

GRANDS Challenges

Le cahier des avancées scientifiques des supercalculateurs

Édition novembre 2024

GENCI
Le calcul intensif au service de la connaissance

**JOLIOT-CURIE
ADAstra**



L'éditorial
Philippe LAVOCAT (GENCI), Michel ROBERT (CINES) et Nicolas LARDJANE (TGCC).

Les projets
19 projets de recherche scientifique menés grâce aux capacités des supercalculateurs.

Le périmètre
Des projets de recherche scientifique qui concernent les domaines de 10 comités thématiques.

SOMMAIRE

4

EDITO

P. LAVOCAT, pdg de GENCI ;
M. ROBERT, directeur du CINES
et N. LARDJANE, responsable du TGCC.

> 10

ORCINUS, une simulation numérique
de l'océan global à très haute résolution.

> 14

Méthodes *Lattice Boltzmann*, pour l'énergie éolienne

> 18

Simulation URANS du compresseur
transsonique ENOVAL 360°

> 22

DNS de turbulence de paroi supersonique :
objectif haut Reynolds.

> 26

Simulation massivement parallèle
de sillages d'éoliennes en mer.

> 30

Simulation haute-fidélité de l'atomisation
assistée dans les moteurs fusée.

> 34

Simulation de l'atomisation primaire
d'un injecteur de carburant aéronautique.

> 38

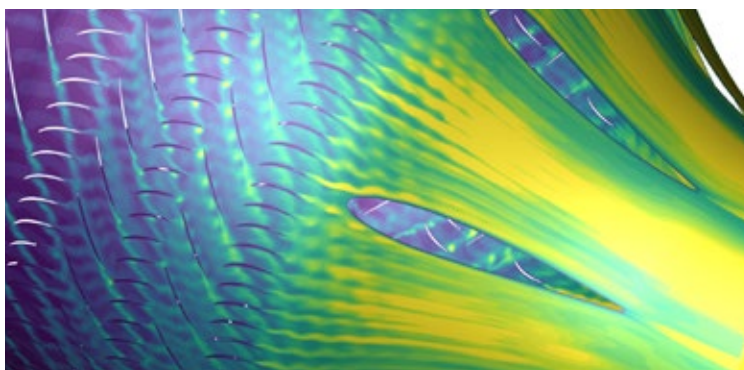
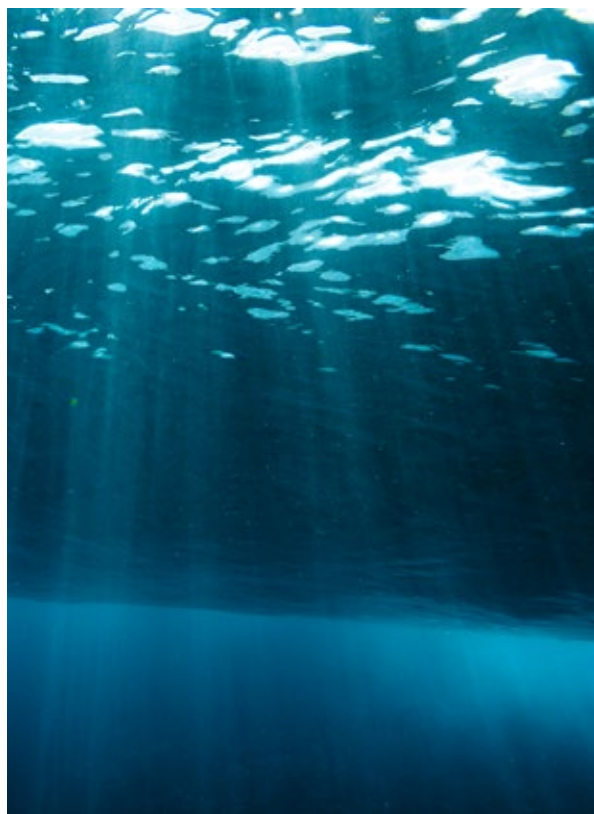
Modélisation et conception de moteurs
à turbine à gaz compacts pour l'avenir.

> 42

Caractérisation du transfert de masse
dans un modèle de poche métallurgique.

> 46

Simulation de stockage de CO₂
dans des structures géologiques.



8

LES SUPERCALCULATEURS

Focus sur Adastra et Joliot-Curie,
utilisés dans ce Grand Challenge.

86

 RÉPERTOIRE
DES PROJETS
SCIENTIFIQUES PAR CT

> 50

Imagerie géophysique haute résolution
avec le solveur MUMPS.

> 54

Vers une nouvelle ère pour l'imagerie
de la croûte terrestre.

> 58

Une approche plasma pour l'étude
de la QED en champ fort.

> 62

Modélisation d'ondes avec
une méthode HDG d'ordre élevé.

> 66

Les bases moléculaires de la neurotransmission.

> 70

Dynamique moléculaire des canaux calciques Cav3.1
et des mutants pathogènes.

> 74

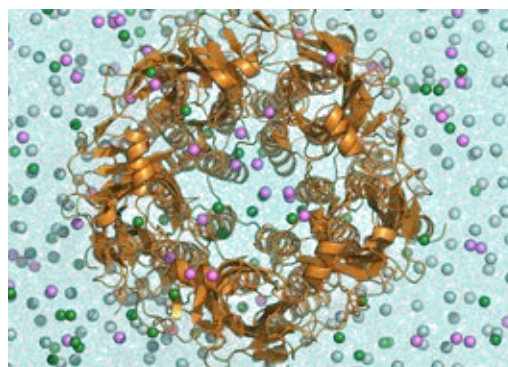
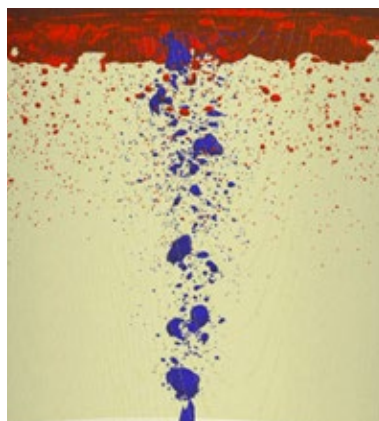
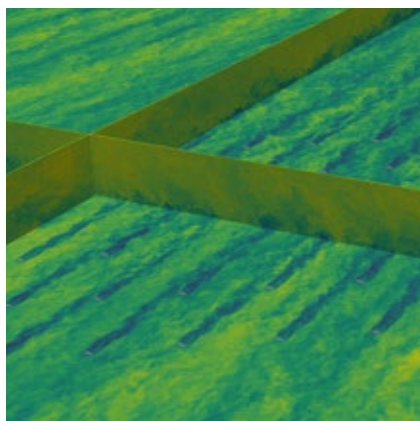
In-Silico Quantum Mechanics Wet Lab experience.

> 78

Simulations de la clairance mucociliaire et l'effet
des pathologies.

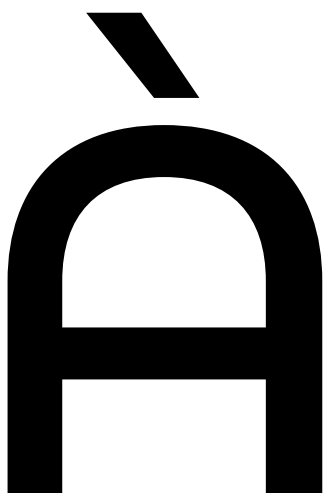
> 82

Prédiction in silico de matériaux sous Pression.

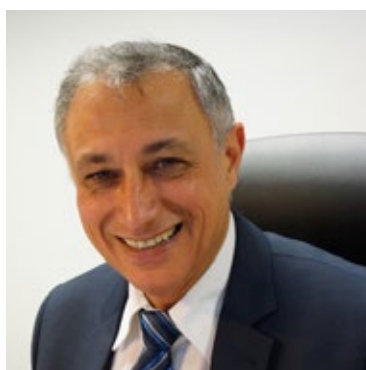


ÉDITO

« Élargir, approfondir et accélérer la production scientifique. Un enjeu majeur de compétitivité scientifique. »



À l'heure de l'accroissement exponentiel des données dans l'ensemble des activités de recherche académique et industrielle, atteindre l'excellence scientifique, favoriser l'innovation, concevoir les systèmes de demain, nécessite de recourir de plus en plus systématiquement aux technologies numériques. Pour répondre aux besoins de calcul toujours plus élevés en termes de précision, de rapidité, de sécurité et de réalisme dans leur pratique de la simulation numérique, les équipes de l'infrastructure de recherche (IR*) GENCI, celles des centres de calcul, du CINES et du TGCC, ont souhaité mettre à la disposition des chercheurs une session spéciale permettant d'éprouver les architectures de calcul en place. Cette initiative vise, in fine, à élargir, approfondir et accélérer la production scientifique, enjeu majeur de compétitivité scientifique mais aussi économique, au cœur de nos missions.



Philippe LAVOCAT,
Président-directeur général
de GENCI



Michel ROBERT,
Directeur du CINES
(centre de calcul de l'Enseignement
Supérieur qui héberge et opère
le supercalculateur Adastra)



Nicolas LARDJANE,
Responsable du TGCC
(centre de calcul du CEA
qui héberge et opère le
supercalculateur Joliot-Curie)

Classiquement, la période de mise en production de nouveaux supercalculateurs offre l'opportunité pour des utilisateurs académiques et industriels d'accéder à des ressources de calcul pouvant aller jusqu'à l'intégralité de la machine, permettant ainsi de mener à bien des projets scientifiques hors normes, sélectionnés sur leur intérêt scientifique et sociétal. Cette période, appelée « *Grands Challenges* » et instaurée par GENCI pour toutes ses acquisitions de calculateurs depuis 2008, permet également le « rodage » des nouveaux équipements en testant leur robustesse sur des codes à grande échelle, poussant ainsi leurs capacités aux limites avant de signer la réception au constructeur. Côté développeur, ces « Grands Challenges » sont également l'occasion de faire progresser les codes, de les porter sur de nouvelles architectures et de tester le passage à l'échelle.

Cette édition 2023-2024 des Grands Challenges GENCI « *Scalaire* » présente un caractère exceptionnel, puisqu'ils mobilisent à la fois le supercalculateur de

Nos équipes ont souhaité mettre à la disposition des chercheurs une session spéciale permettant d'éprouver les architectures de calcul en place.

nouvelle génération Adastra récemment déployé au CINES, et le calculateur Joliot-Curie du TGCC déjà en production. L'ambition de complémentarité des technologies (AMD Genoa au CINES, Intel Skylake et AMD Rome au TGCC) trouve ici une illustration marquante au bénéfice de la science. Au global, plus de 500 000 cœurs de calcul sont ainsi disponibles aux utilisateurs, ce qui témoigne notamment de la capacité des pouvoirs publics, de GENCI, et des centres de calcul, de mettre à disposition des ressources scalaires de haut niveau.

SERVIR UNE PRODUCTION SCIENTIFIQUE DE PREMIER PLAN

Les ressources nationales de calcul haute performance, convergées avec l'intelligence artificielle et bientôt avec des dispositifs prototypes de calcul quantique, bénéficient à tous les champs de l'activité scientifique et de l'innovation : lutte contre le réchauffement climatique, santé, transports propres, biodiversité, aide à la décision, sciences humaines et sociales, biologie, chimie, physique, astrophysique...

Le grand nombre de dossiers soumis à cette session « Grands Challenges 2023 » témoigne de l'intérêt pour les utilisateurs d'accéder à de grandes ressources de calcul. Au final 23 projets ont été retenus pour un total de 663 Mh d'heures cœur ! Le spectre des domaines scientifiques est largement couvert à la fois par des équipes académiques mais aussi industrielles. Plusieurs projets s'inscrivent directement dans une démarche visant à répondre à un enjeu sociétal : optimisation des fermes éoliennes *offshore*, développement de véhicules autonomes, réduction de la consommation de carburant, étude des molécules impliquées

**Le grand nombre de dossiers soumis
à cette session « *Grands Challenges 2023* »
témoigne de l'intérêt pour les utilisateurs
d'accéder à de grandes ressources de calcul.**

dans les complications du diabète et les dérèglement métaboliques, synthèse de molécules thérapeutiques ciblant les agents impliqués dans l'épilepsie et les pathologies neurodégénératives, captation et le stockage du dioxyde de carbone, arrivée de nouvelles énergies basées sur la fusion nucléaire, amélioration de la prédiction des phénomènes météorologiques extrêmes, recherche de nouveaux matériaux, etc.

Les résultats présentés dans ce cahier « Grands Challenges 2023 » attestent que la politique de GENCI et des centres de calculs nationaux, traduite dans les déploiements de l'offre scalaire, permet de servir une production scientifique de premier plan. Elle reste d'actualité et se continuera dans le cadre de la future machine européenne Alice Recoque.

Enfin, il importe ici de saluer l'engagement des femmes et des hommes qui forment la communauté du calcul haute performance. Elles et ils sont les clés de la réussite : les résultats de ces Grands Challenges le démontrent une nouvelle fois.
Bonne lecture ! ■

LES SUPERCALCULATEURS



LE SUPERCALCULATEUR ADASTRA partition GENOA

Il a été installé fin 2023 au sein du CINES (Montpellier), à l'issue d'une procédure d'achat menée par une équipe GENCI-CINES. La mise en œuvre d'Adastras au sein du CINES, ainsi que son exploitation ont été confiées aux équipes opérationnelles du centre de calcul.

La partition GENOA présente les caractéristiques suivantes :

- 544 nœuds de calcul avec, pour chacun, 2 processeurs AMD GENOA (EPYC) 96 cœurs à 2,4 GHz, 768 Go de mémoire DDR5, pour un total de 104 448 cœurs de calcul et une puissance crête de 3,9 PFlop/s.
- Réseau d'interconnexion *Slingshot-11* via une topologie *DragonFly* à deux niveaux.



LE SUPERCALCULATEUR JOLIOT-CURIE

partitions AMD ROME & Intel SKYLAKE

Il a été installé fin 2017 au sein du Très Grand Centre de Calcul (TGCC) du CEA, (Bruyères-le-Chatel-Essonne), à l'issue d'une procédure d'achat menée par une équipe intégrée GENCI-CEA. La mise en œuvre de Joliot-Curie au sein du TGCC, ainsi que son exploitation ont été confiées aux équipes opérationnelles de la Direction des Applications Militaires (DAM) du CEA.

La partition AMD ROME présente les caractéristiques suivantes :

- 2 292 nœuds de calcul avec, pour chacun, 2 processeurs AMD ROME (EPYC) 64 cœurs à 2,6 GHz, 256 Go de mémoire DDR4, pour un total de 293 376 cœurs de calcul et une puissance crête de 11,75 PFlop/s.

- Réseau d'interconnexion *Infiniband HDR100* via une topologie *DragonFly+*.

La partition Intel SKYLAKE présente les caractéristiques suivantes :

- 1 656 nœuds de calcul avec, pour chacun, 2 processeurs Intel SKYLAKE 24 cœurs à 2,7 GHz, 192 Go de mémoire DDR4, pour un total de 79 488 cœurs de calcul et une puissance crête de 6,9 PFlop/s.

- Réseau d'interconnexion *Infiniband EDR* via une topologie *Fat Tree*.

CT1 ENVIRONNEMENT

L'ÉQUIPE

Aurélien ALBERT (CNRS, IGE)
Jean-Marc MOLINES (CNRS, IGE)
Pierre MATHIOT (CNRS, IGE)
Julien LE SOMMER (CNRS, IGE)
Thierry PENDUFF (CNRS, IGE)

ORCINUS, une simulation numérique de l'océan global à très haute résolution

LE CONTEXTE. Le satellite SWOT a embarqué en décembre 2022 un radar interféromètre à large fauchée qui fournit des mesures du niveau de la mer à une résolution inédite de 15-30 km, 10 fois supérieure à celle des instruments antérieurs. Pour accompagner l'exploitation et l'interprétation de ces nouvelles observations ainsi que de celles issues des futures missions satellites d'observation des courants de surface, des simulations réalistes de l'océan à très haute résolution sont nécessaires.

17 millions d'heures CPU.



Le Grand Challenge AdastrA Genoa a permis d'initialiser une simulation numérique réaliste de l'océan tridimensionnel global à une résolution extrêmement fine de 2-3km. Le modèle d'océan-banquise **NEMO** a été opéré sur une grille curvilinéaire tripolaire de type *ORCA* à une résolution de 1/36° et 121 niveaux verticaux, ce qui correspond à plus de 12 milliards de points de grille actifs ; 17 milliards de points si l'on prend en compte également les continents.

Une nouvelle bathymétrie issue des dernières versions des données *GEBCO* et *BedMachine* a été construite afin de limiter le mélange numé-

17 milliards

C'est le nombre de points de grille pour une résolution globale à quelques km et 121 niveaux verticaux.



rique délétère des masses d'eau au-dessus de reliefs trop bruités et afin de favoriser la mise en place du passage des masses d'eau au travers de certains chenaux mieux résolus. La nouvelle grille verticale de 121 niveaux géopotentiels a également été mise en place pour mieux représenter les cavités sous les plateformes de glace flottantes près des pôles, et la bonne résolution des **overflows** et des échanges de chaleur au-dessus des talus continentaux situés aux mêmes profondeurs. Les cavités sous-glaciaires jouent un rôle de résonateur impactant les ondes de marée à très grande échelle ; leur représentation est donc primordiale pour le réalisme de la simulation globale.

UNE PHASE D'INITIALISATION DÉLICATE

Avant de pouvoir faire tourner cette toute nouvelle configuration en mode production, il convient d'initialiser les courants océaniques mondiaux en surface et en profondeur à partir d'une situation au repos

(vitesses nulles). Cette phase d'initialisation est particulièrement délicate à une telle résolution et de nombreuses explosions du code sont à prévoir.

En effet, les vitesses du courant en certains points de grille dépassent parfois une valeur critique qui dépend de la taille de la maille et du pas de temps (vitesse critique = taille maille/pas de temps), les masses d'eau ne peuvent alors plus se propager de maille en maille du fait de leur vitesse trop élevée.

Ces vitesses de courant qui se développent à partir d'un état au repos peuvent atteindre des valeurs très importantes, car elles sont le résultat d'une situation initiale en température et salinité potentiellement instable. En effet, la température et la salinité utilisées pour initialiser la simulation proviennent de l'état moyen d'une simulation à plus basse résolution qui a tourné avec une bathymétrie différente. Les champs

NEMO

Il s'agit d'un modèle aux équations primitives simulant la circulation océanique régionale et globale.

Il est conçu comme un outil flexible pour étudier l'océan et ses interactions avec les autres composantes du système climatique terrestre sur une large gamme d'échelles spatiales et temporelles.

OVERFLOW

Masse d'eau dense, formée sur un plateau continental ou dans une mer marginale, qui rejoint l'océan ouvert en s'écoulant par-delà de fortes contraintes topographiques, telles que d'étroits détroits, des seuils ou des talus continentaux particulièrement pentus.

« Une stratégie basée sur des ajustements incrémentaux du pas de temps et des coefficients de viscosité permet d'éviter les explosions dues à des vitesses trop élevées lors de l'initialisation. »

ONDES DE ROSSBY

Appelées aussi ondes planétaires, ce sont de lents mouvements ondulatoires de la circulation océanique de grande longueur d'onde, dont l'initiation est due à la variation de la force de Coriolis selon la latitude

tridimensionnels sont interpolés et parfois extrapolés pour les adapter à la grille plus fine et à la nouvelle bathymétrie.

Cette situation initiale instable provoque alors des chocs qui se traduisent en ondes inertielles et/ou gravitationnelles qui vont traverser les bassins océaniques. Les échanges de chaleur, d'eau douce et de quantité de mouvement avec l'atmosphère via les forçages atmosphériques peuvent également créer des situations d'instabilité au démarrage de la simulation. Sur le plus long terme, des ondes plus lentes dites de **Rossby** vont également s'établir et ajuster le modèle aux champs initiaux et au forçage.

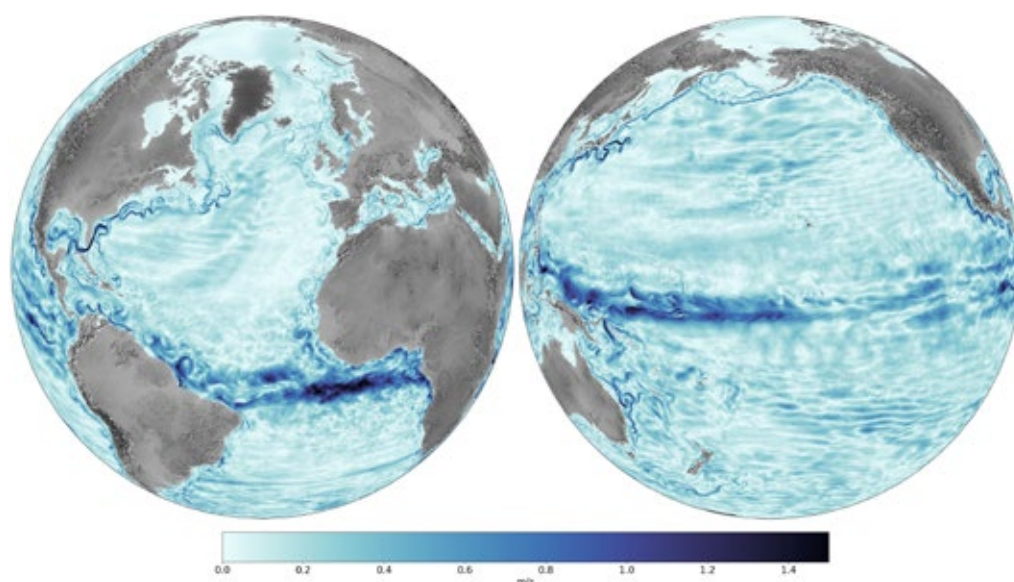
L'initialisation de notre configuration consiste donc à simuler un champ global de vitesses en évitant les explosions du modèle dues à des vitesses trop élevées en élaborant une stratégie ad-hoc basée sur des ajustements incrémentaux du pas de temps et de certains coefficients de viscosité.

Cette procédure nécessite une importante puissance de calcul comme celle qui était mise à notre disposition lors de ce Grand Challenge. Plus de 150 000 intégrations du code ont été réalisées pour notre configuration en partant d'un pas

de temps de 10 secondes entre chaque itération et des viscosités latérales sur la quantité de mouvement et les traceurs 10 fois supérieures à des valeurs réalistes. Nous avons utilisé 100 nœuds en parallèle de la machine Adastra en répartissant le modèle d'océan-banquise **NEMO** et le serveur externe de données **XIOS** sur les 19 200 cœurs associés en plaçant un serveur sur chaque nœud. 12 millions d'heures ont été nécessaires pour effectuer 53 jours de simulation, la moitié d'entre elles ayant été consommées pour débogage et mise en place de la stratégie d'initialisation.

UNE AIDE À L'INTERPRÉTATION DES DONNÉES FUTURES

L'état de l'océan obtenu après cette initialisation servira de base pour les futures simulations qui accompagneront la calibration et/ou la cartographie des données actuelles satellites de hauteur de niveau de la mer ou futures des courants de surface dans n'importe quelle région souhaitée. Ces simulations fourniront alors des réalisations virtuelles qui pourront aider à l'interprétation des données d'observations satellite et in-situ, ou bien des pseudos-observations utiles à la préparation des algorithmes de traitement des futures missions spatiales d'observation de courants de surface. Ces simulations permettront égale-



Intensité en mètres
par seconde des courants de
surface après 53 jours
de simulation au 1/36°
à partir d'un état au repos.

La résolution spatiale de quelques kilomètres permettra également d'étudier l'impact des tourbillons océaniques sur les interactions océan-banquise.

ment l'évaluation de l'horizon de prévisibilité de la dynamique océanique de fine échelle et sa variabilité afin de guider les systèmes de prévisions océaniques.

La résolution spatiale de quelques kilomètres permettra également d'étudier l'impact des tourbillons océaniques sur les interactions océan-banquise, notamment via les transports de masses d'eau sur les marges antarctiques et leur impact sur la fonte basale des plateformes de glace, le

recul des zones englacées et l'impact de la déformation de la banquise à fine échelle au niveau des zones de fracture sur les propriétés de la couche de mélange océanique. Enfin, une étude de la variabilité spatio-temporelle de la macro-turbulence océanique et la calibration de paramétrisations sous-maille de ces effets pour les modèles à plus basse résolution comme ceux mis en œuvre dans les études climatiques seront réalisées via la formulation de problèmes d'apprentissage supervisés. ■

SERVEURS XIOS

XIOS, qui signifie XML-IO-Server, est une bibliothèque dédiée à la gestion des entrées-sorties (lecture/écriture des données) dans les codes climatiques. XIOS gère la sortie des diagnostics et autres données produites par les codes climatiques dans des fichiers et offre des opérations de post-traitement temporel (moyenne, minimum, maximum, etc.) et spatial sur ces données. XIOS vise à simplifier la gestion des entrées/sorties dans les codes en minimisant le nombre de sous-programmes à appeler dans le code et en réduisant le nombre d'arguments de ces sous-programmes.

CT1 ENVIRONNEMENT**L'ÉQUIPE**

Helen SCHOTTENHAMML (IFPEN)

Frédéric BLONDEL (IFPEN)

Ani ANCIAUX SEDRAKIAN (IFPEN)

Méthodes Lattice Boltzmann, pour l'énergie éolienne

LE CONTEXTE. Afin d'accompagner l'implémentation et le bon fonctionnement de champs d'éoliennes (terrestres et en offshore) les équipes d'IFPEN utilisent la simulation numérique aux grandes échelles via le code de calcul *waLBerla-wind* pour modéliser en temps réel les effets de sillage entre éoliennes et de fermes d'éoliennes mais aussi leur couplage avec la couche limite atmosphérique.

26 millions d'heures.



La recherche sur les interactions des sillages d'éoliennes et de fermes éoliennes ainsi que leur couplage avec la couche limite atmosphérique repose fortement sur des modèles haute-fidélité, basés sur la simulation des grandes échelles. Le couplage fort entre la couche limite atmosphérique et les champs éoliens nécessite la prise en compte d'une large gamme d'échelles de longueur, allant de l'échelle kilométrique des tourbillons atmosphériques jusqu'à l'échelle métrique des tourbillons de sillage.

Une telle variété d'échelles de longueur nécessite à la fois des domaines de simulation très grands et des résolutions numériques très fines,

670

C'est le nombre d'éoliennes simulées en temps réel à l'aide d'un solveur haute-fidélité prêt pour l'Exascale.



afin de capturer tous les phénomènes physiques en jeu. En conséquence, il est nécessaire de disposer de codes de calcul extrêmement performants, de manière à pouvoir réaliser de telles simulations, comprendre la physique sous-jacente, et mettre au point des outils à destination des industriels.

CRÉATION DU SOLVEUR *waLBerla-wind*

Les méthodes Lattice-Boltzmann semblent répondre à ce problème. En effet, les algorithmes numériques sous-jacents sont hautement parallèles, et montrent de très bonnes performances sur les supercalculateurs.

Dans cette étude, la plateforme logicielle multiphysique *waLBerla* est utilisée. *WaLBerla* se base sur des outils de génération de code très performants, qui sont utilisés pour générer des noyaux de calcul très optimisés, sur GPU et CPU, permettant la vectorisation via les intrinsèques SIMD et le choix de

la précision utilisée. En revanche, des modèles permettant la prise en compte des éoliennes et de la couche limite atmosphérique manquaient.

Dans le cadre du projet « *Center of Excellence* » *EoCoE-II* ainsi qu'au cours de la thèse en cours d'Helen Schottenhamml à IFPEN, des modèles de turbines, basés sur les méthodes de lignes et disques actuateurs, ainsi que des lois de parois adaptées à la simulation de couches limites atmosphériques ont été implémentés [1,2]. L'ensemble de ces développements ont donné lieu à la création du solveur *waLBerla-wind*. Les méthodes actuatrices permettent de s'affranchir du maillage proche pale couteux, en remplaçant la résolution complète de l'écoulement autour de celle-ci par des termes de forçage volumiques, portés par des lignes ou bien de manière plus grossière par un disque, uniformément chargé dans le cas présent. Les lois de parois, quant à elles, permettent de s'affranchir de la résolution

L'EFFET DE SILLAGE

À l'arrière d'une éolienne, un sillage tourbillonnaire se développe, et la vitesse moyenne du vent après l'hélice est réduite puisque l'éolienne a capté une partie de l'énergie cinétique du vent. L'effet de sillage signifie ainsi une diminution de la vitesse du vent derrière l'éolienne entraînant notamment une baisse de production des éoliennes situées après la première mais aussi des charges de fatigue et l'usure prématurée. D'où l'importance d'une distance adaptée entre les éoliennes d'un champ ou entre plusieurs champs proches.

