces derniers sont peu fiables et imprécis pour décrire des petits systèmes où les surfaces jouent un rôle déterminant, et soumis à des contraintes et déformations élevées. Afin de contourner cette difficulté majeure, nous avons récemment développé une approche originale combinant dynamique moléculaire *ab initio* (basée sur le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité) et compression par champs de force répulsifs [1]. Cette dernière a été mise en œuvre pour étudier les propriétés mécaniques de divers types de matériaux sous forme de molécules ou nanoparticules de dimension 1-2 nm: les fullerènes et endofullerènes de carbone [2,3], le silicium et le carbure de silicium [4], un métal CFC comme l'aluminium [5] (Fig. 1), et un métal CC comme le tungstène [6].

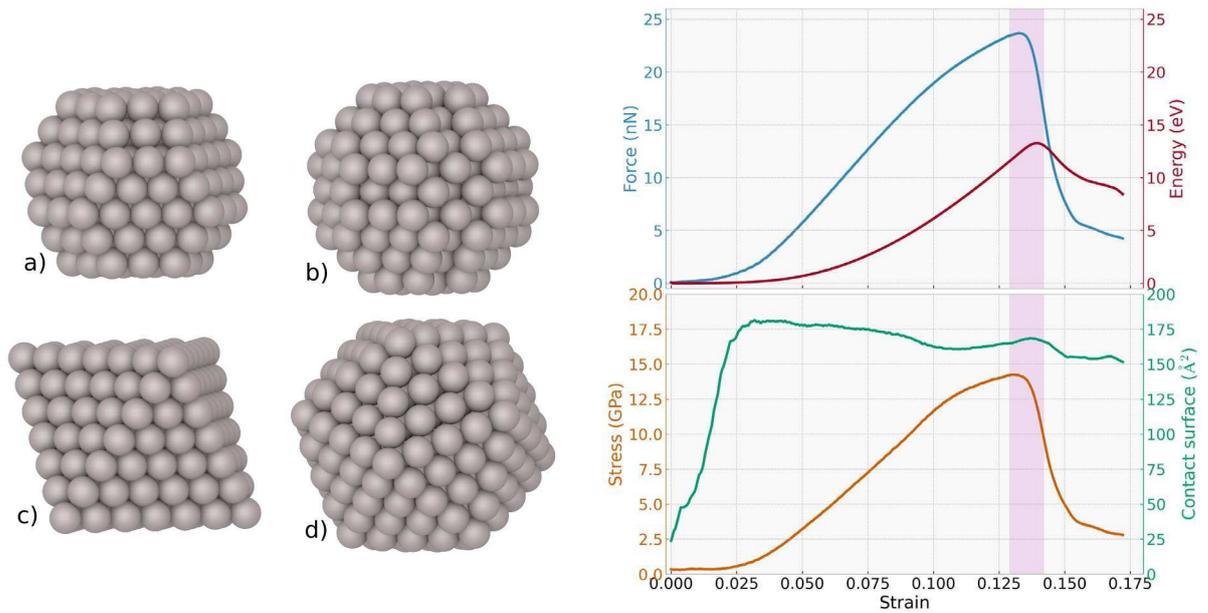


Figure 1 : à gauche, modèles de nanoparticules Al de formes variées avant compression. A droite, exemple de courbes montrant les variations d'énergie, de force appliquée et de contrainte en fonction de la déformation pour une nanoparticule Al de 231 atomes en forme d'octaédre (modèle (c) à gauche) [5].

Ces simulations et les analyses effectuées ont permis des avancées significatives vis à vis de la problématique exposée ci-dessus. Ainsi, nous avons montré que :

- La variation de la limite élastique aux petites échelles dépend du type de matériau. Ainsi elle continue d'augmenter pour Si et SiC quand la taille diminue, mais devient constante pour Al [4-5],
- Cette dernière peut effectivement devenir plus élevée que la contrainte théorique idéale, ce qui s'explique par l'inhomogénéité de la contrainte au sein des nanomatériaux sous compression [4-6],
- La forme des nanoparticules a une influence sur les propriétés mécaniques, qui est plus forte que la taille [5-6],
- L'amorphisation devient un mécanisme de plasticité activable et concurrentiel à ces échelles, quels que soient les matériaux [4-6],
- La nucléation homogène de dislocation est possible dans des nanoparticules de 1-2 nm [4],
- La présence d'un maximum de contrainte bien défini ne correspond pas nécessairement à une déformation plastique irréversible, mais peut correspondre à un adoucissement élastique particulier, ou bien à des modifications structurales importantes mais réversibles en relâchant la contrainte appliquée [3-4],
- De petites molécules (H_2O , CH_4) contenues dans un fullerène peuvent se dissocier sous l'effet de la contrainte [2].

