

www.idris.fr

GRANDS CHALLENGES

GENCI - IDRIS 2012



GRANDS CHALLENGES

GENCI - IDRIS 2012

SOMMAIRE

	Avant-propos	3
	IDRIS	4
	GENCI	4
	Supercalculateurs Turing et Ada	5
	Grands challenges IDRIS 2012	5
DRAKKAR	— Quantification de la variabilité interannuelle intrinsèque de la circulation océanique	6
Méso-NH	— Impact du transport convectif sur la stratosphère tropicale	10
APAFA	— Étude de la propagation de la flamme inter-injecteurs sur le brûleur expérimental KIAI	12
ECOPREMS	— Étude de la COmbustion PREmélangée en Milieu Stratifié	14
DEUS-PUR	— Dark Energy Universe Simulation: Parallel Universe Run	16
MHDTURB	— Turbulence magnétohydrodynamique dans les disques d'accrétion	18
ZOOMBAH	— Zoomed simulations of Black Hole Accretion	20
GYSELA	— Simulations multi-espèces turbulentes dans les plasmas de Tokamak	22
PrecLQCD	— Calculs de précision sur réseau	24
STABMAT	— De la stabilité de la matière ordinaire : électromagnétisme et différence de masse des quarks u et d	26
SELTRAN	— Surface d'énergie libre de transfert d'acides aminés au travers de membranes	28
LIQSIM	— Simulations de phases liquides par dynamique moléculaire <i>ab initio</i>	30
BIGDFT	— Étude <i>ab initio</i> de la structure et de la cinétique des matériaux d'anode pour les batteries ion-lithium	32

Avec le remplacement des supercalculateurs du centre majeur du CNRS pour le calcul de haute performance (IDRIS) par une nouvelle configuration de plus d'un pétaflops, GENCI termine un premier cycle d'évolution des moyens nationaux de calcul après ceux du CINES en 2008 et du CCRT/TGCC en 2009 et 2012. La politique d'investissement de GENCI dans des moyens de calcul complémentaires mis à la disposition de la recherche scientifique permet à la communauté française du calcul intensif de continuer à bénéficier des moyens nécessaires à son excellence.

Cette brochure présente les travaux des scientifiques de diverses disciplines lauréats des « grands défis scientifiques ». Il s'agissait de mettre à profit les quelques mois séparant la fin de l'installation des nouveaux supercalculateurs de leur ouverture à l'ensemble des utilisateurs pour permettre à ces chercheurs de définir un projet scientifique ambitieux, de porter et mettre au point les applications correspondantes sur les nouveaux calculateurs, puis d'exploiter intensivement celles-ci pendant quelques semaines afin de réaliser des simulations d'envergure exceptionnelle, bénéficiant des nouvelles capacités disponibles et de l'environnement logiciel et matériel qui les accompagnent. Le rôle décisif du calcul intensif dans les avancées de la recherche est une nouvelle fois mis en évidence par les résultats remarquables, parfois des « premières mondiales », obtenus par ces projets, qui concernaient un grand nombre de domaines différents, des sciences de l'environnement à l'astrophysique, de la combustion à la physique des matériaux, de la physique théorique à la chimie.

Nous nous associons donc pour féliciter tous les acteurs de ces succès, tant du côté des équipes de l'IDRIS et d'IBM qui ont réussi, en un temps record, à mettre en service ces deux nouveaux supercalculateurs, que du côté des scientifiques qui ont su saisir l'opportunité exceptionnelle que ces « grands défis » représentaient. De plus, l'expérience acquise de cette manière va contribuer à la préparation des prochaines étapes dans la voie européenne conduisant vers la mise en service, d'ici la fin de la décennie, de supercalculateurs de la classe exaflopique dans le cadre du partenariat PRACE. En attendant, c'est dès aujourd'hui que, sous l'égide de GENCI et du CNRS, ces deux nouveaux supercalculateurs, rendus accessibles dès le 1^{er} janvier 2013 à l'ensemble de la communauté scientifique française, vont permettre à toutes les disciplines scientifiques de réaliser des avancées majeures.

Catherine Rivière
Président-directeur général de GENCI

Philippe Baptiste
*Directeur de l'Institut des sciences de
l'information et de leurs interactions du CNRS*

IDRIS

L'IDRIS (Institut du développement et des ressources en informatique scientifique) est le centre majeur du CNRS pour le calcul numérique intensif de très haute performance. Il participe à la mise en place de ressources informatiques nationales financées par GENCI, au service de la communauté scientifique qui nécessite des moyens informatiques extrêmes.

À la fois centre de ressources informatiques et pôle de compétences en calcul intensif de haute performance, l'IDRIS intervient à deux niveaux :

1. Comme structure de services, par la mise en place et l'exploitation d'un environnement de calcul intensif d'avant-garde, diversifié, polyvalent et évolutif, adapté aux très grands défis scientifiques dans le domaine de la simulation numérique
2. Comme pôle de compétences et d'expertise dans le domaine du calcul de haute performance, de par ses activités de support applicatif sur projets, de formation tant sur les langages scientifiques de programmation que sur les paradigmes de parallélisation d'applications, de veille technologique et de contribution à la construction en cours de l'écosystème européen du calcul intensif, via sa participation aux différents projets PRACE (*the Partnership for Advanced Computing in Europe*).