La capacité à réaliser des simulations plus rapidement que le temps réel ouvre le champs de nombreuses nouvelles applications.

L'EXTENSIBILITÉ DES PERFORMANCES
Ou *performance scalability* en anglais signifie l'accroissement des performances de calcul d'un modèle en fonction soit du nombre de processeurs utilisés (exemple : pour un problème donné on divise par 2 le temps calcul en mobilisant 2 fois plus de ressources) soit en fonction de la taille du modèle (exemple : on est capable dans le même temps de traiter un problème 2 fois plus gros sur 2 fois plus de ressources de calcul).

de la sous-couche visqueuse au niveau du sol qui nécessiterait des mailles de tailles micrométriques.

Notre objectif au cours de ce grand challenge était de valider les performances de *waLBerla-wind* pour la simulation de grand champs éolien, voire de clusters de champs éoliens, et de repousser les limites du code. La capacité à réaliser des simulations plus rapidement que le temps réel ouvre le champ de nombreuses nouvelles applications.

Pour ce faire, différents cas tests ont été considérés, allant d'une turbine seule (*NREL 5MW*) à la simulation de fermes entières (*Westermost et Anholt*, constituée de 35 et 111 turbines, respectivement) mais aussi de plusieurs fermes en interaction (*Danish Energy Island*, 10 fermes de 67 turbines chacune). Des cas avec et sans couche limite atmosphérique idéalisée [3] ont été simulés.

L'ensemble des résultats détaillés ci-dessous se basent sur des simulations simple précision, incluant la vectorisation AVX512, ayant été lancés sur les nœuds CPU d'Adastra.

Pour le cas de la *NREL 5MW*, l'extensibilité parallèle du code a été testée sur 1 à 100 nœuds. Jusqu'à 50 nœuds, une extensibilité quasi parfaite est observée. De 50 à 100 nœuds, les résultats restent bons. Des simulations temps réel ont été

atteintes à partir de 20 nœuds pour ce cas comprenant environ 145 millions de cellules.

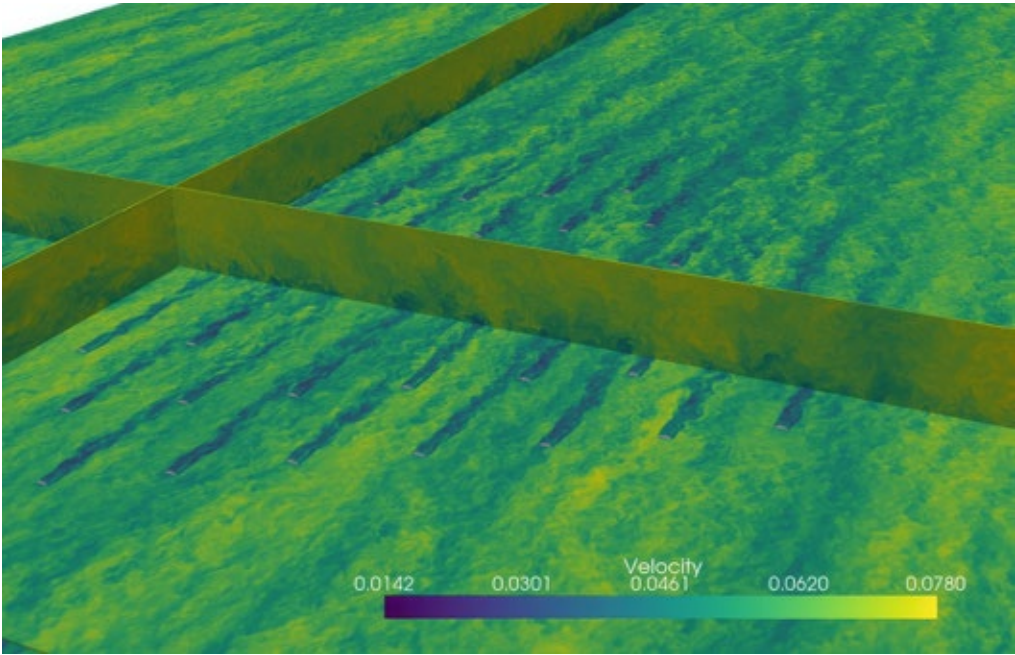
SIMULATIONS ET PERFORMANCES ASSOCIÉES

Pour le cas de la ferme de *Westermost Rough* (35 turbines, 32 cellules par diamètre de rotor pour un total de 4 milliards de cellules), les performances globales et la scalabilité sont légèrement dégradées, mettant en lumière le surcoût lié à la prise en compte des éoliennes. Cependant, le temps réel était atteint dès l'utilisation de 40 nœuds de calcul.

Le cas *Anholt* avec 111 turbines a nécessité une réduction de la finesse du maillage, passant à 16 cellules par diamètre de rotor, ce qui reste conforme aux préconisations faites dans la littérature. Le domaine de simulation étant lui-même plus restreint, le temps réel a été atteint pour seulement 9 nœuds.

Le dernier cas test, *Danish Energy Island*, est constitué de 670 turbines réparties en 10 fermes. 16 cellules par diamètre de rotor ont été considérées. Malgré la taille du domaine, d'environ 2.2 milliards de cellules, le temps réel a été atteint sur 50 nœuds, ce qui est remarquable étant donné la complexité de l'étude.

Enfin, la fonctionnalité couche limite atmosphérique a été testée pour les cas mono turbine et *Westermost Rough*. Dans



Contour de vitesses en unité « Lattice Units » - Simulation de la ferme WesternMost Rough soumise à une couche limite atmosphérique neutre

Configuration	#Noeuds	#Mailles	Temps physique (h)	Temps de simulation (h)	Temps physique / temps simulation
Avec couche limite atmosphérique : simulation précurseur pour Westernmost Rough	400	4.0e9	20.0	12.3	1.63
Sans couche limite atmosphérique : interaction entre 10 fermes (670 turbines)	100	2.2e9	15.6	8.8	1.77

Configurations testées et temps de simulation associés

les deux cas, des simulations sans turbine ont été lancées pour initialiser la couche limite. Ensuite, une seconde simulation a été lancée, cette fois avec les turbines. Pour les simulations sans turbine, une excellente extensibilité parallèle a été obtenue, jusqu'à 400 des 544 nœuds de calcul disponibles. Pour les simulations avec turbines, les performances ont été légèrement réduites. Sur 100 nœuds, le surcoût en calcul a été estimé à environ 12 pourcents, ce qui reste modéré.

AMÉLIORATION DES PERFORMANCES DU CODE EN PERSPECTIVE

Ces résultats ouvrent la porte à des application prometteuses, telles que la génération de bases de données pour la mise au point de modèles physiques analytiques ou pilotés par les données.

Des jumeaux numériques à l'échelle de fermes éoliennes peuvent également être envisagés, permettant la mise en place d'algorithmes de contrôle en boucle fermée basés sur des modèles à haute-fidélité. Les travaux futurs vont porter sur l'amélioration des performances du code, afin de pouvoir réaliser des simulations Exascale. Ces travaux seront réalisés au cours du projet EoCoE-III. Par ailleurs, les modèles physiques sont également améliorés, avec notamment la prise en compte des terrains complexes et des effets thermiques, afin de pouvoir modéliser des couches limites non neutres. ■

(1) Helen Schottenhamml et al 2022 J. Phys. : Conf. Ser. 2265 022027
(2) Helen Schottenhamml et al 2024 Concurrency and Computation: Practice and Experience doi: 10.1002/cpe.8117
(3) Helen Schottenhamml et al 2024 ECCOMAS

CT2a ÉCOULEMENTS NON RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES

L'ÉQUIPE

Marc CHAUVY (Safran Tech/DST)

Julien MARTY (ONERA/DAAA)

Sébastien BOURASSEAU (ONERA/DAAA)

Nicolas HABOTTE (Safran Aero Booster/DT)

Simulation URANS du compresseur transsonique ENOVAL 360°

LE CONTEXTE. Safran Aero Boosters a mis au point un prototype de compresseur basse pression à haute vitesse (10 000 tours/minute), appelé ENOVAL, destiné aux nouvelles configurations de moteurs à haut taux de dilution pour diminuer la consommation de carburant et le bruit. Ce compresseur est instrumenté et il s'agit donc d'un cas intéressant pour comprendre les phénomènes physiques associés à ces fonctionnements et réaliser des études numériques.

34 millions d'heures CPU.



a réduction de la consommation de carburants, des émissions de polluants et du bruit sont des contraintes de plus en plus fortes pour le développement des nouvelles générations de moteurs d'avion. Pour répondre en partie à ce problème, chacun des composants de la turbomachine doit évoluer et est amené à fonctionner dans un environnement plus exigeant (réduction maîtrisée des marges de fonctionnement).

Afin d'atteindre ces objectifs, les concepteurs dessinent des machines compactes à fort rendement et grande plage de fonctionnement.

1,3 milliard

de points ; 1 tour de roue complet représente 2,8 millions d'heures CPU ; 3,5 tours de roue réalisés.



Les compresseurs basse pression évoluent donc vers des fonctionnements en régime transsonique plus complexe à maîtriser que la technologie actuelle : caractérisés par des pertes résultant des ondes de chocs (aussi présentes dans les roues mobiles), entre autres, par une alimentation inhomogène (distorsion) à l'entrée de la turbomachine renforçant l'instationnarité de l'écoulement, et enfin, au niveau des écoulements secondaires, par des pertes par couplages entre composants notamment accentuées par les tourbillons de passage, de coin et de jeu.

CAPTURER NUMÉRIQUEMENT LES PHÉNOMÈNES ENTRAÎNANT DES INSTABILITÉS

Jusqu'à présent, de nombreuses études ont été réalisées sur des compresseurs plutôt subsoniques / haut subsoniques. Au fil des années, l'ONERA, avec elsA, a acquis un savoir-faire pour la mise en données de ces calculs compresseurs, c'est-à-dire

l'entièreté du compresseur. Cela a conduit à plusieurs **études numériques** qui ont permis de montrer l'intérêt de ces simulations pour comprendre finement des phénomènes physiques comme le décollement, le pompage ou bien l'acoustique de ces composants.

On peut citer les références de N. Gourdain et Flore Crevel (p. ex. [1-3]). Ces travaux ont été complétés par des études internes à l'ONERA menées par Julien Marty (p. ex. [4-5]). Ainsi les premières études ont démarré avec des maillages de l'ordre de 30 millions de points (5 tours de roues sur 4 cœurs vectoriels) pour arriver dernièrement à 150 millions de points (10 tours de roues sur 2 400 cœurs). Aujourd'hui, nous souhaitons réaliser ce type de simulation sur des compresseurs modernes transsoniques à fort taux de compression (~3 comparé à un compresseur classique ~2) et grandes vitesses de rotation (~10000 rpm comparé à un compresseur classique ~4500 rpm) entraînant des

URANS

Unsteady Reynolds Average Navier-Stocks désigne l'étude des écoulements des fluides instationnaires par des méthodes numériques.

« *La simulation instationnaire d'un compresseur complet ouvre de grandes perspectives en termes de recherche mais aussi de développement pour l'industriel.* »

L'intérêt d'un tel calcul est d'apporter la possibilité de faire une analyse fine du système complet et de capter une physique plus riche.

ÉTAGE

Une turbomachine est composée de couples de roues rotor-stator (un couple est appelé un étage). Une roue est composée de plusieurs aubes.

elsA

Logiciel ONERA Safran de simulation aérodynamique compressible permettant le calcul d'écoulements tant internes qu'externes autour de configurations mixant parties fixes et mobiles, en maillages structurés ou non structurés du subsonique à l'hypersonique.

instabilités lorsqu'on se rapproche du fonctionnement optimal du compresseur, c'est-à-dire proche des zones de pompage. La difficulté est donc de capturer numériquement les phénomènes qui entraînent des instabilités (ondes de choc, distorsions, interactions entre grilles et renforcement des écoulements secondaires) afin de les comprendre et d'aider les bureaux d'études dans le design des compresseurs. Cela passe nécessairement par des calculs 360 degrés instationnaires.

FAIRE UNE ANALYSE FINE DU SYSTÈME COMPLET

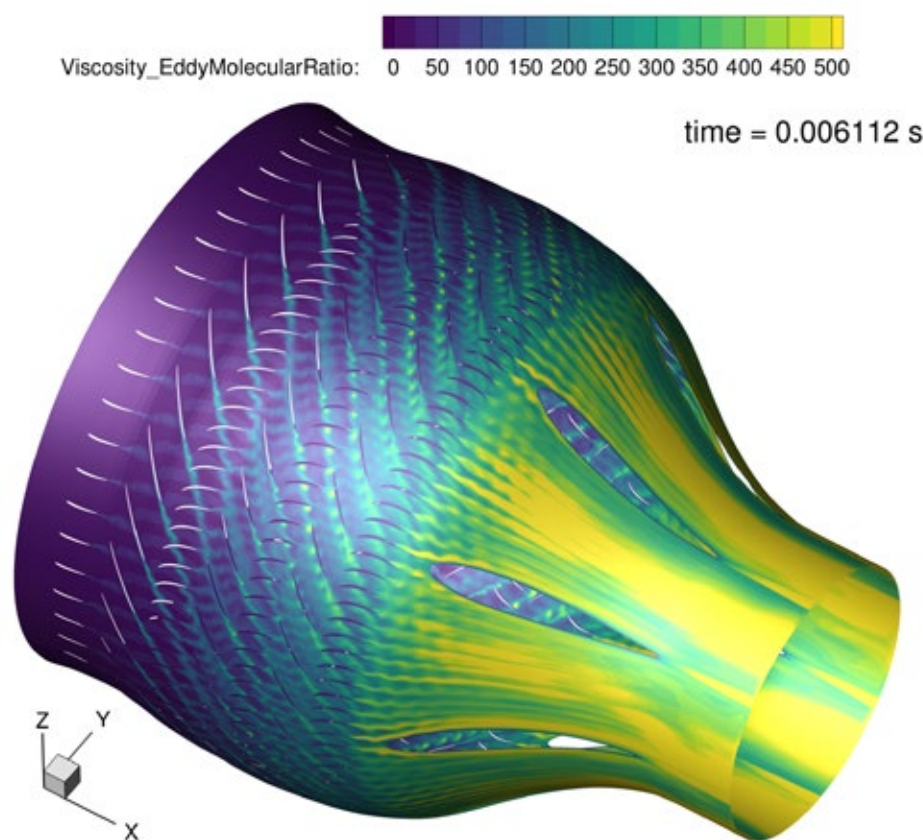
Jusqu'à maintenant, ce type de calcul reste à l'état de challenge pour la recherche et encore plus pour l'industrie, et peu ont été réalisés sur ces compresseurs transsoniques en prenant en compte tous les étages dans une même simulation. L'intérêt d'un tel calcul est d'apporter la possibilité de faire une analyse fine du système complet et de capter une physique plus riche étant donné qu'il n'y a pas ou peu d'approximations sur la géométrie, et d'autant plus en présence d'un écoulement entrant distordu.

Dans ce Grand Challenge, nous avons utilisé le compresseur transsonique ENOVAL développé chez Safran. Un des avantages de ce compresseur est que nous avons

de nombreuses données expérimentales bien documentées (p. ex. : pressions et températures totales pour les grilles statoriques ainsi qu'en entrée/sortie du compresseur, pressions statiques au moyeu et au carter et pressions instationnaires au carter) qui permettent de vérifier la qualité des simulations à chaque étape. Pour réaliser ces simulations, nous avons utilisé le logiciel elsA. Il était déjà capable de simuler des configurations mobiles, de la turbulence modélisée ou résolue (même avec loi de paroi), et sur de grandes durées de simulation. La principale difficulté est la génération des maillages de plus d'un milliard de cellules (ici 1.3 milliards de points) et à l'utiliser avec elsA. Ce nombre de points très élevés est une nouveauté dans le domaine des turbomachines. Il faut donc un bon équilibrage de charge entre processeurs (déjà fonctionnel) mais une gestion fine de la mémoire. Deux points de fonctionnement ont été simulés : le point nominal (sur 3,5 tours de roue) et un point proche pompage (sur 4,5 tours). La durée de simulation a permis de calculer un champ moyenné en temps sur un tour de roue.

POUR UNE MEILLEURE COMPRÉHENSION DES INSTABILITÉS DES COMPRESSEURS

Il est à noter que ce travail de modélisation 360 degrés du compresseur trans-



Visualisation du nombre de Reynolds turbulent au milieu de la veine du compresseur après deux tours de roues. On montre que le sillage d'une roue N peut toujours être observé jusqu'à 2 roues après cette roue N.

sonique *ENOVAL* est une étude qui est réalisée dans le cadre du projet *SONICE* (projet «France Relance» co-financé par la DGAC qui bénéficient aussi de financements EU via l'initiative *NextGenerationEU*), projet qui vise à travailler sur le développement de méthodes et d'outils numériques pour le remplaçant du code CFD *elsA* (le projet ne finance pas les heures de calculs).

Les simulations réalisées dans cette étude apportent donc une meilleure compréhension des instabilités des compresseurs transsoniques et serviront également à améliorer les modèles de réductions du nombre d'aubes pour les simulations stationnaires (comme les méthodes Giles) ou bien les simulations instationnaires (les méthodes temporelles de type multi-chorochroniques ou fréquentielles de type HBT ou NLH). De plus, cette étude servira de base pour étudier des calculs avec distorsion sur

cette même configuration (on pourra ainsi repartir des conclusions et des résultats de cette étude).

Nous tenons à adresser nos remerciements à Mickael Philit pour son implication dans le projet. ■

Bibliographie

- (1) Gourdain, N. (2005). *Simulation numérique des phénomènes de décollement tournant dans les compresseurs axiaux*, Thèse.
- (2) Gourdain, N., Burguburu, S., Leboeuf, F. and Michon, G.-J. «Simulation of rotating stall in a whole stage of an axial compressor». *Computers & Fluids*. October 2010; 39(9). <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.05.017>
- (3) Crevel, F. (2013). *Simulation numérique de l'écoulement en régime de pompage dans un compresseur axial multi-étage*, Thèse.
- (4) Marty, J., Castillon, L., and Joseph, P. (November 25, 2022). «Numerical Investigations on the Rotating Stall in an Axial Compressor and Its Control by Flow Injection at Casing». *ASME. J. Turbomach.* May 2023; 145(5): 051009. <https://doi.org/10.1115/1.4056090>
- (5) Marty, J., Barrier, R. and Garnier, E. «Impact of distortions due to separation in S-duct inlet on compressor stage behavior and performances». *AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. June 2017. <https://doi.org/10.2514/6.2017-3795>

CT2a ÉCOULEMENTS NON RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES

L'ÉQUIPE

Georges GEROLYMOS (Sorbonne Université)

Isabelle VALLET (Sorbonne Université)

Patrick DA COSTA (Sorbonne Université)

DNS de turbulence de paroi supersonique : objectif haut Reynolds

LE CONTEXTE. La détermination des lois d'échelle en turbulence compressible de paroi nécessite des statistiques précises pour une matrice de nombres de Mach et de Reynolds. Les données dans la littérature sont limitées à des nombres de Reynolds modérés. L'objectif de ce challenge est d'étendre la base de données de la matrice (Reynolds, Mach) à des nombres de Reynolds plus élevés ($Re_\theta = 2000$) pour lesquels la structure de l'écoulement est représentative des couches limites (à Reynolds encore plus élevés) présentes dans les applications aérospatiales.

80 millions d'heures.



a turbulence compressible de paroi correspond à l'écoulement complexe, multi-paramètres (nombres de Mach et de Reynolds et condition thermique de la paroi) et multi-échelles (échelles paroi/sillage différentes pour la vitesse, la température ou la pression), dans les couches-limites autour et à l'intérieur de configurations aérospatiales. La simulation numérique directe (DNS) résout les équations de Navier-Stokes instationnaires sur les très fins maillages nécessaires pour la résolution des petites structures qui déterminent le taux-de-dissipation (lequel, selon notre compréhension actuelle phénoménologique de Kolmogorov est un paramètre d'échelle essentiel de la dynamique globale de l'écoulement).

7x10⁹

Points et 100 millions
d'heures sont nécessaires
pour atteindre
 $Re_\theta = 2000$ à Mach 2.



Ces simulations fournissent des données détaillées (souvent impossibles à mesurer expérimentalement avec la technologie actuelle) nécessaires pour l'analyse et la modélisation de la turbulence. Les simulations compressibles demandent des ressources de calcul intensif beaucoup plus importantes que les simulations incompressibles. D'une part on doit rajouter la masse volumique et la température comme variables, et d'autre part le pas-de-temps admissible est restreint par la propagation des ondes de pression. En plus, les techniques de résolution d'ondes-de-choc telles que WENO, augmentent le temps de calcul d'un facteur de 2-3. Enfin, pour un Re_θ donné, plusieurs simulations sont nécessaires pour étudier l'influence du nombre de Mach et de la condition thermique de la paroi.

ACQUÉRIR ET ANALYSER DES DONNÉES POUR TROIS NOMBRES DE MACH

Pour ces raisons, alors que des données en écoulement incompressible couvrent des

Reynolds basés sur l'épaisseur de déficit de la quantité de mouvement allant jusqu'à $Re_\theta = 20\,000$, les données en écoulement compressible sont limitées à des nombres de Reynolds modérés.

L'objectif principal de ce Grand Challenge était d'acquérir et d'analyser des données fiables pour 3 nombres de Mach (0.8, 1.5, 2.0) à $Re_\theta = 2\,000$, étendant ainsi la base de données alors disponible à ce nombre de Reynolds plus élevé. Les données à $Re_\theta = 2\,000$ sont essentielles : avec l'augmentation du nombre de Reynolds, la zone de validité simultanée des lois de paroi et de sillage se forme, et des modifications substantielles de la structure de l'écoulement et de la turbulence apparaissent.

Un exemple typique est la modification du profil de la corrélation triple de la composante normale à la paroi de la vitesse fluctuante (Figure) observée à $Re_\theta = 2\,000$. Des modifications analogues sont

NOMBRE DE REYNOLDS

Le Nombre de Reynolds (Re) est une dimension sans unité utilisée en mécanique des fluides pour caractériser le régime d'écoulement d'un fluide. Il permet de déterminer si l'écoulement est laminaire (mouvement ordonné des particules de fluide) ou turbulent (mouvement chaotique des particules de fluide). Si le nombre de Reynolds est faible (typiquement inférieur à 2000 pour un écoulement dans un tuyau), l'écoulement est généralement laminaire. S'il est élevé (typiquement supérieur à 4000), l'écoulement est généralement turbulent. Entre ces deux valeurs, l'écoulement est en transition et peut être instable.

« Ce Grand Challenge a permis à Sorbonne Université de simuler un écoulement turbulent supersonique (Mach 2) à $Re_\theta = 2000$. »

L'acquisition et la mise à disposition de données compressibles haut-Reynolds est utile pour l'analyse de la physique de l'écoulement mais également pour la modélisation de la turbulence avancée.

LOGICIEL

AERODYNAMICS

Le logiciel aerodynamics utilise un parallélisme hybride MPI/OpenMP pour adapter la décomposition de domaine (processus MPI) au nombre de cœurs/nœud de la machine cible.

CORRÉLATION À 2 POINTS

Les corrélations à 2 points soulignent l'effet du nombre de Reynolds sur les structures cohérentes lentes.

observées pour plusieurs autres quantités, comme le nombre de Prandtl turbulent.

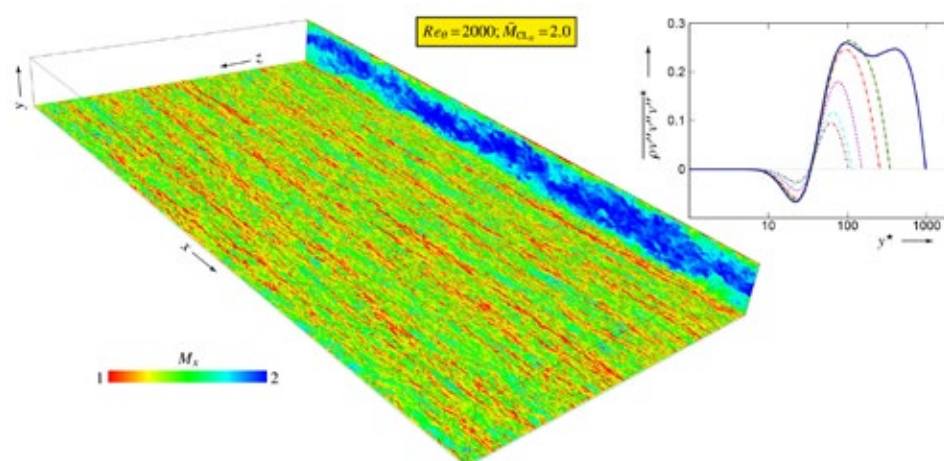
L'écoulement a été simulé en utilisant le logiciel *aerodynamics* (open source) développé à Sorbonne Université, qui adopte une implémentation massivement parallèle hybride MPI/OpenMP avec une scalabilité démontrée jusqu'à 65 535 cœurs. Les termes convectifs sont discrétisés avec un schéma décentré amont d'ordre très élevé (17), incluant une option WENO, combiné à un solveur de Riemann approché HLLC pour une thermodynamique de gaz dilué à chaleur spécifique variable. Les simulations à $Re_\theta = 2\,000$ initialisées par des simulations préliminaires à maillage très grossier, ont été menées jusqu'à l'évacuation du transitoire, puis continuées pour l'acquisition des statistiques (moments jusqu'à l'ordre 6, densités de probabilité à une ou deux variables et **corrélations à 2 points**). L'augmentation du nombre de variables (composantes de vitesse, pression, masse volumique, température, entropie, enthalpie totale) génère une croissance combinatoire des corrélations turbulentes qui doivent être échantillonnées et étudiées. Un effort particulier a été fait pour acquérir un grand nombre de corrélations, y compris de gradients et de dérivées d'ordre 2.

UN MAILLAGE DES CONDITIONS D'ÉCOULEMENT

Un maillage Cartésien de conditions d'écoulement (Reynolds, Mach) est nécessaire pour identifier les lois d'échelle en (Reynolds, Mach) caractérisant la turbulence compressible de paroi.

Les calculs effectués dans ce Grand Challenge complètent ce maillage dans la plage $200 \leq Re \leq 2\,000$ et $0.3 \leq M^\infty \delta x \leq 2$. L'analyse détaillée du grand volume de données obtenu suggère qu'aucune transformation ne peut complètement éliminer la dépendance bi-paramétrique de l'écoulement au couple (Reynolds, Mach). L'utilisation d'unités HCB (basées sur le cisaillement pariétal moyen et sur les valeurs locales de masse volumique et de viscosité) tient compte de l'effet de Mach sur la contrainte de Reynolds croisée, et conduit à la transformation compressible du profil de vitesse moyenne, mais ne suffit pas pour d'écrire l'effet de Mach sur les tensions diagonales ou sur les corrélations de vitesse d'ordre supérieur.

Des effets de Mach spécifiques apparaissent très proche paroi (distance adimensionnée de la paroi $y^* \leq 40$) où, avec l'augmentation du nombre de



Niveaux instantanés du nombre de Mach longitudinal à $(Re\delta, M\delta x) = (2000, 2)$ et effet de Reynolds sur le profil de la composante perpendiculaire à la paroi $\rho v''v''v''^*$ de la corrélation triple de vitesse fluctuante.

Mach, on observe des ondes de pression cohérentes se propageant dans la direction longitudinale. Ces ondes s'étendent dans la direction transverse sur plusieurs structures basse-vitesse, et modifient aussi bien l'intensité des fluctuations de pression que leur corrélation avec la composante normale de la vitesse fluctuante.

UNE BASE DE DONNÉES OUVERTE

Bien que les empreintes de ces intenses effets de compressibilité très proche paroi apparaissent sur les statistiques en 1 point habituelles, ils ne peuvent pas être expliqués par les profils du nombre de Mach moyen $M^-(y)$ ou sa variance $M'(y)$ (dont le substitut est le nombre de Mach de la turbulence). Ils sont au contraire associés à l'asymétrie positive élevée de M' et à la probabilité relativement élevée d'apparition d'événements extrêmes de Mach élevé supersonique (proche des niveaux externes et beaucoup plus élevé que $M^-(y)$) très proche paroi.

