

Grands Challenges Joliot-Curie 2021



GENCI

Le calcul intensif au service de la connaissance

cea



TGCC

Très Grand Centre de calcul du CEA



Grands challenges sur le supercalculateur Joliot-Curie

Conçu par la société Atos pour GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif), le supercalculateur Joliot-Curie, basé sur l'architecture BullSequana d'Atos, a atteint une puissance crête de 22 petaflops en 2020.

Les grands challenges constituent des simulations et calculs exceptionnels qui ont été réalisés lors de la période dite de « Grand challenge ».

Faisant suite à l'installation de la nouvelle partition de calcul AMD ROME du supercalculateur Joliot-Curie de GENCI, cette période constitue une occasion unique pour un nombre d'utilisateurs limité d'accéder à une grande partie des ressources de la machine.



Ils bénéficient alors du support des équipes du TGCC et du constructeur, collaborant ensemble pour optimiser le fonctionnement du calculateur lors de cette phase de « démarrage ».



Table des matières

Impacts des processus de fine-échelle sur la circulation océanique Atlantique	3
L'organisation des nuages tropicaux face au réchauffement climatique.....	4
Simulations avancées du changement d'échelle pour les procédés continus de synthèse des matériaux	5
Simulation numérique directe d'un écoulement de gaz dense dans un canal périodique.....	6
Simulations numériques directes pour améliorer la compréhension de la turbulence induite par les bulles	7
Impact à haute vitesse d'une goutte d'eau	8
Effets de température, de taille et de composition sur le comportement de sels NaX dans des gouttelettes d'eau de la taille d'aérosols marins.....	9
Cardio100G	10
Calcul des doses en radiothérapie avec la simulation Monte-Carlo	11
Simulation numérique de la géodynamo à très haute résolution et dans des conditions quasi-Terrestres	12
Comprendre l'Univers « noir » et la formation de galaxies primordiales - Grand Challenge Extreme-Horizon.....	13
Réduction du fossé entre les simulations numériques et l'expérimentation sur le graphène en suspension libre (free standing)	14
Les limites du continu et de leading twist des fonctions de distribution de partons dans la Chromodynamique quantique (QCD) sur réseau.....	15
Prédire la dynamique d'interaction des Récepteurs Couplés aux Protéines-G avec leurs partenaires intra-cellulaires	16
La mort cellulaire et la catastrophe structurale de son protéome	17
Modélisation prédictive de la structure électronique de complexes d'actinides (PRECISE)	18
Calculs de référence pour la photochimie.....	19
Structure et diffusion du proton hydraté.....	20
Structure des gels lamellaires d'alcools gras.....	21
Impact d'une particule sur une surface solide.....	22
Un calcul GW tout électron sur 1 milliard d'atomes !	23
Influence de la résolution en maillage sur la prédiction de l'écoulement et de l'ambiance dynamique dans un moteur de fusée	24
Haute-fidélité et Intelligence artificielle pour le design des moteurs aéronautiques de demain	25
Simulation massivement parallèle d'écoulements gaz/particules dans un réacteur à lit fluidisé industriel avec une approche n-fluid Euler.....	26
Le calcul intensif de haute fidélité en mécanique des fluides : un outil d'aide à la décision contre la propagation du virus SARS-CoV-2	27
Etude des facteurs favorisant l'interaction SARS-CoV-2/inhibiteurs.....	28

Impacts des processus de fine-échelle sur la circulation océanique Atlantique

Jonathan Gula [1], Sébastien Theetten [2], Gildas Cambon [3], Guillaume Roulet [1]

[1] LOPS/UBO, [2] LOPS/Ifremer, [3] LOPS/IRD

Les processus océaniques de fine échelle correspondent typiquement à des échelles spatiales horizontales de l'ordre de 1 – 10 km, et des échelles temporelles de quelques jours à quelques heures. Ces processus incluent les ondes internes et différents processus de sous-mésoéchelle qui sont visibles sous forme de fronts et de tourbillons. Ces fines échelles sont présentes dans les couches de surface de l'océan, où elles jouent un rôle majeur pour moduler les échanges entre l'océan et l'atmosphère et pour contrôler les flux verticaux de traceurs et d'énergie, mais aussi dans les couches de fond, où elles impactent la dissipation d'énergie et le mélange océanique.

Malheureusement, ces processus ne sont pas résolus pour les modèles océaniques et leur absence conduit à de nombreux biais dans les modélisations de l'océan et du climat.

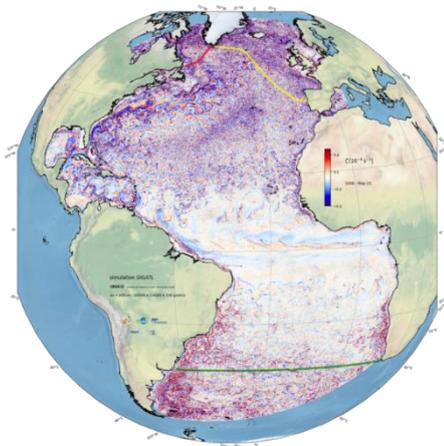


Figure : Vorticité relative de surface (rouge = cyclones, bleu = anticyclones) pour une simulation de l'Atlantique avec une résolution horizontale de 1 km.

Les objectifs de ce grand challenge étaient de quantifier les impacts des processus de fine échelle sur la circulation grande échelle de l'océan Atlantique en les résolvant explicitement grâce à un ensemble de nouvelles simulations numériques de l'océan Atlantique avec le modèle océanique CROCO.

Des simulations réalistes, incluant la marée et les forçages atmosphériques horaires, ont été réalisées pour la première fois avec une résolution horizontale inférieure au kilomètre sur une grille couvrant tout l'océan Atlantique (Figure).

Les données ainsi générées vont permettre d'étudier les interactions entre les différentes échelles spatiales et temporelles de la dynamique et de quantifier les impacts de chacun des processus sur le mélange et la structure de la circulation océanique de grande échelle. Ces impacts

L'exploitation de ces données ne fait que commencer et devrait se poursuivre pendant plusieurs années. Des études déjà réalisées portent sur :

- L'impact des tempêtes sur l'augmentation du mélange profond le long des pentes topographiques par piégeage des ondes proches-inertielles (Qu et al, submitted)
- La prise-en-compte de la structure verticale de la couche de mélange profonde sur l'estimation de l'énergie dissipée par frottement (Ruan et al, submitted)
- L'extraction d'énergie des tourbillons de méso-échelle par les ondes internes (Barkan et al, submitted).

Les données sont aussi actuellement utilisées dans le cadre de plusieurs autres projets (e.g., JPI-Oceans eurec4a-0a, ANR DEEPER, NASA/CNES SWOT) et vont être utiles pour de nombreuses autres applications dans le cadre de collaborations (e.g., dispersion des micro-plastiques, pompe physique de Carbone, etc.).

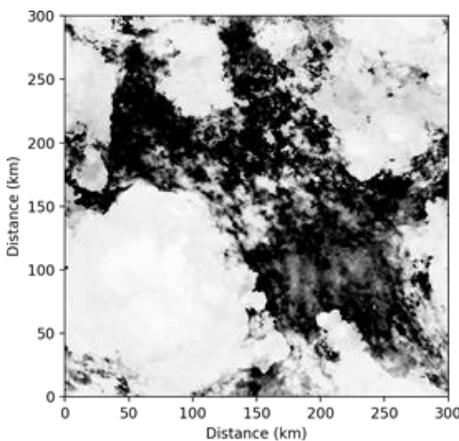


L'organisation des nuages tropicaux face au réchauffement climatique

Jean-Pierre Chaboureau, Juan Escobar, Philippe Wautelet,

Laboratoire d'Aérodologie (Université de Toulouse et CNRS)

Comprendre comment les propriétés des nuages tropicaux varient avec le réchauffement est une question ouverte du changement climatique. En équilibre radiatif-convectif (RCE), les modèles montrent que la convection s'agrège en amas nuageux, rendant l'atmosphère plus sèche avec moins de nuages. Ils divergent cependant dans la réponse de l'agrégation avec le réchauffement. Notre compréhension de cette réponse est en partie limitée par la capacité à résoudre explicitement à la fois la convection dans son ensemble et les détails de ses composantes. La giga-LES (giga pour milliard et LES pour *large-eddy simulation* ou simulation des grands tourbillons) est un outil révolutionnaire car elle résout un large éventail d'échelles, des courants d'air de grand échelle aux tourbillons les plus énergétiques. Un jeu de trois giga-LES de l'atmosphère tropicale a été réalisé selon le protocole de l'exercice RCEMIP (Wing et al. 2018) avec le code communautaire Méso-NH (<http://mesonh.aero.obs-mip.fr/>) développé conjointement par le CNRS, Météo-France et l'université Paul Sabatier. Porté sur l'ensemble des supercalculateurs du GENCI, le code Méso-NH a montré une scalabilité jusqu'à 2 000 000 cœurs virtuels (*threads*, Lac et al. 2018). Le temps de communication pour les entrées sorties a été amélioré par l'emploi de la librairie Global Array.



La configuration choisie est une grille de 333 millions de points avec un maillage horizontal de 200 m. Un total de 110 jours de simulation a été réalisé avec 9216 cœurs, en consommant 20 millions d'heures de calcul et générant 300 To de données.

La figure montre une agrégation modérée de la convection en climat actuel (300 K). Cette agrégation est peu sensible à la température de la surface de la mer. Bien que ce résultat nécessite d'être confirmé avec des simulations à réaliser sur des domaines au moins quatre fois plus grand, il suggère une absence de changement de l'organisation des nuages avec le réchauffement.

Figure : Vue en infrarouge thermique de la GigaLES-RCE par Méso-NH

Références

Lac, C., J.-P. Chaboureau, V. Masson, J.-P. Pinty, P. Tulet, J. Escobar, M. Leriche, C. Barthe, B. Aouizerats, C. Augros, P. Aumond, F. Auguste, P. Bechtold, S. Berthet, S. Bieilli, F. Bosseur, O. Caumont, J.-M. Cohard, J. Colin, F. Couvreux, J. Cuxart, G. Delautier, T. Dauhut, V. Ducrocq, J.-B. Filippi, D. Gazen, O. Geoffroy, F. Gheusi, R. Honnert, J.-P. Lafore, C. Lebeaupin Brossier, Q. Libois, T. Lunet, C. Mari, T. Maric, P. Mascart, M. Mogé, G. Molinié, O. Nuissier, F. Pantillon, P. Peyrillé, J. Pergaud, E. Perraud, J. Pianezze, J.-L. Redelsperger, D. Ricard, E. Richard, S. Riette, Q. Rodier, R. Schoetter, L. Seyfried, J. Stein, K. Suhre, O. Thouron, S. Turner, A. Verrelle, B. Vié, F. Visentin, V. Vionnet, and P. Wautelet, Overview of the Meso-NH model version 5.4 and its applications, *Geosci. Model Dev.*, 11, 1929-1969, 2018. <https://doi.org/10.5194/gmd-11-1929-2018>

Wing, A. A., C. L. Stauffer, T. Becker, K. A. Reed, M.-S. Ahn, N. P. Arnold, S. Bony, M. Branson, G. H. Bryan, J.-P. Chaboureau, S. R. de Roode, K. Gayatri, C. Hohenegger, I.-K. Hu, F. Jansson, T. R. Jones, M. Khairoutdinov, D. Kim, Z. K. Martin, S. Matsugishi, B. Medeiros, H. Miura, Y. Moon, S. K. Müller, T. Ohno, M. Popp, T. Prabhakaran, D. Randall, R. Rios-Berrios, N. Rochetin, R. Roehrig, D. M. Romps, J. H. Ruppert Jr., M. Satoh, L. G. Silvers, M. S. Singh, B. Stevens, L. Tomassini, C. C. van Heerwaarden, S. Wang, and M. Zhao, Clouds and convective self-aggregation in a multi-model ensemble of radiative-convective equilibrium simulations, *J. Adv. Model Earth Syst.*, 12, e2020MS002138, 2020. <https://doi.org/10.1029/2020MS002138>



Simulations avancées du changement d'échelle pour les procédés continus de synthèse des matériaux

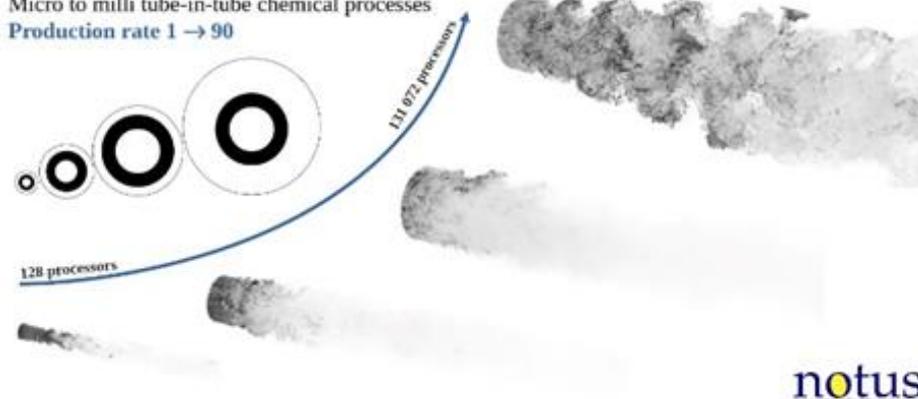
S. Glockner, A.M.D. Jost, A. Erriguible,
Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux

Nous avons proposé dans ce challenge l'utilisation d'un supercalculateur pétaflopique pour aborder le problème ouvert du changement d'échelle pour les procédés continus de synthèse des matériaux. Parmi les approches conventionnelles de la précipitation de nanoparticules, les procédés microfluidiques de CO₂ (anti-solvant) en conditions turbulente et supercritique ont prouvé leur efficacité pour contrôler le mélange et améliorer les performances du réacteur. Toutefois, il convient de noter que les débits massiques utilisés dans les microréacteurs sont beaucoup plus faibles que ceux utilisés pour de plus grands réacteurs discontinus. Par conséquent, même si les premiers offrent d'excellentes performances de mélange, les seconds ont le gros avantage d'avoir des taux de production plus élevés. La question qui a donc justifié ce challenge est de savoir si un réacteur continu peut fonctionner avec les mêmes débits qu'un réacteur discontinu tout en conservant d'excellentes performances de mélange.