GENCI

Créé en 2007 par les pouvoirs publics pour placer la France au meilleur niveau européen et international dans le domaine du calcul intensif, GENCI mobilise les principaux acteurs de la Recherche pour faire de la simulation numérique un levier majeur d'excellence scientifique et d'innovation.

GENCI coordonne la mise en place des ressources informatiques nationales en calcul intensif, en étroite collaboration avec les trois centres nationaux : le CINES pour le ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, l'IDRIS pour le CNRS et le TGCC pour le CEA.

GENCI a pour missions de :

- Financer et coordonner la mise en œuvre de la stratégie française d'équipements des trois centres nationaux de calcul intensif pour la recherche civile ;
- Participer pleinement à l'organisation et la réalisation d'un espace européen du calcul intensif pour la recherche. À ce titre, GENCI représente la France au sein de PRACE ;
- Promouvoir la simulation numérique et le calcul intensif auprès des industriels, grands groupes comme PME, et dans la sphère de la recherche fondamentale et technologique.

GENCI est une société civile détenue à 49 % par l'État représenté par le Ministère de la Recherche et l'Enseignement Supérieur, 20 % par le CEA, 20 % par le CNRS, 10 % par les Universités représentées par la Conférence des Présidents d'Université et 1% par Inria.



TURING, machine IBM BLUE GENE/Q



ADA, machine IBM X3750

SUPERCALCULATEURS TURING ET ADA

GENCI, en partenariat avec l'IDRIS, a conduit à partir d'octobre 2011 un appel d'offres pour le remplacement de l'ancienne génération des supercalculateurs exploitée par celui-ci, qui a abouti en mai 2012 à l'acquisition, auprès de la société IBM, de deux supercalculateurs d'architectures complémentaires de nouvelle génération, pour une puissance crête cumulée de 1 PFlop/s. Leur mise en œuvre a commencé au mois de juillet suivant et, après le déroulement de l'ensemble des phases d'installation, de test et de validation, ces machines ont été réceptionnées à la toute fin de l'année 2012 et mises en production au 1^{er} janvier 2013.

Turing (nom donné en l'honneur d'Alan Turing, 1912-1954) est une machine de type Blue Gene / Q constituée de 4 cabinets avec 4 096 processeurs ayant chacun 16 cœurs, soit un total de 65 536 cœurs de calcul. Sa puissance crête cumulée est de 836 TFlop/s, ce qui la classe actuellement au 31^e rang du classement mondial des supercalculateurs, dit Top 500, et au 20^e rang du classement Green 500 qui prend en compte le rapport performance / consommation électrique. Chaque cœur disposant de 1 Go, la mémoire totale accessible est de 65 To.

Ada (nom donné en l'honneur d'Ada Lovelace, 1815-1852) est une machine de type x3750 constituée de 332 nœuds de 4 processeurs Intel Sandy Bridge octo-cœurs, soit 32 cœurs par nœud pour une configuration totale de 10 624 cœurs de calcul. Sa puissance crête cumulée est de 230 TFlop/s, ce qui la classe actuellement au 123^e rang du classement Top 500. La mémoire totale accessible est de 46 To, 304 nœuds disposant de 128 Go de mémoire partagée et les 28 autres nœuds de 256 Go.

Dans la configuration de ces deux calculateurs, sont intégrés 2,2 Po de disques partagés entre eux deux ainsi que quatre nœuds de 32 cœurs Intel Westmere disposant chacun de 1 To de mémoire partagée, dédiés aux tâches de pré et post-traitements des deux supercalculateurs.

GRANDS CHALLENGES IDRIS 2012

Comme il est d'usage, la période de préparation à la mise en production de nouveaux supercalculateurs est propice à l'attribution de ressources importantes à quelques projets particuliers pour leur permettre de réaliser des simulations de très grandes tailles sur tout ou partie des nouvelles configurations. Ces allocations exceptionnelles ont pour but de concourir à des avancées scientifiques significatives dans diverses disciplines, ce pour quoi on les baptise Grands challenges scientifiques. Treize projets ont ainsi été sélectionnés à l'automne 2012 pour les Grands challenges IDRIS sur ses nouveaux supercalculateurs, neuf sur la machine Blue Gene / Q Turing et quatre sur la machine généraliste Ada. Ils ont concernés la plupart des disciplines scientifiques utilisatrices de la simulation numérique : sciences de l'environnement, combustion, astrophysique, physique théorique, fusion, chimie, physique des matériaux, certaines de ces simulations ayant permis des avancées majeures dans leurs domaines respectifs.

La journée du 27 mars 2013, organisée dans les locaux de l'IDRIS à Orsay, a permis une présentation de la plupart de ces projets et des résultats issus des premières analyses des simulations effectuées, ceci devant un large auditoire représentatif de tous les domaines de la recherche.

DRAKKAR

Quantification de la variabilité interannuelle intrinsèque de la circulation océanique

1. INTRODUCTION

DRAKKAR est un projet de coordination scientifique et technique entre des équipes du CNRS et du centre opérationnel MERCATOR-océan, avec des collaborations étroites au Royaume Uni, en Allemagne et au Canada. DRAKKAR conçoit, réalise, évalue et distribue des simulations numériques de l'océan global et de la banquise (sur la base du code NEMO) à très haute résolution, couvrant de longues périodes (50 ans et plus).