L'acquisition et la mise à disposition de données compressibles haut-Reynolds est non seulement utile pour l'analyse de la physique de l'écoulement (structures cohérentes et échelles), mais également pour la modélisation de la turbulence avancée, aussi bien en RANS (termes dans les équations de transport des composantes du tenseur des taux de dissipation ou des corrélations triples de vitesse) qu'en LES (corrélations à 2 points).

Une base de données ouverte "Compressible turbulent plane channel DNS database" (Mendeley Data, 2024, V1, doi: 10.17632/wt8t5kxzb.1) a été créée pour partager les résultats obtenus par ces simulations Grand Challenge, et le 1^{er} d'une série d'articles analysant les résultats vient d'être publié dans *J. Fluid Mech.* **978** (2024) A25 [doi: 10.1017/jfm.2023.10134]. ■

ÉVÉNEMENTS EXTRÊMES

L'étude des profils d'événements extrêmes (minima and maxima observés des variables de l'écoulement) est essentielle à la compréhension de la structure de la turbulence de proche-paroi.

CT2a ÉCOULEMENTS NON RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES**L'ÉQUIPE**

Félix HOUTIN MONGROLLE (Siemens Gamesa Renewable Energy)

Étienne MULLER (Siemens Gamesa Renewable Energy)

Ricardo AMARAL (TU Delft and Siemens Gamesa Renewable Energy)

Ansh PATEL (Siemens Gamesa Renewable Energy)

Bastien DUBOC (Siemens Gamesa Renewable Energy)

Simulation massivement parallèle de sillages d'éoliennes en mer

LE CONTEXTE. Au sein des parcs éoliens en mer, les interactions de sillage sont connues pour susciter des pertes de production d'énergie parfois importantes, en plus d'impacter négativement la durée de vie des éoliennes. De tels phénomènes sont complexes à étudier, principalement en raison de la large gamme d'échelles spatiales et temporelles impliquées dans l'écoulement ambiant. En outre, les interactions entre l'aérodynamique, la structure et le contrôle de l'éolienne doivent être pris en compte pour prédire adéquatement la réponse de la machine lorsque celle-ci opère dans un sillage. Ce projet a permis les simulations haute performance de nombreux cas d'interaction de sillage, au moyen d'un code de calcul adapté aux complexités évoquées.

22 millions d'heures.



Le contexte énergétique et environnemental actuel nécessite la production d'une énergie décarbonée à faible coût. Pour cela, la France multiplie les appels à projets et la pose de nouveaux parcs éoliens en mer. Siemens Gamesa Renewable Energy détient déjà 3 (~1.5GW) des 4 parcs en cours de déploiement au large des côtes Normandes et Bretonnes. Pour continuer à réduire les coûts de ces installations, il est nécessaire de continuer à optimiser la production d'énergie.

Toutefois, le rassemblement des éoliennes dans des parcs induit des interactions de **sillages** impactant significativement la puissance délivrée. Or, ces effets ne sont encore que trop peu pris en compte dans les

2,1 milliards

De cellules pour simuler l'écoulement autour de 7 éoliennes Flexibles pendant 30 minutes, durant 8 jours, avec 8 448 cœurs.



phases de conception des éoliennes et de leur stratégie de contrôle. Un premier pas a été effectué dans ce sens par la communauté scientifique, en proposant des nouvelles stratégies actives de contrôle. Toutefois, le lien entre les mesures effectuées sur le terrain, les simulations et les modèles de sillages basse fidélité requiert d'être explicité davantage.

PERMETTRE L'AMÉLIORATION DES MODÈLES BASSE FIDÉLITÉ

Ce projet a eu pour but d'étudier les interactions de sillages d'éoliennes offshore dans différentes configurations de parc. Actuellement, les outils d'estimation d'**AEP** sont basés sur des modèles empiriques, lesquels ne disposent pas d'un niveau de fidélité nécessaire. L'étude des interactions de sillages pose deux problématiques majeures. Premièrement, une problématique multi-échelles : afin de simuler la dynamique du sillage ; il faut prendre en compte la vaste gamme d'échelles de l'écoulement allant de l'épaisseur des couches limites à la

surface des pales jusqu'à la distance entre la première et la dernière turbine du parc. Deuxièmement, la problématique multi-physique : les éoliennes, de plus en plus grandes et flexibles, sont soumises à de grandes déformations structurelles mais aussi à des variations de point de fonctionnement.

Ces interactions aéro-servo-élastiques doivent être prisent en compte. À terme, l'étude haute-fidélité des interactions de sillage doit permettre l'amélioration des modèles basse fidélité. A l'heure actuelle, les données de terrains montrent que les modèles empiriques ne prédisent pas de manière conservative l'impact des sillages sur les éoliennes.

C'est pourquoi le développement d'un couplage entre le logiciel BHawC, développé en interne chez SGRE pour le dimensionnement/design des éoliennes, et la bibliothèque YALES2, développé principalement par le laboratoire CORIA et dédiée au calcul massivement parallèle

SILLAGE

Perturbation en aval d'une éolienne, marquée par une vitesse de vent fluctuante et globalement réduite

AEP

Energie annuelle produite par un parc éolien.

« Ce projet a permis à Siemens Gamesa de conforter son besoin de recourir à des simulations massivement parallèles pour étudier le phénomène non-linéaire que sont les interactions de sillage »

LEVEL SET

La fonction de niveau (ou *level set* en anglais) est une méthode mathématique utilisée principalement en géométrie numérique, en traitement d'images et en simulation de fluides. Elle permet de représenter des formes et des interfaces dans un espace multidimensionnel.

d'écoulements multiphysique sur maillages non-structurés, a été initié il y a maintenant trois ans.

Le but de cette méthodologie de couplage est de résoudre la dynamique du sillage au moyen de la simulation aux grandes échelles, tout en venant résoudre son impact sur la structure et le contrôle de l'éolienne. Suivant ce contexte, quatre grands axes ont été suivis dans le cadre de ce projet.

QUATRE GRANDS AXES D'ÉTUDE

Afin de représenter des conditions de couche limite atmosphérique neutre, la première étude du projet a visé à générer une base de données d'écoulements caractéristiques avant de positionner le cluster d'éoliennes dans le domaine. La méthode utilisée durant ce projet est une méthode dite de recyclage consistant à prélever, sur un plan en aval de l'entrée du domaine, le champ de vitesse afin de le réinjecter en entrée. La couche limite atmosphérique se développe au cours du temps et une fois le profil de vitesse convergé les éoliennes sont ensuite positionnées en aval du plan de recyclage. Quatorze rugosités à l'interface mer/air et six débits ont été simulés pour un total de 84 simulations. Le domaine considéré pour ces simulations était de $7.4 \times 1.6 \times 0.9 \text{ km}^3$ avec une taille de maille au sol inférieure à 10m. Chaque simulation a duré 12 heures sur 128 CPU. Les profils de vitesse générés

ont permis de déterminer quelles valeurs de rugosités et de débits utiliser pour être proches de conditions environnementales caractéristiques.

QUATRE ÉTUDES PARAMÉTRIQUES CONDUITES

Dans un second temps une chaîne de calcul automatisée pour la simulation d'interaction de sillage a été développée et optimisée, afin de simplifier la mise en place, l'adaptation du maillage et le déroulement des simulations. Une étape importante de cette méthodologie a été de définir les zones d'intérêt du domaine avant d'y effectuer un raffinement local du maillage. Ces zones contenant majoritairement les sillages des éoliennes sont déterminées par le biais de fonctions « *Level-set* » originellement utilisées dans des calculs diphasiques. Cette méthodologie, appliquée à une rangée de trois turbines alignées, débute avec un maillage de 0,9 millions de cellules, et accumule des statistiques sur un maillage final de 560 millions de cellules.

Les premières étapes nécessitent 128 cœurs et finissent par des simulations sur 2 560 cœurs. Les étapes de cette chaîne de calculs ont été publiées à l'occasion de la conférence TORQUE 2024 [1]. Une discussion autour des effets de la nacelle sur le sillage a également été publiée dans le cadre de ce projet [2].

Enfin, quatre études paramétriques ont été conduites. La première a été réalisée sur

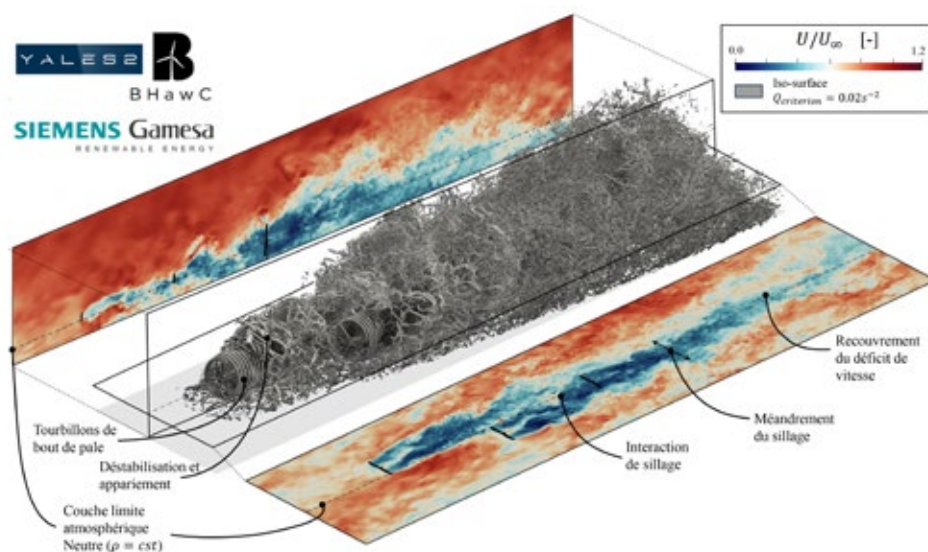


Figure 1: Simulation de l'écoulement autour d'une rangée de trois éoliennes. Deux coupes du champ de vitesse sont représentées ainsi qu'une visualisation 3D de la structure tourbillonnaire des sillages. Cette simulation a nécessité 2 560 cœurs la partition AMD Rome du supercalculateur Irene au TGCC et représenté 350 Go de données.

une turbine de 8 MW soumise à six vitesses de vents et deux niveaux de turbulence différents. Ceci a permis de quantifier et de tabuler comment le sillage évolue et interagit avec l'écoulement extérieur pour les différents points de fonctionnement. Le nombre de cellules des maillages finaux s'étend de 270 millions à 440 millions en fonction de la vitesse de l'écoulement amont.

CONSTRUCTION D'UNE IMPORTANTE BASE DE DONNÉES

La seconde étude a été réalisée avec deux machines supplémentaires dans le domaine. Le but étant d'étudier l'impact d'un décalage latéral des machines en amont sur la dernière éolienne. L'une des configurations est illustrée dans cet article. La figure représente la richesse des différents phénomènes physique capturés par ces simulations, notamment le **méandrement** du sillage. Le nombre de cellules des maillages finaux s'étend de 448 millions à 600 millions en fonction du décalage latéral des machines.

La troisième étude a permis d'atteindre les

limites de la chaîne de calcul en simulant l'écoulements autour d'une rangée de sept éoliennes pour deux vitesses de vent. Les maillages générés sont de 2,1 et 1.7 milliards de cellules pour une basse, 8 m/s, et une haute, 16 m/s, vitesse de vent. Ces simulations ont été obtenues en huit jours sur 8 448 et 6 848 processeurs respectivement.

Ce projet a permis à Siemens Gamesa de conforter son besoin de recourir à des simulations massivement parallèles pour étudier le phénomène non-linéaire que sont les interactions de sillage. Il a aussi initié la construction d'une importante base de données de champs de vitesse finement résolus en aval d'une et plusieurs éoliennes en représentant une grande partie de la physique. Cette base de données permettra de comparer et de quantifier les écarts avec des modèles de sillages basse fidélité. ■

[1] A Patel et al, Towards an automated framework for Aero-Servo-Elastic Large Eddy Simulation of wind turbine wakes, 2024 J. Phys.: Conf. Ser. 2767 052059

[2] R Amaral et al, Nacelle modeling considerations for wind turbines using large-eddy simulations, 2024 J. Phys.: Conf. Ser. 2767 052056

MÉANDREMENT
Dans certaines conditions atmosphériques, la turbulence ambiante anisotrope engendre un déplacement horizontal périodique du centre du sillage.

CT2b ÉCOULEMENTS RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES**L'ÉQUIPE**

Jean-Luc ESTIVALEZES (DMPE, ONERA)
Jean-Christophe HOARAU (DMPE ONERA)
Davide ZUZIO (DMPE, ONERA)
Luc-Henry DOREY (DMPE, ONERA)

Simulation haute-fidélité de l'atomisation assistée dans les moteurs fusée

LE CONTEXTE. Les futurs moteurs-fusées des lanceurs européens sont développés avec l'objectif d'augmenter leur fiabilité et de diminuer leur coût. Pour cela, il est nécessaire de mieux comprendre les phénomènes physiques complexes qui régissent leur fonctionnement. Dans le cas des moteurs-fusées à ergols liquides, les instabilités de combustion haute fréquence sont très complexes et difficilement abordables d'un point de vue expérimental. La simulation numérique haute-fidélité devient ainsi l'outil privilégié pour attaquer ce type de problème.

60 millions d'heures CPU.



La simulation numérique des chambres de combustion des lanceurs spatiaux est un sujet qui suscite un intérêt croissant, car elle peut contribuer au développement de conceptions plus sûres et plus efficaces. La compréhension de l'injection de carburant est un défi particulièrement difficile à relever d'autant plus que ce dernier joue un rôle non négligeable dans le développement d'instabilités de combustion néfastes au bon fonctionnement du moteur. L'oxygène liquide est injecté par un orifice rond entouré d'un flux gazeux annulaire de carburant, ce qui conduit, dans des conditions sous-critiques, à un processus d'atomisation assistée en deux phases.

x10

C'est la multiplication du rapport de densité entre le liquide et le gaz par rapport aux simulation précédentes.



Le résultat de ce processus est un écoulement diphasique très dense et polydispersé, qui influence fortement le comportement de la chambre. L'étude expérimentale de cet écoulement est difficile en raison de la géométrie axisymétrique et de la caractéristique dense de la pulvérisation. Ni la simulation RANS moyennée (Reynolds Averaged Navier Stokes) ni la simulation instationnaire des grandes échelles turbulentes (LES) ne possèdent de modèles fiables capables de reproduire les plus petites échelles de l'atomisation, l'une des raisons étant les difficultés expérimentales à obtenir des informations pertinentes dans la zone dense du jet liquide.

MIEUX COMPRENDRE LA TOPOLOGIE DU LIQUIDE DURANT SON ATOMISATION

C'est pourquoi ce travail vise à fournir des données détaillées sur le processus

d'atomisation à l'aide de la simulation numérique directe (DNS) haute-fidélité. On présente une simulation de l'atomisation coaxiale liquide-gaz assistée dans le régime fibre typique rencontré dans les injecteurs cryogéniques des moteurs-fusées.

L'écoulement est simulé sur une durée physique de 17 ms avec près de 3 milliards de mailles et a nécessité 60 millions d'heures CPU, consommées en utilisant 21 000 cœurs CPU pendant 4 mois. Avec cette acquisition temporelle et une résolution spatiale de 34 μm permettant de suivre une bonne partie des gouttes produites lors de l'atomisation, cette étude permet de mieux comprendre l'évolution de la topologie du liquide durant son atomisation et d'extraire des grandeurs pertinentes pour le développement des

ATOMISATION
Phénomène de création d'un spray de fines gouttelettes pendant l'injection de liquide.

« Ce grand challenge a permis à l'ONERA de réaliser sa première simulation DNS d'injection Fusée en régime Fibre. »

Ces résultats ont permis d'établir des distributions spatiales de tailles et de vitesses de gouttelettes employées ultérieurement pour améliorer les modèles à plus grandes échelles.

MULTI-PHASIQUE
Écoulement comportant plusieurs phases distinguées non-miscibles (ici, une liquide et une gazeuse).

modèles à plus grande échelle. Dans le cadre de ce grand challenge, mené sur la machine Joliot-Curie du TGCC, on a pu mener une simulation avec un rapport de densité liquide/gaz de 1000, c'est-à-dire dans les conditions réelles de l'expérience, ce qui n'avait encore jamais été fait dans ce type de configuration du fait de la raideur numérique accrue induite par ce rapport de densité élevé. Pour cette simulation, nous avons utilisé le code *DyJeat* développé à l'ONERA depuis plusieurs années.

Ce code massivement parallèle (extensibilité quasi parfaite jusqu'à 86 000 cœurs) permet de simuler sans aucun modèle de turbulence les écoulements **multiphases**. Associé à ce code, un outil de traitement de données, *AlgoDetec* a été développé afin de permettre l'extraction à la volée durant la simulation des différentes structures liquides qui vont se former lors de l'atomisation du jet liquide : cœur liquide, ligaments, gouttes.

PRÉCISER LE SCÉNARIO LORS DE L'ATOMISATION

L'analyse a été organisée en suivant la progression de l'écoulement. Tout d'abord, une analyse de fréquence a été effectuée sur le noyau liquide pour étudier l'origine du processus d'atomisation. Ensuite, *AlgoDetect* a été utilisé pour analyser l'atomisation principale, permettant la caractérisation de la taille et de la forme des structures liquides.

Les structures ligamentaires sont mises en perspective dans le processus d'atomisation. Enfin, l'accent a été mis sur la taille caractéristique des gouttelettes dans le spray final et sur la stabilisation des structures liquides de forme sphérique. L'analyse de l'écoulement a permis de préciser le scénario se produisant lors de l'atomisation en régime fibreux. À proximité de la sortie de l'injecteur, une zone de non-atomisation a été caractérisée par des ondulations visibles sur le cœur du liquide, dont la fréquence spécifique est sans doute



Instantané de
l'écoulement diphasique.

l'origine première de l'ensemble du processus d'atomisation de ce régime.

AMÉLIORER LES MODÈLES À PLUS GRANDES ÉCHELLES

À une certaine position en aval dans le noyau liquide, les ondulations de l'interface deviennent suffisamment importantes pour créer de grandes poches de liquide ainsi que des structures allongées attachées au noyau.

Ensuite, l'atomisation de ces grandes structures crée une population de ligaments allongés détachés. Très rapidement, ces ligaments détachés sont également atomisés en de nombreuses gouttelettes de forme sphérique. Les gouttelettes résultantes sont finalement trop petites pour être affectées de manière significative par l'atomisation.

Cette atomisation textuelle a été localisée avec précision, le nombre de structures ligamentaires détachées étant un bon indicateur de son avancement. L'ensemble de ces résultats a permis d'établir des distributions spatiales de tailles et de vitesses de gouttelettes qui seront employées ultérieurement pour améliorer les modèles à plus grande échelle utilisés dans le secteur industriel de la propulsion fusée. Pour nos futures simulations, nous souhaitons explorer des points de fonctionnement différents afin d'analyser la création de gouttes dans des conditions d'injection plus sévères. Les gouttes créées étant plus petites, il faudra augmenter la résolution spatiale de nos simulations pour pouvoir capter l'intégralité des structures liquides plus fines, ce qui nécessitera des ressources de calcul encore plus importantes. ■

CT2b ÉCOULEMENTS RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES

L'ÉQUIPE

Ibtissam EL YAMANI (CORIA / CNRS / Safran Tech)
Julien CARMONA (CORIA / CNRS)
Julien LEPAROUX (Safran Tech)

Mélody CAILLER (Safran Tech)
Vincent MOUREAU (CORIA / CNRS)
Renaud MERCIER (Safran Tech)

Simulation de l'atomisation primaire d'un injecteur de carburant aéronautique

LE CONTEXTE. Pour relever les défis climatiques, la transition vers des carburants d'aviation durables (SAF) nécessite le développement de méthodes numériques fiables permettant aux ingénieurs de concevoir des injecteurs carburant efficaces. La cible de ce projet est de monter en maturité les méthodologies de simulation pour prédire les performances d'injecteurs.

30 millions d'heures CPU.

D

ans les systèmes aéronautiques, la qualité de l'atomisation du carburant pilote au premier ordre l'homogénéité du mélange air-carburant et par conséquent les performances du moteur et les émissions polluantes. Face aux enjeux climatiques, la transition vers l'utilisation massive des carburants durables (SAF pour *Sustainable Aviation Fuels*) impose de développer des moyens numériques fiables pour la prédiction des performances des injecteurs carburant.

La compréhension et la modélisation de l'atomisation du cœur dense liquide sont complexes en raison du comportement fortement non linéaire de la dynamique des interfaces et de la

2 μm

Pour 1,5 milliards d'éléments :
c'est la résolution
de l'interface et le nombre
d'éléments atteints.



grande disparité des échelles de temps et d'espace impliquées. L'objectif de ce grand challenge a été de caractériser l'influence de la résolution du maillage sur la prédiction de l'atomisation primaire.

Pour ce grand challenge, la plateforme YALES2 a été utilisée. Il s'agit d'un code volume finis *Low-Mach* impliquant les méthodes de suivi d'interface **ACLS** (*Accurate Conservative Level-Set*) couplée à de l'adaptation de maillage dynamique (**ADM**). La prédiction de l'atomisation secondaire et de la distribution de la taille des gouttelettes à l'aide de cette seule approche entraîne des coûts de calcul prohibitifs en raison de la large gamme d'échelles spatiales.

UNE STRATÉGIE D'APPROCHE HYBRIDE

Une stratégie pour résoudre cette difficulté est l'utilisation d'une approche multi-échelle reposant sur le couplage de la méthode ACLS et d'une description

Lagrangienne des plus petites gouttelettes sphériques.

L'approche eulérienne est utilisée pour décrire les instabilités interfaciales à l'origine de la fragmentation de l'interface, puis dès que les structures liquides sont uniquement affectées par le transport par le gaz, elles sont converties vers un formalisme lagrangien qui est plus adapté et moins coûteux car il ne nécessite pas une résolution de maille fine.

Dans cette approche hybride, l'adaptation dynamique de maillage s'assure que les deux formalismes sont utilisés dans leur domaine de validité : avec un maillage fin pour l'approche eulérienne et avec une résolution suffisamment supérieure au diamètre des gouttelettes pour le formalisme Lagrangien. Cette approche hybride déjà mise en œuvre dans YALES2 a montré des capacités prometteuses pour prédire la performance des injecteurs à

ACLS

Méthode de description de la dynamique d'une interface liquide/gaz reposant sur le transport d'une fonction lisse et sa réinitialisation.

ADM

Méthode de raffinement et de déraffinement adaptatif permettant une résolution au juste besoin : fine dans la région proche interface et grossière ailleurs.

« Un des calculs les plus fins jamais réalisé de l'atomisation liquide sur un injecteur aéronautique. »

Ce type de simulation ouvre la porte à la génération de base de données numériques de référence permettant de valider des méthodologies plus basses fidélité ou impliquant des modèles d'atomisation.

SIMULATIONS LES

La simulation des grandes structures de la turbulence (SGS ou en anglais LES pour *Large Eddy Simulation*) est une méthode utilisée en modélisation de la turbulence. Elle consiste à filtrer les petites échelles qui sont modélisées et en calculant directement les grandes échelles de la cascade turbulente. La LES est particulièrement utile pour simuler des écoulements à nombre de Reynolds élevé caractérisés par de grands tourbillons turbulents. Parmi ces écoulements, on peut citer les écoulements de couche limite atmosphérique, les écoulements à jet et les écoulements de moteurs à combustion interne.

des coûts de calcul compatibles avec les besoins industriels.

Deux configurations représentatives de systèmes d'injection aéronautiques ont été étudiées. La première géométrie étudiée est un *Jet-In-Cross-Flow* diphasique semblable à un système d'injection de type "combustion pauvre".

Ce cas présente une difficulté particulière en raison de la vitesse relative élevée entre l'air et le liquide (ici jusqu'à 100 m/s), qui forme des couches limites minces. La seconde configuration est un injecteur de type "pressure swirl" très utilisé dans les chambres de combustion aéronautiques et formant une nappe liquide creuse au centre.

Les Figures 1 et 2 montrent des images instantanées pour les deux configurations d'injecteur. On peut notamment observer deux résolutions d'interface liquide air/carburant et l'impact de celles-ci sur la

topologie de l'interface résolue (en gris) ainsi que sur la génération des structures liquides lagrangiennes (en orange).

DES RÉSULTATS DE RÉOLUTION DE L'INTERFACE AIR/CARBURANT PARMIS LES PLUS IMPORTANTS

Les différentes résolutions étudiées ont impliqué des maillages entre une centaine de millions d'éléments jusqu'à 1,5 milliards d'éléments avec 30 000 à 60 000 particules lagrangiennes. La résolution de l'interface air/carburant à 2 μm (voir Figure 2) a été réalisée en mobilisant 15 000 à 20 000 cœurs durant plus de 15 jours.

À notre connaissance, ces simulations LES font parties, à ce jour, des résultats présentant une résolution de l'interface air/carburant parmi les plus importantes de la littérature sur des configurations d'injecteur à une échelle industrielle. Les simulations hautes-fidélités impliquant des résolutions d'interface importantes requièrent plusieurs dizaines de millions

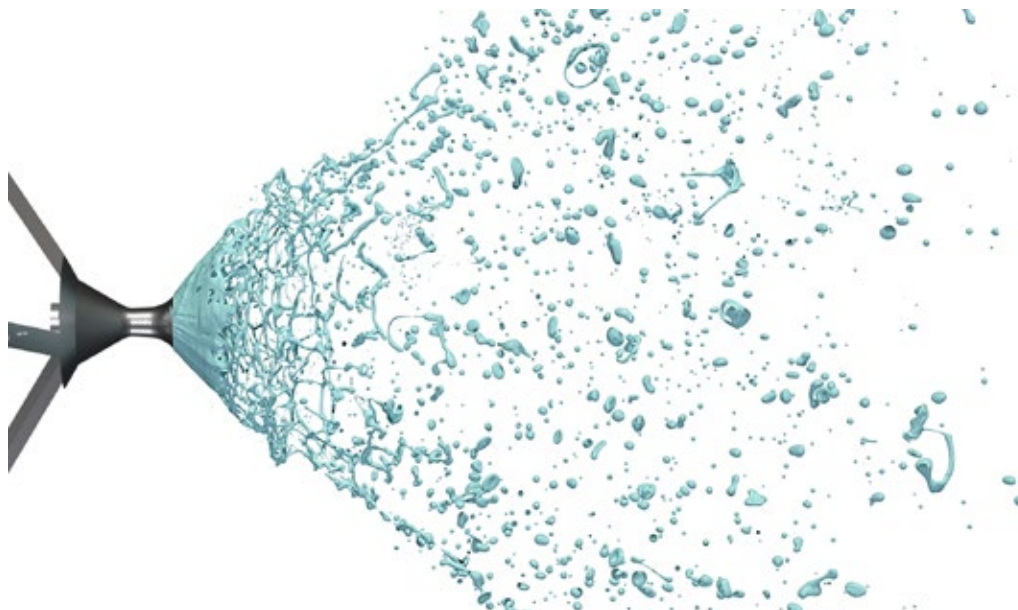


Figure 1 :
Vues instantanée
de l'interface air/carburant
(en gris) et des gouttes
générées (en orange) par
un Jet-In-Cross-Flow pour
deux résolutions de l'interface
(5 μm à gauche et 10 μm
à droite).