- [1] Physical Review B **102**, 094102 (2020)
 [2] Phys. Chem. Chem. Phys. **24**, 9449, (2022)
 [3] Diamond & Related Materials **123**, 108870 (2022)
 [4] Physical Review Letters **131**, 236201 (2023)
 [5] Scripta Materialia **241**, 115863 (2024)
 [6] En préparation (2024)

Informations techniques

Les simulations de dynamique moléculaire ab initio ont été effectuées avec le code Quantum Espresso. Elles nécessitent des ressources de calcul importantes, à la fois en nombre de CPU et de temps. Ces simulations décrivent la dynamique du système de manière itérative. Chaque itération requiert un calcul convergé de la structure électronique. Ce calcul dépend du matériau et plus spécifiquement du nombre d'états électroniques à prendre en compte. Ainsi, à nombre d'atomes identiques, l'effort est plus conséquent pour W (14 électrons) que pour Al (1 électron). Le nombre d'itérations doit être suffisant pour atteindre les premiers stades de la déformation plastique, par exemple environ 6000 pour les nanoparticules métalliques (Al, W). Concrètement, voici deux exemples des ressources nécessaires pour un seul run de compression d'une nanoparticule:

- Nb cores = 256 / walltime = 675h : Nanoparticule W 169 atomes. La simulation est segmentée en plusieurs runs successifs (5) du fait des limitations propres à la soumission sur Curta.
- Nb cores = 160 / walltime = 360h : Nanoparticule Al 249 atomes. La simulation est segmentée en 2 runs successifs.

Contact: Laurent Pizzagalli, laurent.pizzagalli@univ-poitiers.fr

Simulation numérique d'interactions onde de choc-bulle [Département Fluides, Thermique et Combustion. Auteurs : Eric Goncalves, Lucas Menez, Jean Decaix, Philippe Parnaudeau]

Ce projet vise à étudier les effets néfastes du collapse violent de structures diphasiques sur la performance et la durabilité des dispositifs industriels et des systèmes énergétiques (comme les turbomachines, injecteurs de carburant, hélices, etc.). L'implosion de bulles de gaz dans ces composants génère des pics de pression et de température très élevés, ainsi que des micro-jets rapides, perturbant le fonctionnement et provoquant des dommages aux parois. Différents paramètres ont déjà été examinés, comme l'intensité de l'onde, la distance entre la bulle et la paroi, l'agencement des bulles, et la courbure des parois grâce à une méthode de pénalisation. Un modèle de transfert de masse a été validé, et la suite consistera à étudier des écoulements avec des nombres de Reynolds plus élevés.

Ce projet développe sur un code de simulation SCB [2] qui repose sur un modèle diphasique compressible [3]. SCB, repose utilise une équation d'état pour les aspects thermodynamique de type Stiffened Gas et le modèle est inspiré des détonations [1]. Il résout les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, ainsi qu'une équation de transport pour la fraction volumique de gaz. Le code utilise une discrétisation en volumes finis sur une grille structurée cartésienne et s'étend à des résolutions 3D massives, générant d'importants volumes de données.

Notre programme de recherche comporte trois axes principaux, chacun d'eux sera mené partiellement ou intégralement grâce aux ressources du MCIA :

1. **Validation de modèles sous-maille** : Nous évaluons deux modèles de sous-maille pour la simulation de l'écoulement de Taylor-Green, en régime supersonique et turbulent (Reynolds = 1600, Mach = 1,25). Une étude comparative, avec des données de références, nous servira de base pour tester les limites de nos choix de modélisation de la turbulence.

2. **Étude de la fragmentation d'une goutte de liquide par une onde de choc** : En collaboration avec Florent Viot de Pprime, nous étudions la fragmentation d'une goutte d'eau impactée par une onde de choc droite à différents nombres de Mach (3 à 11). Des simulations numériques (Mach 4,5) sont comparées à des visualisations en caméra rapide, avec une première validation sur l'écoulement autour d'une sphère en régime supersonique.
3. **Validation des intégrations numériques** : Nous avons mis en place un protocole de validation et de tests de non-régression pour assurer la robustesse de notre outil de simulation sur divers matériels. Avec les nouveaux développements annuels, des périodes dédiées aux tests sont nécessaires, ce qui accroît les besoins en ressources de calcul.