Cet effort répond au besoin de disposer de simulations physiquement cohérentes et réalistes de l'état de l'océan et de sa variabilité sur les dernières décennies afin de répondre à des questions fondamentales sur les mécanismes générateurs de la variabilité interannuelle à décennale de l'océan ou l'impact des courants de bord et des processus de fine échelle sur la circulation de grande échelle et sa variabilité, etc. Cet effort répond également à la nécessité d'accroître la résolution pour résoudre explicitement une plus grande variété de processus et améliorer les paramétrisations des configurations de modèles d'océan utilisés par les communautés de l'opérationnel et du climat.

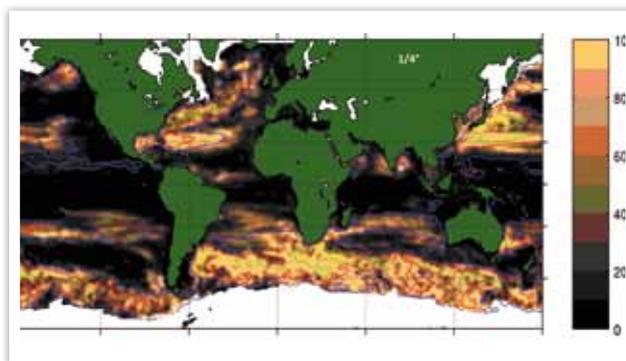
2. VARIABILITÉ BASSE FRÉQUENCE DE LA CIRCULATION OCÉANIQUE

Au cours des Grands challenges scientifiques GENCI 2008, le groupe DRAKKAR a réalisé au CINES une simulation de la dynamique océanique de plus de 300 ans qui a permis d'étudier le rôle de la turbulence océanique de méso-échelle sur la variabilité basse fréquence de l'océan global. Cette simulation de résolution horizontale de $1/4^\circ$ (de ~ 10 km à ~ 25 km selon la latitude) utilisait un forçage atmosphérique dit climatologique (c.-à-d. un cycle saisonnier répété année après année), de sorte que la variabilité océanique basse fréquence (interannuelle à décennale) ne pouvait être générée que par la dynamique océanique (d'où sa dénomination de variabilité intrinsèque).

Cette simulation, combinée avec celles forcées par une atmosphère variable inter-annuellement réalisées par ailleurs, a montré que les processus océaniques turbulents de petite échelle (~ 10 à 200 km) contribuent aux variations interannuelles des niveaux de mer et a donné pour la première fois une estimation de l'ampleur de cette contribution (▼ **Figure 1**) dans l'océan réel, ce type de phénomène ayant été le plus souvent étudiés en termes de processus dans des contextes très idéalisés.

Une part importante de la variabilité interannuelle du niveau des mers est donc chaotique et générée par l'océan, sans forçage direct par l'atmosphère. Cette part peut égaler voire largement dépasser la variabilité forcée directement par l'atmosphère (jusqu'à 70 % en moyenne dans l'océan Austral).

Ces résultats plaident en faveur d'une représentation explicite des fines échelles océaniques dans les systèmes de prévision climatique et soulèvent des questions quant à la prévisibilité des courants océaniques.



▲ **Figure 1** : La palette de couleurs indique le pourcentage de variance interannuelle du niveau des mers attribuable aux processus océaniques intrinsèques, tels qu'estimés par l'analyse de la simulation réalisée lors de notre participation aux « Grands challenges scientifiques » de 2008. Les zones blanches indiquent l'extension maximale de la banquise. Cette figure est extraite d'une de nos publications dans le Journal of Climate (Penduff et al. 2011).

Jean-Marc Molines, Bernard Barnier, Albanne Lecointre, Thierry Penduff et Raphael Dussin
Équipe de Modélisation des Écoulements Océaniques Multiéchelles
Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement, UMR 5183 (CNRS / UJF), Grenoble

Pascal Voury et Philippe Collinet
Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique, UPS 851 (CNRS), Orsay

3. LE PROJET PROPOSÉ AUX GRANDS CHALLENGES GENCI EN 2012

Si les simulations réalisées en 2008 ont montré que la turbulence océanique de méso-échelle génère des fluctuations de basses fréquences dans l'océan, elles n'ont pas permis de quantifier avec précision la part de cette variabilité intrinsèque dans la variabilité océanique. Ceci est dû à la résolution de $1/4^\circ$ utilisée alors dont la grille de calcul (~ 25 km à l'équateur et ~ 9 km le long du continent Antarctique) ne permet pas de résoudre toutes les échelles dynamiques impliquées dans la turbulence de méso-échelle, en particulier aux hautes latitudes, régions où se concentre une part importante de l'incertitude quant à l'évolution du système climatique.