La stratégie de changement d'échelle est basée sur la conservation du taux de dissipation turbulente dans le réacteur, combinée à des simulations avancées aux différentes échelles et à une analyse approfondie des effets de l'augmentation des dimensions sur les performances de mélange. Des simulations numériques directes de 55 millions à 11 milliards de points (jusqu'à 131 072 processeurs) captant les échelles de Kolmogorov et de Batchelor ont été réalisées dans des micro/milli-réacteurs tout en maintenant la même précision de la description des phénomènes physiques. Elles conduisent à une estimation qualitative fiable de la performance du mélange pour les différents scénarios de dimensionnement. Le code open-source Notus (<https://notus-cfd.org>) a été utilisé en mettant en œuvre une stratégie d'explicitation des schémas numériques. Cette approche tire parti des caractéristiques physiques favorables du fluide qui ne réduisent pas de manière significative la condition de Courant-Friedrichs-Lewy et maintiennent ainsi un nombre total d'itérations temporelles raisonnable. Le seul système linéaire à résoudre est celui associé à la pression pour lequel la bibliothèque de solveurs parallèles Hypr est utilisée. Afin de surmonter la saturation des échanges de message MPI pour un grand nombre de processeurs, un changement de paradigme de la programmation parallèle mise en œuvre dans Notus a été réalisé (passage à une approche hybride OpenMP/MPI). Une analyse des performances a montré qu'un nombre de cellules par cœur de 40³ permet d'obtenir une très bonne scalabilité faible jusqu'à 131 072 cœurs (8 threads OpenMP par processus MPI).

Les simulations ont montré qu'il est possible d'augmenter le volume du réacteur continu - de l'échelle de laboratoire/académique à l'échelle de production/industrielle - tout en maintenant une excellente qualité de mélange, ce qui est très favorable au processus de synthèse des matériaux. Des taux de production jusqu'à deux ordres de grandeur plus élevés ont été vérifiés. Ces travaux ont montré que le calcul haute performance est un outil émergent et efficace pour l'analyse de différents scénarios de mise à l'échelle ou de conception de réacteurs dans le domaine du génie chimique.

Micro to milli tube-in-tube chemical processes
Production rate 1 → 90



Synoptique de l'étude de changement d'échelle micro-milli d'un réacteur continu.

Rendus volumiques des champs de concentration instantanée aux différentes échelles.

notus

Simulation numérique directe d'un écoulement de gaz dense dans un canal périodique

A. Giauque, Christophe Corre, Paolo Errante

Ecole Centrale Lyon/LMFA

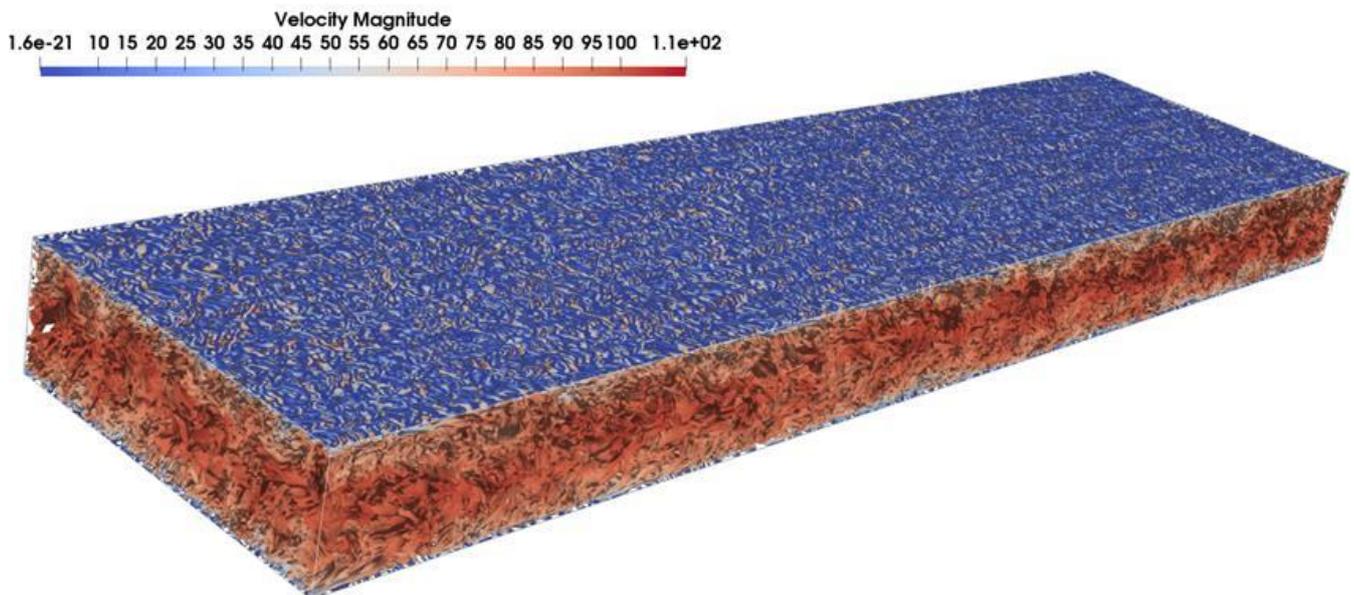
L'objectif du grand challenge EDGES est d'étudier le comportement de la turbulence en canal dans un écoulement supersonique de gaz dense proche du point critique.

Deux simulations numériques directes ont été réalisées grâce au code de calcul fluide AVBP. La première pour un nombre de Mach égal à 3 et la seconde pour un nombre de Mach hypersonique égal à 6.

Ces résultats nous ont permis de mettre en évidence la présence, dans ce contexte, de nouveaux termes de sous-maille à modéliser pour réaliser des simulations aux grandes échelles de ces écoulements.

Ces résultats font désormais partie d'une plus large base de données comprenant d'autres types d'écoulements de gaz denses (THI, couche de mélange).

Plus de 30 milliards d'échantillons sont présents dans cette base de données, qui est actuellement utilisée pour construire à l'aide de l'intelligence artificielle (réseaux de neurones) de nouveaux modèles de turbulence pour ces fluides complexes, à l'attention de la simulation aux grandes échelles. Les résultats obtenus grâce à ce grand challenge devraient être valorisés sous peu à travers un article soumis à Physics of Fluids.



La figure ci-dessus présente des iso-surfaces de critère Q colorées par la norme de la vitesse dans l'écoulement.



Simulations numériques directes pour améliorer la compréhension de la turbulence induite par les bulles

Guillaume Bois, Antoine du Cluzeau, Alan Burlot

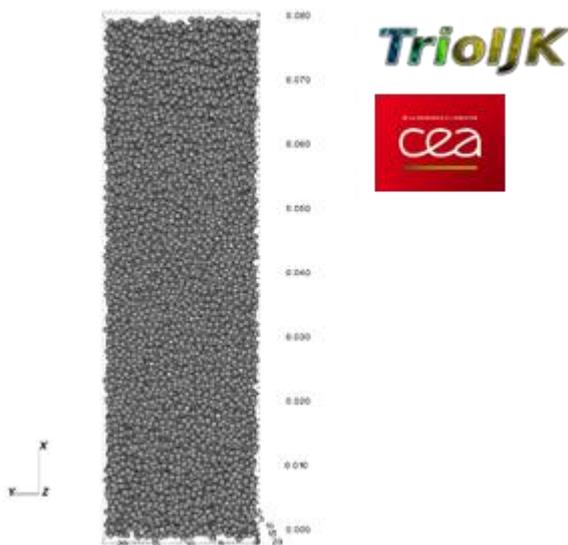
CEA/DES/ISAS/DM2S/STMF/LMSF

Les écoulements diphasiques présentent un intérêt pour l'étude des performances de nombreux échangeurs thermiques basés sur l'ébullition.

Ils sont généralement étudiés par des modèles moyennés à deux fluides (RANS), seuls à même d'étudier des configurations industrielles. En revanche, ces modèles reposent sur une caractérisation de la turbulence très complexe.

Des travaux récents montrent que les fluctuations de vitesse dans le liquide, induites par la présence de bulles ont plusieurs origines.

Pour les comprendre finement, la simulation numérique directe (DNS) est un formidable outil. Nous l'employons pour simuler des essais homogènes de bulles avec représentation explicite des interfaces, afin de produire des données statistiques qui permettent de renseigner les relations de fermeture des modèles RANS.



Ce grand challenge a permis d'approfondir ces travaux en fournissant des données pour des domaines plus grands, incluant jusqu'à 30 000 bulles, pour des taux de vides plus élevés (jusqu'à 36% contre 6% étudiés précédemment) et à des nombres de Reynolds assez élevés ($Re_B \approx 400$), tout en résolvant précisément toutes les échelles de l'écoulement.

L'originalité du cas repose dans la taille du domaine simulé.

A notre connaissance, il n'existe pas de publication de simulations numériques directes diphasiques avec résolution explicite des interfaces sur un domaine aussi large (plus de 30 000 bulles résolues).

Figure : Simulation d'un essaim de 22 300 bulles libres

à $Re_b = 400$ et un taux de vide $\alpha = 36\%$

L'innovation de ce grand challenge concernait la taille de l'essaim qui conduit à une augmentation du maillage pour franchir 500Mons d'éléments.

Cette limite posait des contraintes informatiques techniques (int64) qui ont pu être levées.

Des analyses de performance et de scaling du code ont aussi permis de constater de forts ralentissements de certaines parties de l'algorithme, spécifiquement en lien avec le suivi du maillage lagrangien décrivant les bulles.

Ces difficultés sont un frein technique important à la collecte de statistiques nécessaire à l'analyse physique ; ils ouvrent la voie à de nouveaux travaux.

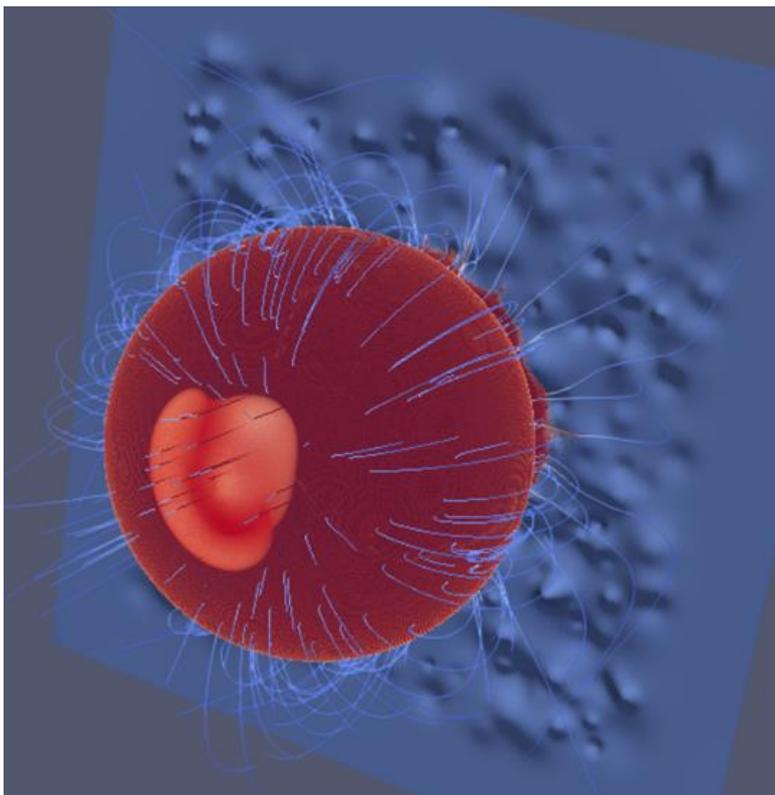
Ce grand challenge a aussi permis de démontrer la faisabilité de nouvelles études, actuellement en cours dans le cadre de thèses.

Impact à haute vitesse d'une goutte d'eau

Edouard Audit, Julien Derouillat, Pierre Kestener, Samuel Kokh, Martial Mancip, Thomas Padioleau [1], Pascal Tremblin
CEA

Lorsque la puissance d'un réacteur nucléaire augmente, cela conduit à abaisser la pression dans le circuit secondaire et donc diminuer le titre vapeur. Ce dernier peut descendre jusqu'à 0.97 et ainsi provoquer l'apparition de gouttelettes d'eau à haute vitesse. Lors du changement de direction du circuit, les gouttelettes impactent les parois qui peuvent ainsi être endommagées et accélérer le vieillissement du matériel. Une estimation de ce vieillissement est donc importante, notamment pour les réacteurs nucléaires embarqués.