Informations techniques

Afin de calculer des configurations tridimensionnelles, une parallélisation au moyen de la librairie MPI couplée soit avec la librairie OpenMP ou la librairie OpenACC a été mise en place, afin de pouvoir utiliser un large spectre d'architecture de calcul. La stratégie de communication sur l'aspect distribuée s'appuie sur l'ajout de points fantômes à chaque sous-domaine et d'échanger des données entre domaine avec des « subroutines » MPI. Les librairies OpenMP ou OpenACC servant elles à utiliser le code sur divers accélérateurs, il s'agit donc d'une optimisation des boucles (approche Fine Grain) et d'une migration des données vers les accélérateurs quand nécessaire [2].

La Figure propose un test de passage à l'échelle dur (strong scalability test), à savoir que pour un problème de taille fixé, on augmente le nombre de processus MPI (chaque processus étant soit reliés à un cœur de processeur ou à une carte GPU). Ce test montre que le code a un passage à l'échelle satisfaisant et quel que soit l'architecture de calcul (CPU, GPU, des tests ont également été menés avec divers type de processeurs dans le cadre du projet Mesonet, dont le MCIA est partenaire)

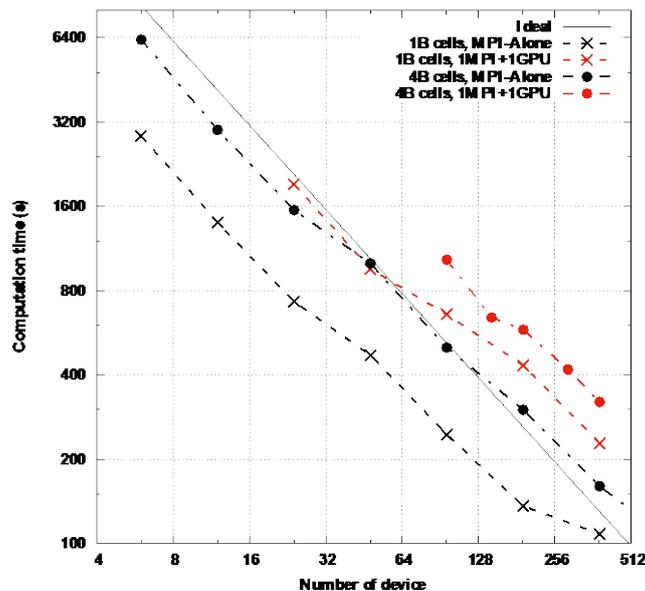


Figure: Strong scalability

[1] : Physics of Fluids, 13, pp. 3002–3024, 2001

[2] : Computers and Mathematics with Applications, 99(4), pp. 246-256, 2021

[3] : Communications in Computational Physics, 2018, 24 (1), pp. 167-20, 2018

En cours de publication une étude paramétrique du collapse d'un nuage de bulles d'air dans l'eau proche d'une paroi.

- Contact : *eric Goncalves Da Silva*, eric.goncalves@ensma.fr

Simulation à surface libre d'écoulements (OpenFOAM) [Département Fluides, Thermique et Combustion. Auteurs : Guillaume Bon, Ludovic Chatellier, Yves Le Guer, Laurent David]

Les simulations CFD (« Computational Fluid Dynamics ») avec la résolution des équations de Navier-Stokes en régime turbulent par le biais de la méthode des volumes finis peuvent demander un coût de calcul particulièrement important. Cela est encore plus vrai lorsque l'écoulement est considéré multiphasique, comme pour des écoulements à surface libre, par exemple. Dans le cadre d'une thèse, des simulations à surface libre pour des écoulements en canaux d'amenée de centrales hydroélectriques ont dû être mises en place afin de simuler l'écoulement passant au travers d'une grille semi-immersée et d'un système d'exutoires. En raison de la finesse du maillage nécessaire au niveau de la grille ainsi que de la taille importante du domaine de calcul global, un grand nombre de cellules est nécessaire pour chaque simulation (plusieurs millions de cellules). Chaque simulation prend alors un temps important. L'utilisation d'un cluster permet de lancer les différentes simulations parallélisées et de gagner un temps considérable dans un projet limité à 3 ans. Ce résumé montre les études numériques qui ont été possibles grâce au cluster CURTA lors de la thèse.