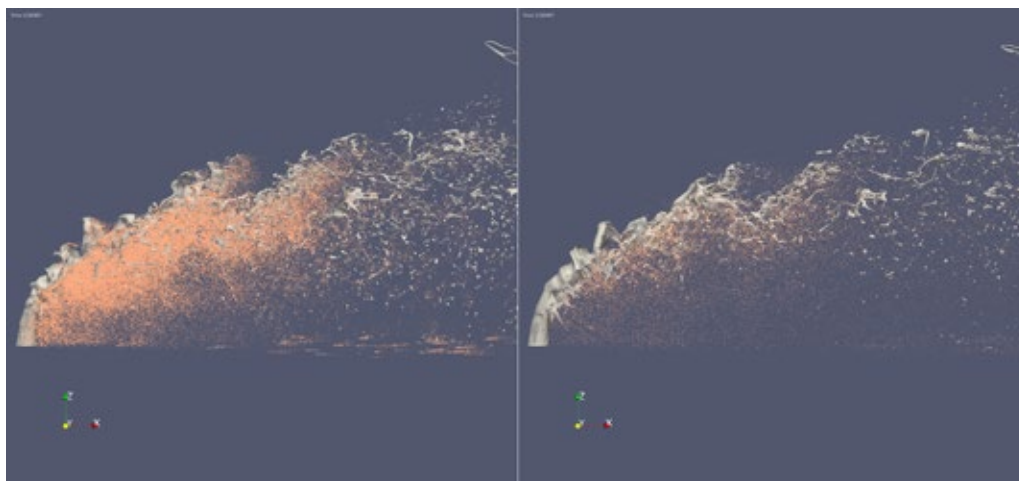


Figure 2 :
Vues instantanée
de l'interface air/carburant
et des structures liquides
générées par un injecteur
mécanique pour
une résolution de l'interface
à 2 μm .

d'heures calculs sur 10 à 20 000 cœurs, ce qui est en dehors des contraintes de coût imposé par la rapidité d'itération nécessaire en conception. Cependant, la capacité à réaliser ce type de simulation ouvre la porte à la génération de base de données numériques de référence permettant de valider des méthodologies plus basses

fidélité ou impliquant des modèles d'atomisation. En effet, la cible industrielle est de rendre le coût et le temps de restitution de ce type de simulation compatibles des besoins d'un cycle de conception, tout en offrant une précision plus grande. Des efforts de modélisation seront à mener pour tendre vers cet objectif. ■

CT2b ÉCOULEMENTS RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES

L'ÉQUIPE

Carlos PÉREZ ARROYO (CERFACS)

Jérôme DOMBARD (CERFACS)

Nabil BEN NASR (SAFRAN)

Jean-Louis CHAMPION (SAFRAN)

Quentin BOUYSSOU (SAFRAN)

Modélisation et conception de moteurs à turbine à gaz compacts pour l'avenir

LE CONTEXTE. Les objectifs de développement de la prochaine génération de moteurs d'avion sont principalement déterminés par la nécessité de réduire leur consommation de carburant et leur impact sur l'environnement grâce à des conceptions plus compactes et mieux intégrées. Pour ces moteurs, la maîtrise des interactions entre la chambre de combustion et la turbine sera donc d'une importance capitale.

25 millions d'heures.



es objectifs de développement de la prochaine génération de moteurs d'avion sont principalement déterminés par la nécessité de réduire leur consommation de carburant et leur impact sur l'environnement grâce à des conceptions plus compactes et mieux intégrées. Aujourd'hui, les moteurs d'avion sont encore conçus en suivant des voies distinctes pour chaque composant (compresseur, chambre de combustion, turbine et autres) par différents départements d'une même entreprise. Chaque composant est conçu et fabriqué individuellement, puis assemblé. Un problème pratique important qui pourrait être rencontré serait que le moteur présente des performances

+1 700 millions

De cellules tétraédriques ont été nécessaires pour modéliser une chambre de combustion et une turbine complètes dans une simulation haute fidélité.



globales inférieures à celles obtenues à partir des optimisations individuelles de chaque composant, ainsi que d'éventuelles instabilités dues aux effets d'intégration, nécessitant *in fine* une reconception coûteuse.

En outre, les temps de séjour dans la chambre de combustion sont raccourcis, ce qui réduit le mélange des gaz brûlés et des gaz frais. Il en résulte des niveaux plus élevés de turbulence et de distorsion de la température à la sortie de la chambre de combustion. La maîtrise des interactions entre modules, par exemple entre la chambre de combustion et la turbine, sera donc d'une importance cruciale.

LES ATOUTS DE LA FACILITÉ D'ACCÈS AU CALCUL HAUTE PERFORMANCE

Dans ce cas précis, le transport des points chauds à travers la turbine déterminera la durée de vie des composants tournants. En effet, le cycle de vie d'une turbine à gaz

diminue de manière exponentielle avec la température. Une meilleure estimation de la température des pales de la turbine permettra donc de réduire directement les coûts en prolongeant sa durée de vie et en réduisant les impacts sur l'environnement. Dans le processus de conception, la dynamique des fluides numérique **multiphysique** (CFD) a été progressivement adoptée, passant de simulations bidimensionnelles de profils de pales à une représentation tridimensionnelle plus précise d'un composant.

Les simulations avec la méthode RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) ont été le premier choix de l'industrie, en particulier pour la conception de composants individuels, mais aujourd'hui, en raison de l'augmentation et de la facilité d'accès au calcul haute performance (HPC), des méthodes plus fidèles telles que les **simulations RANS instationnaires (URANS)** et LES (Large-Eddy Simulations) sont peu à peu utilisées.

MULTIPHYSIQUE

La multiphysique implique l'analyse de plusieurs phénomènes physiques simultanés tels que le transfert de chaleur, l'écoulement des fluides ou l'acoustique.

« Cette base de données, générée avec le code haute Fidélité AVBP, sera utilisée pour mieux comprendre la physique du transport de points chauds. »

MÉTHODES RANS ET URANS

Les équations de Navier-Stokes moyennées par Reynolds (RANS) sont des équations de mouvement moyennées dans le temps pour l'écoulement des fluides. L'idée qui sous-tend ces équations est la décomposition de Reynolds, selon laquelle une quantité instantanée est décomposée en quantités fluctuantes et moyennées dans le temps, une idée proposée pour la première fois par Osborne Reynolds. *U(Unsteady)* RANS est une extension de l'approche RANS, permettant des modifications en fonction du temps dans le champ d'écoulement, ce qui le rend capable de saisir les phénomènes de flux transitoire.

Cependant, leur utilisation reste principalement limitée aux configurations académiques, et lorsqu'elles sont utilisées pour des moteurs industriels, c'est en majorité pour calculer des secteurs axi périodiques de composants individuels. Ces simulations ne prennent donc pas par nature les interactions instationnaires bidirectionnelles entre les composants et demandent d'utiliser des quantités moyennées dans le temps ou dans l'espace sur les conditions limites d'entrée et de sortie.

DES TENTATIVES ET DES TRAVAUX

Afin de surmonter certaines des simplifications des composants individuels, plusieurs tentatives ont été faites pour coupler deux composants du moteur. Dans certains travaux, des solveurs RANS ou LES ont été utilisés pour la chambre de combustion et des solveurs URANS pour la turbine (Jacobi et al., 2017). Néanmoins, ces approches conduisent encore à des hypothèses fortes sur les informations fournies d'un code à l'autre. L'utilisation d'un solveur LES unique pour résoudre le système complet constitue une solution avec un fort potentiel pour éviter ces approximations (Duchaine et al., 2017 ; Miki et al., 2020). De telles simulations LES multi-composantes ont déjà permis par exemple de représenter avec précision les points critiques instationnaires à

haute température issus de la chambre de combustion qui ont un impact sur les pales de la turbine, comme cela a été démontré dans le cadre du projet européen *FACTOR*. Néanmoins, les bancs du projet *FACTOR* n'étaient pas équipés de véritables chambres de combustion en amont, et le flux à la sortie des simulateurs de chambre était inférieur à 500 K, ce qui n'est pas représentatif des moteurs réels.

UNE SIMULATION GRÂCE À PRACE

En 2021, l'équipe du CERFACS a réalisé la première LES d'une configuration à 360 degrés du moteur DGEN380, comprenant l'entrée d'air, le ventilateur, les redresseurs, le by-pass, le compresseur radial et la chambre de combustion (Pérez Arroyo et al., 2022). Cette simulation de plus de 2 000 millions de cellules a été réalisée à l'aide de l'allocation *PRACE* nommée *FULLEST*, et visait à étudier les interactions des composants en amont de la chambre de combustion avec cette dernière. En 2022, cette étude a été complétée par l'ajout de la turbine, aboutissant à une LES complète du moteur où plusieurs briques technologiques ont été spécifiquement développées pour permettre l'extension de la procédure de calcul au moteur complet. Cependant, comme le moteur DGEN380 n'est pas instrumenté dans les sections chaudes, aucune comparaison entre les résultats expérimentaux et numériques n'a pu être effectuée sur ce sujet spécifique et



Figure 1 :
Simulation aux grandes
échelles du banc d'essai
BERCAT.

les résultats n'ont donc pas été exploités plus en détail.

PLUS DE 1 700 MILLIONS DE CELLULES TÉTRAÉDRIQUES !

Dans ce contexte, le Grand Challenge ADAstra a permis la réalisation du projet NOCTURNAL, qui fait partie de l'écosystème ATOM (pilote par SAFRAN Tech et cofinancé par la DGAC). Ce projet a généré le premier **jumeau numérique** de la chambre de combustion, ainsi que de la biturbine haute pression, comparable aux tests effectués sur le banc d'essai BEARCAT (Champion-Réaud, Jean-Louis, et al., 2020) en termes de température, de vitesse, ainsi que d'acoustique dans les parties chaudes et froides de la machine. Cette base de données, générée avec le code haute-fidélité AVBP, sera utilisée pour mieux

comprendre la physique du transport par point chaud. En effet, pour bien comprendre les effets technologiques sur ce type de configuration, la simulation a été réalisée dans son intégralité, couvrant les 360 degrés de la machine, avec tous les principaux accessoires optiques et asymétries du banc réel.

Cette dernière comprenait plus de 1 700 millions de cellules tétraédriques. La simulation a déjà montré son potentiel en permettant de comprendre l'impact des différentes asymétries géométriques présentes dans la chambre de combustion dont l'effet se propage en aval de l'étage de la turbine. D'autres travaux et analyses sont programmés sur cette base de données et permettront d'explorer l'injection de carburant, le transport des points chauds et l'acoustique de ces machines. ■

JUMEAU NUMÉRIQUE
Un jumeau numérique
est une représentation
virtuelle d'une entité ou
d'un processus réel.

CT2b ÉCOULEMENTS RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES

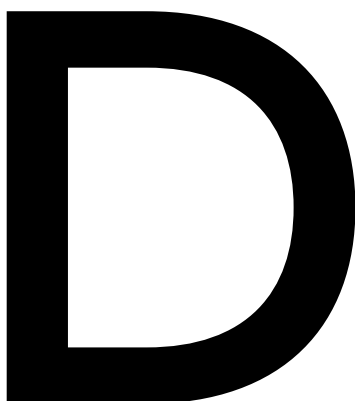
L'ÉQUIPE

Jacob MAAREK (Sorbonne Université)
Stéphane ZALESKI (Sorbonne Université)
Stéphane POPINET (CNRS)
Stefano DE ROSA (Eurocom)

Caractérisation du transfert de masse dans un modèle de poche métallurgique

LE CONTEXTE. Nous étudions les divers phénomènes physiques qui contrôlent le taux de transfert de masse dans un modèle de poche métallurgique modélisée par un système air-huile-eau. Une simulation numérique de l'écoulement triphasique est réalisée, avec un modèle sous-maille utilisé pour calculer le transport de masse, ce qui nous permet de surmonter les grandes différences d'échelle de longueur dans le système. Nous utilisons les mesures des profils d'écoulement locaux et des taux de transfert de masse pour développer un modèle phénoménologique qui explique les quantités globales mesurées.

31 666 384 heures (GENOA cores)



Dans le processus de fabrication de l'acier, la métallurgie en poche est utilisée pour ajuster la composition et promouvoir l'homogénéisation de l'acier liquide. Dans l'un de ces procédés, l'acier liquide est désulfuré par des réactions chimiques avec une couche de laitier située au-dessus du métal liquide. L'injection d'argon est utilisée pour contrôler le taux de transfert de masse du système, la cinétique globale du système étant limitée par le transport convectif et diffusif des espèces.

Le gaz crée un panache de bulles qui s'élève à la surface du liquide et le liquide est dévié radialement vers l'extérieur dans

+20 000

C'est le Flux de masse sans dimension (nombre de Sherwood) record atteint dans la simulation.

un jet de surface. À un débit critique, un « œil ouvert », où la couche d'acier n'est pas recouverte par la couche de laitier, se forme. Le processus décrit est assez complexe et fait intervenir de nombreux phénomènes physiques tels que la gravité, la tension superficielle et le transport d'espèces. Expérimentalement, le processus industriel est coûteux et difficile à étudier en raison de la température élevée et de la nature opaque de l'acier liquide.

SIMULATIONS NUMÉRIQUES TRIDIMENSIONNELLES

Les expérimentateurs ont recours à des expériences à échelle réduite avec différents fluides pour reproduire la dynamique présente dans le système, mais l'efficacité de cette approche est limitée en raison de l'impossibilité d'obtenir une similitude pour de nombreux paramètres non dimensionnels.

Les simulations offrent une approche alternative où on peut considérer

directement le processus industriel et générer des données plus riches que celles qui peuvent être mesurées expérimentalement, ce qui permet de construire un modèle éclairé qui explique les quantités globales mesurées. Les simulations s'accompagnent de défis supplémentaires tels que la nécessité de **modéliser la large gamme d'échelles** de longueur présentes. L'utilisation de techniques numériques sophistiquées telles que l'adaptation du maillage (AMR) et de modèles sous-maille (MSM) intégrés dans un code massivement parallèle, combinée aux ressources de calcul fournies par GENCI, rend possible la résolution de ce problème exigeant en puissance numérique.

Nous avons effectué des simulations numériques tridimensionnelles d'un modèle réduit de poche de coulée métallurgique dans un système air-huile-eau pour différentes géométries et différents débits et nous avons comparé les résultats

MODÉLISATION À MULTI-ÉCHELLES

Utilisation de techniques pour résoudre des problèmes nécessitant le traitement simultané de différents phénomènes à des échelles de longueur fortement variables.

« Nous avons généré plus quatre téraoctets (To) de données provenant des simulations à partir d'instantanés sauvegardés. »

Les simulations réalisées ont considérablement amélioré la compréhension de l'écoulement dans les poches métallurgiques.

MODÈLE DE COUCHE LIMITE
Modèle mathématique simplifié utilisé pour décrire le comportement d'un phénomène physique près d'une interface. Nous utilisons un modèle de couche limite pour modéliser le transport d'un scalaire passif à une interface fluide-fluide.

numériques directement avec des données expérimentales analogues réalisées par notre groupe et trouvées dans la littérature.

L'hydrodynamique est traitée par simulation numérique directe (DNS), où toutes les échelles sont résolues numériquement. L'équation de transport scalaire est résolue avec un modèle MSM qui gère les fines couches limites de concentration présentes à l'interface liquide-liquide.

Nous enregistrons des instantanés des simulations à intervalles réguliers qui stockent des informations telles que la position de l'interface, le champ de vitesse et la distribution des espèces. Nous comparons les mesures directes de la taille de l'œil ouvert et du taux de transfert de masse global, en observant un bon accord avec les résultats expérimentaux. Nous extrayons des informations locales telles que la vitesse de montée dans le panache de bulles, la vitesse du jet radial près de la surface libre, le profil de la couche limite de quantité de mouvement à l'interface huile-eau à proximité de l'œil ouvert, et la distribution locale du nombre de Sherwood.

CONSTRUCTION DE DIFFÉRENTS MODÈLES

À partir de ces données, nous démontrons que la majeure partie du transfert de masse se produit dans un anneau entourant l'œil ouvert en raison de la présence d'une couche limite de cisaillement causée par la déviation de l'eau par la couche d'huile. À partir des données recueillies, nous pouvons construire un modèle précis pour l'écoulement global, ce qui permet de prédire la taille de l'œil ouvert.

Dans ce modèle, nous prenons en compte le panache de bulles, le jet de surface libre et la théorie de la couche mince qui conduit à un équilibre de la gravité et de l'inertie sur la couche d'huile. Chaque composante individuelle du modèle est en accord avec les échelles connues, et nous ajustons les coefficients directement à partir des données qui sont en accord avec celles trouvées dans la littérature.

Nous construisons ensuite un modèle pour le nombre de Sherwood local près de l'œil ouvert en tenant compte des couches limites de quantité de



Figure 1 :
Interfaces air-huile dans
une poche conique à un débit
de 5 litres par minute.
On observe la fragmentation
de la couche d'huile qui
augmente considérablement
le taux de transfert de masse.

mouvement en interaction et de la théorie de la couche limite pour le transport des espèces près d'une interface cisaillée. Enfin, nous construisons un modèle analytique pour le taux de transfert de masse global observé en fonction du nombre de Sherwood local et de la zone d'échange effective dans l'anneau adjacent à l'œil ouvert.

GÉNÉRALISATION DU MODÈLE PHÉNOMÉNOLOGIQUE DÉVELOPPÉ EN PERSPECTIVE

Dans l'ensemble, nous avons réalisé neuf configurations distinctes, réparties entre une poche de coulée cubique et une poche de coulée tronconique. Nous avons généré plus de quatre téraoctets (To) de données provenant des simulations à partir d'instantanés sauvegardés.

L'étude a été réalisée avec des tâches allant de 1024 à 8 192 processeurs en fonction du nombre de cellules de la simulation donnée et a utilisé vingt millions d'heures de CPU.

Les simulations réalisées ont considérablement amélioré la compréhension de l'écoulement dans les poches métallurgiques et démontrent la faisabilité de l'utilisation de techniques basées sur les premiers principes pour modéliser des processus industriels à plusieurs échelles. À l'avenir, nous tenterons de généraliser le modèle phénoménologique développé afin de décrire les données observées dans la littérature et d'étudier le régime de débit de gaz plus élevé où l'on observe une fragmentation persistante de la couche d'huile. ■

OEIL-OUVERT

Phénomène de métallurgie en poche se produisant à des débits moyens ou élevés, où une partie du métal liquide n'est pas recouverte par le laitier.

CT2b ÉCOULEMENTS RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES

L'ÉQUIPE

Thomas GUIGNON (IFP Énergies Nouvelles)
Aboul-Karim Mohamed EL MAAROUF (IFP Énergies Nouvelles)
Raphaël GAYNO (IFP Énergies Nouvelles)
Jean-Marc GRATIEN (IFP Énergies Nouvelles)

Guillaume ENCHERY (IFP Énergies Nouvelles)
Ani ANCIAUX-SEDRKIAN (IFP Énergies Nouvelles)
Stéphane DE CHAISEMARTIN (IFP Énergies Nouvelles)

Simulation de stockage de CO₂ dans des structures géologiques

LE CONTEXTE. Le stockage de CO₂ dans des structures géologiques est un enjeu du défi climatique à venir. Cette technologie consiste à injecter dans des couches profondes du sous-sol le CO₂ émis par de grands sites industriels. L'objectif de ce type de simulation est de caractériser le comportement du stockage à long terme. Pour être pertinentes ces simulations doivent être réalisées à l'échelle du bassin sédimentaire soit plusieurs milliers de km².

2 875 673 heures.

L'

objectif du projet *TRANSITION* (Simulations haute-fidélités pour la transition énergétique) est d'évaluer la plateforme logicielle Open Source *Arcane/Alien* avec le démonstrateur *ShArc* sur des simulations avec plus de 100 millions de cellules [1]. Ce démonstrateur est extrait du simulateur IFPEN pour le stockage de CO₂ : *Geoxim* [2]. Cette taille de maillage peut en effet être facilement atteinte pour une simulation à l'échelle du bassin et nous ne l'avions, jusqu'à maintenant, encore jamais expérimentée. Cette évaluation avait pour but d'identifier les difficultés liées à la très grande taille de ces simulations et de déterminer l'efficacité parallèle [3] de la plateforme pour des simulations en géosciences.

700 millions

De cellules, soit 2,1 milliards d'équations, simulées avec 32 768 cœurs sur la machine Joliot Curie (partition AMD Rome).



La plateforme logicielle *Arcane/Alien* est codéveloppée par le CEA DAM et IFPEN. Arcane a pour but de fournir des services pour la simulation numérique parallèle à grande échelle comme la gestion du maillage avec les variables physiques, le partitionnement, les entrées/sorties, la définition des jeux de données et la boucle de simulation en temps.

Arcane est complétée par Alien qui permet d'unifier l'interface de programmation de différents solveurs linéaires nécessaires pour les simulateurs développés à partir de cette plateforme. En plus de ce socle commun, IFPEN a développé la plateforme ArcGeoSim qui rassemble tous les services utiles pour des simulations en géosciences, comme dans le simulateur Geoxim ou dans le démonstrateur ShArc.

2,1 MILLIARDS D'ÉQUATIONS RÉALISÉES !

Les simulations réalisées dans le cadre de ce Grand Challenge, sur la partition ROME de la machine Joliot Curie du TGCC, sont des cas tests synthétiques d'injection de gaz dans un milieu poreux contenant de l'eau avec des couches géologiques de 80 x 80 km jusqu'à 160 x 160 km et des tailles de maillage variant de ~4 millions à ~400 millions de cellules dans un premier temps.

Ces simulations ont montré une très bonne efficacité parallèle de la boucle en temps (le cœur de la simulation), en particulier la simulation à ~400 millions de cellules a révélé une efficacité relative des calculs supérieure à 90 % jusqu'à 16 384 cœurs.

CELLULES

Pour simuler un phénomène avec un supercalculateur, le domaine physique doit être subdivisé en petits « cubes » appelés cellules. Plus le nombre de cellules est élevé plus la simulation sera proche de la solution du problème non discrétisé.

GEOXIM

Logiciel d'IFPEN pour simuler une injection de CO₂ dans un site de stockage (écoulement multiphasique réactif avec couplage mécanique).

« L'expérience acquise ainsi que les résultats obtenus nous permettront de mettre en place des simulations haute-fidélité avec les autres simulateurs géosciences. »

Grâce à l'utilisation d'une plateforme commune, il a été possible d'exécuter ShArc sur des maillages contenant 700 millions de cellules sans grande difficulté.

EFFICACITÉ PARALLÈLE

L'efficacité parallèle d'un logiciel de simulation est une mesure de sa capacité à utiliser les cœurs d'un supercalculateur de manière optimale.

Ces premières expériences ont aussi mis en évidence des points bloquants (corrigés depuis) dans la séquence d'initialisation du démonstrateur *ShArc* que nous n'aurions pas pu identifier avec des simulations à plus petite échelle. Grâce à ces résultats nous avons par la suite effectué des simulations à la limite de la capacité de la plateforme : 700 millions de cellules soit 2,1 milliards d'équations avec 32 768 cœurs. Le nombre d'équations dans ce cas correspond à la capacité maximale d'Alien et du solveur linéaire sous-jacent (indexation des équations avec des entiers 32 bits).

Grâce à l'utilisation d'une plateforme commune qui avait déjà été utilisée en parallèle avec d'autres simulateurs IFPEN sur des échelles d'espace moins importantes, il a été possible d'exécuter *ShArc* sur des maillages contenant

700 millions de cellules sans grande difficulté. A titre d'illustration, un simple changement du jeu de données a permis de passer d'un cas test de quelques cellules avec un solveur linéaire direct (issu de la bibliothèque *Petsc*) à un cas

POUR ALLER PLUS LOIN

LIENS POUR TÉLÉCHARGEMENT :



**LA PLATEFORME
ARCANE/ALIEN :**
[https://github.com/
arcaneframework/
framework](https://github.com/arcaneframework/framework)



**LE DÉMONSTRATEUR
SHARC :**
[https://github.com/
arcaneframework/sharc](https://github.com/arcaneframework/sharc)

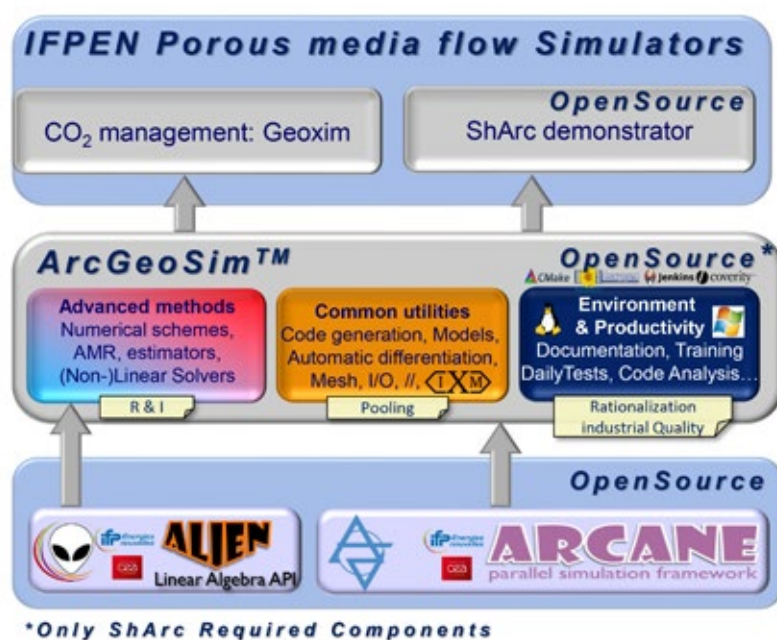


Figure 1 :
organisation de l'écosystème
logiciel IFPEN autour de la
plateforme Arcane/Alien.

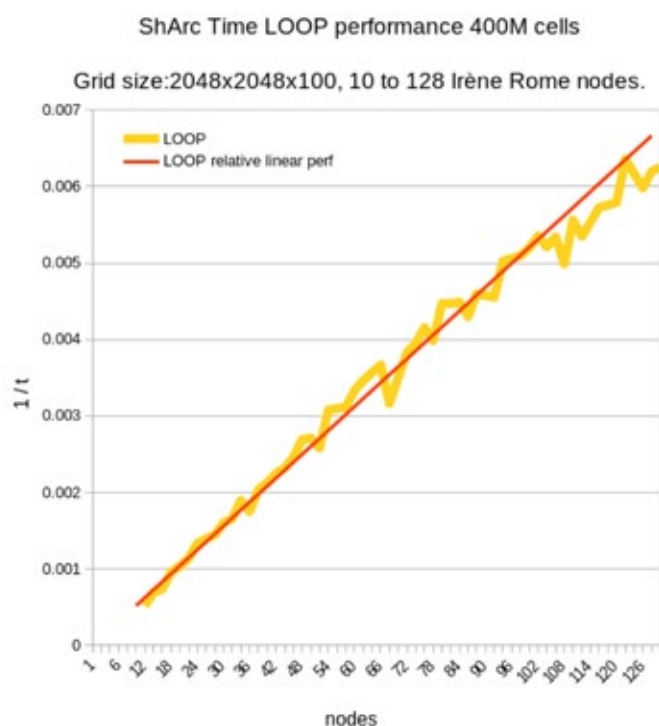


Figure 2 :
performance relative de ShArc
comparée à la performance
idéale en rouge
(accélération proportionnelle
au nombre de nœuds).

test de plusieurs centaines de millions de cellules avec un solveur linéaire itératif parallèle (issu de la bibliothèque MCGSolver). Finalement, l'expérience acquise ainsi que les résultats obtenus nous permettront de mettre en place

des simulations haute-fidélité avec les autres simulateurs géosciences à base d'Arcane/Alien développés à IFPEN, comme le simulateur CO₂ Geoxim, où l'apport des simulations haute résolution n'est plus à démontrer. ■

CT4 GÉOPHYSIQUE ET ASTROPHYSIQUE

L'ÉQUIPE

Patrick AMESTOY (MUMPS Technologies)
Stephen BELLER (Geoazur/CNRS)
Alfredo BUTTARI (IRIT, CNRS)
Laure COMBE (Geoazur/CNRS)
Florian FAUCHER (MAKUTU, INRIA)

Jean-Yves L'EXCELLENT (MUMPS Technologies)
Théo MARY (LIP6/CNRS)
Stéphane OPERTO (GeoAzur/CNRS)
Chiara PUGLISI (MUMPS Technologies)

Imagerie géophysique haute résolution avec le solveur MUMPS

LE CONTEXTE. Nous présentons un cas d'étude d'imagerie sismique par FWI en domaine fréquentiel sur des données industrielles acquises sur le champ gazier de Gorgon, Australie. L'inversion poussée jusqu'à une fréquence de 25 Hz a permis d'atteindre un niveau de résolution élevé. Nous simulons les ondes en domaine fréquentiel avec le solveur direct MUMPS qui a permis de résoudre des systèmes linéaires de plus de 500 millions d'inconnues, un défi numérique jamais encore relevé avec des méthodes directes.