L'objectif principal de ce grand challenge est d'étudier le champ de pression à haute résolution développé lors de l'impact d'une goutte d'eau contre une paroi rigide présentant des défauts, modélisant des impacts antérieurs. La goutte d'eau est initialement à 40 m.s^{-1} dans de la vapeur d'eau à 30 bars. La dynamique est résolue par un modèle diphasique compressible, Homogeneous Equilibrium Model, à partir d'un modèle aux 5 équations avec retour instantané à l'équilibre thermodynamique. Le schéma de discrétisation s'appuie sur un splitting d'opérateur acoustique-transport. Ce schéma est implémenté dans une version diphasique du code ARK [2]. La parallélisation du code est quant à elle réalisée à partir du modèle de programmation hybride MPI+Kokkos permettant ainsi sa portabilité sur la majorité des architectures HPC dont les biprocesseurs AMD Rome Epyc du calculateur.



Lors de ce Grand Challenge deux simulations ont été réalisées à résolution $1'024^3$ et $2'048^3$ soit 1,07 et 8,58 milliards de cellules respectivement sur 2292 nœuds et pour un total de 13 millions d'heures de calcul.

Les deux simulations ont mis en évidence le développement de pics de pression secondaires après l'impact initial.

Les défauts de la paroi ont eu pour effet de focaliser le liquide de la goutte et ainsi d'atteindre des pressions encore supérieures au premier pic de pression.

Figure : Représentation volumique de la goutte d'eau (rouge) après impact sur une paroi présentant des défauts. Une zone de vapeur (en clair) apparaît à l'arrière de la goutte sous l'effet de la cavitation.

[1] thomas.padioleau@cea.fr

[2] <https://gitlab.erc-atmo.eu/erc-atmo/ark>

Effets de température, de taille et de composition sur le comportement de sels NaX dans des gouttelettes d'eau de la taille d'aérosols marins

Valérie Vallet [1], Michel Masella [2]

[1] Laboratoire PhLAM, Université de Lille, France

[2] CEA Direction de la Recherche Fondamentale, Institut Joliot.

Malgré le rôle majeur joué par les phénomènes physico-chimiques à l'interface de gouttelettes d'eau dans les phénomènes climatiques, de pollution atmosphérique ou encore de corrosion, ceux-ci sont encore difficilement étudiés expérimentalement.

Récemment nous avons proposé de nouveaux modèles physiques (en particulier polarisables) permettant de décrire de manière précise les interactions microscopiques entre des molécules d'eau et des sels usuels de type NaX (X=F-, Cl-, Br- et I-) qui constituent les composants principaux des aérosols marins.

Dans le cadre de ce grand challenge nous avons réalisé des simulations (à des températures allant de -25 à +45 °C) de gouttelettes d'eau contenant les sels précédents dans des concentrations usuellement observées dans des eaux saumâtres et de mer, mais également plus élevées (proche de la saturation). Le rayon de ces gouttelettes varie de 2 à 20 nm (les plus grandes correspondant à la taille typique d'aérosols marins, elles comprennent de l'ordre de 3 millions d'atomes).

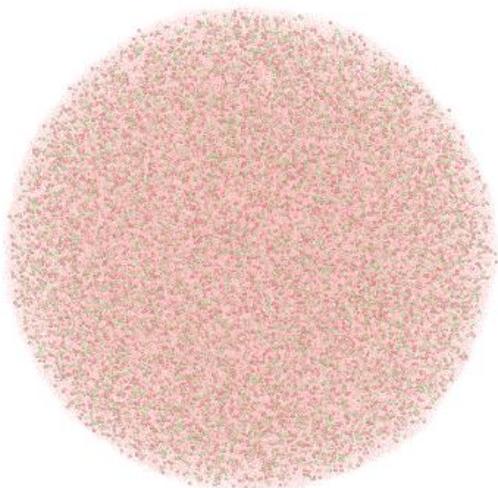


Figure : Gouttelette contenant 1 million de molécules d'eau (représentées de manière transparentes) et du sel NaCl (sphères rouges et vertes) à la concentration de l'eau de mer, simulée à température ambiante à l'aide du code parallèle POLARIS(MD) et de 4096 cœurs AMD-Rome.

Nos simulations montrent des différences de comportement marquées pour un même sel lorsqu'il est situé au cœur et en surface de ces gouttelettes et des différences de comportement tout aussi marquées entre les différents sels.

Nos simulations montrent également l'apparition de clusters de sels précurseurs de cristaux proprement dits.

Ces simulations nous ont également permis d'étudier la convergence des comportements de ces gouttelettes en fonction de leur taille et donc de définir une taille raisonnable de tels systèmes permettant de simuler efficacement le comportement de vrais aérosols marins.

Outre l'ensemble des résultats générés lors de ce grand challenge qui feront l'objet de plusieurs publications, les gouttelettes étudiées vont nous servir de point de départ pour de nouvelles simulations numériques ayant pour objectif l'étude du comportement de polluants comme l'acide pyruvique dans des aérosols usuels et pour lesquels les rares données expérimentales disponibles sont difficilement interprétables.



Cardio100G

Mark Potse, Emmanuelle Saillard, Denis Barthou, Yves Coudière

INRIA

Les arythmies cardiaques sont une cause fréquente de santé dégradée et de décès, faisant même des victimes jeunes et apparemment saines. La présence d'anomalies structurelles dans le tissu cardiaque constitue un facteur important de déclenchement et de maintien de ces arythmies. Perturbant la communication électrique entre les cellules, ces anomalies facilitent l'apparition spontanée d'ondes d'activation électrique du muscle cardiaque qui tournent sur elles-mêmes, et provoquent des battements cardiaques trop rapides et inefficaces.

Pour mieux comprendre le rôle de ces anomalies structurelles dans les arythmies et trouver des moyens de diagnostic, nous avons besoin de raffiner nos modèles numériques du tissu cardiaque et de son comportement électrique, qui sont actuellement composés de 10 à 100 millions d'éléments avec une trentaine de variables par élément.

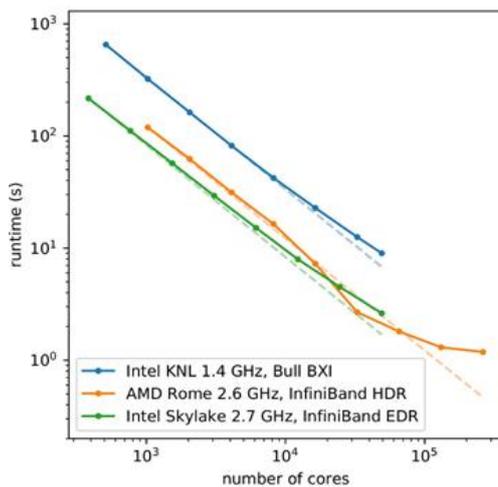


Figure : Performance du code sur un modèle relativement modeste comportant 168 millions d'éléments : comparaison de différentes architectures.

Le projet Cardio100G visait donc à mesurer la performance d'un code de simulation cardiaque existant sur la totalité de la partition AMD Rome.

Ces tests ont été effectués avec des simulations comportant jusqu'à 11 milliards d'éléments.

Ils ont d'abord permis d'identifier des verrous, tels que des limitations dans le parallélisme par fil d'exécution sur l'architecture Rome, et des limites sur le nombre de processus qui pourraient contribuer efficacement aux entrées et sorties de données, et à la procédure de décomposition de domaine.

Après avoir modifié le code pour n'affecter qu'une partie des processus à ces tâches nous avons pu démontrer son efficacité sur jusqu'à 262 144 cœurs de calcul.

Au-delà de dix mille cœurs de calcul, la partition AMD Rome s'avérait plus performante que la partition Skylake, pourtant cadencée un peu plus rapide.

Les résultats du projet ont été publiés [1] et l'expertise gagnée a contribué au montage du projet EuroHPC MICROCARD [2], lancé le 1^{er} avril 2021, qui vise à développer un code pouvant simuler des modèles encore 100 fois plus grands sur les futurs calculateurs exaflopiques.

[1] Mark Potse, Emmanuelle Saillard, Denis Barthou, et Yves Coudière: Feasibility of Whole-Heart Electrophysiological Models with Near-Cellular Resolution. Dans: Computing in Cardiology, septembre 2020.

<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02943513> https://www.cinc.org/2020/Program/accepted/126_CinCFinalPDF.pdf

[2] <https://microcard.eu>



Calcul des doses en radiothérapie avec la simulation Monte-Carlo

Sonia Martinot, Norbert Bus, Nikos Paragios

Therapanacea

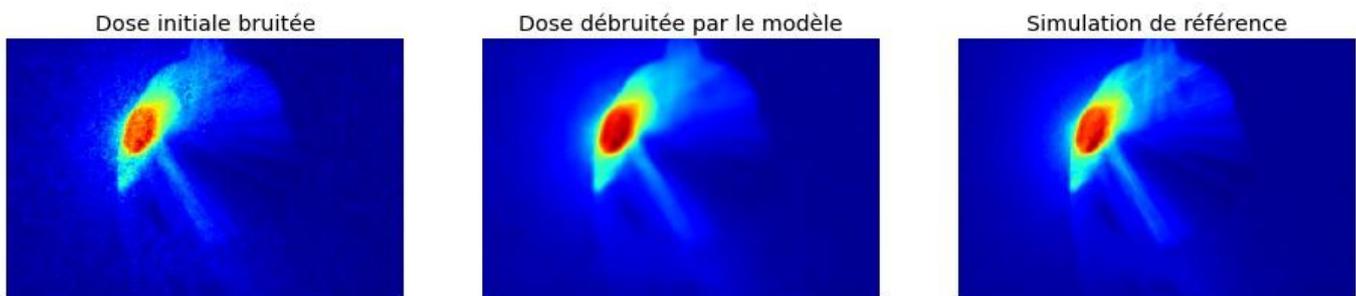
Le calcul des doses est crucial aujourd'hui pour la radiothérapie. En effet, les plans de traitements sont conçus et validés à partir d'une simulation du dépôt de dose dépendant de paramètres choisis par le médecin. Or, le calcul des doses Monte-Carlo reste à ce jour le plus précis, mais est sous-utilisé en pratique à cause des temps de calcul qui sont prohibitifs pour converger.

Le but du projet est d'explorer l'utilisation du deep learning, en particulier les réseaux récurrents long short-term memory (LSTMs), pour accélérer la convergence de la méthode et la rendre utilisable en clinique.

Pour entraîner ces modèles d'apprentissage profond, il est indispensable d'avoir un jeu de données suffisant.

Sur le supercalculateur Joliot-Curie situé au TGCC, nous avons donc calculé 50 simulations de doses selon les plans de traitement par arc-thérapie volumétrique par modulation d'intensité de 50 patients.

L'accélérateur linéaire utilisé pour le calcul Monte-Carlo, a été modélisé avec OpenGate. Afin d'obtenir une simulation finale avec un maximum de 3% d'incertitude sur la dose déposée dans un voxel, il a été nécessaire de simuler 10^{11} particules pour chaque patient. Pour plus d'efficacité, cette simulation a été parallélisée en 1 000 sous-simulations à 10^7 particules par patient.



Ainsi, chaque simulation globale a nécessité environ 4000 heures de calcul sur 4 cœurs (soit environ 16 000 heures comptabilisées sur Joliot-Curie). Grâce au jeu de données généré, nous avons pu entraîner des réseaux de neurones basés sur les LSTMs à accélérer le calcul Monte-Carlo de dose.

Les résultats de ces études seront publiés dans plusieurs conférences :

- Fast Monte-Carlo dose simulation with recurrent deep learning, ESTRO 2021,
- Weakly-supervised 3DConvLSTMs for Monte-Carlo radiotherapy dose simulations, MIDL 2021
- High-particle simulation of Monte-Carlo dose distribution with 3D ConvLSTMs, MICCAI 2021.

Simulation numérique de la géodynamo à très haute résolution et dans des conditions quasi-Terrestres

Julien Aubert, Thomas Gastine

Institut de Physique du Globe de Paris

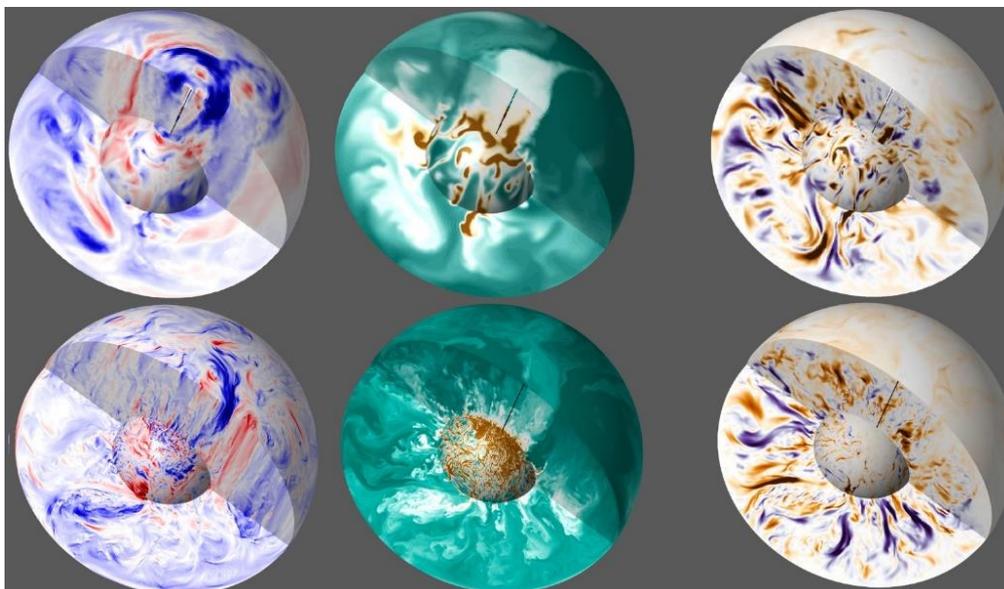
Le champ magnétique de la Terre est produit en son noyau métallique fluide par un mécanisme de dynamo auto-entretenu. La source d'énergie de ce mécanisme est le refroidissement de la planète, qui entretient une convection intensément turbulente dans le noyau. Le système physique décrivant la géodynamo fait donc intervenir une très large disparité d'échelles spatiales et temporelles, ce qui représente classiquement un obstacle pour toute simulation numérique.