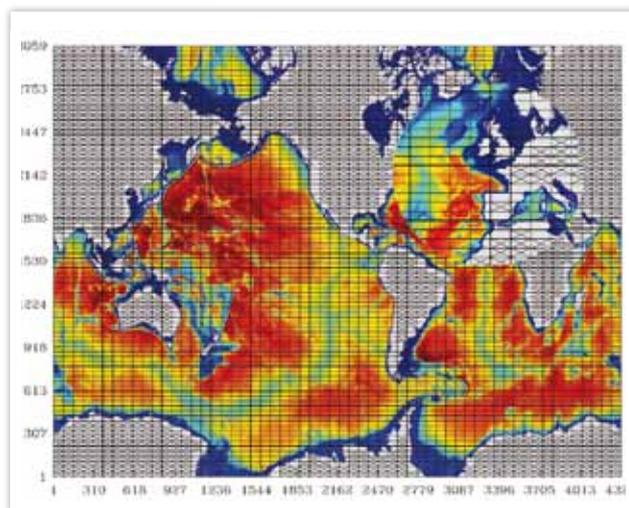
Au cours des 3 dernières années, le groupe DRAKKAR a implémenté une nouvelle configuration globale du modèle NEMO à la résolution horizontale de $1/12^\circ$. Cette configuration, appelée ORCA12, utilise une grille de calcul dont le pas varie de 9 km à l'équateur à moins de 3 km le long du continent Antarctique, ce qui représente, avec 46 niveaux verticaux, un peu plus de 600 millions de points de calcul (soit 9 fois plus que dans les modèles précédents, et un coût de calcul environ 30 fois supérieur car le pas de temps est 3 fois plus petit).

ORCA12 a été développé pour quantifier plus finement l'impact de la turbulence océanique de méso-échelle sur la variabilité de l'océan. À cette résolution, les niveaux d'énergie simulés par le modèle se comparent bien aux observations spatiales.

Pour les Grands challenges GENCI 2013, nous avons proposé de réaliser une expérience longue d'environ 100 ans à forçage climatologique (dans une stratégie comparable au challenge de 2008) mais cette fois au moyen de la configuration ORCA12 afin de mieux résoudre la turbulence océanique de méso-échelle, et ainsi de pouvoir développer une approche plus quantitative.

4. LA SIMULATION RÉALISÉE AUX GRANDS CHALLENGES GENCI EN 2012

Le code et le paradigme de programmation : la configuration ORCA12 utilisée est basée sur la version 3.4 du modèle de circulation océanique NEMO (Madec, 2008). Le domaine global est discrétisé par un maillage tri-polaire de $4322 \times 3059 \times 46$ points de calcul ; il est découpé en 3 584 sous-domaines océaniques (▼ Figure 2), chaque sous-domaine étant associé à une tâche MPI, sur un cœur de calcul de la machine Ada. Les domaines adjacents possèdent une zone de recouvrement de 2 points de grille pour l'implémentation des schémas numériques. La synchronisation des calculs entre les différents domaines est assurée par échange explicite de messages via la bibliothèque MPI.



▲ Figure 2 : Découpage du domaine de calcul de la configuration ORCA12 en 3 584 sous-domaines pour le calcul sur Ada de l'IDRIS (avec un effet de loupe sur l'Europe). Cette configuration résulte d'études d'extensibilité où nous avons parcouru un espace allant de 500 à 8 000 cœurs. Le choix de 3 584 cœurs est un compromis raisonnable entre le besoin de retour rapide d'expérience (temps « elapsed » de simulations) et le coût « cpu » du calcul. Les abscisses et ordonnées indiquent les indices des points de calcul. La couleur représente la topographie sous-marine du modèle et le gris les continents. Les processeurs marqués d'une croix ne contiennent pas de point « océan » et sont dits « processeurs terre ». Ils ne sont pas considérés lors du calcul (gain voisin de 25 %). Chaque sous-domaine correspond à un pavé d'océan de $77 \times 38 \times 46$ points de grille.

DRAKKAR

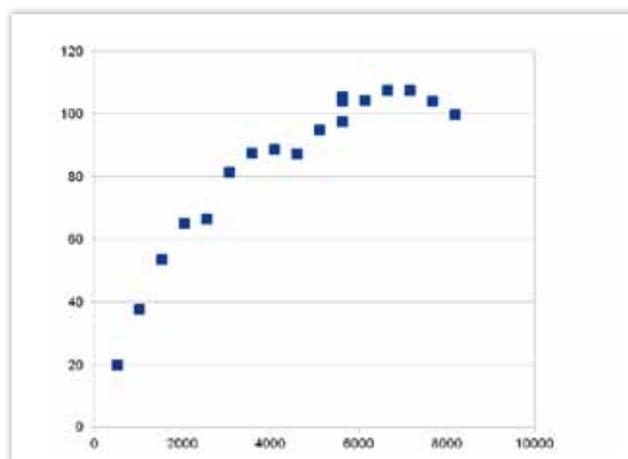
Quantification de la variabilité interannuelle intrinsèque de la circulation océanique

Les performances obtenues : une étude d'extensibilité réalisée pour des découpages variant entre 512 et 8 064 cœurs montre (► **Figure 3**) un comportement satisfaisant jusque vers 4 000 cœurs. Nous avons retenu 3 584 cœurs (112 nœuds de 32 cœurs) pour la réalisation de ce calcul. Avec ce découpage, et en mode de production stable (sorties mensuelles), une année de simulation prend 12 h 35 mn (temps écoulé). Cependant nous avons augmenté la fréquence des sorties pour les 10 dernières années de simulation (sorties tous les 5 jours) et sous cette seule contrainte additionnelle, le temps écoulé pour 1 an de simulation a été augmenté de 2 h environ, soit 15 %. Dans la prochaine version de NEMO, le système d'I/O permettra le recouvrement des opérations d'I/O et du calcul ce qui rendra pratiquement négligeable leur surcoût. À noter également que nous n'avons pas pu tester des stratégies de placement optimal des tâches sur les cœurs, stratégie qui sur la machine JADE du CINES permet une augmentation très significative (de 30 à 40 %) des performances.