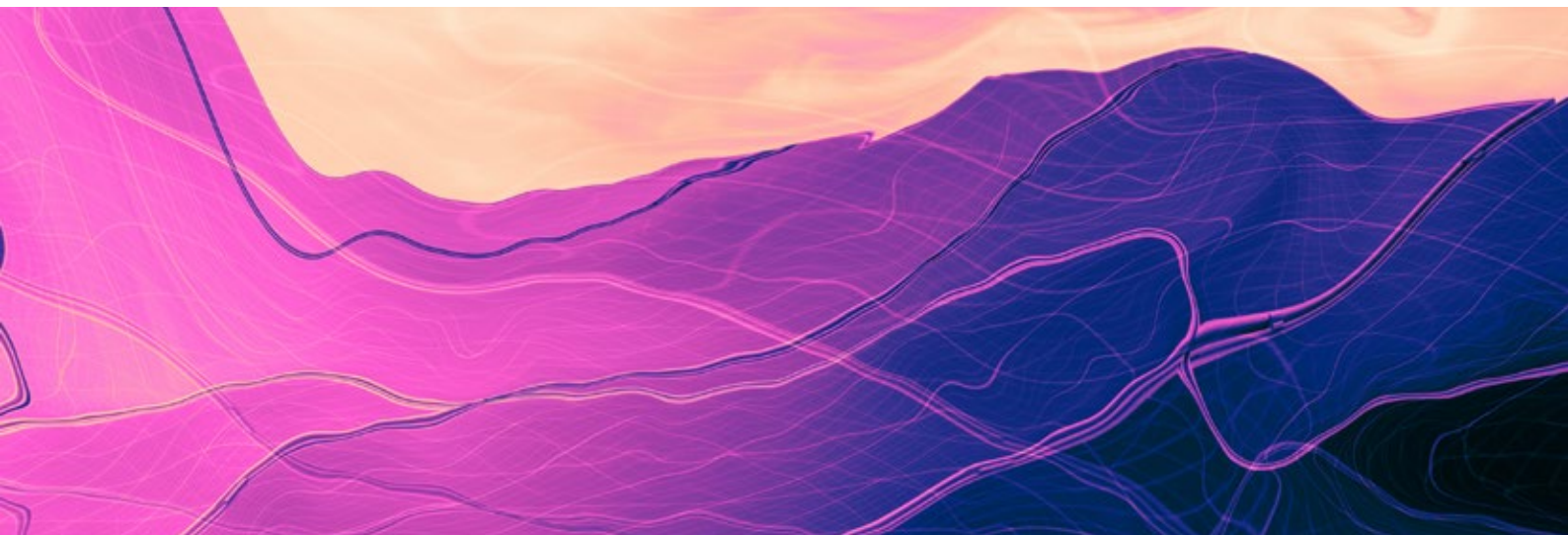
51 491 501 heures.

L'

imagerie d'un milieu par les ondes a de multiples applications académiques et industrielles (imagerie médicale, contrôle non destructif de pièces mécaniques, génie civil, imagerie et surveillance de réservoirs, sismologie, héliosismologie...). L'exploration sismique de réservoirs à partir de dispositifs denses de sources artificielles et de capteurs est parmi celles engendrant les plus gros calculs numériques en raison des volumes considérables de données enregistrées (pour ce projet, 40 To) et de la taille des grilles numériques discrétisant le milieu en fonction des fréquences émises. Dans ce contexte, la méthode d'imagerie par inversion des formes

531 millions

C'est le nombre maximum d'inconnues du système linéaire qui a pu être résolu avec MUMPS.



d'ondes complètes (FWI) reconstruit le milieu avec une résolution théorique de la demi longueur d'onde.

FULL WAVEFORM INVERSION (FWI)

La FWI minimise une distance entre les mesures sismiques et les données simulées numériquement pour mettre à jour les propriétés du milieu contenues dans les coefficients hétérogènes de l'équation d'onde.

Ce problème inverse non linéaire est résolu avec des approches d'optimisation locale (méthode de gradient) en raison de la taille de l'espace des données et des paramètres. Les données simulées sont obtenues en échantillonnant les champs d'ondes, solutions de l'équation d'onde, aux positions des capteurs pour chaque source sismique. Le calcul de ces solutions (le problème direct) est la partie la plus coûteuse de l'algorithme de FWI.

Dans ce projet, on simule les ondes dans le domaine fréquentiel après transformée

de Fourier par rapport au temps. Le problème direct consiste alors à résoudre un système linéaire creux par fréquence dont les solutions sont les champs d'ondes monochromatiques et les seconds membres sont les sources sismiques. Cette approche fréquentielle, généralement considérée irréaliste en 3D, est pourtant justifiée par des volumes compacts de données (un nombre limité de fréquences est utilisé par un processus hiérarchique multi-résolution) permettant d'effectuer les calculs en mémoire sans points de reprise ou accès disques, les seconds membres sont traités efficacement en parallèle par blocs et l'atténuation sismique est modélisée sans surcoût calculatoire.

LE SOLVEUR DIRECT MULTIFRONTAL MUMPS

Nous résolvons les systèmes linéaires du problème direct avec une méthode directe pour traiter efficacement un grand nombre de seconds membres et pour sa simplicité

**FULL WAVEFORM
INVERSION (FWI)**
Méthode d'imagerie
minimisant les écarts
entre des mesures et des
simulations d'ondes pour
caractériser les propriétés
d'un milieu.

« *Ce Grand Challenge a permis d'effectuer la première application industrielle de FWI en domaine fréquentiel à des données marines de nœuds avec le solveur direct MUMPS.* »

SOLVEUR MUMPS

Logiciel pour la résolution de systèmes d'équations linéaires creux avec une méthode directe fondée sur l'approche multifrontale.

STATIONS SISMIQUES SOUS-MARINES / OCEAN-BOTTOM NODE (OBN)

Capteurs sismiques autonomes de fond de mer utilisés pour des acquisitions sismiques marines à dispositifs de réception stationnaires.

d'utilisation (la solution est obtenue en un nombre limité d'opérations). Une approche directe se compose, après une analyse symbolique de la matrice, de la phase de factorisation de Gauss (décomposition LU de la matrice) suivie du calcul des solutions par résolution des systèmes triangulaires. Nous discrétisons l'équation d'onde avec un schéma aux différences finies compact minimisant le nombre de coefficients non nuls par ligne tout en garantissant une précision suffisante des solutions.

Nous utilisons le solveur multifrontal MUMPS pour lequel la matrice creuse est distribuée sur les processeurs suivant le graphe de calcul élaboré lors de la phase d'analyse sous la forme de matrices denses appelées matrices frontales.

MUMPS incorpore trois fonctions clef ayant permis les simulations de grande dimension présentées dans ce projet :

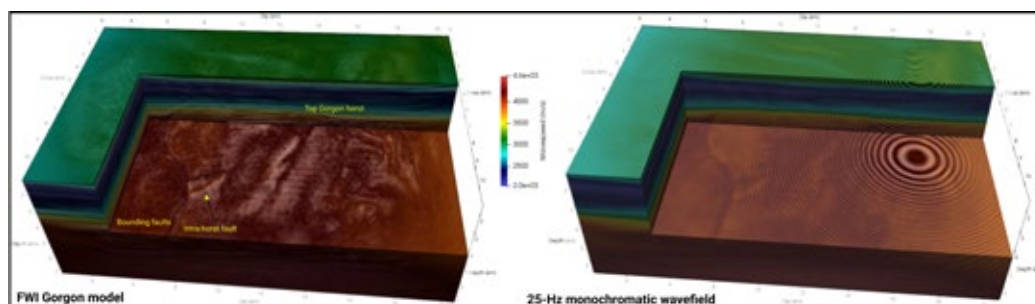
1. Une compression des facteurs LU exploitant les propriétés de rang faible des blocs hors diagonaux des matrices frontales couplée à une représentation de ces blocs en précision arithmétique variable. Cette compression induit une diminution du coût mémoire mais aussi de la complexité arithmétique des phases de factorisation et de calcul des solutions.
2. Un traitement en parallèle optimisé des seconds membres exploitant leur caractère creux (les sources sismiques sont ponctuelles).
3. Un parallélisme hybride combinant MPI et multithreading. Dans ce projet, nous allouons deux processus MPI par nœud de calcul et autant de threads réparties sur les deux processus MPI que de cœurs

disponibles sur un nœud de calcul pour minimiser les volumes de communication et les surcoûts mémoire. Les calculs ont été faits en arithmétique simple précision complexe.

UN NOMBRE D'INCONNUES ENTRE 17 MILLIONS ET 408 MILLIONS

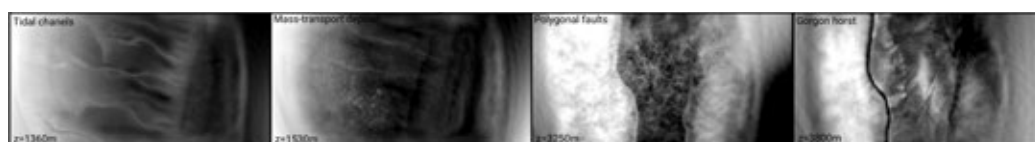
Nous appliquons la FWI à des données sismiques industrielles pour imager le champ gazier de Gorgon sur le plateau continental Australien. Le dispositif d'acquisition est formé de 650 stations sismiques sous-marines et de 400 000 sources. La cible est le horst de Gorgon hébergeant le réservoir entre 3,6 km et 4,3 km de profondeur.

Ce horst est partitionné en blocs par des failles en- échelon constituant des fermetures latérales aux grès chargés en gaz de la formation Mungaroo. La superficie de la zone d'étude est de 705 km² jusqu'à la fréquence de 11.5 Hz et de 260 km² jusqu'à la fréquence de 25 Hz pour une profondeur maximale de 8 km. L'imagerie multi-résolution se compose d'une série d'inversions parcourant hiérarchiquement des groupes de fréquences entre 1,7 Hz et 25 Hz. Le nombre d'inconnues dans les grilles discrétisant le milieu (la dimension des systèmes à résoudre) varie de 17 millions à 408 millions avec un pas de grille adapté aux fréquences utilisées par l'inversion. Un total de 725 itérations ont été effectuées pour produire le modèle final du sous-sol en utilisant entre 16 et 292 nœuds de calcul. Des structures de petite échelle ont été imagées avec une résolution spectaculaire (figure) : dans la partie superficielle, un



À gauche :
vue en perspective du modèle final du champ gazier de Gorgon obtenu par FWI. La figure représente la vitesse de propagation verticale des ondes de compression sur laquelle est superposée en transparence la magnitude du gradient de vitesse pour faire ressortir les structures de petite échelle reconstruites par FWI comme des failles. Une des failles bordières du horst, une faille intra-horst et le toit du horst dans le plan vertical sont indiqués.

À droite :
modèle de vitesse sur lequel est superposé en transparence la partie réelle du champ d'onde monochromatique à 25 Hz.



En bas :
coupes horizontales du modèle de vitesse montrant de la gauche vers la droite des chenaux tidaux, des dépôts de masses transportées et un paléo trait de côte, des failles polygonales et le réservoir faillé.

paléo champ de pockmarks, la cicatrice d'un paléo glissement de terrain, des chenaux tidaux, des dépôts de masses transportées, une paléo ligne côtière et des structures plissées ; au niveau du réservoir, un réseau de failles polygonales le long desquelles les fluides migrent du réservoir vers la surface et les failles en-échelon partitionnant le horst.

PREMIÈRE APPLICATION INDUSTRIELLE !

Ce Grand Challenge illustre avec un cas d'étude industriel d'imagerie sismique le potentiel de la FWI en domaine fréquentiel lorsque des solveurs d'algèbre linéaire massivement parallèles de dernière génération comme le solveur direct MUMPS utilisent de manière optimisée les ressources de calcul via la compression des facteurs LU et la gestion parallèle des seconds membres.

Pour traiter ce cas industriel conduisant à une taille de matrice jamais traitée par le solveur MUMPS, une attention particulière a dû être portée aux algorithmes pour réduire l'empreinte mémoire du solveur et des communications. Ces travaux ont été possibles grâce à une collaboration étroite entre les équipes de développement à qui, par ailleurs, un effort particulier a été demandé pour identifier, caractériser et essayer de contourner des difficultés identifiées dans les bibliothèques MPI, BLAS et Scalapack utilisées.

Ce Grand Challenge a permis aux équipes du projet WIND et de MUMPS Technologies d'effectuer la première application industrielle de FWI en domaine fréquentiel à des données marines de nœuds avec le solveur direct MUMPS. ■

CT4 GÉOPHYSIQUE ET ASTROPHYSIQUE

L'ÉQUIPE

Ludovic METIVIER (CNRS, ISTerre, LJK)
Romain BROSSIER (UGA, ISTerre)
Andrzej GÓRSZCZYK (Polish Academy of Sciences)

Giuseppe PROVENZANO (UGA, ISTerre)
Serge SAMBOLIAN (Univ. Strasbourg, ITES)
Alizia TARAYOUN (UGA, ISTerre)

Vers une nouvelle ère pour l'imagerie de la croûte terrestre

LE CONTEXTE. Dans ce travail, nous mettons en œuvre sur la partition scalaire d'ADASTRA un algorithme d'imagerie sismique haute résolution permettant une caractérisation multi-paramètre de résolution décimétrique des premiers kilomètres de la croûte en Mer du Nord, en exploitant toute la richesse de l'information sismique enregistrée par un réseau dense de 2000 capteurs localisés sur le fond de mer.

28 millions d'heures.



La caractérisation à une résolution décimétrique des premiers kilomètres de la croûte terrestre est un enjeu scientifique, économique et social majeur dans la perspective de la transition énergétique et de la décarbonation de nos industries. Les batteries nécessaires à la massification de la production d'électricité « verte » reposent sur l'exploitation des « terres rares ». L'énergie nucléaire repose sur l'extraction d'uranium. Les infrastructures nécessaires au développement de ces sources d'énergies non carbonées reposent elles-mêmes sur l'accès à des volumes considérables de béton dont les composés doivent être extraits de la croûte.

49 152

Cœurs de calcul
utilisés simultanément.



La croûte terrestre offre aussi des sources d'énergie alternatives : la géothermie permet d'alimenter des chauffages urbains et pourrait être utilisée comme moyen de production d'électricité. Le GIEC, dans son dernier rapport, insiste sur la nécessité de mettre en œuvre à grande échelle des solutions de stockage de CO₂ par exemple dans des réservoirs de pétrole épuisés, ou des aquifères salins.

Pour pouvoir détecter les mouvements de fluides dans de tels réservoirs, surveiller les zones d'accumulation, discriminer entre les fluides, une caractérisation fine multi-paramètre 3D de la rhéologie du sous-sol est nécessaire.

MÉTHODE D'IMAGERIE « QUANTITATIVE »

L'imagerie du sous-sol repose sur l'interprétation d'ondes sismiques

enregistrées par un réseau de capteurs et générées par des sources contrôlées (camions vibrants sur terre, canons à air en mer).

Les méthodes classiques d'imagerie reconstruisent en premier lieu un modèle de vitesse basse résolution à partir de l'interprétation des temps d'arrivées des ondes sismiques, puis une image haute résolution de réflectivité en « migrant » les ondes réfléchies à la profondeur des réflecteurs qui les ont générées. Cette image est ensuite interprétée par des géologues pour déterminer des scénarios plausibles de rhéologie.

La méthode que nous avons mise en œuvre dans ce Grand Challenge est une méthode d'imagerie dite « quantitative » qui interprète la donnée sismique entière, sans séparer les phases et leurs amplitudes, et qui permet de reconstruire

ONDES SISMIQUES

Vibration du sous-sol suite à une excitation par une source naturelle (tremblement de terre) ou contrôlée (origine humaine)

« Les moyens de calcul modernes vont permettre l'ouverture d'une nouvelle ère pour la caractérisation du sous-sol. »

RÉSOLUTION

Plus petite variation spatiale des propriétés mécaniques du sous-sol détectable par la méthode d'imagerie déployée.

RÉSOLUTION

Plus petite variation spatiale des propriétés mécaniques du sous-sol détectable par la méthode d'imagerie déployée.

des cartes 3D des paramètres mécaniques du sous-sol, dans notre cas la vitesse des ondes de pression, la masse volumique, et un paramètre mesurant l'atténuation intrinsèque.

Cette méthode est connue du monde académique depuis les années 1980, et a été mise en œuvre sur des données industrielles à partir des années 2010. Cependant, elle est généralement utilisée dans des bandes de fréquence relativement basses, pour améliorer la **résolution** du modèle de vitesse qui sert ensuite à la migration des ondes réfléchies. Ce faisant on ne tire pas entièrement bénéfice de cette méthode d'imagerie. La résolution finale des modèles est liée à la fréquence maximale : plus grande est la fréquence, plus fine est la résolution.

D'autre part, les reconstructions multi-paramètres dans des bandes de fréquence limitées sont sensibles au problème de couplage : il est plus difficile de dissocier l'effet de deux paramètres sur des données basse fréquence.

La raison principale de cette utilisation limitée est le coût de calcul. Cette méthode d'imagerie, appelée « inversion des formes d'onde », repose sur la modélisation 3D de la propagation des ondes dans le sous-sol, pour chacune des sources sismiques considérées (plusieurs milliers dans les cas d'application industrielles). La complexité algorithmique

de ces modélisations 3D dépend de la puissance 4 de la fréquence maximale du signal inversé. Autrement dit : multiplier par 2 la fréquence maximale demande un effort de calcul 16 fois supérieur !

UNE BANDE DE FRÉQUENCE JUSQU'À 22,5 HZ !

Grâce à l'accès à la machine ADAstra, nous avons mis en œuvre une inversion de formes d'ondes sur des données acquises en Mer du Nord, correspondant à plus de 2 000 sources sismiques et 50 000 capteurs, dans une bande de fréquence allant jusqu'à 22,5 Hz, quand les études précédentes étaient limitées à 10 Hz.

En ouvrant la bande de fréquence, nous avons non seulement accès à une résolution décimétrique, mais nous pouvons aussi mieux découpler les effets liés à la vitesse de propagation et ceux liés à la masse volumique du sous-sol. Cette mise en œuvre repose sur une implémentation optimisée, permettant l'exploitation des ressources de calcul sur trois niveaux de parallélisme.

Deux niveaux de parallélisation imbriqués sur les sources sismiques et une décomposition en domaine via des communications MPI (inter-nœuds de calcul). Un troisième niveau de parallélisation au sein de chaque domaine via des directives OpenMP (intra-nœud de calcul). Cette implémentation est le résultat d'une décennie de développements, mettant en jeu une

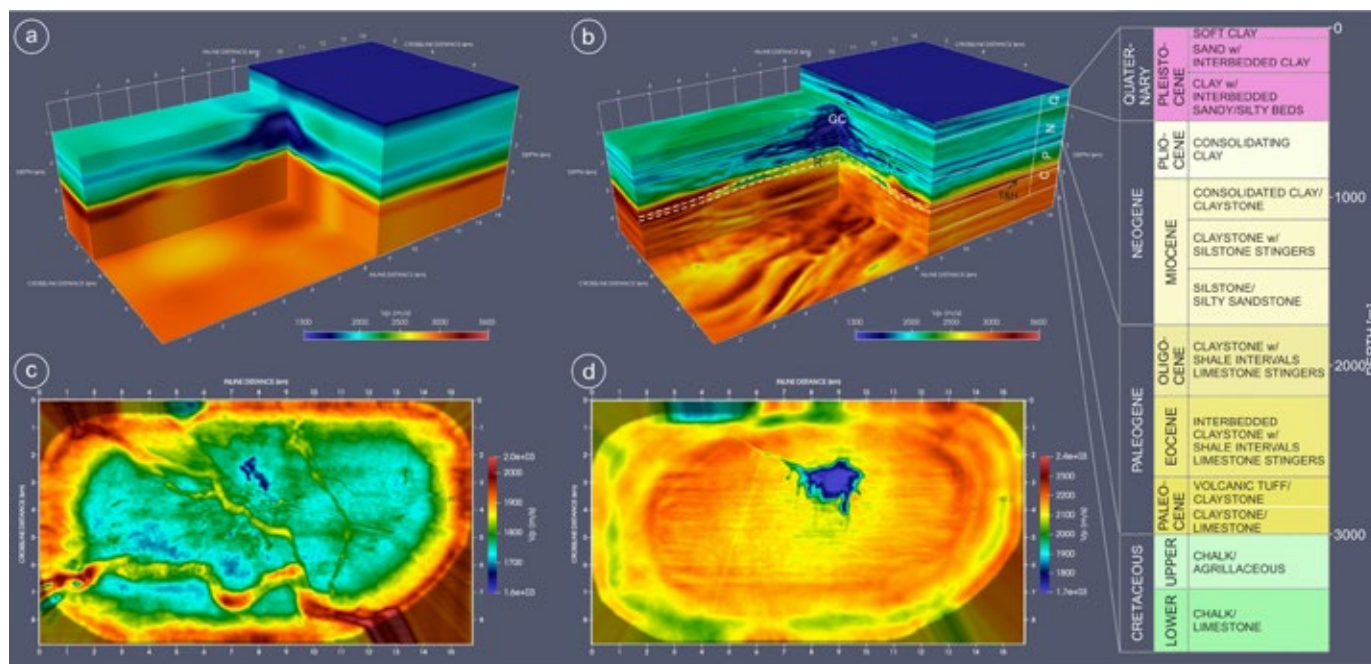


Figure 1 : Cartes 3D des ondes de vitesse de compression.

(a) Carte initiale issue d'une tomographie des temps d'arrivée.

(b) Carte finale issue de notre méthode d'inversion des formes d'ondes dans une bande de fréquence jusqu'à 22,5 Hz.

(c-d) Coupes horizontale de cette carte finale à $z=200$ m (c) et $z=1000$ m (d) de profondeur. L'anomalie en bleu foncé au centre de la carte (a,b) correspond à une zone basse vitesse chargée en gaz. Le gain en résolution est notable : les détails sont beaucoup plus fins dans le modèle issu d'inversion des formes d'ondes (b) que dans le modèle initial de tomographie (a). L'alternance des couches sédimentaires est conforme avec les études stratigraphiques locales (b, tableau à droite). Sur les coupes horizontales (c-d), on voit apparaître un réseau de paléo-chenaux à $z=200$ m (c) et les contours clairs du nuage de gaz à $z=1000$ m (d) avec un système de failles dans lequel le gaz circule.

discretisation des équations des ondes visco-acoustiques 3D par différences finies, des méthodes d'optimisation numériques locales de type quasi-Newton, et des algorithmes de calcul du gradient par la méthode de l'état adjoint.

PRÈS DE 28 MILLIONS D'HEURES SCALAIRES

Au cours de l'été 2023, nous avons exploité jusqu'à 49 152 cœurs de calcul simultanément pour générer des cartes 3D de vitesse d'ondes de compression, de masse volumique, et d'un paramètre relié à l'atténuation, chacune contenant jusqu'à 110 millions de voxels, pour un coût de calcul scalaire total avoisinant les 28 millions d'heures.

Soulignons que ces travaux restent limités à une physique acoustique de la propagation des ondes. Une caractérisation du sous-sol prenant en compte leur caractère élastique permettrait une meilleure détection de la présence de fluide et une résolution accrue. Ceci requiert des méthodes mathématiques avancées pour faire face à la non-linéarité du problème d'imagerie élastique, et des algorithmes permettant d'exploiter la puissance de calcul des machines Exascale, la physique élastique de propagation des ondes amenant un coût de calcul supérieur de presque deux ordres de grandeur à celui de la physique acoustique. C'est notre sujet d'étude pour la prochaine décennie ! ■

CARACTÉRISATION DU SOUS-SOL

Détermination des propriétés mécaniques du sous-sol (e.g. vitesses, masse volumique) pour accéder à sa rhéologie.

EXASCALE

Calculateurs de nouvelle génération capables d'exécuter 1018 floating-point operations par seconde (FLOPS).

CT5

PHYSIQUE THÉORIQUE & PHYSIQUE DES PLASMAS

L'ÉQUIPE

Sébastien CORDE (École polytechnique, Lab. Optique Appliquée)

Aimé MATHERON (École polytechnique, Lab. Optique Appliquée)

Igor ANDRIYASH (CNRS, Lab. Optique Appliquée)

Xavier DAVOINE (CEA, CEA/DAM/DIF, Université Paris-Saclay, LMCE)

Laurent GREMILLET (CEA, CEA/DAM/DIF, Université Paris-Saclay, LMCE)

Une approche plasma pour l'étude de la QED en champ fort

LE CONTEXTE. Les dernières avancées sur les lasers et les accélérateurs de particules ouvrent un nouveau champ d'étude fondamentale : celui de l'électrodynamique quantique en champ fort, où la théorie devient non-linéaire et des paires électron-positron, donc de la matière, peuvent émerger du vide en présence d'un champ électromagnétique extrêmement intense. Dans ce contexte, les plasmas peuvent jouer un rôle crucial avec de nouvelles approches pour accéder à ce régime avec les lasers les plus puissants actuellement.

20 millions d'heures CPU.

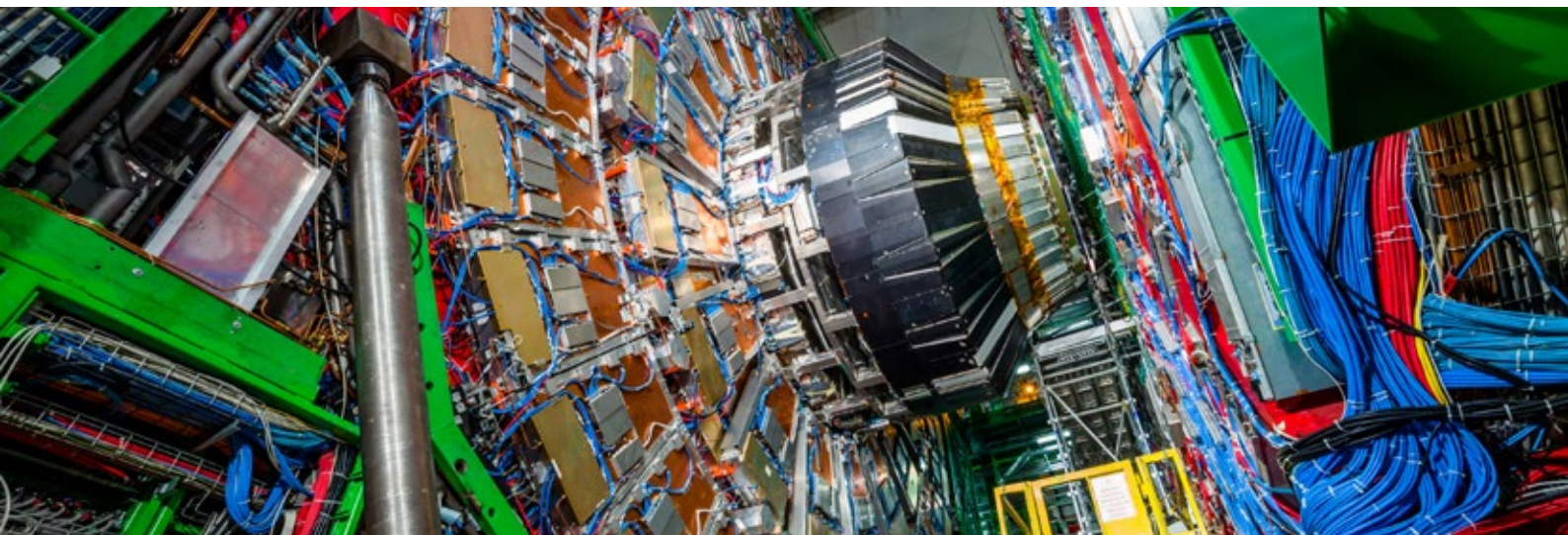
L'

électrodynamique quantique (QED) est l'une des théories physiques les mieux testées aujourd'hui. Décrivant la dynamique et l'interaction des particules chargées et de la lumière, c'est-à-dire des champs électromagnétiques et des photons, la QED n'a cependant jamais été explorée au-delà d'une échelle caractéristique pour le champ électrique : le champ critique de Schwinger $E_{cr} = m_e^2 c^3 / e \hbar \approx 1.3 \times 10^{18} \text{ Vm}^{-1}$.

Pourtant, il s'agit d'une échelle naturelle de champ électrique combinant les constantes physiques de la mécanique quantique et de la relativité, et la charge et la masse de la particule

X~6

Le champ électrique atteint 6 fois le champ critique de Schwinger dans le référentiel du faisceau d'électrons.



chargée la plus légère, l'électron (et de son anti-particule, le positron). L'électromagnétisme, dont on apprend très tôt sa linéarité et connu pour son principe de superposition, devient fondamentalement non-linéaire à cette échelle. Dans le vide, des paires électron-positron peuvent émerger spontanément en présence d'un tel champ.