Notre groupe a développé ces dernières années une approche théorique permettant de relier les conditions physiques des modèles numériques à celles de la Terre le long d'un chemin théorique dans l'espace des paramètres physiques du système.

Le long de ce chemin, le système préserve sa structure à grande échelle spatiale mais l'augmentation progressive de la turbulence hydrodynamique enrichit graduellement son contenu en petites échelles.

Précédemment (Aubert 2019), nous avons élaboré une théorie décrivant cette disparité d'échelles spatiales, mais nous n'avions pas pu la valider dans des conditions extrêmes du fait de limitations numériques.

L'allocation d'heures du Grand Challenge nous a permis de réaliser une simulation numérique avancée à 36% du chemin théorique décrit ci-dessous, de caractériser la distribution d'échelles spatiales de la turbulence, et de valider notre approche théorique. Ces résultats permettent d'évaluer le degré de séparation d'échelles dans le noyau de la Terre ainsi que les détails de l'équilibre des forces qui régit la géodynamo.



Aubert, J.: Approaching Earth's core conditions in high resolution geodynamo simulations, *Geophysical Journal International* 219 S1, S137-S151, 2019, doi: 10.1093/gji/ggz232.

Figure : Coupes de la simulation numérique présentant le champ de vitesse longitudinale (gauche), le champ d'anomalie de densité (au milieu) et le champ magnétique radial (à droite), dans une simulation numérique peu turbulente (ligne du haut) et dans la simulation numérique avancée réalisée au cours du Grand Challenge (ligne du bas).

Le long du chemin théorique qui relie ces deux simulations, la turbulence hydrodynamique affectant le champ de vitesse et le champ d'anomalie de densité augmente fortement, ce qui implique un enrichissement de la solution en petites échelles d'espace. Le degré de turbulence magnétique est en revanche préservé, ce qui implique que le champ magnétique reste à grande échelle et préserve sa structure spatiale.



Comprendre l'Univers « noir » et la formation de galaxies primordiales - Grand Challenge Extreme-Horizon

Eric Armengaud, Ricarda Beckmann, Frédéric Bournaud, Olivier Bressand, Solène Chabanier, Damien Chapon, Sandrine Codis, Julien Devriendt, Yohan Dubois, David Elbaz, Raphael Gavazzi, Katarina Kraljic, Taysun Kimm, Clotilde Laigle, Jean-Baptiste Lekien, Garreth Martin, Nathalie Palanque-Delabrouille, Sébastien Peirani, Christophe Pichon, Pierre-Franck Piserchia, Adrienne Slyz, Maxime Trebitsch, Christophe Yèche.

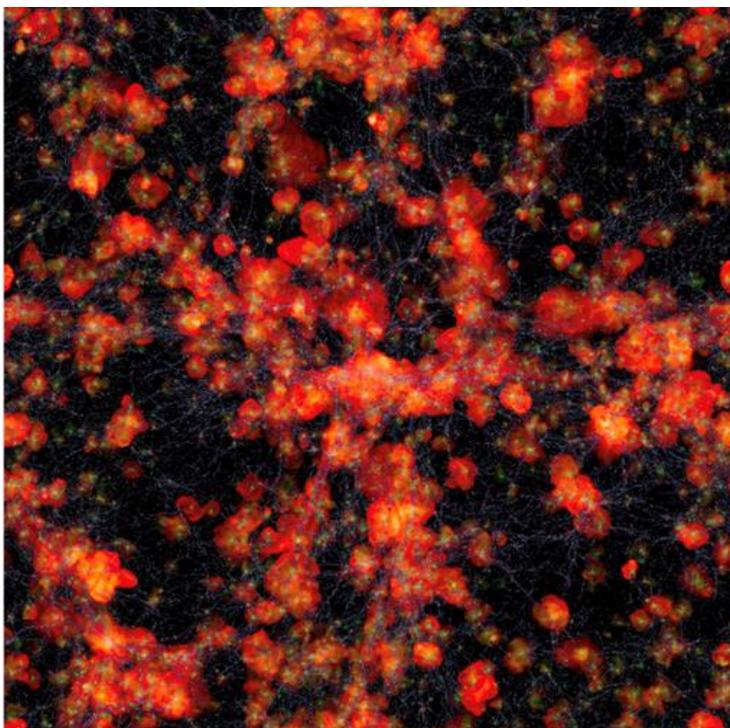
Collaboration CEA, CNRS, Sorbonne Université et Université Paris-Saclay

La collaboration Extreme-Horizon a produit une simulation inédite de l'évolution des structures cosmiques – galaxies, étoiles et trous noirs supermassifs – qui débute quelques instants après le Big-Bang et se poursuit jusqu'à aujourd'hui. Les régions intergalactiques qui représentent 90 % du volume de l'Univers y sont décrites avec une résolution sans précédent.

Cette simulation, qui conduit à deux résultats surprenants aux échelles galactiques et cosmologiques, a fait l'objet le 4 novembre 2020 d'une publication dans MNRAS et A&A Letters.

Le premier résultat de cette simulation concerne l'interprétation de grandes structures de l'Univers lointain : les « nuages » d'hydrogène intergalactiques. Par ailleurs, la haute résolution de la simulation Extreme-Horizon dans les régions de faible densité a permis de décrire l'accrétion de gaz « froid » sur les galaxies et la formation des galaxies massives ultra-compactes lorsque l'Univers n'avait que 2 à 3 milliards d'années.

Figure : Vue de la simulation Extreme-Horizon.



Le rouge correspond au gaz chaud, généralement expulsé des galaxies par les trous noirs supermassifs.

Le gris correspond au gaz primordial, froid, qui alimente les galaxies le long des filaments cosmiques.

Le vert correspond au gaz enrichi en éléments lourds (métaux) sous l'effet des explosions d'étoiles massives (supernovae).

Cette simulation a utilisé cinquante millions d'heures de calcul et a nécessité la mise en œuvre de nouvelles techniques de lecture et d'écriture des données afin de réduire l'utilisation de l'espace disque et accélérer l'accès aux données.

Plus d'informations : [Espace Presse - Comprendre l'Univers « noir » et la formation de galaxies primordiales \(cea.fr\)](https://cea.fr/GrandChallenge/Extreme-Horizon)



Réduction du fossé entre les simulations numériques et l'expérimentation sur le graphène en suspension libre (free standing)

Investigateur Principal : Dr. Savvas Zafeiropoulos, (CNRS, CPT Marseille)

Collaborateurs externes: Prof. Dr. Fakhre Assaad (Universität Würzburg, Allemagne), Dr. Maksim Ulybyshev (Universität Würzburg, Allemagne), Dr. Christopher Winterowd (Universität de Francfort, Allemagne)

Depuis sa découverte expérimentale en 2004, le graphène a attiré l'attention de la communauté de la matière condensée et de la physique des hautes énergies. Ceci est en partie dû au fait que ses excitations électroniques de basse énergie peuvent être décrites par une variante de l'électrodynamique quantique (QED).

Dans notre récente prépublication (<https://arxiv.org/pdf/2104.09655.pdf>), nous rapportons les résultats de simulations quantiques Monte Carlo (QMC) à grande échelle du graphène. Grâce à des améliorations algorithmiques de pointe, nous sommes capables de considérer des volumes spatiaux, correspondant à 20 808 électrons, qui nous permettent d'accéder à des échelles d'énergie bien plus pertinentes pour les expériences. En utilisant des estimations par approximation de phase aléatoire contrainte (cRPA) des interactions à courte distance combinées à une queue de Coulomb semblable au vide, nous sommes en mesure de confronter avec succès les estimations numériques et expérimentales de la renormalisation de la vitesse de Fermi. Ces résultats et leur comparaison avec la théorie des perturbations montrent non seulement le caractère liquide non-Fermi du graphène, mais prouvent également l'importance de la physique à l'échelle du réseau pour la description quantitative des données expérimentales pour la renormalisation de la vitesse de Fermi.

Nous nous concentrons sur l'étude de la vitesse de Fermi. La renormalisation de cette quantité dans l'infrarouge a déjà été observée dans plusieurs expériences. Bien qu'un certain nombre de calculs théoriques aient été effectués en utilisant une approche perturbative, il n'y a toujours pas de comparaison complète avec des calculs entièrement non perturbatifs. Comme la renormalisation de la vitesse de Fermi est un effet infrarouge, des calculs QMC sur de grands réseaux sont nécessaires pour résoudre cette fenêtre de petites impulsions.

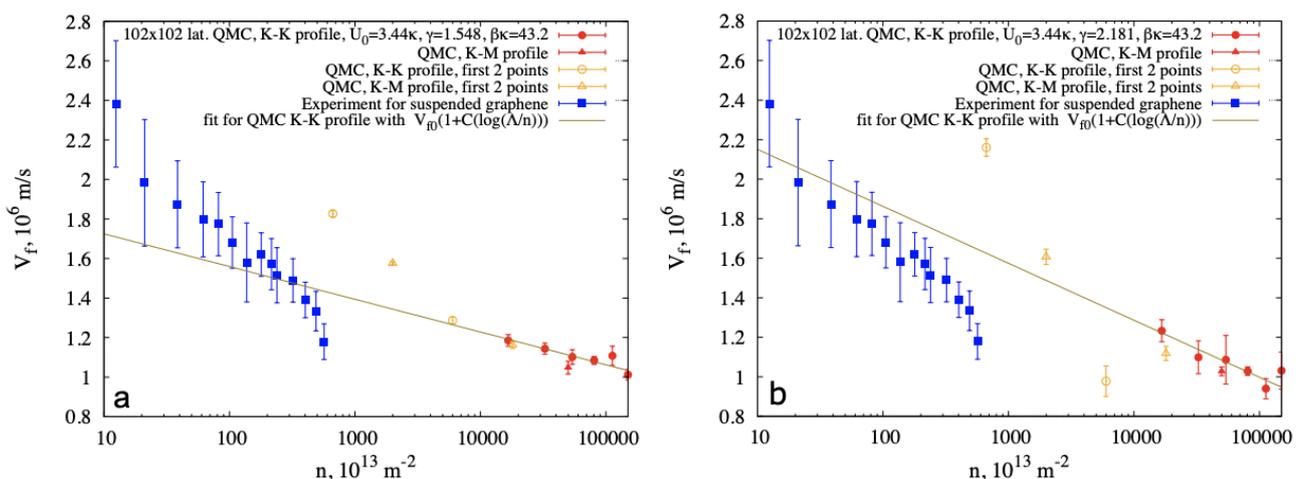


Figure : Comparaison des résultats expérimentaux pour le graphène en suspension avec les données QMC obtenues avec les variantes potentielles I et II. Ce dernier correspond au graphène en suspension, tandis que le premier a une queue de Coulomb réduite.

Les ressources de l'Irène Joliot-Curie ont rendu ce calcul possible et il vaut la peine de mentionner qu'il s'agit du premier calcul ab-initio de cette ampleur dans le domaine de la physique de la matière condensée utilisant ces grandes tailles de systèmes.



Les limites du continu et de leading twist des fonctions de distribution de partons dans la Chromodynamique quantique (QCD) sur réseau

Investigateur Principal : Dr. Savvas Zafeiropoulos, (CNRS, CPT Marseille)

Collaborateurs externes: Dr. Joseph Karpie (Columbia University, USA), Prof. Dr. Konstantinos Orginos (College of William&Mary and Jefferson Lab, USA), Prof. Dr. Anatoly Radyushkin (Old Dominion University and Jefferson Lab, USA)

Un objectif clé du programme de physique nucléaire est une description des premiers principes de la structure des hadrons à partir de la chromodynamique quantique (QCD), la théorie des interactions fortes. Notre connaissance de la structure des hadrons est résumée dans une variété de mesures. Depuis les premières observations de la mise à l'échelle de Bjorken (Bjorken scaling) dans la diffusion inélastique profonde, une description longitudinale unidimensionnelle du nucléon a été fournie par le biais des fonctions de distribution de partons (PDF) non polarisées et polarisées. Afin de décrypter les informations provenant des expériences du Grand collisionneur de hadrons (LHC), et afin de capitaliser au maximum le potentiel du futur collisionneur électron-ion (EIC), il est d'une importance vitale de déterminer avec précision les PDFs. Le calcul de la distribution des impulsions que les quarks et les gluons liés transportent dans le proton est un problème non perturbatif qui, en raison de la nature du cône de lumière des PDF était insaisissable pour les calculs QCD sur réseau jusqu'à très récemment. Lattice QCD permet le calcul de la structure non perturbative du nucléon à partir des premiers principes. Cependant, le calcul LQCD a lieu dans une version discrétisée de l'espace-temps euclidien et une étape clé de chaque calcul de ce type est ce qu'on appelle la limite du continu. Dans notre récente préimpression (<https://arxiv.org/abs/2105.13313>), nous parvenons à obtenir cela pour la première fois pour la méthode des pseudo-PDFs et c'est une étape très importante dans notre domaine. Les ressources d'Irène Joliot-Curie ainsi que d'autres ressources en Allemagne et aux États-Unis ont rendu cela possible.