Simulation d'un écoulement à surface libre autour de barreaux

Le cas d'étude est le suivant : une grille inclinée par rapport à l'horizontale est mise en place dans le canal d'amenée des centrales hydroélectriques pour assurer la protection de la centrale face à de larges débris et pour éviter le passage des poissons par les turbines. Cette grille est composée d'une succession de barreaux espacés de 20 mm chacun (recommandation pour le blocage des poissons). La grille génère une perte de charge non négligeable qui se répercute sur la production de la centrale. Une étude d'optimisation de la forme des barreaux afin de minimiser ces pertes de charge a été mise en place dans un premier temps à l'aide de simulations 2D monophasiques sur des espaces de calcul du laboratoire. Afin de valider les formes de barreaux sélectionnées, des simulations 3D à surface libre ont été mises en place pour une partie de la grille avec des barreaux optimisés. Ces simulations présentent environ 20 millions de mailles ainsi qu'une condition limite régulée (sortie du domaine asservie sur l'entrée du domaine pour respecter la hauteur et le débit d'entrée). La paroi du dessous est considérée comme un mur, tandis qu'une condition de symétrie est imposée de chaque côté afin de modéliser une grille plus large. La partie supérieure est considérée libre à pression atmosphérique. Le solveur InterFOAM, qui est basé sur un modèle multiphasique avec deux phases non miscibles et la méthode VOF (« Volume Of Fluid »), est utilisé. Étant donné que l'écoulement est turbulent, le modèle de fermeture $k-\omega$ SST

est sélectionné. La condition limite régulée représente la principale difficulté, puisqu'elle a dû être développée et rend la simulation beaucoup plus instable. Une attention particulière doit être portée au maillage, accompagnée de conditions initiales adaptées pour assurer la convergence. Cela demande un temps de calcul très important, couplé à une dizaine de profils à tester (dizaine de simulations). La Figure 1 montre le domaine de calcul sélectionné pour tester les formes de barreaux optimisés. Afin de mettre en place ces simulations, le cluster CURTA a été utilisé. Chaque simulation est lancée sur 2 nœuds de 32 cœurs chacun, 90 gigaoctets de mémoire vive totale et sur un temps de convergence d'environ 15 jours. Cela permet de modéliser la surface libre et de retrouver la perte de hauteur d'eau générée par la grille pour les différentes formes de barreaux (voir Figure 2). Les bonnes performances des barreaux optimisés ont alors pu être vérifiées dans un temps raisonnable.

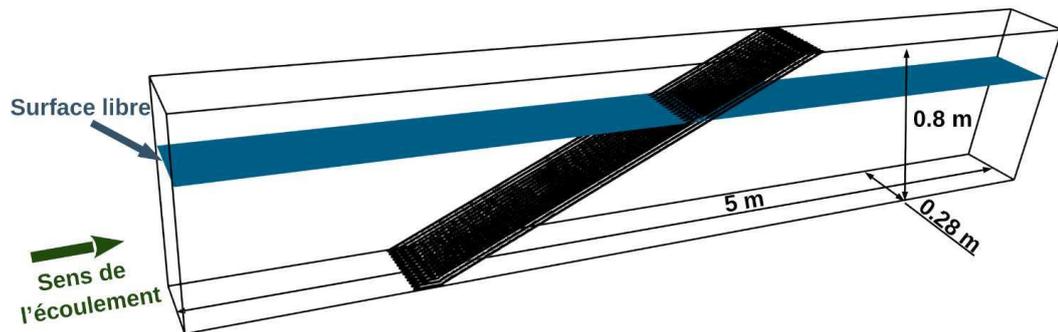


Figure 19: Domaine de calcul utilisé pour la simulation de l'écoulement à surface libre au travers une grille inclinée partiellement submergée.