Avec les derniers développements sur les accélérateurs de particules et les lasers de haute puissance, comme le **laser APOLLON** en France, de nombreux projets expérimentaux visent à sonder la QED dite en régime de champ fort. En réalité, le champ critique dépasse de loin ce qu'il est aujourd'hui possible de créer en laboratoire. En revanche, il est envisageable de l'atteindre dans le référentiel au repos d'un électron se propageant à une vitesse proche de la lumière, où l'on bénéficie du boost relativiste de Lorentz.

UNE APPROCHE « TOUT PLASMA »

Le schéma traditionnel pour l'étude de la QED en champ fort est ainsi la collision entre des électrons de très haute énergie d'une part (boost de Lorentz) et un laser de très forte intensité d'autre part (champ fort).

Combiner un accélérateur d'électrons avec un laser de haute puissance est difficile d'un point de vue technologique et économique, ce qui suscite un intérêt pour les accélérateurs laser-plasma qui peuvent être réalisés en utilisant des lasers de haute puissance, évitant ainsi le besoin d'un accélérateur conventionnel. Cependant, il faut tout de même disposer de deux impulsions laser : l'une pour l'accélérateur laser-plasma et la génération des électrons de haute énergie, et l'autre pour générer le champ fort. Cela complexifie l'infrastructure requise et l'expérience, avec des limitations liées aux fluctuations tir à tir, à l'alignement spatial et à la synchronisation.

LASER APOLLON

C'est une nouvelle infrastructure de recherche laser en construction sur le Plateau de Saclay. D'une puissance inégalée allant jusqu'à 10 pétawatts (PW), les impulsions énergétiques et brèves délivrées par le faisceau principal d'Apollon, jusqu'à 150 joules en 15 femtosecondes (fs).

« Ce Grand Challenge a permis la modélisation complète de notre approche plasma avec un raccourci expérimental à la clé. »

Cette approche assure un alignement et une synchronisation automatiques, et sa géométrie est telle que la totalité des électrons voient le champ fort.

MODÉLISATION

Trois simulations sont couplées pour modéliser l'injecteur et l'accélérateur laser-plasma, et la collision QED après boost laser et réflexion.

Notre approche « tout plasma », en revanche, repose sur une seule impulsion laser, ce qui simplifie grandement l'expérience. Pour cela, l'accélérateur laser-plasma se termine par un plasma transparent de haute densité afin d'auto-focaliser et comprimer l'impulsion laser, démultipliant son intensité, suivie d'un « miroir plasma » (une feuille métallique) pour réfléchir l'impulsion laser et provoquer sa collision avec les électrons (voir figure 1).

Cette approche assure ainsi un alignement et une synchronisation automatiques, et sa géométrie est telle que la totalité des électrons voient le champ fort. Elle offre un raccourci considérable pour une première étude expérimentale de la QED en champ fort, avec un champ dépassant largement celui de Schwinger dans le référentiel des électrons et une création abondante de paires à la clé.

FAIRE APPEL À DES MODÈLES RÉDUITS

Notre projet Grand Challenge a consisté en la modélisation complète de cette approche dans des conditions accessibles très prochainement au laser APOLLON. Cette modélisation demande de coupler de nombreux modèles physiques et ainsi

différents codes de simulation. Ces outils, de type « *particle-in-cell* » (PIC), doivent décrire les différents processus physiques en jeu, avec des échelles variées, avec un coût numérique raisonnable.

L'accélérateur laser-plasma a une densité plasma faible ($n_p = 7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) mais une longueur très importante (environ 40 cm). Pour modéliser la propagation du laser et l'accélérateur sur une telle longueur, il faut faire appel à des modèles réduits. Sur ces 40 cm, on utilise d'abord le code *HiPACE* [1], basé sur l'approximation quasi-statique qui suppose que le laser et la structure de l'onde plasma évoluent lentement par rapport au temps caractéristique de la réponse des électrons du plasma.

L'injecteur laser-plasma, réalisé à l'aide d'un gradient descendant de densité plasma au début de l'accélérateur laser-plasma, est incompatible avec cette approximation quasi-statique et est simulé sur une longueur de 10 mm avec le code quasi-3D *FBPIC* [2], qui utilise une décomposition de Fourier sur la coordonnée angulaire d'un système de coordonnées cylindriques.

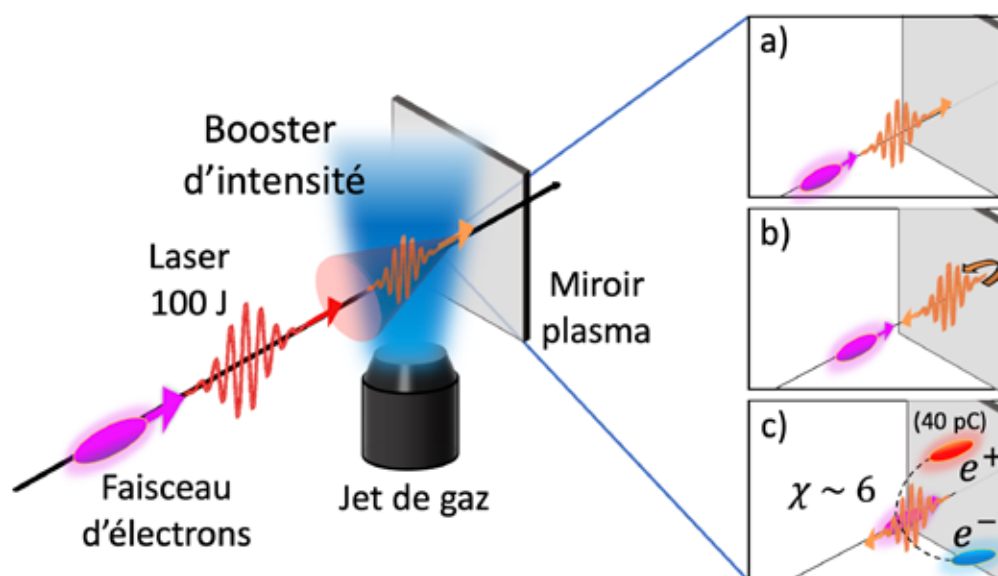


Figure 1.
Schéma de principe de notre
approche « tout plasma ».
Après un accélérateur laser-plasma, le laser et le faisceau d'électrons se propagent dans un plasma transparent de haute densité (jet de gaz) pour démultiplier l'intensité laser. Incident sur un miroir plasma (a), le laser est réfléchi (b) déclenchant ainsi la collision entre électrons et laser (c).

DES RÉSULTATS ENCOURAGEANTS !

La modélisation du plasma transparent de haute densité ($n_p = 7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), la réflexion sur le miroir plasma et la collision entre électrons et laser réfléchis, en tenant compte des processus QED, se fait en deux temps. D'une part, le **code PIC-QED CALDER** [3] simule le plasma transparent de haute densité et la collision QED dans l'hypothèse d'une réflexion parfaite. D'autre part, la réflexion sur le miroir plasma est modélisée, avec une résolution beaucoup plus fine cette fois-ci (typiquement un ordre de grandeur gagné sur toutes les dimensions, par exemple le pas de temps passe de 260 as à 25 as), en utilisant le laser de la précédente simulation, de manière à vérifier que le champ électrique réfléchi en conditions réelles s'approche bien du cas idéal. Au vu de l'envergure du projet, plus d'une centaine de simulations de test et d'optimisation paramétrique ont été réalisées avec des paramètres numériques moins exigeants pour tourner en quelques heures sur plusieurs milliers de cœurs, tandis que plusieurs dizaines de simulations de haute précision ont été effectuées pour modéliser l'autofocalisation laser et la collision QED ou le miroir plasma, nécessitant jusqu'à 25 600 cœurs sur une vingtaine d'heures par simulation.

Les résultats de ce Grand Challenge sont très encourageants : avec une énergie laser de 100 Joules (une valeur pertinente pour le laser *APOLLON*), l'accélérateur laser-plasma engendre un faisceau d'électrons de 11 GeV, tandis que l'intensité du faisceau laser auto-focalisé dans le plasma transparent de haute densité est multipliée d'un facteur ~ 100 . Le champ réfléchi sur le miroir plasma n'est que 10 % inférieur au champ incident.

Ainsi, lors de la collision, les électrons de 11 GeV voient dans leur référentiel un champ électrique d'environ 6 fois le champ critique de Schwinger, ce qui donne lieu à une production massive de paires, avec un rapport de 0.2 entre nombre de paires produites et nombre d'électrons incidents. Avec un faisceau d'électrons de 185 pC, cela conduit à une charge totale de 40 pC de positrons, aisément détectable lors d'une démonstration expérimentale. ■

CODE CALDER

Le code CALDER est utilisé pour simuler en 3D l'auto-focalisation du laser qui démultiplie son intensité et la génération des paires de QED champ fort.

[1] S. Diederichs et al., *HiPACE++: A portable, 3D quasi-static particle-in-cell code*, *Comput. Phys. Commun.* 278, 108421 (2022).

[2] R. Lehe et al., *A spectral, quasi-cylindrical and dispersion-free Particle-In-Cell algorithm*, *Comput. Phys. Commun.* 203, 66 (2016).

[3] E. Lefebvre et al., *Electron and photon production from relativistic laser-plasma interactions*, *Nucl. Fusion* 43, 629 (2003).

CT6 INFORMATIQUE ALGORITHMIQUE & MATHÉMATIQUES

L'ÉQUIPE

Florian FAUCHER (INRIA Makutu)

Ha PHAM (INRIA Makutu)

Hélène BARUCQ (INRIA Makutu)

Patrick AMESTOY (MUMPS Tech.)

Jean-Yves L'EXCELLENT (MUMPS Tech.)

Théo MARY (LIP6/CNRS)

Chiara PUGLISI (MUMPS Tech.)

Laure COMBE (Geoazur/CNRS)

Stéphane OBERTO (Geoazur/CNRS)

Modélisation d'ondes avec une méthode HDG d'ordre élevé

LE CONTEXTE. Ce grand défi s'intéresse à la simulation de la propagation d'ondes mécaniques sur des problèmes à très grande échelle en domaine fréquentiel. L'objectif est d'être capable de simuler un grand nombre de longueurs d'onde dans des milieux complexes. En particulier, deux cas d'études sont mis en avant pour l'imagerie : la propagation d'ondes dans la Terre et le Soleil.

45 millions d'heures.



La propagation des ondes sismiques est un outil fondamental pour de nombreuses applications, comme en géophysique interne pour l'étude de la structure de la Terre, en astrophysique pour l'imagerie du soleil (héliosismologie) et des étoiles (astérosismologie), ou encore en imagerie médicale.

Les ondes contiennent des informations sur les milieux dans lesquels elles se sont propagées ; en comparant les données mesurées et des données issues de simulations numériques, nous pouvons identifier les milieux qui ne sont pas accessibles.

-50%

C'est la réduction de l'empreinte mémoire sur la simulation élastique obtenue en combinant *HAWEN* et *MUMPS*.



Ce projet se concentre sur deux types de milieux. Pour la propagation d'ondes sismiques terrestres, nous considérons des milieux élastiques avec atténuation et éventuellement anisotropes, qui sont difficiles à traiter de par la complexité des géométries du sous-sol, la topographie en surface, et la taille des domaines (mesurée en nombre de longueur d'onde à propager).

Nous considérons également la propagation d'ondes acoustiques dans le Soleil, où nous faisons face à des variations de paramètres particulièrement sévères proche de l'atmosphère solaire (par exemple la densité qui devient exponentiellement décroissante), ce qui challenge les méthodes numériques. Afin de traiter au mieux ces applications, il est indispensable d'avoir une méthode de discrétisation numérique flexible, efficace, et qui passe à l'échelle.

DISCRÉTISATION PAR MÉTHODE DE GALERKIN DISCONTINUE HYDRIZABLE D'ORDRE ÉLEVÉ

Afin de simuler la propagation d'ondes dans des milieux complexes, nous considérons les équations d'ondes harmoniques qui permettent de traiter facilement l'atténuation. Elles sont ensuite discrétisées, pour mener à la résolution d'un système linéaire de très grande taille. Pour la discrétisation, nous utilisons une méthode de Galerkin discontinue hybridizable (HDG). Cette méthode relativement récente a plusieurs avantages, comme d'être propice à la hp-adaptivité. La méthode est compatible avec une implémentation massivement parallèle, l'inconnue du système étant construite de façon indépendante à l'échelle de l'élément.

De plus, la méthode HDG est une méthode DG à laquelle on peut appliquer

HDG
Méthode de discrétisation des équations d'ondes qui utilise la condensation statique pour réduire le nombre d'inconnues.

« *Le Grand Challenge ADASTRA nous a permis de simuler la propagation d'ondes harmoniques pour la Terre et le Soleil, sur des échelles jusqu'alors inaccessibles.* »

Nous avons privilégié les ordres de polynômes supérieurs ou égaux à 6 pour bénéficier au maximum de la méthode HDG.

HAWEN
Logiciel open-source pour la résolution de problèmes d'ondes directs et inverses en utilisant la méthode HDG.

une condensation statique qui permet de réduire la taille du système linéaire à résoudre : en formulant le problème sur le squelette du maillage uniquement, les degrés de liberté intérieurs sont ignorés, et le système linéaire s'en trouve réduit. Cependant, on doit noter que la méthode HDG est réellement efficace quand des approximations polynomiales d'ordre élevé sont utilisées. En effet, dans ce cas, le nombre de degrés de liberté internes est important et leur élimination constitue une réelle réduction de la taille du système.

UNE RÉOLUTION EN TROIS ÉTAPES

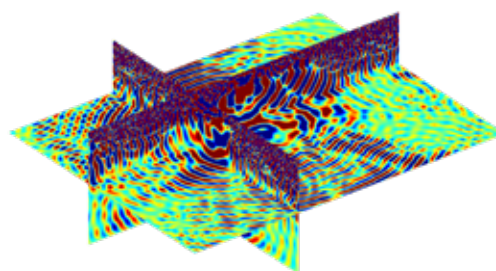
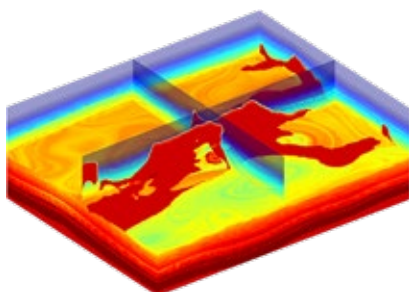
Le logiciel open-source **HAWEN** (<https://ffaucher.gitlab.io/hawen-website/>) a été utilisé pour les simulations numériques utilisant la méthode HDG, avec le solveur direct massivement parallèle **MUMPS** (<https://mumps-solver.org/index.php>) pour résoudre le système linéaire. La résolution se fait en trois étapes avec la phase d'analyse, la factorisation, et la résolution.

La phase d'analyse bénéficie directement de la spécificité des méthodes HDG (tous

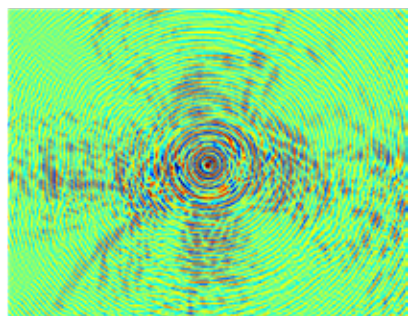
les degrés de liberté sont connectés par les faces du maillage) ce qui permet de réduire la taille des graphes par 60, et le nombre d'arêtes par plus de 2 000. L'utilisation d'un solveur direct permet en outre, pour la résolution, de traiter efficacement un nombre élevé et simultané de seconds membres, c'est-à-dire de simuler de nombreuses sources.

La phase la plus coûteuse numériquement (en termes de temps et de mémoire) demeure la factorisation. Nous pouvons réduire significativement le coût de cette phase grâce à la combinaison de la méthode HDG pour réduire la taille des systèmes linéaires, avec le solveur **MUMPS** pour réduire l'empreinte mémoire (par l'utilisation de la précision mixte et des compressions de rang faible).

Nous avons privilégié les ordres de polynômes supérieurs ou égaux à 6 pour bénéficier au maximum de la méthode HDG, ce qui a nécessité un travail conséquent pour garantir la stabilité, la précision et la rapidité des quadratures numériques.



Modèle de vitesse SEAM
de taille 35x45x15 km³
(gauche), simulation
viscoélastique à la fréquence
de 2Hz (milieu) et coupe
horizontale à 800m de
profondeur.



RÉSoudre DES CAS JUSQUE LÀ INACCESSIBLES

De plus, ceci entraîne une discrétisation du domaine (avec un maillage tétraédrique) avec des grandes mailles, et nous avons mis en place une représentation flexible des propriétés physiques avec des bases de Lagrange afin de garder une résolution correcte, là où une représentation avec des constantes par morceaux serait inappropriée.

Nous avons finalement pu résoudre des cas inaccessibles auparavant, avec un coût de calcul divisé par plus de deux comparé à l'utilisation d'une approche standard sans compression ni précision mixte.

Pour des problèmes géophysiques, nous avons pu propager plusieurs centaines de longueurs d'ondes pour les milieux acoustiques, et plus de 60 longueurs d'ondes pour les milieux viscoélastiques, en utilisant jusqu'à 48 000 cœurs de calcul. Cela a également permis de simuler des ondes acoustiques en considérant le Soleil en entier avec des modèles physiques non-symétriques, et ainsi d'ouvrir la voie à l'étude de phénomènes 3D pour l'héliosismologie.

Tout ceci va servir pour les futures applications du projet européen ERC-StG Incorwave (<https://ffaucher.gitlab.io/erc-incorwave/>) et le projet ANR-DFG Butterfly. ■

HÉLIOSISMOLOGIE

L'héliosismologie étudie les tremblements du Soleil. Comme presque toutes les étoiles, la surface du Soleil est animée de mouvements d'oscillations. Ces pulsations naturelles et permanentes engendrent des ondes sonores ou de gravité qui se propagent dans l'étoile et permettent de l'étudier de la surface au cœur.

CT7 MODÉLISATION MOLÉCULAIRE APPLIQUÉE À LA BIOLOGIE

L'ÉQUIPE

Marco CECCHINI
(IFM/UMR7177)
Paula MILAN RODRIGUEZ
(IFM/UMR7177)

« Ce Grand Challenge nous a permis de réaliser le premier modèle de Markov de la transmission neuronale avec résolution atomique. »

Les bases moléculaires de la neurotransmission

LE CONTEXTE. Les récepteurs synaptiques jouent un rôle central dans la communication entre les neurones et sont impliqués dans des processus cognitifs fondamentaux tels que l'attention, l'apprentissage et la mémoire. Ces récepteurs convertissent un signal chimique en flux ionique, ce qui permet la propagation d'un potentiel d'action à travers les synapses. Comprendre les mécanismes moléculaires d'activation et de désensibilisation des récepteurs est essentiel pour le développement de nouveaux médicaments plus efficaces et sûrs contre les troubles neurologiques.

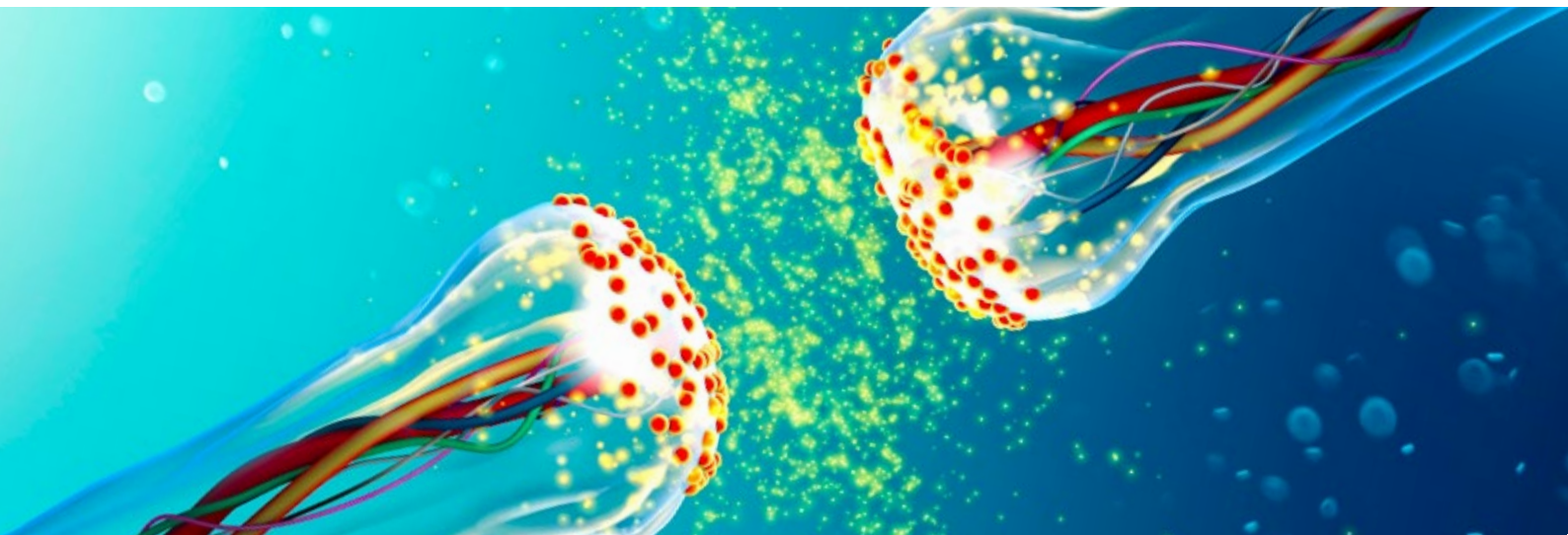
20 millions d'heures CPU.



Les récepteurs synaptiques sont des protéines transmembranaires qui permettent la conversion d'un signal chimique (généralement la liaison de petites molécules appelées neurotransmetteurs) en un flux d'ions à travers la membrane post-synaptique. Des études fonctionnelles par électrophysiologie *patch-clamp* ont démontré que ces protéines accomplissent leur fonction en basculant entre un nombre discret d'états conformationnels : un état de repos dont le canal est fermé ; un état actif en complexe avec le neurotransmetteur qui est perméable aux ions ; et un ou plusieurs états désensibilisés où le canal se referme avec le neurotransmetteur toujours lié.

146

C'est le nombre de microsecondes de simulation toute-atome réalisées lors de ce Grand Challenge. Pour un système moléculaire comme le récepteur glycine (protéine de 195 624 atomes) le temps de simulation dans la littérature est généralement de 1 à 2 ordres de grandeur inférieure.



Jusqu'à présent, la fonction des récepteurs synaptiques a été interprétée à l'aide de modèles thermodynamiques simples tel que le modèle de *Monod-Wyman-Changeux* (MWC), où les états conformationnels du récepteur sont supposés être à l'équilibre réversible et la liaison de l'agoniste/antagoniste déplace cet équilibre vers l'état ouvert/fermé du canal. Cependant, des études fonctionnelles récentes ainsi que les structures atomiques dévoilées par la cryo-microscopie électronique indiquent un mécanisme plus complexe impliquant plusieurs états intermédiaires.

UNE OPPORTUNITÉ D'EXPLORER LES MÉCANISMES DE NEUROTRANSMISSION

Les **modèles de Markov** (MSM) sont des modèles stochastiques capables de décrire l'évolution temporelle d'un système moléculaire bien au-delà des échelles de temps accessible par simulation de dynamique moléculaire (MD) tout-atome, qui difficilement dépasse les dizaines de microsecondes.

En exploitant le principe de l'équilibre local, ces modèles brisent la limite de temps en agrégeant les informations provenant de trajectoires de MD démarrées à partir des conformations distinctes du récepteur. La construction d'un modèle MSM nécessite la collection d'un très grand nombre de simulations (>100), un regroupement des conformations moléculaires en états microscopiques, la génération de la matrice de probabilité de transition entre eux. Cette dernière est au cœur du modèle MSM car elle donne accès aux populations des états à l'équilibre, aux chemins de transition et à la cinétique opérationnelle, ce qui relie les structures moléculaires à leur fonction biologique.

Nous nous sommes concentrés sur le **récepteur de la glycine** (GlyR), un canal ionique pentamérique impliqué dans la transmission synaptique inhibitrice dans le cerveau postérieur et dans la moelle épinière (Fig.1, haut). Le GlyR est de loin le récepteur synaptique le mieux caractérisé

PATCH-CLAMP

Terme anglais désignant une technique d'enregistrement des courants ioniques transitant à travers les membranes cellulaires. Cette méthode permet d'étudier les mécanismes de fonctionnement des canaux ioniques d'une cellule isolée en permettant le suivi en direct des phénomènes d'ouverture, d'inactivation et de fermeture des canaux.

MODÈLES DE MARKOV

Ils comblent le fossé entre les simulations moléculaires tout-atome et les études fonctionnelles en agrégeant l'information provenant de trajectoires indépendantes.

« Ce projet propose une nouvelle méthodologie pour la compréhension des fondements de la neurotransmission par les récepteurs synaptiques. »

**RÉCEPTEUR
DE LA GLYCINE**

Récepteur synaptique, inhibiteur du système nerveux, impliqué dans la coordination motrice, des fonctions sensorielles essentielles et la sensation de douleur. Ces récepteurs sont ciblés par les anesthésiques généraux, les cannabinoïdes et l'éthanol.

avec plus de 40 structures à haute résolution déposées dans la *Protein Data Bank* (PDB).

Ces structures représentent la protéine dans ses différents états conformationnels et/ou en complexe avec des modulateurs (c.a.d. des agonistes, des antagonistes, des agonistes partiels et des modulateurs allostériques), et donnent qui offre l'opportunité d'explorer les mécanismes de la neurotransmission et de la régulation allostérique avec résolution atomique.

**DES SIMULATIONS DU RÉCEPTEUR
DE LA GLYCINE...**

En s'appuyant sur l'information structurelle disponible, le logiciel de simulation GROMACS 2022 et une allocation de 20 millions d'heures CPU accordées lors de ce Grand Challenge, nous avons pu réaliser 300 simulations de 500ns chacune pour un échantillonnage sans précédent de l'espace conformationnel du récepteur. Les 75 μ s de simulation MD obtenus en absence des ligands (APO) et les 71 μ s avec l'agoniste partiel taurine (TAU), lié au récepteur ont permis la construction de deux MSMs (Fig.1, bas).