5. CONCLUSION

Avec les 5 millions d'heures attribuées pour le grand challenge nous avons pu réaliser, en plus des études d'extensibilité et de mise au point, 85 ans de simulations. Le groupe a l'intention de poursuivre cette expérience jusqu'à 100 ans sur les attributions régulières GENCI. Au moment où nous rédigeons cette note, nous venons juste de transférer la base de données engendrée (53 To) sur l'espace de stockage du groupe DRAKKAR et la phase d'exploitation des résultats

va commencer. Les résultats préliminaires procurés par le monitoring « quasi-temps réel » de l'expérience montrent que, comme attendu, la variabilité basse fréquence de la circulation est significative malgré un forçage atmosphérique constant, ceci même sur des quantités intégrées ayant une importance climatique forte (► **Figure 4**).



▲ **Figure 3** : Expérience d'extensibilité avec la configuration ORCA12 sur Ada. En abscisse, le nombre de cœurs utilisés, en ordonnée, la performance du modèle exprimée en nombre de pas de temps par minutes. L'extensibilité est excellente jusqu'à 2 000 cœurs, acceptable jusqu'à 4 000 et se dégrade complètement au-delà de 6 000 cœurs.



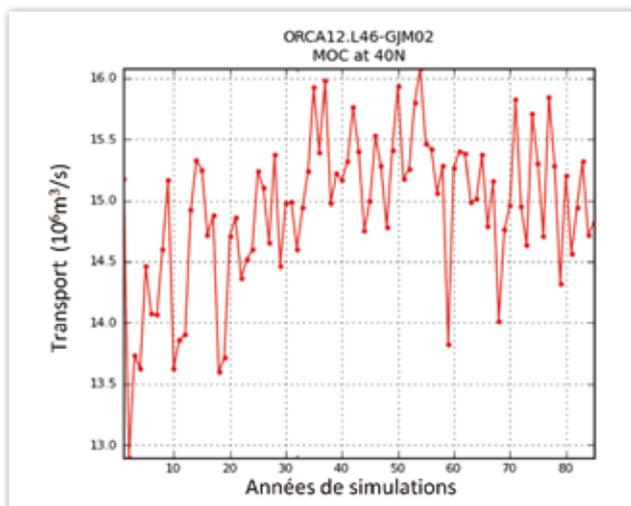
Une partie de l'équipe du LGGE, avec de gauche à droite, Thierry Penduff, CR CNRS, Jean Marc Molines, IR CNRS, Raphael Dussin, IR CDD et Bernard Barnier, DR CNRS.

Cette simulation vient compléter les simulations plus courtes (~50 à 60 ans) et de forçage interannuel (i.e. variant année après année) réalisées dans le cadre de la demande GENCI du groupe DRAKKAR. Cet ensemble de simulations est unique par la cohérence, la longueur et la résolution des

simulations. Il place nos équipes à la pointe des études portant sur la compréhension et la quantification de la variabilité des océans.

6. REMERCIEMENTS

Le projet DRAKKAR a bénéficié du soutien du CNRS-INSU et du CNES, des programmes GMMC et LEFE-IDAO, du projet européen MyOcean et des moyens de calcul GENCI du CINES et de l'IDRIS. Les auteurs remercient A.-M. Tréguier du LPO, coordinatrice de DRAKKAR, J. Le Sommer du LGGE, G. Madec du LOCEAN et R. Bourdallé-Badie de Mercator Océan pour leur participation. Notre équipe remercie tout particulièrement le personnel de l'IDRIS pour son soutien au cours du projet.



▲ **Figure 4** : Variations interannuelles de l'amplitude de la cellule de circulation méridienne de l'océan global à 40° N. Cette quantité représente en quelque sorte le volume d'eau de surface (donc transportant de la chaleur) allant vers le nord à cette latitude. On observe une croissance régulière sur les 40 premières années suivie d'une relative stabilisation indiquant un début de convergence vers un état d'équilibre autour de $15 \times 10^6 \text{ m}^3/\text{s}$. La simulation est cependant trop courte pour que cet équilibre apparent soit significatif. L'intégration spatiale relative au calcul de cette quantité a tendance à lisser la variabilité. Néanmoins, ce transport montre des variations pluriannuelles de forte amplitudes (de 1 à $2 \times 10^6 \text{ m}^3/\text{s}$) qui dans le cas présent sont engendrées par les non linéarités de la circulation océanique.

Méso-NH

Impact du transport convectif sur la stratosphère tropicale

Jean-Pierre CHABOUREAU,
Juan ESCOBAR, Patrick MASCART
Laboratoire d'Aérodologie (Université de Toulouse et CNRS)

L'impact de la convection sur les échanges à l'interface troposphère-stratosphère a longtemps été considéré comme négligeable, les orages n'atteignant que rarement des hauteurs supérieures à 18 km. C'est cette absence supposée de transferts d'eau et de constituants chimiques que simulent les modèles existants de climat qui discrétisent l'atmosphère avec des mailles de quelques 100 km. Mais aucun de ces modèles n'est capable d'expliquer les tendances de vapeur d'eau stratosphérique mesurées entre les années 1950 et 2000, limitant notre capacité à prévoir la composition de l'ozone dans le climat futur.