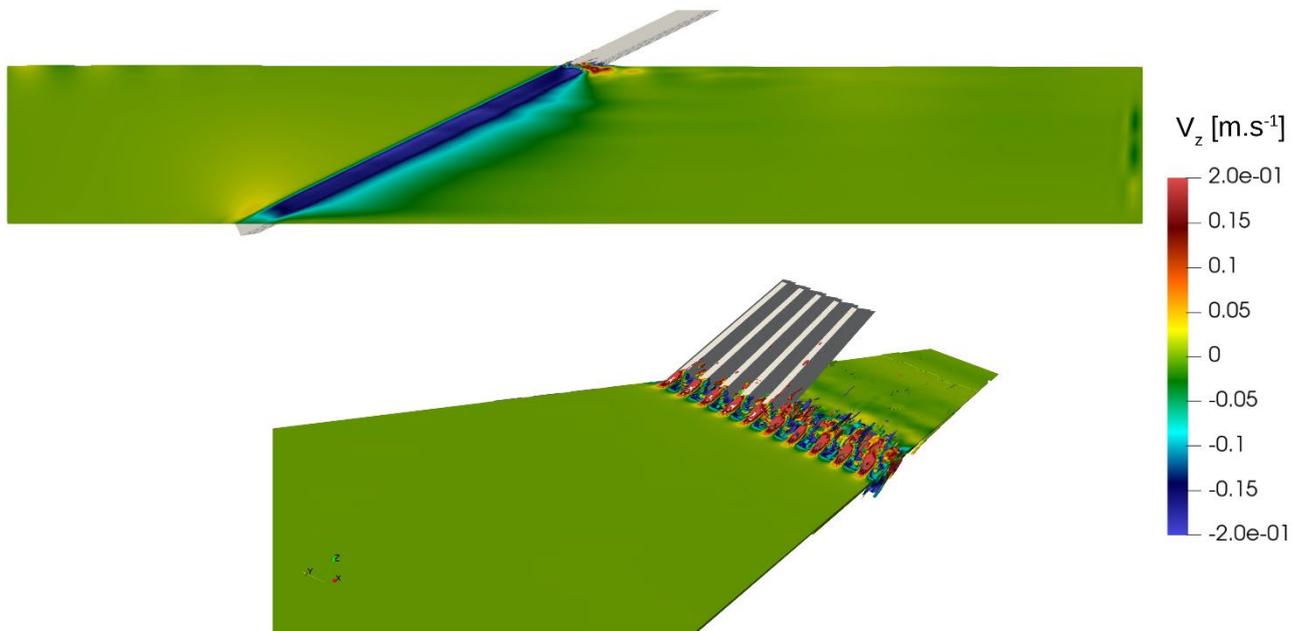


Figure 18 : Exemples de résultats obtenus pour une grille à barreaux rectangulaires avec en haut le champ de vitesse dans la direction de l'écoulement principal et en bas la représentation de la surface libre au niveau de la grille avec la vitesse verticale.

Simulation d'un écoulement à surface libre d'une prise d'eau de centrale hydroélectrique

Une seconde partie du projet de thèse vise à faire l'étude paramétrique du système d'exutoires de la grille inclinée permettant de transférer les poissons vers l'aval de la centrale en sécurité sans passer par les turbines (voir Figure 3). La grille est cette fois remplacée par un volume poreux équivalent pour limiter le nombre de mailles nécessaires (14 millions de mailles). Le principe général de la simulation est identique à celui de la section précédente. La condition limite régulée est ici remplacée par une condition de vitesse moyenne fixe classique. La différence majeure réside dans le couplage de la résolution de la partie fluide, qui se fait par la résolution des équations de Navier-Stokes, et de la partie volume poreux, grâce à la résolution de l'équation de Darcy-Forchheimer. Une calibration des valeurs de perméabilité et du nombre d'Ergün a été nécessaire en amont de la simulation afin de modéliser au mieux les pertes de charge d'une grille inclinée par un volume poreux. Deux sorties de domaine sont mises en place : la sortie du canal (en rouge sur la Figure 3) et la sortie de la goulotte de dévalaison (en violet sur la Figure 3). Les conditions limites pour des simulations à surface libre étant basées sur la conservation du débit, la fixation de la répartition des débits entre les deux sorties du domaine est complexe. La sortie du canal est gérée par une vitesse moyenne fixe, tandis que la sortie de la goulotte l'est par un débit cible et un pas qui gère la hauteur d'eau.

Des simulations 3D à surface libre sont alors mises en place de la même manière que dans la section précédente. Une étude paramétrique de la forme du système d'exutoires et de goulotte est alors effectuée avec plus de 50 configurations différentes. Le temps de calcul estimé sur un ordinateur classique (40 cœurs, 180 gigas de RAM) était de plus de 3 mois. L'utilisation du cluster CURTA a ainsi permis de réduire ce temps à environ 1 mois. De la même manière que lors de la section précédente, chaque simulation est lancée sur 2 nœuds de 32 cœurs chacun, 90 gigas de mémoire vive totale et sur un temps de convergence d'environ 3 jours par simulation. La condition limite n'étant plus asservie, avec en plus un raffinement moins important au niveau du volume poreux par rapport à une grille, permet de réduire considérablement le temps de calcul par rapport à la section précédente. L'écoulement au sein du système d'exutoires et de goulotte a ainsi pu être calculé (voir Figure 4) afin d'étudier l'effet de chaque configuration.