Ces modèles mettent en évidence une surface d'enthalpie libre complexe avec plusieurs bassins séparés par des barrières. Dans les deux cas, quatre états sont identifiés : un état fermé et imperméable aux ions et à l'eau ; un état ouvert perméable aux ions ; un état en forme d'entonnoir hydraté mais imperméable aux ions, qui serait compatible avec un état désensibilisé et un état intermédiaire fermé situé soit entre l'état de repos et l'état désensibilisé en absence de ligands,

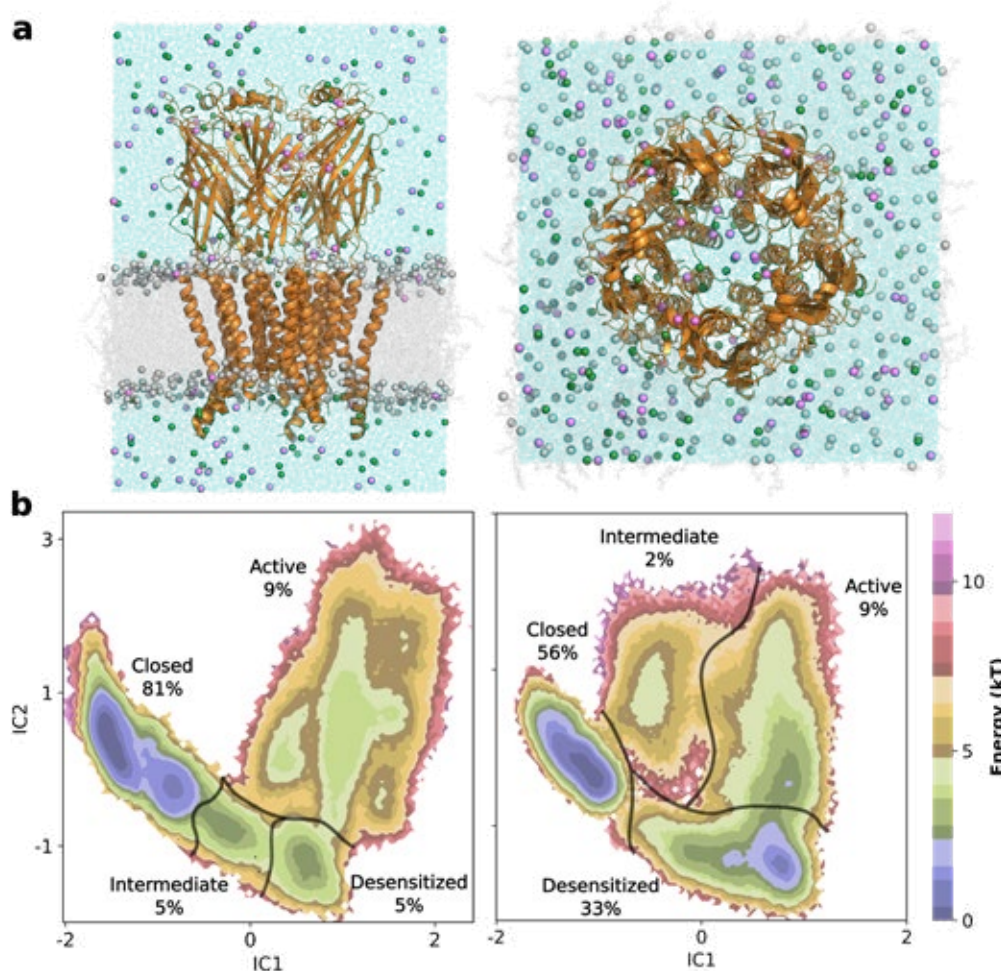
soit entre l'état de repos et l'état ouvert en présence d'agoniste. L'analyse par MSM fournit des prédictions pointues : D'abord, elle prédit qu'en absence de ligands, l'état fermé du canal est largement majoritaire (81 %) et que la liaison de l'agoniste (taurine) entraîne un déplacement d'équilibre vers l'état ouvert/désensibilisé. Cette prédiction, qui est cohérente avec les observations expérimentales par électrophysiologie, est un résultat remarquable étant donné que la taurine n'est pas plus grosse qu'un seul acide aminé, c'est-à-dire un millième de la taille du récepteur.

**QUANTIFIER LES CONSTANTES
CINÉTIQUES MICROSCOPIQUES...**

Deuxièmement, la matrice de probabilité de transition donne accès aux constantes cinétiques microscopiques entre les états conformationnels du récepteur. Cela permet non seulement de prédire les temps d'ouverture/fermeture du canal, mais également de construire des modèles cinétiques avec une résolution temporelle inférieure à la nanoseconde.

À noter, nos modèles prédisent qu'indépendamment de l'état de liaison, le chemin d'activation le plus probable passe par la structure annotée comme désensibilisée. Cette prédiction plutôt inattendue semble indiquer que cette conformation du récepteur représenterait plutôt un état intermédiaire pré-actif tardif.

Troisièmement, une combinaison de la modélisation MSM avec des calculs d'électrophysiologie *in silico*, qui permettent de sonder la conductance du canal dans chaque état microscopique du récepteur,



a) Vue de côté (gauche) et vue de dessus (droite) du GlyR (orange) intégré dans une bicouche lipidique POPC (gris). Les molécules d'eau sont représentées en cyan et les ions chlorure et sodium en vert et violet respectivement. Les atomes de phosphore des têtes lipidiques sont représentés par des sphères grises.

En bas, l'espace conformationnel du récepteur glycine sans ligand (à gauche) et avec l'agoniste partiel taurine (à droite) sont présentés. Dans les deux cas quatre états conformationnels sont identifiés. La caractérisation des états et leurs populations sont présentées.

permettrait de simuler les enregistrements par électrophysiologie *single-channel* et prédire la cinétique d'ouverture/fermeture du canal dans les différentes conditions physiologiques (c.a.d. avec agoniste, avec antagoniste, et/ou en présence des modulateurs allostériques ou des mutations). Ces prédictions peuvent être directement comparées avec les données expérimentales.

VERS DE NOUVELLES STRATÉGIES PHARMACOLOGIQUES ?

Les résultats obtenus lors de ce Grand Challenge montrent que la combinaison de structures à haute résolution avec la modélisation par chaîne de Markov (MSM) et des ressources HPC exceptionnelles fournit une approche de simulation multi-échelle bien adaptée pour combler le fossé entre la structure et la fonction des récepteurs synaptiques. Cette approche ouvre à une compréhension

profonde de la neurotransmission synaptique qui pourrait fournir une interprétation moléculaire de certaines conditions pathophysiologiques du système nerveux (ex. lors de mutations des récepteurs) ainsi que du mode d'action des substances psychoactives telles que l'alcool, la nicotine, les anesthésiques ou les cannabinoïdes. Néanmoins, la construction d'un modèle MSM pour un seul type de récepteur requiert environ 10 millions d'heures de calcul, ce qui reste très coûteux pour des applications à large spectre. Le développement des protocoles plus efficaces pour la modélisation MSM ainsi que l'accès aux ressources de calcul Exascale pourront avoir un effet de levier pour la compréhension des maladies neurologiques telles que les maladies d'Alzheimer et de Parkinson, l'épilepsie et les troubles du spectre de l'autisme, et leur traitement pharmacologique. ■

ÉLECTROPHYSIOLOGIE IN SILICO

Technique de simulation qui permet de mesurer la conductance d'un récepteur dans un état conformationnel donné.

CT7 MODÉLISATION MOLÉCULAIRE APPLIQUÉE À LA BIOLOGIE

L'ÉQUIPE

Xiaojing CONG (CNRS, Institut de Génomique Fonctionnelle)

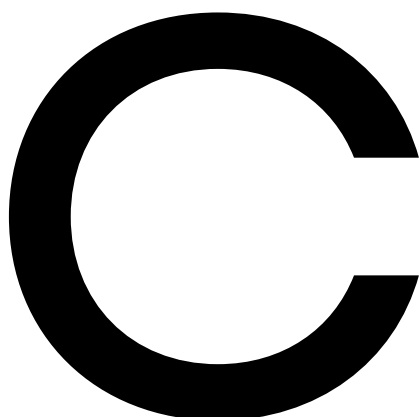
Amaël DAVAKAN (Institut de Génomique Fonctionnelle)

Philippe LORY (CNRS, Institut de Génomique Fonctionnelle)

Dynamique moléculaire des canaux calciques Cav3.1 et des mutants pathogènes

LE CONTEXTE. Les canaux calciques Cav3.1 activés par la dépolarisation membranaire régulent l'excitabilité neuronale. Des mutations gain de fonction dans Cav3.1 peuvent provoquer des syndromes neurodéveloppementaux graves accompagnées d'ataxies cérébelleuses. Décrypter la relation structure-fonction de Cav3.1 requiert la simulation *in silico* et permet d'étudier sa pharmacologie *in vitro*.

20 millions d'heures CPU.



av3.1 sont des canaux calciques de type T, activés par la dépolarisation membranaire de la membrane plasmique de tous types de cellules excitables, en particulier dans les neurones. Ils sont fortement exprimés dans le cervelet, notamment dans les neurones de Purkinje, ainsi que dans le thalamus, où ils contribuent de manière significative à la signalisation calcique et à l'excitabilité de ces neurones.

Les canaux Cav3.1 régulent l'entrée des ions calcium dans les cellules en réponse aux changements de potentiel membranaire, déclenchant des processus cellulaires allant de la transcription

2 377

C'est le nombre d'acides aminés qui composent la protéine Cav 3.1 chez l'Homme.



génique à l'intégration synaptique et à la libération de neurotransmetteurs. Diverses mutations dans Cav3.1 ont été identifiées et liées à des troubles neurodéveloppementaux graves et à des ataxies cérébelleuses.

ÉTUDIER COMMENT LES MUTATIONS AFFECTENT LES DYNAMIQUES DE CAV3.1

Notre objectif est d'élucider l'impact de ces mutations pathogènes sur la structure et la fonction de Cav3.1. Nous avons utilisé des expériences de **patch-clamp** combinées à la pharmacologie *in vitro* pour étudier les activités anormales des canaux Cav3.1 porteurs de ces mutations, ainsi que leurs réponses différentielles aux bloqueurs de canaux de type T. Parallèlement, nous avons réalisé des simulations de dynamiques

moléculaires de Cav3.1 dans un environnement transmembranaire, en appliquant différents potentiels membranaires, pour étudier comment les mutations affectent leur dynamiques conformationnelles et leur réponse aux bloqueurs.

Des informations structurales et dynamiques détaillées contribueront à la conception de nouveaux bloqueurs plus spécifiques des canaux Cav3.1, essentiels comme outils de recherche et agents thérapeutiques pour les maladies neurologiques liées à Cav3.1.

Les canaux Cav3.1 contiennent de multiples domaines transmembranaires formant un pore à travers la membrane. Ils détectent les changements de potentiel membranaire grâce à leurs

PATCH-CLAMP

Patch-clamp est un terme anglais désignant une technique électrophysiologique d'enregistrement des courants ioniques transitant à travers les membranes.

« Le projet contribuera à la conception de thérapies ciblant Cav3.1 pour les troubles neurologiques. »

Ce projet va également améliorer la compréhension des canaux calciques de type T, et notamment des canaux calciques Cav activés notamment au sein des neurones.

DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE

La dynamique moléculaire est une technique de simulation numérique permettant de modéliser l'évolution d'un système de particules au cours du temps.

« voltage-sensing domains » (VSDs) contenant de nombreux acides aminés chargés (segment S4). Les changements de potentiel membranaire déclenchent des mouvements des VSDs, entraînant l'ouverture et la fermeture du pore du canal : mécanisme appelé « *gating* ».

ESSENTIEL POUR DÉCOUVRIR LES MÉCANISMES DES MALADIES GÉNÉTIQUES

Les canaux Cav3.1 présentent de multiples états fonctionnels (états de repos, activé et inactivé) et ces états de « *gating* » peuvent être altérés par une seule mutation ponctuelle. Ceci est connu sous le nom d'effet allostérique, dans lequel des mutations à des sites spécifiques peuvent avoir des impacts à longue portée sur la structure globale, la stabilité, la dynamique, la fonction et la réponse aux médicaments d'une protéine.

Les simulations de **dynamique moléculaire** sont essentielles pour comprendre comment ces mutations induisent des changements

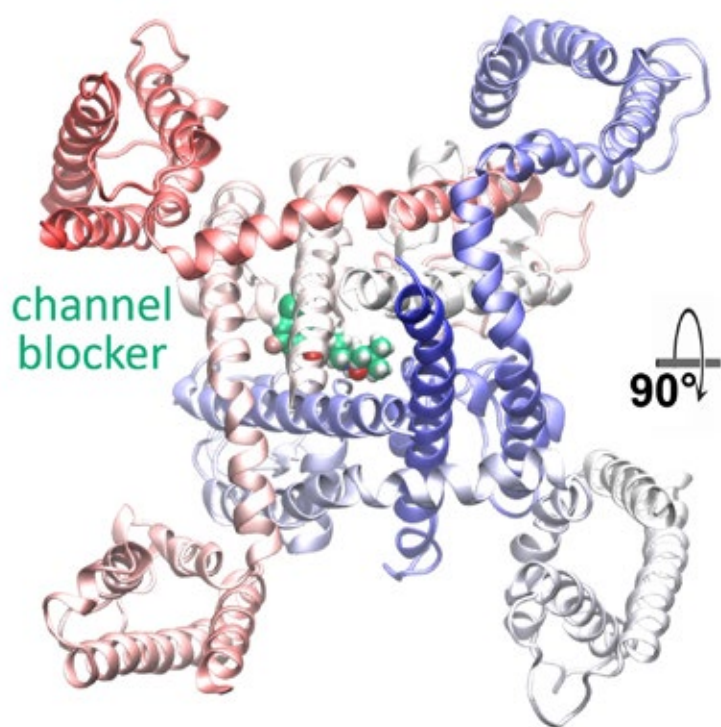
conformationnels à distance, ce qui aide à découvrir les mécanismes des maladies génétiques et à développer des thérapies ciblées.

Des structures haute résolution de Cav3.1 ont été obtenues par microscopie électronique cryogénique (cryo-EM) dans un état inactivé. En utilisant des simulations de dynamique moléculaire et des techniques d'échantillonnage renforcées, nous avons obtenu des descriptions à l'échelle atomistique de la transition du canal de l'état inactivé à l'état de repos, en réponse à différents potentiels membranaires.

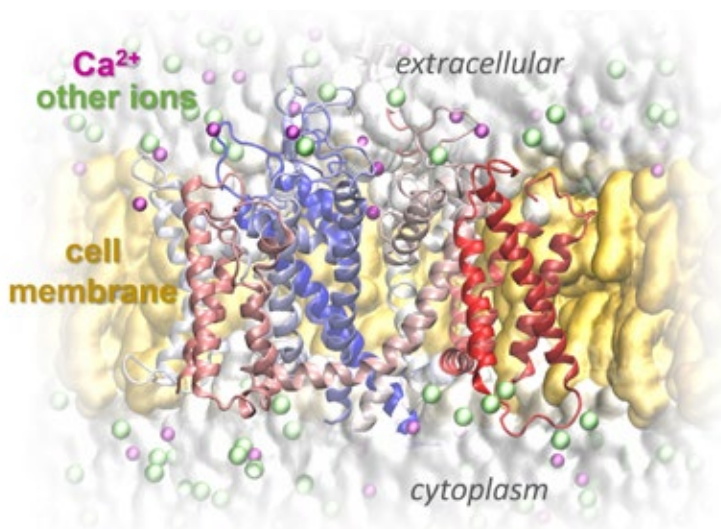
Les simulations ont également révélé comment les mutations pathogènes altèrent ce processus en contrariant les mouvements des VSDs du canal.

POUR LA CONCEPTION DE BLOQUEURS SPÉCIFIQUES

Ces découvertes permettent de relier les détails dynamiques moléculaires aux propriétés macroscopiques observées



Structure cryo-EM de Cav3.1
liée à un bloqueur de canal
(vert).



Simulations de dynamique
moléculaire tout-atome de
Cav3.1 (sans bloqueur)
dans un environnement
transmembranaire avec des
lipides et un solvant explicite.

expérimentalement pour les mutants pathogènes.

De plus, les résultats ont mis en évidence des régions structurales dans le canal critiques pour la transition conformationnelle entre les états inactivés et repos, qui peuvent être

explorées pour la conception de bloqueurs spécifiques de Cav3.1.

Ce projet va également améliorer notre compréhension des autres canaux calciques de type T, et des canaux calciques Cav en général. ■

CT3 BIOLOGIE & SANTÉ

CT9 PHYSIQUE, CHIMIE & PROPRIÉTÉ DES MATÉRIAUX

L'ÉQUIPE

Luigi GENOVESE (DRF – IRIG – Laboratoire de Simulation Atomistique – CEA Grenoble)

Marco ZACCARIA (DRF – IRIG - Laboratoire de Simulation Atomistique – CEA Grenoble)

In-Silico Quantum Mechanics Wet Lab experience

LE CONTEXTE. Le Deep Mutational Scanning est la technique de référence pour évaluer l'impact de mutations sur un **phénotype** donné. Nous présentons une approche computationnelle alternative/complémentaire afin de comparer les deux niveaux d'information obtenus, et de vérifier les possibilités d'application des simulations de mécanique quantique dans l'immunologie moderne. On analyse ici l'espace chimique autour du spectre mutationnel du SARS-CoV-2 en réponse à l'interaction avec des anticorps neutralisants.

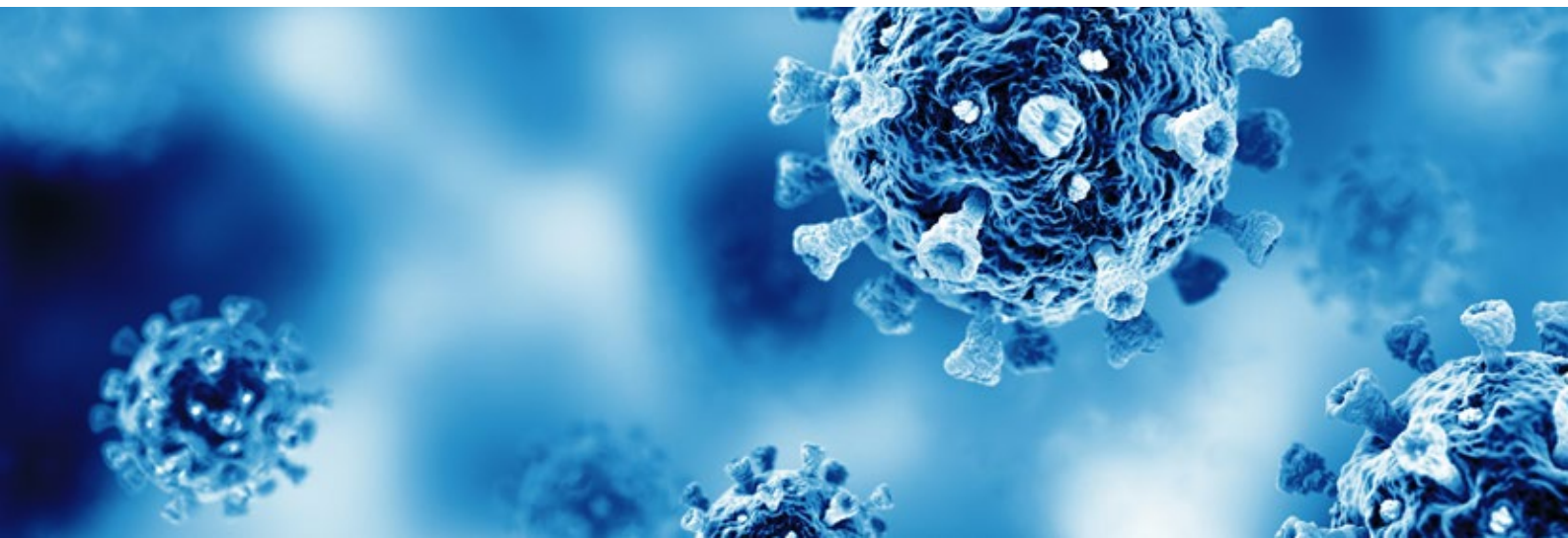
20 millions d'heures CPU.



Le SARS-CoV-2 est un virus à fort taux de mutation. Cela confère à l'agent pathogène une efficacité intrinsèque dans l'optimisation du processus d'infection et dans le déploiement de contre-mesures évolutives pour contrecarrer la réponse immunitaire de l'organisme cible. Ainsi, les nombreux variants du SARS-COV-2, qui ont pris place au cours de la pandémie, ont fait l'objet d'intenses recherches expérimentales visant à contrer leur propagation et, si possible, à anticiper leur émergence par rapport aux enquêtes épidémiologiques. Dans ces cas, la biologie a eu recours, et a toujours recours, à des pipelines expérimentaux intensifs, au premier rang desquels figure le deep mutational scanning (DMS).

3 000

calculs DFT de systèmes de l'ordre de 12 000 atomes, effectués avec le code BigDFT pour identifier les positions cristallographiques des mutations du virus qui déstabilisent l'interaction avec les anticorps.



Pour réaliser un DMS, un organisme unicellulaire facile à expérimenter, souvent une levure, est utilisé comme « piédestal » pour l'expression d'une protéine d'intérêt ; dans notre cas de référence, le domaine de liaison au récepteur (RBD) de la protéine spike (S) du SARS-CoV-2. Une bibliothèque de mutants RBD aléatoires est ensuite générée. Les cellules de levure exprimant les variantes de RBD à la surface sont ensuite exposées au récepteur ACE2 en culture ; ACE2 est le récepteur de la cellule animale auquel le SARS-CoV-2 se lie pour déclencher le processus d'infection via une liaison intermoléculaire entre sa protéine S, via le RBD, et ACE2 lui-même.

ÉVALUER L'EFFET D'UNE SEULE MUTATION PARTICULIÈRE

La performance de liaison du système S+ACE2 est l'objectif de l'analyse DMS visant à établir l'efficacité des différents variants de virus à se lier à la cellule humaine. Cette efficacité est estimée in vitro

par tri cellulaire activé par fluorescence (FACS), en partant de l'hypothèse solide que plus le signal de fluorescence détecté pour chaque variante est fort, plus son affinité pour le récepteur de la cellule cible (ACE2) est importante dans le processus d'infection virale.

La constante de dissociation (KD) est ensuite calculée sur la base des courbes de liaison de chaque mutant. Dans ces pipelines expérimentaux, chaque mutant généré dans la bibliothèque comporte généralement plus d'une mutation par rapport à la séquence originale : en moyenne, le nombre de ces mutations est de trois, assorties de combinaisons aléatoires.

Afin d'évaluer l'effet d'une seule mutation particulière sur les performances de liaison de l'ensemble du variant, ce que l'on appelle l'effet épistatique, une analyse statistique est effectuée dans laquelle les différents phénotypes sont exprimés sous forme d'analogues de probabilité par le biais d'une pondération de Boltzmann. Le décalage

PHÉNOTYPE

En génétique, le phénotype est l'ensemble des traits observables d'un organisme. Très souvent, l'usage de ce terme est plus restrictif : le phénotype est alors considéré au niveau d'un seul caractère, à l'échelle cellulaire ou encore moléculaire. L'ensemble des phénotypes observables chez les individus d'une espèce donnée est parfois appelé le phénome.

« La motivation est d'éclaircir la capacité des calculs de structure électronique à pouvoir anticiper les chemins évolutifs d'un virus dans l'émergence de nouveaux variants. »

Nous pouvons ainsi prédire les effets que des mutations (ponctuelles ou non) peuvent avoir sur l'interaction S-RBD, ou sur l'interaction S-anticorps.

BIGDFT

Logiciel libre pour physiciens et chimistes, distribué sous la licence publique générale GNU, dont le programme principal permet de calculer l'énergie totale, la densité de charge et la structure électronique de systèmes composés d'électrons et de noyaux (molécules et solides périodiques/cristallins) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), à l'aide de pseudopotentiels et d'une base d'ondelettes. https://l_sim.gitlab.io/bigdft-doc/index.html

épistatique est évalué comme la divergence de Jensen-Shannon entre les vecteurs de possibilité des 20 acides aminés, ce qui donne un résultat compris entre 0 pour des vecteurs de probabilité identiques et 1 pour des vecteurs qui ne sont pas du tout différents.

La recherche que nous présentons dans le contexte de ce challenge vise à obtenir, par des simulations de liaisons intermoléculaires avec BigDFT, des résultats comparables à l'état de l'art statistique/expérimental décrit ci-dessus. BigDFT fonctionne sur des superordinateurs à haute performance et calcul la structure électronique de matériaux et molécules à l'échelle nanométrique. Nous l'utilisons ici pour caractériser, par des calculs de premier principe, les modèles d'interaction des sous-unités biologiques afin d'identifier les régions de liaison du système et de les classer en fonction de leur pertinence. Cette approche modélise la signature d'interaction (phénotype de liaison) d'un système protéine-protéine ou protéine-ligand, de la taille de milliers de résidus (jusqu'à ~500 kDa, dans les systèmes les plus difficiles). Cette caractérisation est entièrement in silico, à partir d'une représentation structurale du système, et permet

de tester l'effet de mutations hypothétiques sur la liaison par rapport à des configurations de référence.

Entrée du modèle. Un « échantillon de calcul » est constitué par une représentation tout-atome d'une structure biologique. La notion de « tout-atome » comprend les positions de tous les hydrogènes (y compris les résidus titrables) et les hétéroatomes d'intérêt. Une telle représentation découle d'un équilibrage approprié des structures cristallines, d'expériences cryo-tem ou d'instantanés de trajectoires de dynamique moléculaire informées par le champ de force.

RÉSULTATS DU MODÈLE

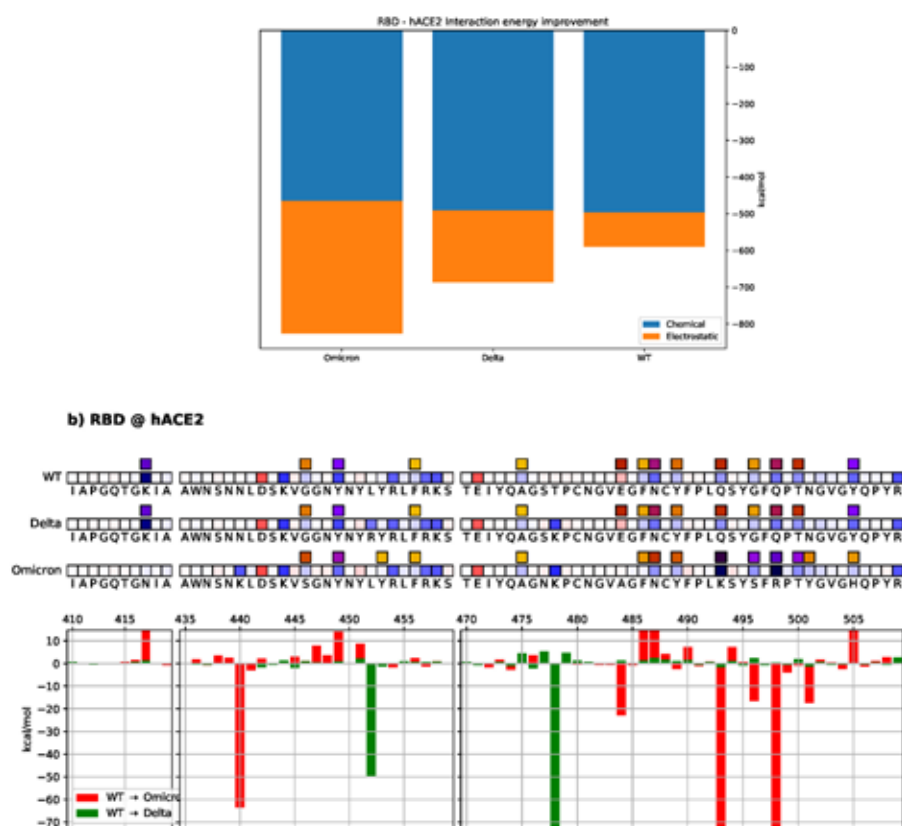
Une caractérisation mécaniste de la liaison entre les interacteurs du système. L'approche fournit des données multicouches, à différents niveaux de complexité. Par ordre décroissant de complexité :

a) Densité électronique /

La densité électronique détermine la nature et la force des liaisons chimiques entre les molécules en interaction.

b) Fragments /

Le modèle partitionne le nuage d'électrons



Figures :
Caractérisation mécaniste de la liaison spike-hACE2 pour le Wuhan (WT) et les variantes de spikes Delta et Omicron. Les données sont représentées sur les différents spikes viraux. Les acides aminés sont représentés par les lettres correspondantes et numérotés sur l'axe horizontal de l'histogramme. Leur effet global sur le ligand est indiqué par des carrés rouges/répulsifs et bleus/attractifs ; l'échelle d'énergie est identique dans toutes les figures.

Les résidus d'interface sont mis en évidence par des barres au-dessus des valeurs d'interaction, et les couleurs plus foncées indiquent des valeurs d'interface plus fortes. Les histogrammes sous les séquences montrent le changement relatif de l'énergie de liaison.

en régions physiquement cohérentes et/ou vérifie la cohérence d'un partitionnement prédéfini ; chaque région de ce type est définie comme un fragment.

c) Interactions entre fragments /

À partir des résultats du modèle et des caractéristiques des fragments, il est possible de calculer la force de l'interaction de liaison entre un nombre quelconque de deux fragments en interaction. Cette interaction comporte à la fois un terme chimique/à courte portée qui est toujours attractif et un terme électrostatique/à longue portée qui peut être attractif ou répulsif.

d) Résultat final /

À la fin de la simulation, notre approche fournit une représentation simple de la force de l'interaction entre les fragments des deux molécules, ainsi que la signature de l'interaction. Le modèle peut décrire l'énergie et la nature des liaisons chimiques en jeu. Cela permet une explication mécaniste et/ou une prédiction de la façon dont des substitutions ou des suppressions d'acides aminés spécifiques peuvent avoir un impact sur les interactions.

SIMULER LA PERFORMANCE DE LA LIAISON D'ANTICORPS NEUTRALISANTS CONNUS

Nous pouvons ainsi prédire les effets que des mutations (ponctuelles ou non) peuvent avoir sur l'interaction S - RBD, ou sur l'interaction S – anticorps, et mettre en relation cette différence d'interaction avec la performance expérimentale fournie par la fluorescence, comme montré dans la figure jointe.