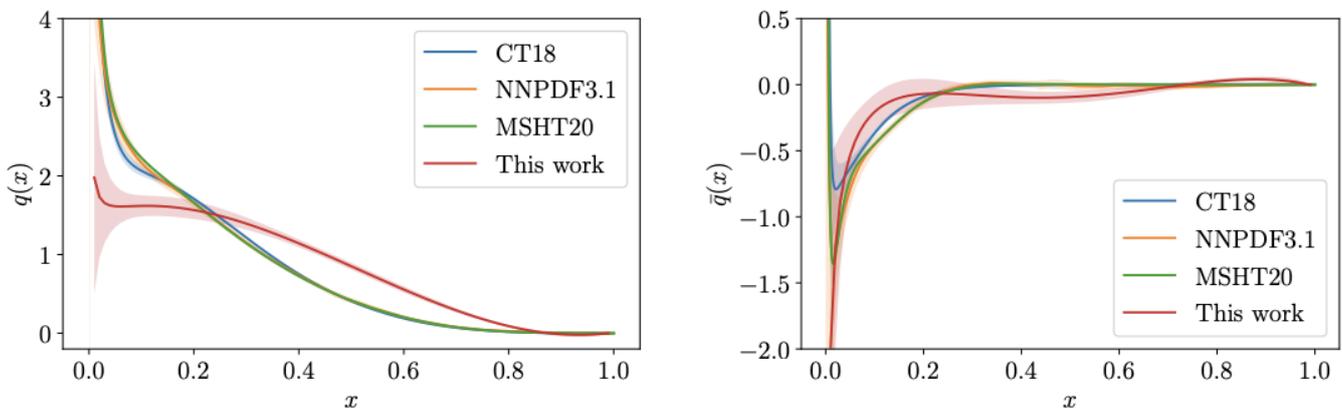


Figure : Les PDFs pour les quarks (à gauche) et les antiquarks (à droite) de notre calcul avec les extractions phénoménologiques pertinentes.

Prédire la dynamique d'interaction des Récepteurs Couplés aux Protéines-G avec leurs partenaires intra-cellulaires

Maxime LOUET, Antoniel GOMES, Nicolas FLOQUET

Institut des Biomolécules Max Mousseron (IBMM), CNRS UMR5247, Université de Montpellier, ENSCM

Les Récepteurs Couplés aux Protéines-G (RCPGs) forment, chez l'homme, une famille de protéines de plus de 800 membres et sont ciblés par près de 40% des médicaments actuellement sur le marché. Depuis quelques années nous testons l'utilisation de modèles gros-grains (ou Coarse-Grained) pour prédire la dynamique d'interaction de ces récepteurs membranaires avec leurs différents partenaires extra- [1,2] ou intra-cellulaires.

Cette phase de grand challenge sur la machine IRENE JOLIOT-CURIE nous a permis d'améliorer notre protocole et de l'optimiser de telle sorte qu'il consomme aujourd'hui près de 5 fois moins d'heures qu'auparavant.

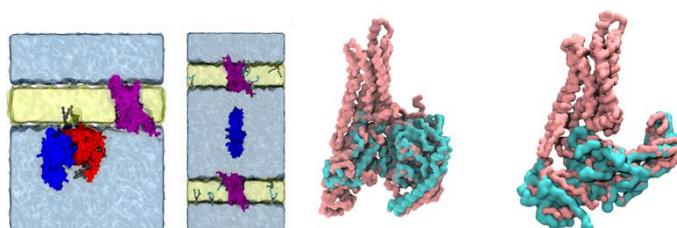
De nombreuses simulations de dynamique moléculaire de l'ordre de la milliseconde ont pu être obtenues et ce sur de nombreux systèmes (différents couples récepteur : partenaire) en utilisant Gromacs et le champ de forces MARTINI [3].

Nos calculs ont permis de valider notre protocole et de montrer que ces modèles gros-grains étaient capables de prédire sans aucune contrainte inter-moléculaire appliquée, le couplage de ces récepteurs clé à leurs deux principales familles de protéines intra-cellulaires partenaires : les protéines-G et la bêta-arrestine. Nous espérons maintenant aller plus loin et prédire / expliquer la sélectivité de ces interactions à l'échelle moléculaire pour ensuite guider des expériences qui pourront être menées au sein du laboratoire.

Figure :

A gauche : systèmes typiques utilisés lors nos calculs de dynamique moléculaire (en violet : un récepteur dans la membrane (en jaune), en bleu + rouge + gris : protéine-G hétéro-trimérique, en bleu : bêta-arrestine).

A droite : comparaison entre les modèles obtenus lors des simulations (en rose) et les orientations connues des mêmes partenaires dans la « Protein Data Bank » (PDB) (en bleu).



Références :

[1] B. Delort, P. Renault, L. Charlier, F. Raussin, J. Martinez, N. Floquet, Coarse-Grained Prediction of Peptide Binding to G-Protein Coupled Receptors, *J Chem Inf Model.* (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.6b00503>.

[2] G. Ferré, M. Louet, O. Saurel, B. Delort, G. Czaplicki, C. M'Kadmi, M. Damian, P. Renault, S. Cantel, L. Gavara, P. Demange, J. Marie, J.-A. Fehrentz, N. Floquet, A. Milon, J.-L. Banères, Structure and dynamics of G protein-coupled receptor-bound ghrelin reveal the critical role of the octanoyl chain, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 116 (2019) 17525–17530. <https://doi.org/10.1073/pnas.1905105116>.

[3] S.J. Marrink, H.J. Risselada, S. Yefimov, D.P. Tieleman, A.H. de Vries, The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations, *J Phys Chem B.* 111 (2007) 7812–7824. <https://doi.org/10.1021/jp071097f>.

La mort cellulaire et la catastrophe structurale de son protéome

D. Di Bari [1], S. Timr [2], F. Sterpone [2]

[1] Institut Laue-Langevin Grenoble, France

[2] CNRS, Université de Paris, UPR 9080, Laboratoire de Biochimie Théorique, 13 rue Pierre et Marie Curie, F-75005, Paris, France

Nous sommes partis de l'hypothèse que la mort thermique d'une cellule coïncide avec une transition structurale globale de son protéome, à voir la perte de la structure native de ses protéines.

Dans le cadre de ce grand challenge, nous avons effectué des simulations à multi-échelles pour étudier ce scénario et rationaliser les résultats des expériences de diffusion de neutrons réalisées sur des cellules.

L'objectif principal de ces simulations était de caractériser et de suivre la dynamique des protéines in vivo jusqu'à la température de mort cellulaire.

Nous avons d'abord réalisé une simulation de dynamique moléculaire avec hydrodynamique (lattice Boltzmann MD) d'un système modèle du cytoplasme d'E. Coli constitué d'environ 200 protéines de tailles différentes avec une représentation gros-grains.

La simulation massive nous a permis de comprendre l'évolution de ce grand système à l'échelle de temps de la microseconde et d'identifier les états représentatifs de la structure locale.

De plus, nous avons extrait des sous-parties du système et nous avons reconstruit un modèle à la résolution tout-atome pour effectuer une dynamique moléculaire standard et avec échantillonnage amélioré.

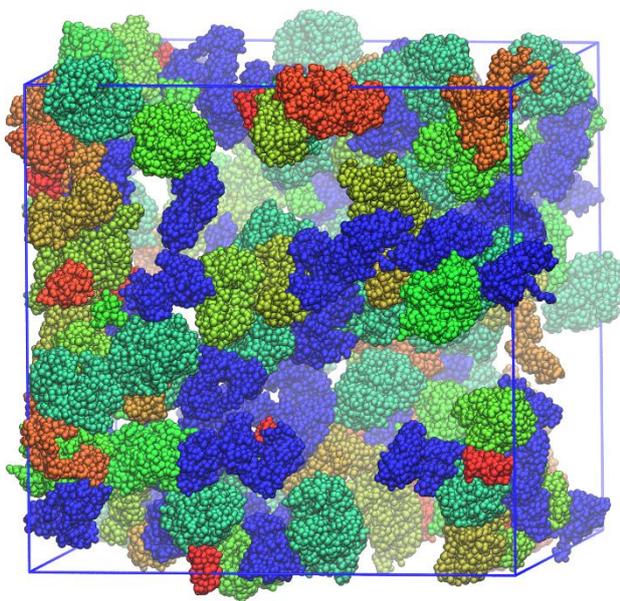


Figure : Cytoplasme instantané

Les simulations ont donné à la fois une vue globale et moléculaire de la dynamique des protéines à différentes échelles de temps, pour les états repliés et de-repliés, dans des conditions proches du in vivo.

Un article comprenant les résultats obtenus et leur concordance avec les expériences de diffusion neutronique est en cours de préparation.



Modélisation prédictive de la structure électronique de complexes d'actinides (PRECISE)

Valérie VALLET [1], Johann POTOSCHNIG [2], Dmitry LYAKH [3], Hans Jorgen AAGAARD JENSEN [4], Lucas VISSCHER [2], André SEVERO PEREIRA GOMES [1]

[1]. Physique des Lasers, Atomes et Molécules, CNRS UMR8523, Université de Lille, France

[2]. Section Theoretical Chemistry, Faculty of Sciences, Vrije Universiteit Amsterdam, The Netherlands

[3]. Oak Ridge National Laboratory Leadership Computing Facility, USA

[4]. Department of Physics, Chemistry and Pharmacy, University of Southern Denmark, Denmark

Les éléments lourds occupent une position centrale dans les sociétés modernes à cause de leur utilisation intensive comme composants d'objets d'utilisation quotidienne ou industrielle (métaux d, et lanthanides), et dans la production d'énergie renouvelable (lanthanides) et nucléaire (actinides). Dans chacune de ces activités, il est indispensable de comprendre les processus physiques et chimiques sous-jacents, ce qui revient souvent à caractériser le comportement de la matière à l'échelle microscopique. Pour les actinides et d'autres éléments radioactifs, les difficultés à manipuler expérimentalement les molécules en question font que la modélisation théorique est devenue incontournable [1], à condition que les méthodes utilisées soient assez précises pour avoir une valeur prédictive.

Dans le projet PRECISE nous avons comme objectif de caractériser la fiabilité de la méthode DFT (largement utilisée à cause de son faible coût calculatoire) pour des propriétés de complexes d'actinides de taille variée (voir exemples dans la figure ci-dessous) à travers d'une comparaison avec des méthodes de haute précision comme la méthode couplé cluster (CC)-qui dans sa version relativiste [2] a récemment été (re)implémenté pour des architectures (pre-)exascale [3].

Pendant le projet, nous avons réussi à traiter des complexes d'uranyle (202 électrons et environ 1000 spineurs virtuels) avec les approches DFT et CC [3], et de plus gros complexes contenant du plutonium et des ligands de séparation de nouvelle génération (jusqu'à 442 électrons) avec la DFT. La comparaison de la DFT avec la méthode CC pour ce dernier système sera possible une fois que des développements supplémentaires (actuellement en cours) seront rendus disponibles dans le code CC [3].

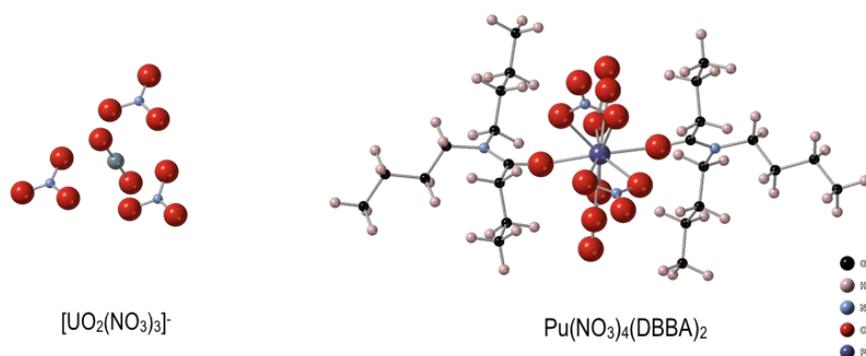


Figure : Complexes de l'ion uranyle (UO₂²⁺) avec ions nitrate (gauche), et de Pu(IV) avec ions nitrate et N,N-dialkylamides (DBBA) (droite), investigués avec des méthodes de structure électronique relativistes basées sur des approches à 4 composantes.