Pourtant, des particules glacées et des poches d'air humide ont été observées autour de systèmes convectifs dans la basse stratosphère tropicale au Brésil, en Afrique de l'ouest et en Australie. Des études numériques associées réalisées avec des modèles plus détaillés avec des mailles kilométriques ont montré que la convection tropicale pouvait dépasser la tropopause locale et pénétrer la basse stratosphère jusqu'à 20 km d'altitude (Chaboureau et al. 2007). L'importance du transport par la convection profonde sur la composition de l'air de la haute troposphère et la basse stratosphère reste néanmoins une question ouverte et très débattue.

Jusqu'à présent, les quelques simulations numériques d'orages intenses atteignant la basse stratosphère tropicale ont été réalisées le plus souvent avec des mailles kilométriques. Si ces résolutions permettent une représentation explicite des circulations à l'intérieur des nuages, leur représentation reste insuffisamment résolue. Aussi le transport convectif estimé à partir de ces simulations reste incertain. L'objectif de ce projet Grand challenge sur Turing était d'explorer l'impact du transport convectif sur la vapeur d'eau stratosphérique dans les tropiques par simulation numérique et sa sensibilité à la résolution horizontale. La maille la plus fine atteinte pour

ce Grand challenge est la maille cubique de 100 m, ce qui en fait une première mondiale pour simuler explicitement le transport convectif et la turbulence associée d'un orage atteignant la basse stratosphère.

Le modèle météorologique utilisé est le code communautaire Méso-NH développé conjointement par le Laboratoire d'Aérodologie et le CNRM-GAME. Porté sur l'ensemble des supercalculateurs du GENCI, ce code est écrit en Fortran 90 et utilise MPI. L'extensibilité du code a été montrée jusqu'à 130 000 cœurs (Pantillon et al. 2011). Pour Turing, le temps de communication pour les entrées-sorties a été amélioré d'un facteur 20 par l'emploi de la bibliothèque Global Array. La configuration choisie pour la simulation de maille cubique de 100 m est une grille de 2560 x 2048 points et 256 niveaux (1,34 milliard de points). Cette simulation a été réalisée sur un des quatre cabinets de Turing, mobilisant ainsi 16 384 cœurs. La simulation de 10 h temps réel a consommé plus de 8 millions d'heures de calcul et a généré un volume de 20 To de données.

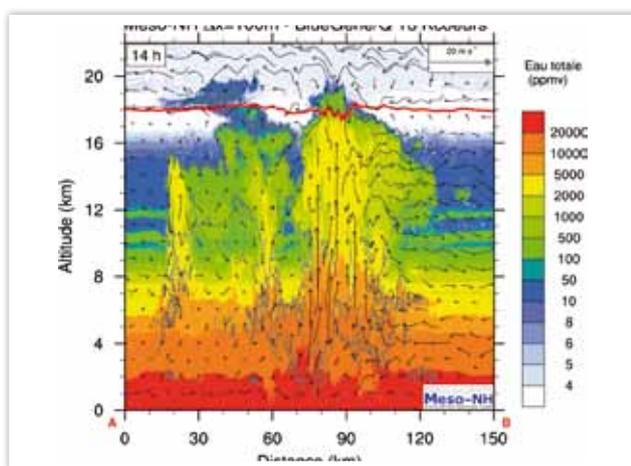
L'orage étudié est Hector, un orage qui se développe quotidiennement en période de pré-mousson sur les îles Tiwi au nord de l'Australie. Dans le cadre de la campagne internationale SCOUT-03, un panache convectif traversant la tropopause a été observé au-dessus d'Hector par lidar embarqué sur l'avion stratosphérique Geophysica volant à plus de 18 km d'altitude. Une série de simulations Méso-NH ont été réalisées avec des mailles de 800, 400, 200 et 100 m. Elles ont toutes simulé avec succès l'épisode orageux dans son entier, de sa genèse à sa dissipation.

La **Figure 1** montre une coupe verticale à 14 h à travers Hector pendant sa phase la plus intense dans la simulation à maille de 100 m. À gauche, la cellule orageuse se dissipe laissant une poche humide dans la stratosphère. À droite, la cellule est totalement développée verticalement. Son enveloppe nuageuse atteint la tropopause située à 18 km



Équipe ayant participé au projet :

De gauche à droite : Juan Escobar, Patrick Mascart, Jean-Pierre Chaboureau respectivement ingénieur de recherche au CNRS et physiciens des observatoires au Laboratoire d'Aérodologie (Université de Toulouse et CNRS).

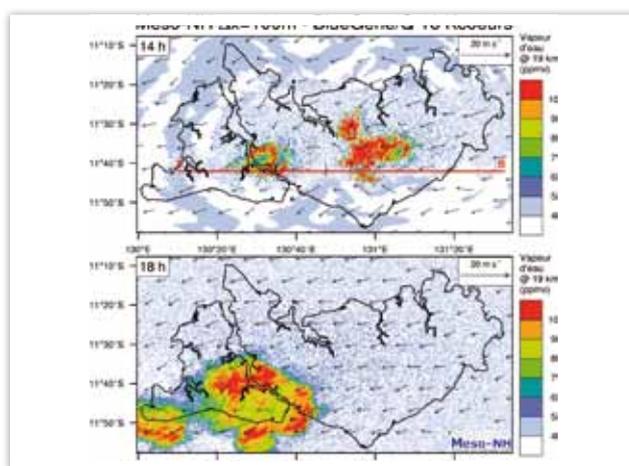


▲ **Figure 1** : Coupe verticale à travers l'orage Hector à 14 h pendant sa phase mature. Le champ coloré représente l'eau totale (vapeur d'eau et eau condensée) et les flèches le vent dans la coupe. La ligne grise montre le contour nuageux et la ligne rouge représente la tropopause, la limite entre troposphère et stratosphère.

et un panache d'eau condensée est injecté au-delà de 20 km d'altitude. Ce panache convectif présente des caractéristiques très similaires à celui observé depuis l'avion stratosphérique.