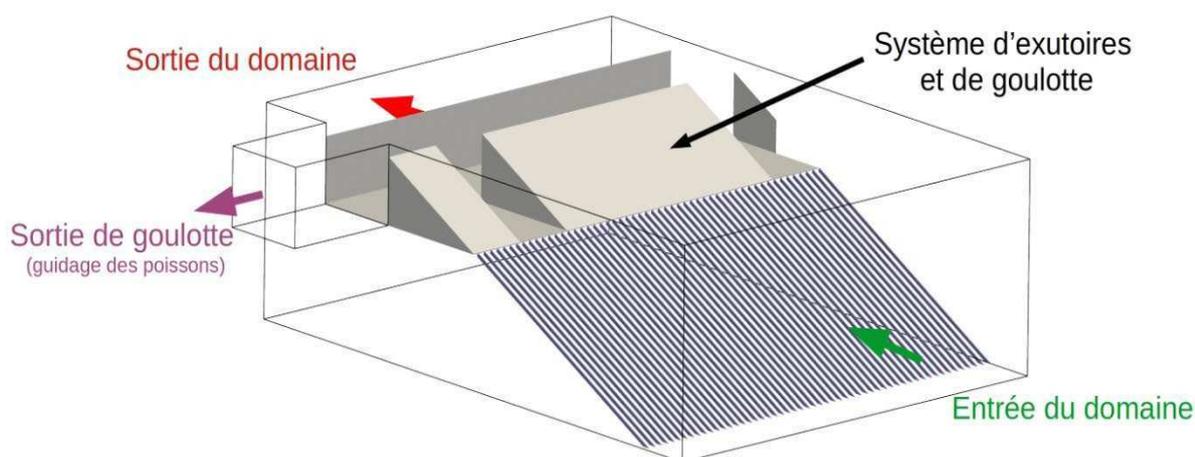


Figure 3 : Domaine de calcul pour la simulation à surface libre du système de dévalaison (exutoires et goulotte) des poissons.

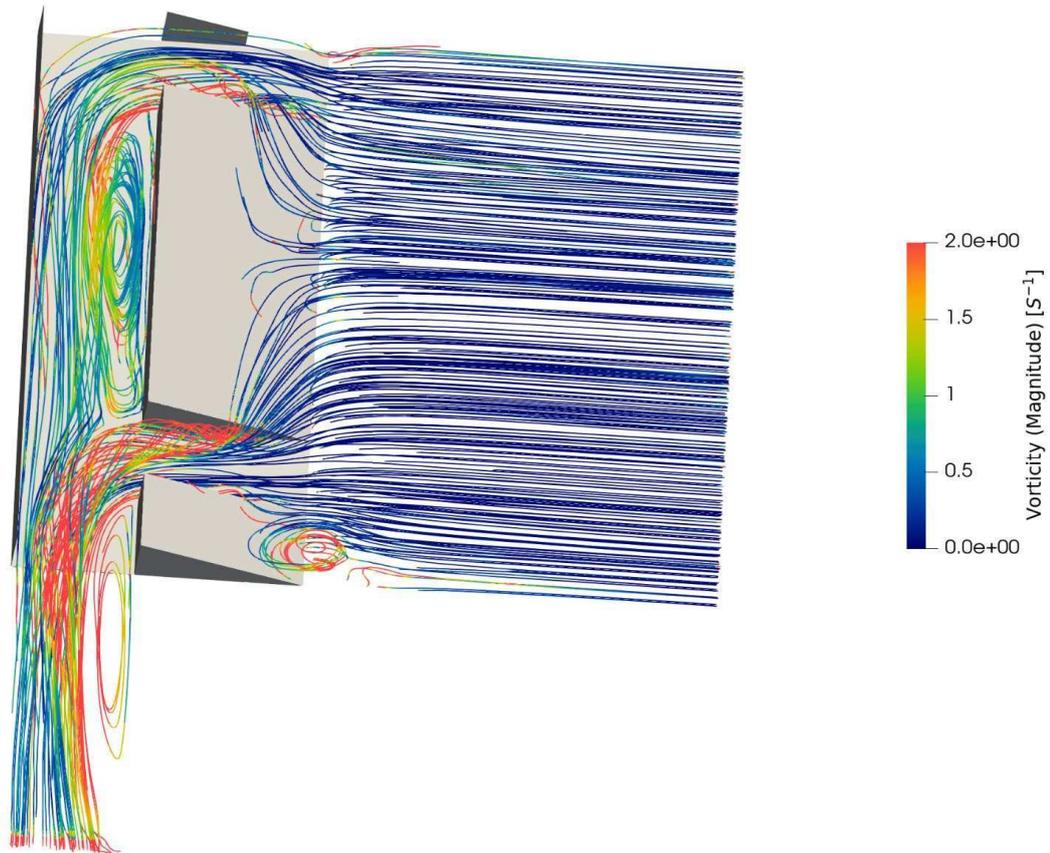


Figure 4 : Lignes de courant de l'écoulement dans le système d'exutoires et de goulotte pour la configuration initiale.