[1] R. Maurice, E. Acher, N. Galland, D. Guillaumont, F. Réal, E. Renault, J. Roques, A.S.P. Gomes, B. Siberchicot, V. Vallet, [L'Actualité Chimique](#), 2021

[2] T. Saue *et al.*, "The DIRAC code for relativistic molecular calculations", [J. Chem. Phys.](#) 152 (2020) 204104 <https://diracprogram.org>

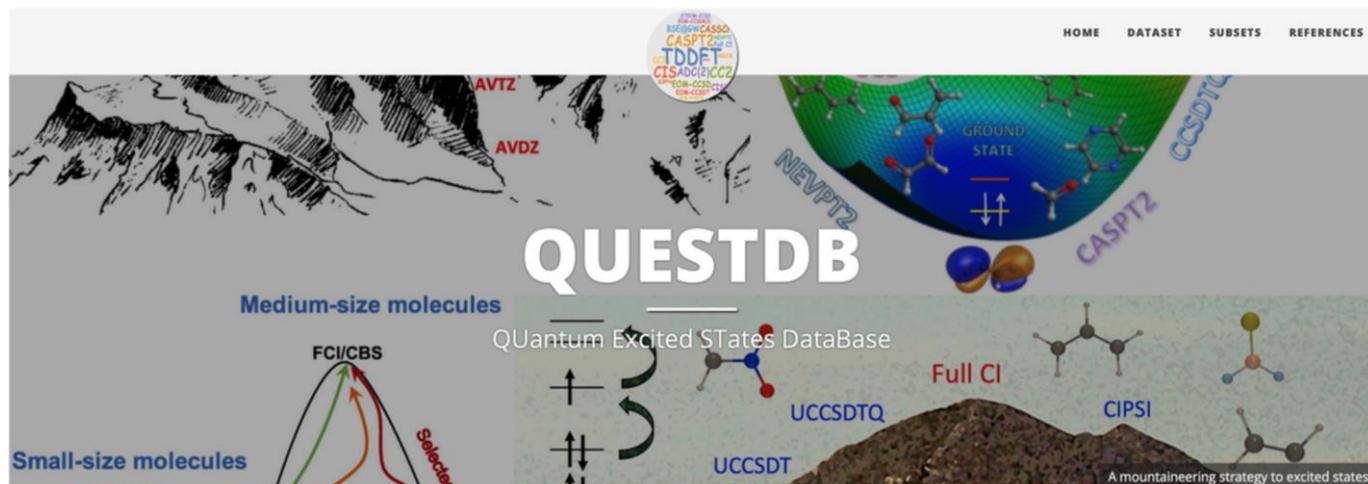
[3] J. V. Pototschnig, A. Papadopoulos, D. I. Lyakh, M. Repisky, L. Halbert, A. S. P. Gomes, H. J. Aa. Jensen, L. Visscher, "Implementation of relativistic coupled cluster theory for massively parallel GPU-accelerated computing architectures" (2021) [arXiv:2103.08473](https://arxiv.org/abs/2103.08473)



Calculs de référence pour la photochimie

Anthony Scemama, Pierre-François Loos

Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques - CNRS-Université Paul Sabatier, Toulouse



L'interaction de la lumière et de la matière joue un rôle majeur dans la description de nombreux processus physiques, chimiques et biologiques, tels que les dispositifs photovoltaïques, la photophysique de la vision, et la photochimie en général. Au cœur même de la photochimie se trouve le rôle subtil joué par les états électroniques les plus bas en énergie et leurs interactions mutuelles. En général, la description correcte de ces phénomènes nécessite de situer avec suffisamment de précision les quelques premiers états excités du système.

La chimie quantique est toujours très en demande pour données de référence afin de comparer les méthodes de calcul ou fournir des énergies de référence pour les expérimentateurs. Cependant, définir une méthode efficace fournissant de manière fiable et précise les énergies et les propriétés d'états excités reste un défi majeur de la chimie théorique.

Ce grand challenge nous a permis de repousser les limites actuelles et de calculer avec le code Quantum Package des énergies d'excitation d'une qualité inégalée pour une vingtaine de molécules [1].

[1] Les résultats obtenus ont complété notre base de données nommée QUEST, qui a récemment été mise à la disposition de la communauté via un site web (https://lcpq.github.io/QUESTDB_website). Ces données servent aujourd'hui à améliorer les méthodes de calcul usuelles, ou à proposer de nouvelles méthodes précises et beaucoup moins coûteuses.

[1] Mickaël Vériel, Anthony Scemama, Michel Caffarel, Filippo Lipparini, Martial Boggio-Pasqua, Denis Jacquemin, Pierre-François Loos, "QUESTDB: A database of highly accurate excitation energies for the electronic structure community." *WIREs Comput Mol Sci.* 2021;e1517. <https://doi.org/10.1002/wcms.1517>



Structure et diffusion du proton hydraté

Ari P. Seitsonen, Rodolphe Vuilleumier, Damien Laage

Laboratoire PASTEUR (ENS/PSL/SU/CNRS), Ecole Normale Supérieure, Paris

Un grand nombre de processus chimiques essentiels allant de la respiration dans nos cellules à la production d'énergie par des piles à combustible reposent sur un même mécanisme à l'échelle moléculaire : le transport de protons dans un milieu aqueux. Cependant, la structure moléculaire d'un proton en excès dans l'eau liquide reste toujours mystérieuse, malgré plusieurs décennies d'études.

Une des questions principales est de déterminer le degré de délocalisation de ce proton, c'est-à-dire s'il est porté par une seule molécule d'eau ou plutôt partagé entre plusieurs molécules. Alors qu'une structure localisée était largement admise, de récents travaux expérimentaux ont suggéré que le proton serait en fait délocalisé sur deux molécules d'eau. Les données expérimentales étant ambiguës, des simulations sont nécessaires pour trancher cette question. Cependant, pour être prédictifs, les calculs requis sont extrêmement coûteux. Ceux-ci nécessitent à la fois des calculs de chimie quantique de haut niveau pour la structure électronique ainsi qu'un traitement explicite des effets quantiques nucléaires en raison du caractère très léger du proton.

Les moyens de calcul exceptionnels mis à disposition par le Grand Challenge nous ont permis de réaliser une première étude combinant ces descriptions de haut niveau (théorie de la fonctionnelle de densité B3LYP et dynamique moléculaire de polymère anneau RPMD).

Nos résultats ont montré que le proton est le plus souvent localisé sur une molécule d'eau lorsqu'il est dans son état vibrationnel fondamental, mais qu'il est délocalisé dans son état vibrationnel excité sondé par les expériences de spectroscopie récentes.

Ceci permet de mieux cerner le comportement du proton dans l'eau, et les données de haute précision acquises dans ce projet serviront à calibrer les calculs de futures études sur le proton dans différents milieux aqueux complexes rencontrés dans les applications.

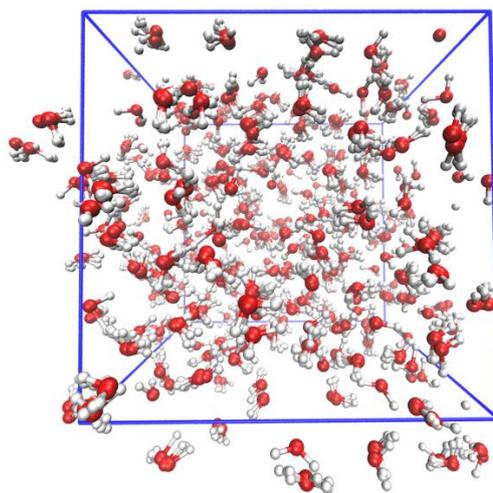


Figure : Proton en excès dans l'eau décrit par simulations de dynamique moléculaire combinant effets quantiques électroniques et nucléaires

Structure des gels lamellaires d'alcools gras

Adrien Gola [1], Fabrice Thalmann[1], Carlos Marques[1], Fabien Léonforte [2], Odile Aubrun [2], Aldo Pizzino [2], Bernard Querleux [2].

[1] - Institut Charles Sadron, CNRS et Université de Strasbourg, Strasbourg, France

[2] - L'Oréal Research and Innovation, France

Malgré leur grande importance dans les formulations cosmétiques, les réseaux lamellaires d'alcools gras demeurent très mal compris à toutes les échelles. La bicouche de mélanges d'alcools gras et de tensioactifs est la brique élémentaire du réseau, une brique dont les propriétés physiques telles que l'élasticité, la mobilité, la perméabilité ou encore le comportement de phase sont peu connues alors qu'elles jouent un rôle clé dans la rhéologie de la formulation. Nous avons utilisé un modèle de dynamique moléculaire tout atome (GROMACS/ Charmm36) pour étudier ces propriétés pour des systèmes comportant 20% de tensioactifs.

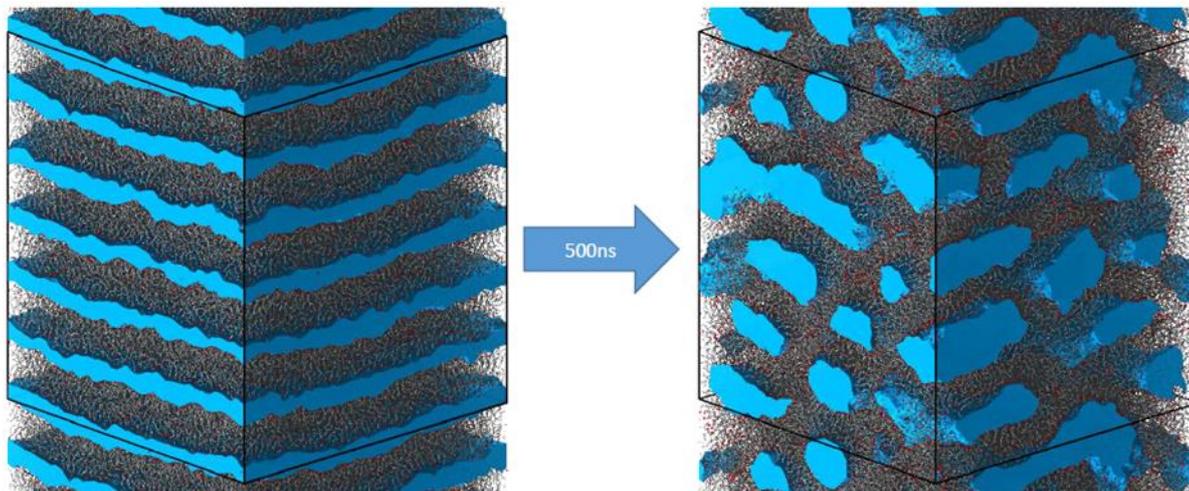


Figure : Evolution d'un système périodique composé de 6 membranes d'un mélange de tensioactifs et d'alcool gras vers une structure pontée après 500 ns à 333K. Les surfaces bleues représentent l'eau dans le système à un niveau d'hydratation correspondant à 8 molécules d'eau par chaîne alkyle. Les chaînes alkyles sont représentées en gris, les groupements alcools en rouge et les groupement ammonium en bleu foncé. Les atomes d'hydrogènes sont masqués.

Nous avons d'abord étudié un système composé d'une seule membrane hydratée à des taux de 10 à 20 molécules d'eau par chaîne. La membrane est composée de 5280 chaînes.

Ces systèmes représentant des patches périodiques d'environ 30 nm x 30 nm nous ont permis de suivre l'évolution de leurs propriétés mécaniques en fonction de la température via des analyses de la fluctuation de la surface de la membrane. Nous avons pu détecter une diminution d'un ordre de grandeur du module de flexion lors du passage

Cette étude a également démontré la forte propension des molécules d'alcool gras à effectuer des renversements intramembranaires. Ces molécules peu hydratées permettent au système de se réarranger, une caractéristique physique mise ici en évidence pour la première fois.

Nous avons étudié ces réarrangements à l'aide de systèmes peu hydratés (8 molécules d'eau par chaîne) composés de 6 membranes (31680 chaînes) dans une boîte de simulation de 30 nm x 30 nm x 30 nm.

La figure montre les réarrangements observés après 500 ns. Nous avons pu constater la formation de ponts entre chacune des lamelles initialement présentes.

Le caractère labile des molécules d'alcool gras permet de réduire les contraintes tensiles du système par une transformation structurelle de l'empilement lamellaire. Celui-ci développe une courbure importante à l'interface eau-alcool gras surfactants, conduisant à une structure inattendue qui pourrait bien être représentative d'une nouvelle phase lyotrope.

Impact d'une particule sur une surface solide

L. Soulard [1] [2], O. Durand [1], Th. Carrard [1], L. Colombet [1]

[1] CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

[2] Université Paris Saclay, CEA, Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes, Bruyères-le-Châtel 91680, France

Ce Grand Challenge avait pour objet la simulation de l'impact de particules d'étain solide sur une surface du même métal, et la comparaison avec des expériences. Les phénomènes qui découlent de ce type d'impact (ondes de choc, fragmentation, éjection de matière, ...) restent en effet assez mal connus et leur maîtrise est d'une grande importance pour l'optimisation de procédés industriels comme l'impression par jet d'encre ou le refroidissement de surfaces par projection de spray.

La méthode de calcul retenue est la dynamique moléculaire classique car elle permet *a priori* de restituer l'histoire complète de l'impact, mais à petite échelle par rapport aux situations réelles. Le premier objectif de ce Grand Challenge était donc de s'assurer de la représentativité des simulations par comparaison avec des résultats expérimentaux de la littérature [1]. Ce point acquis, la seconde phase du travail, actuellement en cours, est une analyse très fine des mécanismes de fragmentation de la particule.

Les simulations ont été menées avec le code ExaStamp [2] développé au CEA-DAM. Ce code de nouvelle génération permet de tirer au mieux partie de l'architecture de machines comme Irène. Le potentiel interatomique retenu est le potentiel MEAM [3] permettant de restituer correctement les propriétés de l'étain dans le domaine thermodynamique concerné. Pour s'affranchir d'effets de bord indésirables, environ 1,3 milliard d'atomes ont été pris en compte. Sept vitesses d'impact, s'étageant de 500 m/s à 5000 m/s, ont été étudiées. Chaque simulation, effectuée sur 16 000 cœurs, a requis environ 3 millions d'heures de calcul.