La ► **Figure 2** montre le contenu en vapeur d'eau à 19 km d'altitude dans la simulation à maille de 100 m. À 14 h, la poche d'air la plus humide est localisée au sommet de la tour convective montrée dans la ▲ **Figure 1**. À 18 h, l'orage s'est terminé et les mouvements turbulents générés par les ascendances convectives se sont dissipés. Dans la basse stratosphère, une poche d'air humide s'est constituée au-dessus d'Hector : le contenu a doublé en quantité. Cette anomalie résiduelle est ensuite transportée vers l'ouest par le vent en altitude. Un orage peut donc contribuer à l'augmentation de la vapeur d'eau dans la basse stratosphère.

Les simulations réalisées à plus basse résolution montre une augmentation du contenu en vapeur d'eau sensiblement égale à celle obtenue par la simulation à maille de 100 m. Ces résultats robustes à la taille de la maille confortent le mécanisme d'hydratation de la basse stratosphère par les orages tropicaux. Ces processus de petite échelle pourraient avoir un impact à grande échelle. La simulation d'autres orages dans des environnements météorologiques contrastés reste encore à étudier pour apprécier l'importance de l'impact du transport convectif à l'échelle globale.



▲ **Figure 2** : Coupe horizontale à 19 km d'altitude à 14 h et 18 h. Le champ coloré représente la vapeur d'eau injecté par l'orage Hector et les flèches le vent dans la coupe. À 14 h, la ligne rouge A-B localise la coupe verticale de la figure 1.

RÉFÉRENCES

Chaboureau, J.-P., J.-P. Cammas, J. Duron, P. J. Mascart, N. M. Sitnikov, and H.-J. Voessing, 2007: A numerical study of tropical cross-tropopause transport by convective overshoots. *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 1731-1740. Pantillon, F., P. Mascart, J.-P. Chaboureau, C. Lac, J. Escobar, and J. Duron, 2011: Seamless MESO-NH modeling over very large grids. *C. R. Mecanique*, 339, 136-140

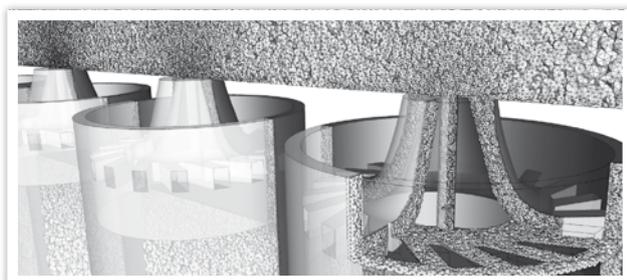
APAFA Étude de la propagation de la flamme inter-injecteurs sur le brûleur expérimental KIAI

D. Barré, L. Esclapez, L. Y. M Gicquel, E. Riber et G. Staffelbach,
CERFACS, Centre Européen en Recherche et de Formation en Calcul Scientifique

1. INTRODUCTION

Les émissions de polluants sont actuellement une des contraintes majeures dans le design des chambres de combustion. Cela implique la réduction de la consommation en carburant et l'augmentation de l'efficacité de la combustion. Cependant, la combustion pauvre est souvent sujette à des instabilités de combustion et des extinctions peuvent avoir lieu au sol ou à hautes altitudes. Une alternative est de diminuer l'émission de polluants par la simple réduction du nombre d'injecteurs. Pour une géométrie de chambre de combustion donnée, cette solution nécessite de larges distances entre les injecteurs consécutifs. Les inconvénients résident dans les impacts possibles sur les performances de réallumage, un point de sécurité essentiel non négligeable. Il doit être assuré que la distance entre injecteurs soit toujours suffisante pour assurer une rapide propagation de la flamme en toute sécurité dans la chambre de combustion, ce qui peut être problématique avec la combinaison d'un régime pauvre et la réduction du nombre d'injecteurs.