En conclusion, ce travail de thèse a permis d'optimiser la conception des grilles et des systèmes d'exutoires des centrales hydroélectriques afin de concilier protection environnementale et performance énergétique. L'utilisation du cluster CURTA a significativement réduit les temps de calcul, permettant d'explorer une large gamme de configurations en un temps limité.

Quelques données de consommation 2024 :

- 1,0004,121 processeurs × heures
- 10100 KWh
- 565,6 kgCo2 (équivalent à 1 aller et retour Paris-New York)

4.19 Thermodynamique (LFCR)

unité de recherche : Laboratoire des fluides complexes et leurs réservoirs (LFCR), Pau

correspondant : Romain Vermorel

Du nanomètre à la centaine de kilomètres, 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 CNRS-UPPA, le LFCR est une unité de recherche originale et remarquable à bien des égards. Son positionnement singulier, principalement autour de l'étude du sous-sol dans une perspective énergétique et environnementale 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.

Séparation de gaz par les graphènes nanoporeux (J. Guo, G. Galliero, R. Vermorel)

Ce projet vise la modélisation des mécanismes de perméation et de séparation de mélanges gazeux à travers des membranes de graphène nanoporeux. Malgré les difficultés rencontrées par leur mise à l'échelle des procédés industriels, les propriétés exceptionnelles de ces matériaux en font des candidats prometteurs pour optimiser les techniques de séparation membranaires. Étant donné leur géométrie 2D, les graphènes nanoporeux constituent également des matériaux modèles pour l'étude des mécanismes de tamisage moléculaires à travers des pores de taille sub-nanométrique. Nos approches fondées sur l'utilisation de simulations de dynamique moléculaire (DM) classiques mettent ainsi en évidence que la perméation de gaz à travers ces membranes 2D résulte de la compétition entre la diffusion et l'adsorption au voisinage des pores. La documentation fine de ces mécanismes par DM nous a permis de proposer un modèle théorique analytique qui fait le lien entre la perméance au gaz et l'interaction effective (appelée potentiel de force moyenne - PMF) entre molécule de gaz et atomes de la membrane [1]. Les paramètres de ce modèle, qui prend la forme d'une équation d'Eyring, correspondent à des propriétés bien définies du PMF. Il est ainsi possible de prédire les perméations de différents gaz et les sélectivités pour différents mélanges à partir des PMF, ces derniers pouvant être obtenus par des simulations moins coûteuses en temps de calcul [2]. L'impact de la prise en compte des effets de flexibilité du graphène dans les modèles moléculaires a également été étudié en détails. Nous montrons que la flexibilité a une influence majeure sur les résultats produits dans le régime de tamisage moléculaire où la perméance est extrêmement sensible à la taille des pores en raison des effets stériques. Néanmoins, l'effet de flexibilité se réduit en première approximation à une augmentation de la taille moyenne des pores avec la température, ce qui autorise sa prise en compte de manière simple [3].

Les simulations ont été conduites avec LAMMPS sur le cluster de calcul Curta. En moyenne, une boîte de simulation comportait 4500 atomes répartis suivant une grille MPI de 16 processeurs pour une performance de l'ordre de 900-1400 pas de DM/seconde.

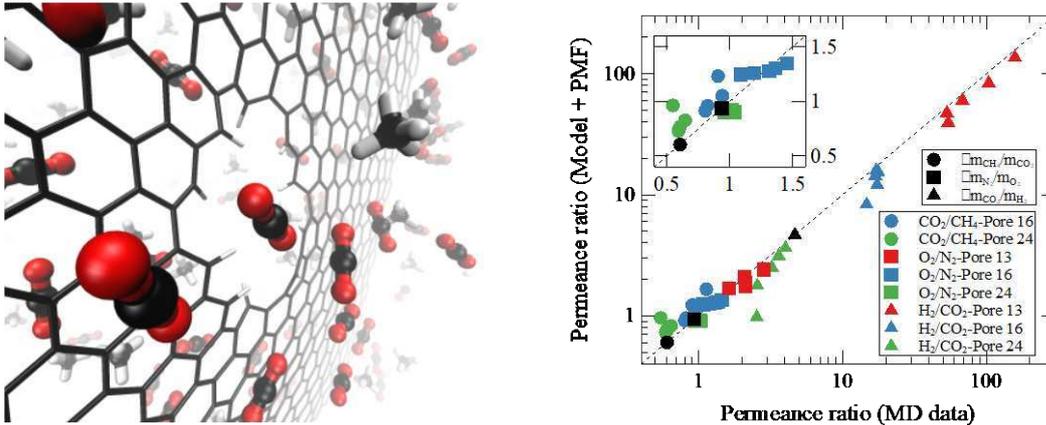


Figure 1 : modèle moléculaire d'un mélange méthane / CO₂ diffusant à travers une membrane 2D de graphène nanoporeux (gauche) ; Perméance prédite par la théorie alimentée par les données de PMF en fonction de la perméance directement calculée par DM (droite).