Les résultats obtenus confortent et complètent les approches purement théoriques [4], et permettent de définir des lois d'échelles simples entre simulation et expérience.

Conformément aux observations expérimentales, l'impact se traduit par un simple collage de la particule sur la surface à basse vitesse d'impact, jusqu'à sa désintégration complète en gouttelettes (figure à droite) à haute vitesse d'impact.

Les détails de ces processus, assez complexes, sont en cours d'analyse.

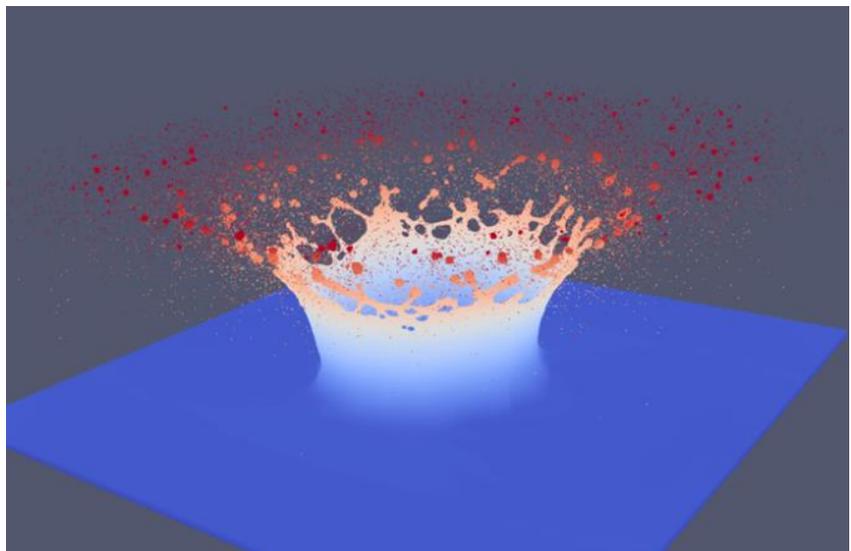


Figure : Ejection d'atomes à la suite de l'impact d'une particule d'étain à 3000 m/s sur une surface solide du même métal.

Bibliographie.

- [1] M. Hassani-Gangaraj, D. Veysset, K. A. Nelson, et C. A. Schuh, Nat. Commun. 9, 5077 (2018).
- [2]. R. Prat, T. Carrard, L. Soulard, O. Durand, R. Namyst et L. Colombet, Comput. Phys. Commun. 253, 107177 (2020).
- [3]. R. Ravelo et M. Baskes, Phys. Rev. Lett. 79, 2482 (1997).
- [4] L. Soulard, O. Durand, R. Prat et T. Carrard, J. App. Phys., à paraître en mai 2021.



Un calcul GW tout électron sur 1 millier d'atomes !

Ivan Duchemin [1], Xavier BLASÉ [2]

[1] CEA

[2] CNRS, institut Neel

Le calcul des propriétés électroniques des matériaux organiques est une clef essentielle pour la compréhension et la maîtrise des mécanismes physiques à l'œuvre dans les dispositifs de type photovoltaïque (PV) organique ou les OLED (diode électroluminescente organique). Que ce soit pour l'étude des propriétés optiques de ces matériaux, ou plus indirectement pour celle des propriétés de transport, via les mécanismes de dopage notamment, l'équipe L. Sim développe depuis plusieurs années des méthodologies basées sur les théories de perturbation à N corps, et plus précisément la théorie dite GW, permettant d'accéder *ab initio* aux grandeurs d'intérêt pour des systèmes physiques d'intérêt expérimental.

La méthode GW permet de calculer les excitations des molécules comme les spectres d'absorption, de photo-émission ou la fluorescence. Calculer les excitations d'une molécule de 100 atomes par la méthode GW est déjà possible mais requiert des ordinateurs parallèles au niveau national.

Fruit d'une collaboration avec les chercheurs de l'institut Néel, un ensemble d'innovations théoriques a permis de réduire significativement la complexité calculatoire du formalisme GW, jusque-là $O(N^4)$, pour l'aligner avec celui de la DFT $O(N^3)$, rendant ainsi ces calculs accessibles pour des systèmes de grandes tailles, de l'ordre du millier d'atomes.

Ces développements, implémentés dans code de calcul massivement parallèle beDefT, ont fait l'objet d'un grand challenge sur l'extension AMD Rome du supercalculateur Irène du centre TGCC du CEA à Bruyère-le-Châtel, qui a permis la démonstration du premier calcul GW tout électron sur un système d'un millier d'atomes.

Ce travail s'appuie sur deux innovations fondamentales : i) la formulation d'une technique de résolution de l'identité séparable, basée sur une approche en espace réel (voir figure), et ii) l'application des techniques d'analyse complexe dites de continuation analytique à la description du potentiel coulombien écranté (W), ingrédient central de la méthodologie GW.

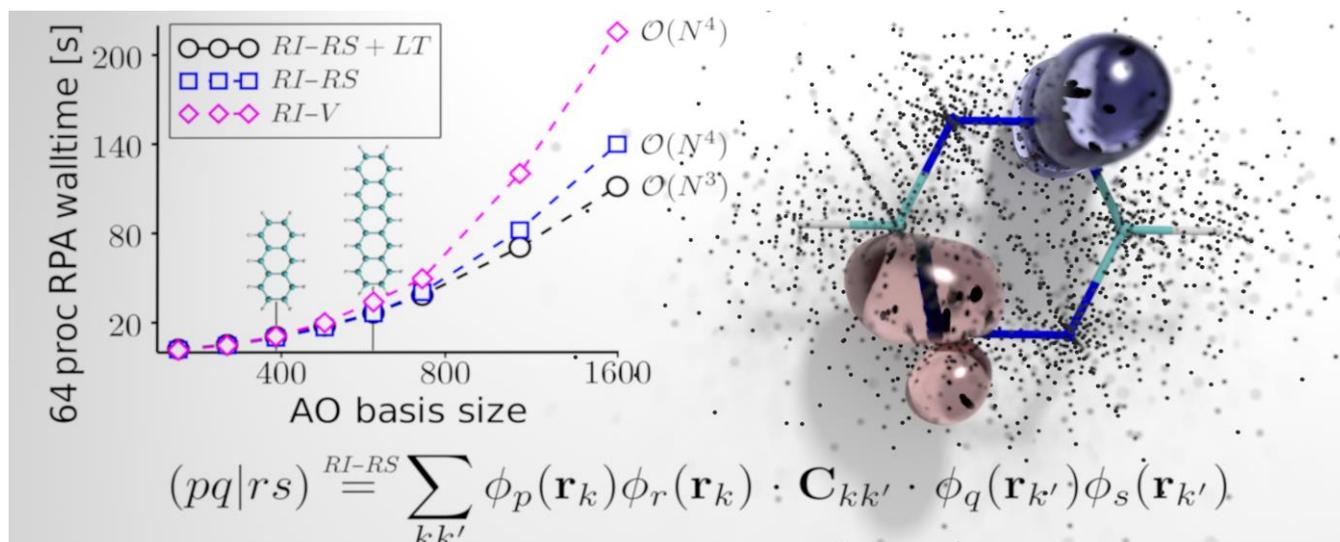


Figure : Coût numérique de différentes méthodes GW pour le calcul des interactions coulombiennes en fonction du nombre d'orbitales atomiques. Illustration de la méthode GW en espace réel avec le nuage de points considérés pour la molécule de benzène.

Influence de la résolution en maillage sur la prédiction de l'écoulement et de l'ambiance dynamique dans un moteur de fusée

Thomas Schmitt [1], G. Staffelbach [2]

[1] Centrale-Supelec

[2] CERFACS

L'objectif du projet est d'évaluer la capacité du calcul haute performance à prédire l'apparition d'instabilités de combustion dans un moteur de fusée via un changement de conditions opératoires, un aspect d'importance première pour l'industrie spatiale.

Dans ce grand challenge, nous nous sommes concentrés sur l'influence de la résolution en maillage sur la prédiction de l'écoulement et de l'ambiance dynamique dans la chambre.

Pour cela, un calcul instable a été réalisé sur 3 grilles différentes, allant de 80 millions de mailles à 1 milliard de mailles. Dans cette première étape, un raffinement homogène est utilisé.

Le résultat de la simulation en terme de champ moyen est fluctuant et peu sensible au maillage, même si un écart est notable pour le maillage le plus grossier par rapport aux deux autres.

Cependant, l'impact de la grille sur l'ambiance dynamique est importante : chaque cas prédit un comportement instable différent.

Par la suite, une stratégie de raffinement de maillage automatique a été mise en place.

Les premiers calculs ont été initiés dans ce Grand Challenge et les simulations plus fines ont été poursuivies via une allocation PRACE.



Figure : coupe longitudinale instantanée de température sur le maillage le plus fin.

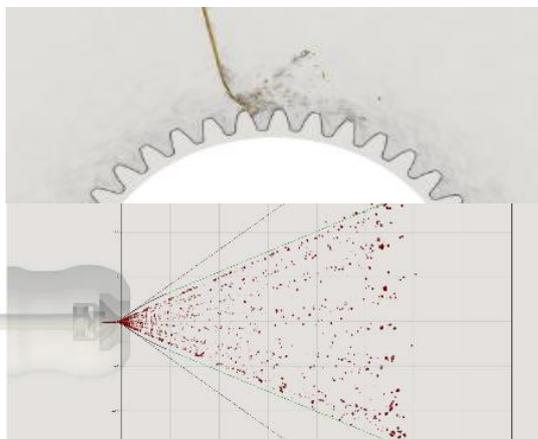


Haute-fidélité et Intelligence artificielle pour le design des moteurs aéronautiques de demain

Renaud Mercier, Augustin Parret-Freaud, Carlos Garcia-Guillamon, Mélody Cailler, Romain Pain, Sébastien Da Veiga, Xavier Roynard, Grégory Dergham, Fabien Casenave, Alexandros Markopoulos†

Safran Tech, Digital Sciences & Technologies Department, - Rue des Jeunes Bois, Châteaufort, 78114 Magny-Les-Hameaux, France

D'excellents résultats ont été obtenus sur les partitions CPU AMD en particulier sur les sous-projets portant sur le développement et la validation de l'approche volume finis pour la simulation de la lubrification et l'atomisation en conditions moteur ainsi que sur le sous-projet « IA pour la simulation numérique ».



Une simulation d'injection de kérosène de type *jet-in-cross-flow*, puis *pressure swirl atomizer*, ont été réalisées avec succès sur plusieurs milliers de cœurs avec adaptation de maillage dynamique.

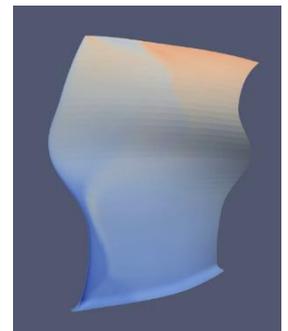
Ces travaux ont fait l'objet d'une communication scientifique [Janodet et al. 2021].

Dans le contexte de la lubrification air-huile, cette même méthodologie a été appliquée à des configurations avec des dynamiques de l'huile de type *filming* et *splashing*.

D'importantes améliorations du temps de retour de ces simulations ont été réalisées en particulier.

Le sous-projet « IA pour la simulation numérique » a permis de réaliser sur la partition CPU AMD une base de données de 11 000 calculs 3D RANS sur la configuration Rotor37 avec fortes variabilités géométriques paramétrées.

L'intérêt de cette base de données est double : d'une part, elle permettra dans le futur de développer et valider les différentes architectures de réseaux de neurones proposées dans la littérature pour gérer des maillages volumiques, et d'autre part elle nous servira d'initialisation pour une procédure de raffinement adaptatif, qui cherchera à effectuer des simulations supplémentaires pour améliorer la représentativité des réseaux de neurones dans les zones de l'espace où ils ne sont pas précis.



Les sous-projets portant sur la validation de l'approche LBM pour la simulation aéro-thermo-acoustique de configurations complexes ainsi que sur la réduction de modèle pour la prédiction de la durée de vie de pièces mécaniques critiques n'ont pas pu être initiés du fait des restrictions sur le temps de travail lors de la crise COVID.



Simulation massivement parallèle d'écoulements gaz/particules dans un réacteur à lit fluidisé industriel avec une approche n-fluid Euler

Hervé Neu [1], Maxime Pigou [1], Pascal Fedé [1], Renaud Ansart [2], Cyril Baudry [4], Nicolas Méricoux [5], Jérôme Laviéville [5], Yvan Fournier [5], Nicolas Renon[3], Olivier Simonin [1]

[1] Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT), Université de Toulouse, CNRS, Toulouse, France

[2] Laboratoire de Génie Chimique, Université de Toulouse, CNRS, INPT, UPS, Toulouse, France

[3] UMS CALMIP 3667 Université de Toulouse, CNRS, INPT, INSA, ISAE, UPS, Toulouse, France

[4] Délégation technologies et systèmes d'information, EDF R&D, Palaiseau, France

[5] Fluid Mechanics, Energy and Environment Dpt., EDF R&D, Chatou, France

Ce Grand Challenge TGCC porte sur la simulation massivement parallèle d'un réacteur gaz/particule à lit fluidisé industriel. Ce procédé industriel basé sur la mise en suspension d'une poudre par un gaz ascendant permet d'obtenir des propriétés hydrodynamiques très recherchées : qualité de mélange, mise en contact fluide-particules, inertie thermique... On le retrouve dans de multiples applications : craquages du pétrole, boucles de *chemical looping* (capture CO₂), gazéification de la biomasse, récepteurs solaires à lit fluidisé, ...