Dans le présent travail, nous simulons la performance de la liaison d'anticorps neutralisants connus avec des mutants virtuels de la protéine spike (S) du SARS-CoV-2, et nous comparons nos résultats avec ceux de la recherche expérimentale de pointe. Plus précisément, nous prenons comme référence les données provenant du laboratoire de Jesse Bloom au Fred Hutchinson Cancer Center (Seattle WA, USA). Les structures biologiques de anticorps utilisées sont les suivants LY-CoV016 (etesevimab), REGN10933 (casirivimab), S2E12, Ly-Cov555 (bamla-nivimab), S2D106, S2H13, S2H97, et S2X259. Le pic de référence utilisé pour les simulations est celui de la variante originale « Wuhan ». ■

INTERACTION DE LIAISON

Dans le contexte de la chimie et de la biologie, elle fait référence aux forces qui maintiennent ensemble les atomes dans une molécule ou qui facilitent l'association entre différentes molécules.

CT7 MODÉLISATION MOLÉCULAIRE APPLIQUÉE À LA BIOLOGIE

L'ÉQUIPE

Fabio STERPONE (CNRS, Univ. Paris Cité, Lab. Biochimie Théorique)

Émeline LABORIE (CNRS, Univ. Paris Cité, Lab. Biochimie Théorique)

Simone MELCHIONNA (IAC – CNR)

Simulations de la clairance mucociliaire et l'effet des pathologies

LE CONTEXTE. La clairance mucociliaire est le premier mécanisme de défense du corps contre les pathogènes inhalés et absorbés dans le mucus, et son dysfonctionnement est associé à de nombreuses maladies respiratoires. Il est donc crucial de mieux comprendre les facteurs qui affectent son efficacité. Ce processus a lieu grâce aux battements coordonnés des cils recouvrant la surface des voies respiratoires qui permettent d'évacuer le mucus hors de la trachée.

23 millions d'heures.



Les cellules ciliées occupent environ 50 % de la surface des voies respiratoires. Chaque cellule contient environ 200 cils, des structures macromoléculaires animées de mouvements directionnels périodiques appelés battements.

C'est grâce à ces mouvements, et à leur coordination dans l'espace et dans le temps, que le mucus est propulsé hors de la trachée. Les cellules ciliées sont naturellement réparties de manière désordonnée dans l'espace. Les directions des battements de leurs cils, quoiqu'en moyenne alignées selon l'axe de la trachée, présentent également une petite variabilité.

40 000 μm^2

C'est la surface du tissu cellulaire simulé, comprenant 250 cellules ciliées.



Les cils sont majoritairement immergés dans un fluide semblable à de l'eau et sont recouverts par une couche de mucus, une sorte de gel visco-élastique, d'une viscosité 10 à 1 000 fois supérieure à celle de l'eau, dans lequel sont piégées les particules inhalées.

ÉVALUER L'EFFET DES DÉFAUTS DE LA SURFACE CILIÉE

Les maladies respiratoires engendrent des défauts affectant la couche de mucus ou le tapis de cils qui impactent ensuite l'efficacité du processus de clairance. Par exemple, l'asthme ou différentes infections virales peuvent provoquer la mort de cellules ciliées entières.

Dans le cas de la dyskinésie ciliaire primitive, une maladie génétique affectant la structure moléculaire des cils, certains cils peuvent aussi présenter des mouvements anormaux ou une immotilité totale. Ces anomalies entraînent ensuite

une réduction de la vitesse de transport du mucus ou une absence de clairance.

Dans ce projet, nous avons évalué l'effet des défauts de la surface ciliée, à savoir la disparition ou l'immotilité de différentes fractions de cils, sur le transport du mucus, et donc sur l'efficacité de la clairance.

Nous avons développé un modèle multi-échelle de la clairance mucociliaire qui permet de simuler le fonctionnement d'un échantillon d'épithélium respiratoire. Le modèle comprend un tapis de milliers de cils autonomes recouvert d'une couche de mucus.

Il inclut également les interactions hydrodynamiques grâce à la méthode **Lattice Boltzmann Molecular Dynamics**.

Les simulations ont été réalisées en utilisant le logiciel **MUPHY** qui permet de coupler la dynamique du fluide à celle des particules. La dynamique active des cils a été implémentée grâce à l'interface Python

LATTICE BOLTZMANN MOLECULAR DYNAMICS (LBMD)

Technique de simulation qui couple la dynamique du fluide à celle des particules.

MUPHY

Logiciel de simulation LBMD, scalable et doté d'une interface en Python qui permet un dialogue en temps réel avec le moteur de simulation.

« Grâce à ce Grand Challenge, l'équipe du LBT a pu simuler le processus de la clairance mucociliaire à une échelle sans précédent. »

Nous avons pu réaliser des simulations de plus d'une seconde (soit une vingtaine de battements). Ce qui permet une évaluation fiable de la vitesse de transport du mucus.

MPI4PY
Bibliothèque Python qui permet d'utiliser le modèle de programmation parallèle MPI (Message Passing Interface) dans les applications Python. Elle fournit une interface pour communiquer entre différents processus exécutés sur un ou plusieurs nœuds d'un cluster.

du logiciel, optimisée à l'aide du module *numba* et parallélisée avec *mpi4py*.

Nous nous sommes d'abord attachés à reproduire la forme et la fréquence physiologiques des battements des cils, puis nous avons organisé les cils en petits groupes très denses pour modéliser les cellules ciliées.

Celles-ci sont ensuite spatialement réparties et orientées avec un degré de désordre visant à reproduire l'architecture physiologique du tissu.

SUIVI DE LA DYNAMIQUE DES CILS À HAUTE RESOLUTION GARANTI

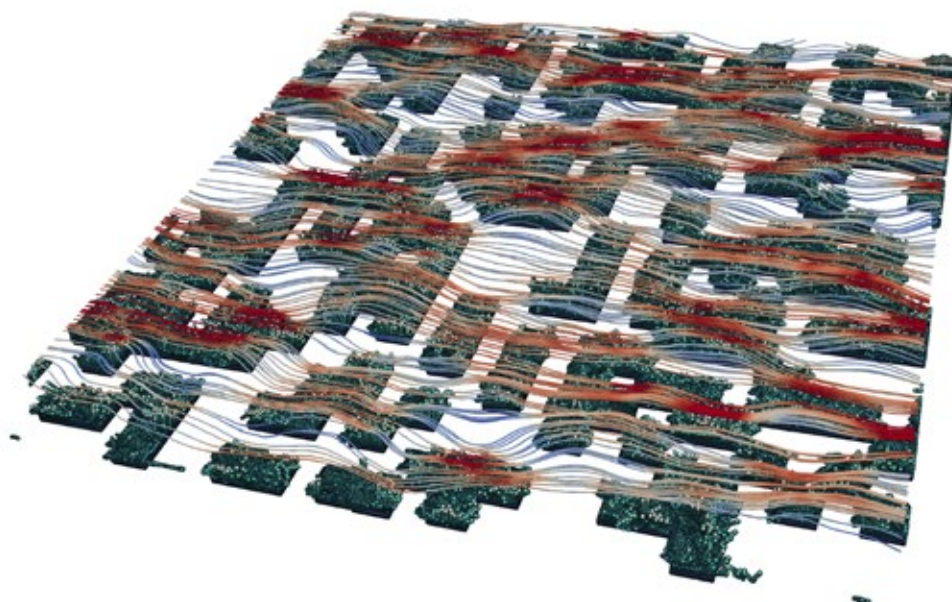
Une étude préalable de l'impact du degré de désordre dans le placement ou l'orientation des cellules ciliées a démontré que la combinaison d'un placement régulier des cellules ciliées dans l'espace avec une direction de battement uniforme est la plus favorable au transport du mucus.

En comparaison, l'introduction de désordre dans l'orientation des cellules ciliées provoque une réduction de la vitesse de transport quasiment d'un facteur trois, alors qu'une organisation spatiale désordonnée

des cellules ciliées n'a qu'un très faible impact si les directions de battements sont maintenues alignées. En présence d'une fraction croissante de défauts pathologiques tels que la disparition ou l'immotilité de cellules ciliées, nous avons mis en évidence une décroissance de la vitesse de transport du mucus proportionnelle à la fraction de cellules ciliées en bonne santé restantes.

Lorsque la fraction de cellules mortes augmente, de larges régions dépourvues de cils apparaissent, au-dessus desquelles le transport du mucus est quasiment nul. La présence de cellules *immotiles* s'est toutefois révélée être une gêne supplémentaire, ralentissant le déplacement du mucus davantage que si elles étaient absentes. En outre, dans certaines pathologies, il a été évoqué que l'orientation du battement des cils perdrait sa direction préférentielle.

Nos simulations confirment donc l'idée que la disparition de cellules ciliées associée à la perte d'orientation des battements des cellules restantes causerait une baisse très importante



Action d'un tapis de cellules ciliées avec un désordre spatial poussant le mucus vers l'avant. Les lignes de courant sont représentées et colorées en fonction de la vitesse du fluide.

d'efficacité de la clairance mucociliaire. Du point de vue méthodologique notre approche garantit le suivi de la dynamique des cils à haute résolution et permet d'évaluer l'effet de propulsion du fluide et des particules piégées dans le mucus qui en résulte ainsi que la formation et la destruction de structures particulières tels que des vortex locaux.

UNE ÉVALUATION FIABLE DE LA VITESSE DE TRANSPORT DU MUCUS

Grâce au Grand Challenge, nous avons simulé un échantillon de tissus d'une taille sans précédent de plus de 40 000 μm^2 , comprenant plus de 50 000 cils répartis en environ 250 cellules ciliées dans les conditions physiologiques de bonne santé. Nous avons ensuite créé différents systèmes avec un nombre croissant de cellules mortes ou immotiles. Pour

chaque système, nous avons pu réaliser des simulations de plus d'une seconde (correspondant à une vingtaine de battements), ce qui nous permet une évaluation fiable de la vitesse de transport du mucus dans les différentes conditions.

Chaque système a été simulé en utilisant 1 936 cœurs CPU. On remarque la formation de lignes de flux associées aux battements des cils, et leur organisation dans l'espace conditionnée par la structure des cellules sous-jacentes.

En suivant la dynamique des particules de mucus, l'effet des conditions pathologiques sur l'efficacité du transport sera évalué, pour la première fois à une échelle aussi grande incluant un degré de désordre physiologique dans le placement des cellules et dans l'orientation des battements. ■

IMMOTILE

Une cellule immotile est une cellule qui ne possède pas la capacité de se déplacer activement par elle-même. Contrairement aux cellules mobiles, comme certaines cellules sanguines (par exemple, les globules blancs) ou les cellules de certaines bactéries, les cellules immotiles restent généralement fixes dans leur environnement.

CT8 MODÉLISATION MOLÉCULAIRE APPLIQUÉE À LA BIOLOGIE

L'ÉQUIPE

Gilles FRAPPER (Groupe de recherche Chimie Quantique Appliquée, E4 IC2MP/UMR 7285 Université de Poitiers – CNRS)

Sylvain PITIÉ (Groupe de recherche Chimie Quantique Appliquée, E4 IC2MP/UMR 7285 Université de Poitiers – CNRS)

Julia CONTERAS-GARCIA (CNRS)

Trinidad NOVOA (Laboratoire de Chimie théorique, CNRS – Paris Sorbonne)

Andrea ECHEVERRI (Laboratoire de Chimie théorique, CNRS – Paris Sorbonne)

Prédiction *in silico* de Matériaux sous Pression

LE CONTEXTE. La connaissance de la structure cristalline d'un matériau permet d'évaluer à l'aide de calculs quantiques diverses propriétés physico-chimiques telles que la conduction électrique, la supraconductivité et le comportement mécanique. Encore faut-il avoir accès à ces données structurales : forme et volume de la maille, positions des atomes. Notre approche couplant algorithme évolutionnaire et calculs quantiques permet d'accéder à ces structures cristallines (méta)stables...

20 millions d'heures*.

* +10 millions d'heures jusqu'à décembre 2023

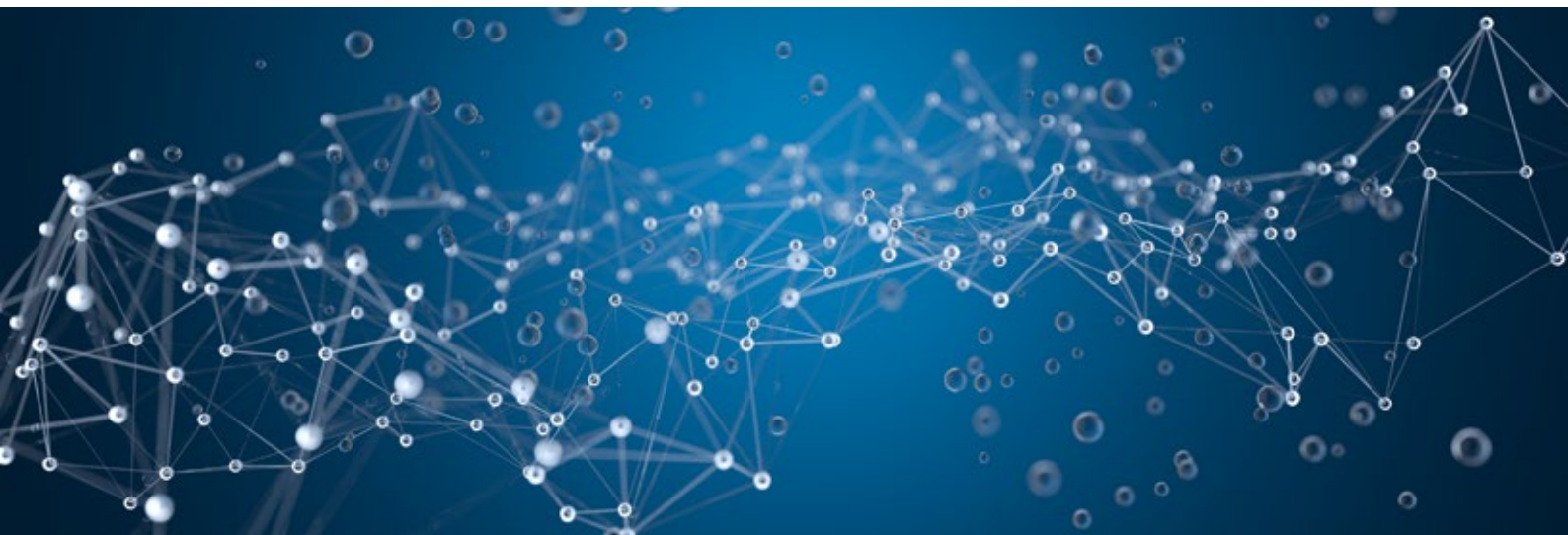


La connaissance de la structure cristalline permet d'évaluer à l'aide de calculs quantiques diverses propriétés physico-chimiques d'un matériau telles que le comportement mécanique, la conduction électrique, la supraconductivité. Lorsque le matériau est disponible, ces données structurales sont déterminées par des approches relevant de la cristallographie.

Or, certains cristaux sont inaccessibles : matière composant une exoplanète ou le manteau de la Terre, composés de l'état solide à faible cristallinité, etc. Comment contourner cet apparent obstacle à la connaissance des structures atomiques ? Une voie d'accès est ouverte par la mise en œuvre d'algorithmes de prédiction de la structure

+ de 300 000

Structures cristallines optimisées par calculs quantiques à l'aide de la machine Joliot-Curie du TGCC.



cristalline couplés à des calculs quantiques. Ces simulations numériques exigent des moyens de calculs conséquents pour résoudre l'équation de Schrödinger dans le formalisme de la fonctionnelle de la densité appliquée aux systèmes périodiques. Des algorithmes évolutionnaires (génétiques) sont employés pour la recherche de la structure la plus stable thermodynamiquement d'un composé chimique.

De génération en génération, les « meilleurs » motifs chimiques, présentant des liaisons stables entre atomes du cristal, sont rapidement identifiés. Par cette approche auto-apprenante, le minimum global d'énergie est atteint à la suite de l'optimisation structurale de 1 000 à 3 000 structures cristallines au lieu des milliards de structures potentielles.

MISE EN ŒUVRE D'UN ALGORITHME ÉVOLUTIONNAIRE

Cette métaheuristique permet de balayer – efficacement – le paysage énergétique

défini selon l'enthalpie et les $3N+3$ coordonnées. Il est identifié alors sur cette (hyper) surface d'énergie potentielle plusieurs minima locaux.

La structure la plus stable parmi ces polymorphes est le composé thermodynamiquement stable à (P, T) données. En modifiant la pression externe, la surface d'énergie potentielle change : des puits profonds deviennent moins profonds, certains disparaissent (structures instables), tandis que d'autres surgissent (autre forme structurale) : la matière se réorganise, de nouvelles liaisons chimiques s'établissent. Aussi, le paramètre pression (P) autorise l'émergence de nouvelles structures cristallines, voire de nouvelles compositions qui défient les règles élaborées pour la « Chimie à 1 atmosphère », à la surface de la Terre.

Par la mise en œuvre d'un algorithme évolutionnaire couplé à des calculs DFT, il est donc possible de localiser la forme structurale la plus basse en énergie (minimum

THÉORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITÉ

Méthode de calcul quantique permettant l'étude de la structure électronique, donc de la structure cristalline.

ALGORITHME ÉVOLUTIONNAIRE (GÉNÉTIQUE)

Il utilise la notion de sélection naturelle et l'applique à une population de solutions potentielles au problème donné pour obtenir une solution approchée à un problème d'optimisation.

« Connaître la structure chimique, les propriétés suivront ! »

L'objectif de notre projet Grand Challenge est le design de nouveaux matériaux pour le stockage de l'énergie. L'enjeu est de prédire de nouvelles compositions chimiques et phases cristallines en utilisant la pression comme paramètre externe.

SYSTÈMES DE TERNAIRES D'HYDRURES

Ils se réfèrent à des systèmes chimiques composés de trois composants, dont au moins un est un hydrure. Ces systèmes sont souvent étudiés dans le contexte des matériaux hydrogénés, tels que les hydrures métalliques ou les hydrures de composés intermétalliques.

global) sur la surface d'énergie potentielle, mais également les formes métastables (Cf Schéma 1).

L'objectif de notre projet Grand Challenge est le design de nouveaux matériaux pour le stockage de l'énergie. L'enjeu est de prédire de nouvelles compositions chimiques et phases cristallines en utilisant la pression comme paramètre externe. Trois objectifs ont été fixés...

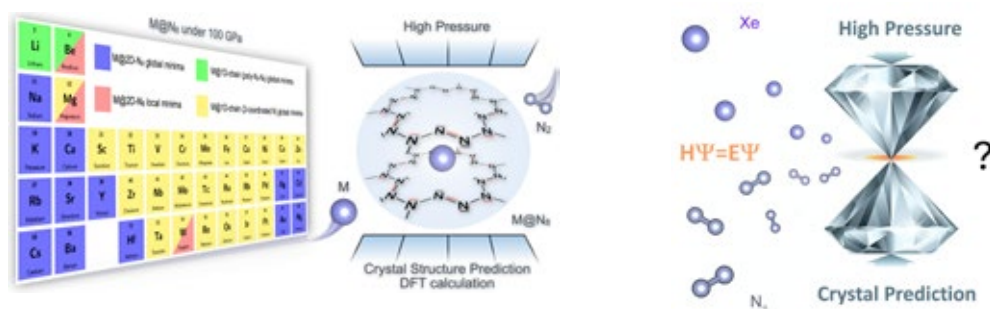
PREMIER OBJECTIF

Il consiste à **élaborer une banque de données de phases hautes pressions**, projet HP_MAT. L'étude *in silico* de 45 % des 80 éléments sélectionnés a été réalisée. Dans une gamme de pression entre 0 et 200 GPa, les phases stables ont été déterminées, puis les séquences de transition de phase. Lorsque le projet HP_MAT sera complété, les informations énergétiques et structurales seront mises à la disposition de la communauté académique via un site collaboratif. De même, plusieurs diagrammes de phases binaires ont été explorés, en particulier de la famille A – N (A, élément du bloc).

DEUXIÈME OBJECTIF

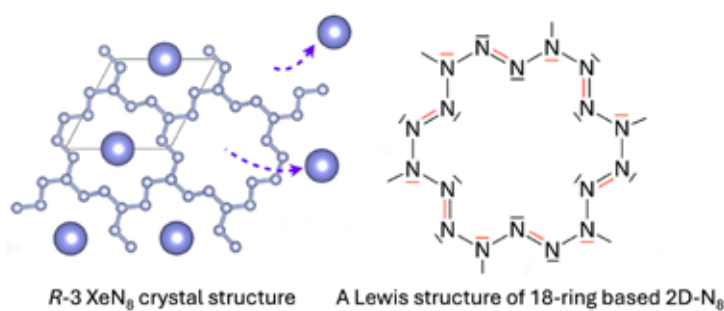
Il s'agissait de l'exploration intensive de **systèmes ternaires d'hydrures** sous

pression (ANR Hydroptère). Dans cette famille de composés hydrures, nous avons identifié plusieurs composés riches en hydrogène, certains pouvant être métastables à pression ambiante donc prometteurs pour le stockage d'H₂. Pour illustration, le diagramme ternaire Mg-Ti-H a été exploré à 0, 10, 25, 50 et 100 GPa. À 50 GPa, sept nouvelles compositions riches en hydrogène ont été prédites dans la zone MgH₂-TiH₂-H₂. Leur viabilité aux conditions standards (1 atm, 25°C) a été étudiée par des calculs DFT de dynamique moléculaire, des tenseurs élastiques, des phonons... Une collaboration avec le groupe de la Dr Contreras-Garcia dans le cadre de l'ANR T_cPredictor nous a permis d'identifier quelques composés A-B-H à haute pression présentant une température critique T_c proche de l'ambiante. Cependant, pour améliorer l'évaluation de la T_c par ce modèle T_cEstime basé sur le Machine Learning et la fonction de localisation électronique (ELF), il nous a paru nécessaire d'élargir la banque de données nécessaire à l'apprentissage-machine de T_cEstime. Pour ce faire, nous avons réalisé des calculs DFT de la T_c de plusieurs dizaines d'hydrures ternaires, exercice très coûteux en temps de calculs.



À gauche
Prédiction in silico de composés $M@2D-N_8$ sous haute pression.

À droite
Polymérisation du diazote associé à un élément (ici le Xénon) sous l'effet de la pression : quels composés seront obtenus ?



Structure cristalline du composé XeN_8 à 100 GPa (gauche) et structure de Lewis de l'allotrope d'azote $2D-N_8$ (droite).

TROISIÈME OBJECTIF

Ce dernier concerne la prédiction de matériaux à haute densité d'énergie contenant des entités polyazotées.

Ces espèces hautement énergétiques ont la particularité de se décomposer en molécules de diazote à la suite d'un choc mécanique, voire thermique. La pression autorise la polymérisation de l'azote en entités polyazotées.

Lors de ce Grand Challenge, nous avons étendu nos explorations de diagrammes de phase A-N (A, élément chimique) aux systèmes Xe-N et Pb-N dans une gamme de pression de 0 à 100 GPa. Ces travaux ont abouti à la proposition d'un nouvel **allotrope** de l'azote à 100 GPa, nommé $2D-N_8$, matériau présentant une structure en feuillet où la charpente azotée bidimensionnelle présente des cycles de type éther-couronne *18-crown-6* avec des pores de 5 Å (Figure 1). La viabilité de cette nouvelle forme allotropique a

été établie par l'étude de ses stabilités par simulations numériques DFT : stabilité thermodynamique (évaluation de l'énergie), stabilité dynamique (calculs des phonons), stabilité cinétique (dynamique moléculaire DFT NVT sur un temps de 10 ps).

Ces investigations exigent un accès à des ressources computationnelles conséquentes, ici de l'ordre d'un million d'heures pour cette seule étude. Finalement, la complexation de cations métalliques par les paires libres localisées sur les atomes d'azote de la couronne N_{18} a été envisagée via des études DFT. Nous avons identifié seize compositions $M@2D-N_8$ sous haute pression dont treize composés conservent leur stabilité dynamique – minima locaux – à pression ambiante. Le fait marquant est que la température de décomposition passe de 600 K pour $2D-N_8$ à 800 K pour $K@2D-N_8$, illustrant l'effet stabilisateur d'un cation coordonné au cycle azoté. ■

ALLOTROPE

Forme différente d'un même élément chimique, qui se distingue par sa structure atomique ou moléculaire. Les allotropes peuvent avoir des propriétés physiques et chimiques très variées, même s'ils sont constitués des mêmes atomes (exemples : le graphite ou le diamant pour le carbone).

RÉPERTOIRE DES PROJETS SCIENTIFIQUES

CT1

ENVIRONNEMENT

- > ORCINUS, une simulation numérique de l'océan global à très haute résolution
- > Méthodes Lattice Boltzmann, pour l'énergie éolienne

CT2a

ÉCOULEMENTS NON RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES

- > Simulation URANS du compresseur transsonique ENOVAL 360°
- > DNS de turbulence de paroi supersonique : objectif haut Reynolds
- > Simulation massivement parallèle de sillages d'éoliennes en mer

CT2b

ÉCOULEMENTS RÉACTIFS & MULTIPHASIQUES

- > Simulation haute-fidélité de l'atomisation assistée dans les moteurs fusée
- > Simulation de l'atomisation primaire d'un injecteur de carburant aéronautique
- > Modélisation et conception de moteurs à turbine à gaz compacts pour l'avenir
- > Caractérisation du transfert de masse dans un modèle de poche métallurgique
- > Simulation de stockage de CO₂ dans des structures géologiques

CT3

BIOLOGIE & SANTÉ

- > *In-Silico Quantum Mechanics Wet Lab experience*

CT4

GÉOPHYSIQUE ET ASTROPHYSIQUE

- > Imagerie géophysique haute résolution avec le solveur MUMPS
- > Vers une nouvelle ère pour l'imagerie de la croûte terrestre

CT5

PHYSIQUE THÉORIQUE & PHYSIQUE DES PLASMAS

- > Une approche plasma pour l'étude de la QED en champ fort

CT6

INFORMATIQUE ALGORITHMIQUE & MATHÉMATIQUES

- > Modélisation d'ondes avec une méthode HDG d'ordre élevé

CT7

MODÉLISATION MOLÉCULAIRE APPLIQUÉE À LA BIOLOGIE

- > Les bases moléculaires de la neurotransmission
- > Dynamique moléculaire des canaux calciques Cav3.1 et des mutants pathogènes
- > Simulations de la clairance mucociliaire et l'effet des pathologies

CT8

MODÉLISATION MOLÉCULAIRE APPLIQUÉE À LA BIOLOGIE

- > Prédiction *in silico* de Matériaux sous Pression

CT9

PHYSIQUE, CHIMIE & PROPRIÉTÉ DES MATÉRIAUX

- > *In-Silico Quantum Mechanics Wet Lab experience*

Un grand merci aux contributeurs, aux rédacteurs et aux chercheurs pour le temps et l'énergie que vous avez consacré à la réalisation de ce nouveau numéro des Grands Challenges, qui illustre notre offre scalaire.

Un grand merci également à l'ensemble de la communauté du calcul haute performance : les résultats de ces Grands Challenges soulignent aussi l'importance de leur engagement dans la réussite de l'approche de GENCI.

Directeur de la publication : Philippe LAVOCAT - **Coordination** : Nicolas BELOT ; Annabel TRUONG - **Conception & réalisation** : avec des mots - **Couverture** : G. Cannat/CINES ; CEA/CADAM - **Photos & illustrations** : A. Albert ; Anciaux-Sedkrian/CINES ; P. Aroyo ; S. Corde ; DR ; J.-L. Estivalzes ; F. Faucher ; G. Frapper ; G. Gerolymos ; T. Guignon ; iStock ; Z. Maarek ; L. Métivier ; Perez-Aroyo ; T. Guignon - **Impression** : Quarante-Six - **GENCI** - 6, bis rue Auguste Vitu 75015 Paris / France - Tél. : +33 1 42 50 04 15 ©GENCI - novembre 2024.



GENCI
6 bis, rue Auguste Vitu - 75015 Paris - France
Tél. : +33 1 42 50 04 15
www.genci.fr



Suivez GENCI