Références :

- [1] Guo, J., Galliero, G., Vermorel, R., Modeling gas permeation mechanisms through 2D membranes: Comparison between a phenomenological model and extensive molecular simulations, *The Journal of Chemical Physics*, 157, 224704 (2022)
- [2] Guo, J., Galliero, G., Vermorel, R., From molecular sieving to gas effusion through nanoporous 2D graphenes: Comparison between analytical predictions and molecular simulations, *The Journal of Chemical Physics*, 159, 084701 (2023)
- [3] Guo, J., Galliero, G., Vermorel, R., How Membrane flexibility impacts permeation and separation of gas through nanoporous graphenes, *Nano Letters*, 24(39), 12292-12298 (2024).

Contact : Romain Vermorel (romain.vermorel@univ-pau.fr)

Propriétés thermophysiques des fluides impliqués dans le stockage souterrain de l'hydrogène (H. Kerkache, S. Chabab, G. Galliéro)

Les aquifères salins profonds représentent une solution intéressante pour le stockage à grande échelle de l'hydrogène, notamment en raison de leur capacité, de leur disponibilité géographique et de leur aptitude au stockage à long terme, ce qui les rend adaptés aux besoins énergétiques saisonniers. Cependant, une meilleure compréhension des phénomènes physico-chimiques et biochimiques est nécessaire pour évaluer leur impact sur la qualité et la quantité d'hydrogène stocké. Ces phénomènes incluent la dissolution, la diffusion et la réactivité de l'hydrogène dans le milieu.

Pour étudier ces aspects, dans ce projet des simulations de Monte Carlo (MC) et de dynamique moléculaire (DM) ont été employées pour explorer les propriétés thermophysiques de l'hydrogène dans l'eau et la saumure, ainsi que les effets du confinement dans des nanopores d'argile. Les travaux ont porté sur la solubilité de l'hydrogène dans des saumures de NaCl, étudiée sous diverses conditions de température, pression et salinité. Différents champs de force ont été testés afin de mieux prédire ces comportements, et un modèle thermodynamique a été proposé pour estimer la solubilité dans les conditions typiques des réservoirs souterrains [1].

En parallèle, la diffusivité de l'hydrogène a été étudiée à l'aide de méthodes de dynamique moléculaire à l'équilibre et hors équilibre [2]. Ces analyses ont permis de calculer le coefficient

d'autodiffusion en fonction de paramètres tels que la température, la pression et la taille des pores dans des milieux confinés, comme les nanopores d'argile non gonflants (Illite), fréquemment présents dans les réservoirs. Ces données ont été intégrées dans un modèle liant la diffusivité effective dans les pores aux contributions de la surface et du volume. Enfin, des fonctions de distribution radiale ont été utilisées pour examiner la structure microscopique du système H₂-saumure, facilitant une meilleure compréhension des mécanismes en jeu.

Les simulations ont été réalisées avec TOWHEE & BRICK-CFCMC (Monte Carlo) et LAMMPS (Dynamique Moléculaire) en partie sur le cluster de calcul Curta. En moyenne, une boîte de simulation comportait de l'ordre de 2000 molécules (eau, sels, hydrogène) répartis suivant une grille MPI de 16 processeurs pour une performance de l'ordre de quelques centaines de pas de DM/seconde.

Références :

[1] Halla Kerkache, Hai Hoang, Pierre Cézac, Guillaume Galliéro, Salaheddine Chabab, The solubility of H₂ in NaCl brine at high pressures and high temperatures: Molecular simulation study and thermodynamic modeling, *Journal of Molecular Liquids*, 400, 124497 (2024).

[2] Halla Kerkache, Hai Hoang, Tu Khai Nam Nguyen, Antoine Geoffroy-Neveux, Carlos Nieto-Draghi; Pierre Cezac, Salaheddine Chabab, Guillaume Galliero, Assessment of H₂ Diffusivity in Water and Brine for Underground Storage: A Molecular Dynamics Approach, soumis à *International Journal of Hydrogen Energy*.

Contact : Guillaume Galliéro (guillaume.galliero@univ-pau.fr)