D'un point de vue théorique, ces systèmes sont très complexes : tridimensionnels, turbulents, instationnaires, multiphasiques, anisothermes, réactifs et fortement multi-échelles. Le besoin d'outils de simulation 3D de ces écoulements à l'échelle des installations industrielles est très fort mais leur mise en œuvre pose toujours de nombreux problèmes.

L'objectif est d'évaluer les performances de la simulation de l'hydrodynamique et des transferts thermiques d'un réacteur industriel à lit fluidisé de 30m de haut, 5m de diamètre, et comportant 100 tonnes de particules dégageant 20MW avec le code massivement parallèle NEPTUNE_CFD. Le maillage utilisé compte 64 milliards de cellules cubiques de 1,25 mm. Ce niveau de raffinement est le plus haut atteint pour une telle simulation et justifie l'utilisation de la nouvelle partition Irene-Rome de Joliot-Curie.

Ce grand challenge consacré à des tests de performances a permis (i) de réaliser une première mondiale : simulation à l'échelle industrielle sur la totalité d'Irene-Rome avec 64 milliards de cellules. Une optimisation importante des paramètres de la librairie IntelMPI pour de si gros calculs a été menée ainsi qu'une optimisation des temps de lecture/écriture des fichiers d'entrée/sortie (de 55 min à 4 min de temps de lecture pour 12To). Il a aussi permis une étude poussée de scalabilité de NEPTUNE_CFD de 30 nœuds à 2250 nœuds de calcul mais aussi des analyses complémentaires : dépeuplement, profiling détaillé jusqu'à 72 064 coeurs.

Ces simulations extrêmes avec des maillages très raffinés demandent beaucoup de ressources HPC et permettent d'obtenir des résultats d'une précision inédite. Elles poussent le code, ses dépendances (MPI, partitionneur) et les supercalculateurs dans leurs limites respectives (IO, bande passante, mémoire) et font progresser la modélisation de systèmes industriels. Enfin ce grand challenge permet une étude comparative des performances HPC des différentes architectures de supercalculateurs. Certaines limites ayant été identifiées et levées, des calculs complémentaires sont en cours pour évaluer le gain lié à la dernière version d'IntelMPI optimisée pour Irene-Rome.

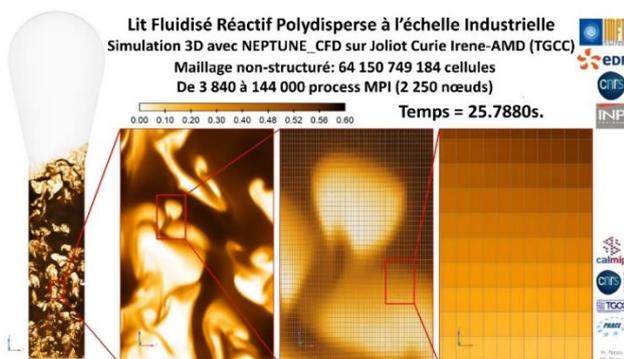


Figure : Champ instantané de taux de présence des particules dans un lit fluidisé 3D réactif à l'échelle industrielle (zooms successifs faisant apparaître le maillage)



Le calcul intensif de haute fidélité en mécanique des fluides : un outil d'aide à la décision contre la propagation du virus SARS-CoV-2

Yves Dubief [1], Simon Mendez [2], Guillaume Balarac [3], Patrick Bégou [3], Pierre Benard [4], Ghislain Lartigue [4], Renaud Mercier [5] et Vincent Moureau [4].

[1] Univ. of Vermont

[4] CORIA

[2] IMAG

[5] SAFRAN

[3] LEGI

La transmission par voies aériennes est un des principaux vecteurs de propagation du virus SARS-CoV-2. Les microgouttelettes pouvant contenir le virus sont éjectées dans l'air (toux, éternuement, voire simple respiration) et pourront être maintenues en suspension sur des temps longs selon les conditions de l'écoulement environnant, avant d'être inhalées par d'autres personnes. L'objectif de ce grand challenge a été d'évaluer les risques liés à ce mode de transmission, et l'efficacité des dispositifs de protection via des simulations numériques s'appuyant sur le code YALES2. Ce code, déjà utilisé dans différents domaines (aéronautique, combustion, énergie renouvelable, médical, ...) a pu rapidement être mobilisé, dans le cadre en particulier d'un groupe de travail national sur le recyclage des masques coordonné par Philippe CINQUIN (TIMC).

Les simulations réalisées ont ainsi permis de simuler explicitement les instationnarités de l'écoulement responsables du maintien en suspension des gouttelettes. Les équations résolues permettent de tenir compte du taux d'humidité de l'air et des variations des propriétés du fluide (masse volumique, viscosité) en fonction de la température, ce qui influence la dynamique des gouttelettes (transport par l'écoulement, effet de la gravité, évaporation, etc...). De plus, le couplage avec la librairie de remaillage MMG a permis d'intégrer directement dans YALES2 la génération de maillage et son optimisation afin de pouvoir considérer des géométries complexes et d'optimiser le coût de calcul. En ce sens un travail important d'automatisation de l'ensemble de la chaîne de calcul a été réalisé. Cela a permis d'automatiser la réalisation d'un plan d'expérience : de la génération du maillage jusqu'au traitement des résultats (typiquement les distributions des gouttelettes inhalées par un sujet).

Ce travail a ainsi démontré que la simulation numérique de haute fidélité en mécanique des fluides, associé à la puissance des supercalculateurs, a désormais les capacités d'être un outil d'aide à la décision pour répondre à ce type de crise.

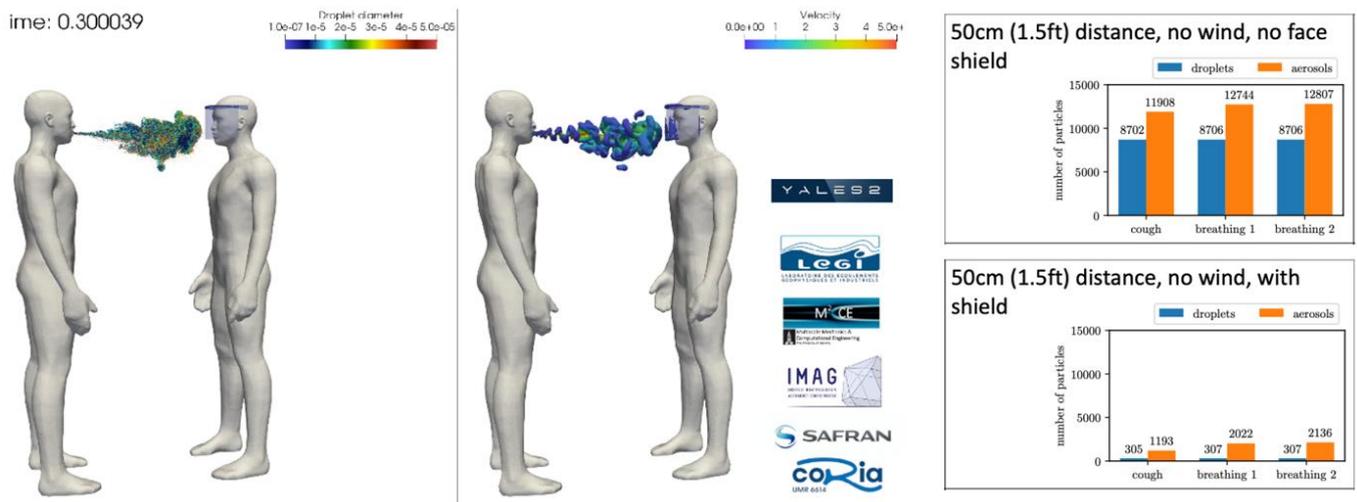


Illustration d'une simulation de toux et histogrammes des gouttelettes et aérosols inhalés.



Etude des facteurs favorisant l'interaction SARS-CoV-2/inhibiteurs

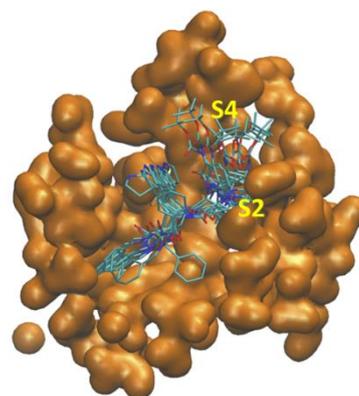
Luigi Genovese [1], Michel Masella [2]

[1] CEA-Grenoble/Institut IRIG, [2] CEA-Saclay/institut Joliot

Le code de structure électronique basé sur les ondelettes, BigDFT, permet aux calculs de varier linéairement avec le nombre d'atomes, contrairement aux codes habituels qui ont un comportement cubique.

Grâce à ses caractéristiques uniques, la description complète de la mécanique quantique des protéines (solvatées) est accessible jusqu'à des systèmes de dizaines de milliers d'atomes.

Associé à un code de dynamique moléculaire, Polaris, BigDFT a été appliqué avec succès à des problèmes de biologie moléculaire, notamment dans le cadre du virus COVID, en permettant d'identifier les fragments actifs d'une protéine en présence d'une molécule cible et de fournir les paramètres clés pour leur modélisation.



SARS-Cov-2 protéase M^{PRO}

Cette méthode d'investigation est complètement générale et offre une nouvelle approche pour l'étude de systèmes biologiques.

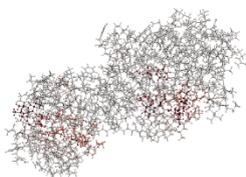
Le ciblage d'anticorps monoclonaux spécifiques peut être réalisé de façon routinière, cependant augmenter l'affinité de l'antigène autant que souhaité reste une tâche difficile.

La plupart des outils théoriques disponibles dans ce domaine se concentrent principalement sur l'étude des régions locales anticorps/antigène (AA) à contact étroit et ignorent généralement l'effet sur l'affinité des domaines plus éloignés.

En raison de la taille des assemblages AA, seuls les champs de force standard de modélisation moléculaire par paire ou les fonctions de coût empiriques sont utilisés pour quantifier la force de leurs interactions.

Cependant, ces approches théoriques sont connues pour être basées sur des approximations grossières empêchant d'atteindre un niveau de précision suffisamment élevé.

Notre projet, récompensé par un SANOFI iTech Award 2020, ajoute deux nouvelles étapes aux protocoles de calcul standard utilisés pour modéliser les assemblages AA (comme le populaire protocole basé sur le paquet de programmes Rosetta) afin d'évaluer et de raffiner leurs solutions.



Ces deux étapes consistent à :

(1) étudier la surface d'énergie potentielle des AA à partir de simulations de dynamique moléculaire «Replica Exchange» basées sur une approche de modélisation moléculaire multi-échelle polarisable ;

(2) affiner les résultats de la simulation en utilisant le cadre de réduction de la complexité de BigDFT, qui permet de calculer l'énergie d'interaction quantique des assemblages AA complets.

```

1: field_vals=interaction_strengths(sys.keys(),fr_pairwise_bo)
   colordict=V.get_colordict(keys=sys.keys(),field_vals=field_vals)
   #colordict=V.get_colordict(keys=sys.keys(),field_vals=[abs(pv[frag]) for frag in sys])
   #colordict=V.get_colordict(keys=sys.keys(),field_vals=[np.linalg.norm(frag.d1()) for frag in sys.values()],colorcode='Greens')
   color_letters=[colordict[frag] for frag in rl]
   plot_sequence(sq[0]+sq[1],colors=color_letters)

```

S	G	F	R	K	M	A	F	P	S	G	K	V	E	G	C	M	V	Q	V	T	C	G	T	T	T	L	N	G	L	W	L	D	D	V	V	Y	C	P	R	H
V	I	C	T	S	E	D	M	L	N	P	N	Y	E	D	L	I	R	K	S	N	H	N	F	L	V	Q	A	G	N	V	Q	L	R	V	I	G	H	S	M	
Q	N	C	V	L	K	L	K	V	D	T	A	N	P	K	T	P	K	Y	K	F	V	R	I	Q	P	G	Q	T	F	S	V	L	A	C	Y	N	G	S	P	S
G	V	Y	Q	C	A	M	R	P	N	F	T	I	K	G	S	F	L	N	G	S	C	G	S	V	G	F	N	I	D	Y	D	C	V	S	F	C	Y	M	H	H
M	E	L	P	T	G	V	H	A	G	T	D	L	E	G	N	Y	G	P	V	D	R	Q	T	A	Q	A	A	G	T	D	T	I	I	T	V	N	V	L		
A	W	L	Y	A	A	V	I	N	G	D	R	W	F	L	N	R	F	T	T	L	N	D	E	N	L	V	A	M	K	Y	N	Y	E	P	L	T	Q	D	H	
V	D	I	L	G	P	L	S	A	Q	T	G	I	L	L	D	M	C	A	S	L	K	E	L	L	Q	N	G	M	N	G	R	T	I	L	G	S	A	L	L	
E	D	E	F	T	P	F	D	V	V	R	Q	C	S	G	V	T	F	Q	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V	V

Figure : Analyse en fragment d'une molécule avec indication des fragments activés basé sur un notebook jupyter en python pour une automatisation du post-traitement