Dans ce contexte, l'objectif de cette étude est d'évaluer la capacité de la LES à prédire l'effet discriminatif de la distance inter-injecteurs sur le processus d'allumage. Cette problématique est traitée en comparant les données expérimentales avec les résultats numériques. D'une part, un banc expérimental du CORIA composé de 5 injecteurs est utilisé pour observer la propagation de la flamme, avec une distance inter-injecteurs variable. D'autre part, des simulations numériques du banc expérimental sont réalisées, tout d'abord dans des conditions à froid pour valider l'approche basée sur une comparaison quantitative avec les mesures expérimentales. Assurer un



▲ Figure 1 : Maillage non-structuré du domaine de calcul

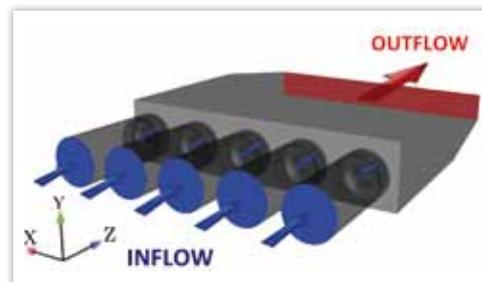
bon accord avec la topologie de l'écoulement obtenu dans l'expérience est le premier pas pour retrouver ces principales caractéristiques déterminantes dans les processus transitoires d'allumage et de propagation. Finalement, la propagation de la flamme entre les injecteurs est ensuite étudiée et comparée à la visualisation rapide de la flamme des données expérimentales.

2. PRÉSENTATION DES PARAMÈTRES NUMÉRIQUES

Conjointement aux études expérimentales, une investigation numérique a été basée sur la Simulation aux Grandes Échelles (LES). Pour ce faire, le code AVBP développé par le CERFACS et IFP-EN a été utilisé. C'est un code massivement parallèle aux volumes finis, compressible et multi-espèces qui résout explicitement les équations de Navier-Stokes sur des maillages hybrides et non-structurés. Il repose sur une méthode de discrétisation cell-vertex et utilise une décomposition caractéristique d'après le formalisme Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition (NSCBC). AVBP est doté de schémas numériques à ordre élevé parmi lesquels le schéma de Taylor-Galerkin du 3^e ordre en espace et en temps est utilisé.

Le but de ces simulations est de confirmer la capacité de la LES à reproduire les séquences d'allumage observées expérimentalement. Le maillage utilisé comporte 38 millions de tétraèdres présentant des zones de raffinement aux niveaux des injecteurs et des branches swirlées avec des tailles caractéristiques de l'ordre de 0,25 mm.

Dans les expériences, l'allumage est réalisé par une étincelle électrique proche d'un mur latéral face au 2^e injecteur à une hauteur $z/D=1,15$ avec D étant le plus grand diamètre des injecteurs. Pour la LES, le modèle de dépôt d'énergie est utilisé pour décrire la phase d'allumage avec l'ajout d'un terme source dans l'équation de l'énergie correspondant à 30 % de l'énergie totale déposée dans l'expérience.



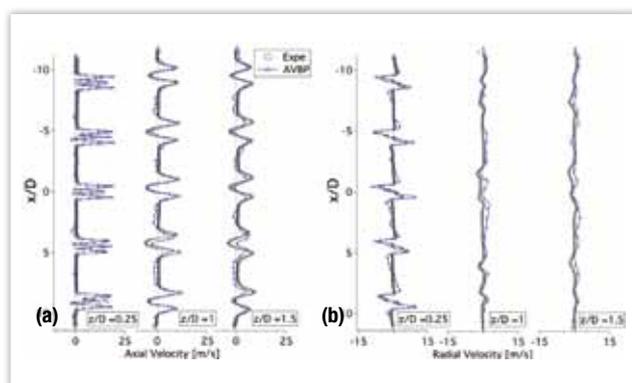
▲ Figure 2 : Configuration du brûleur 5 injecteurs

À cause des coûts prohibitifs que nécessitent les calculs en chimie détaillée et la résolution des petites échelles de turbulence, les simulations demandent une modélisation de la combustion turbulente. Tout d'abord, la chimie est décrite avec le schéma cinétique 2S_CH4_BFER à 2 étapes utilisant la constante pré-exponentielle d'ajustement PEA de façon à ajuster la vitesse de flamme sur une large gamme de richesse [franzelli:2012]. Le brûleur KIAI 5 injecteurs comporte deux types de systèmes d'injection, une centrale par laquelle le méthane est injecté à 0,192 g/s, et une par le plénum, où l'air est injecté à 5 g/s et passe par le swirler entraînant une giration de l'écoulement. Le mélange a une richesse globale de 0,66 et est injecté à température et pression ambiante. La vitesse de flamme laminaire donnée par le schéma cinétique s'élève à $SL=20,28$ cm/s avec une épaisseur de flamme de $L=0,815$ mm.

L'interaction entre la combustion et les échelles de turbulences non résolues est modélisée par le modèle de flamme épaissie (TFLES) [Colin:2000, Legier:2000]. Cette approche épaissit artificiellement le front de flamme par un facteur F pour résoudre la flamme sur le maillage LES, tandis que les interactions entre la combustion et la turbulence de sous-maille sont simplement modélisées avec une fonction d'efficacité [Colin:2000] qui décrit le plissement du front de flamme à l'échelle de sous-maille. Un senseur S construit à partir du taux de réaction permet de déclencher seulement sur la zone réactive le modèle d'épaississement qui est utilisé avec succès aussi bien sur des flammes de prémélange que des flammes partiellement prémélangées [Colin:2000, Angelberger:2000].

3. VALIDATION DE L'ÉCOULEMENT À FROID

La précision des résultats LES est maintenant évaluée en comparant les profils de vitesse moyenne axiale aux données expérimentales sur 3 positions en aval du plan de sortie de l'injection à $z/D=\{0,25; 1; 1,5\}$ où D est le diamètre extérieur des injecteurs. L'ordre de grandeur des vitesses moyennes axiales est globalement satisfaisant comparé aux mesures.

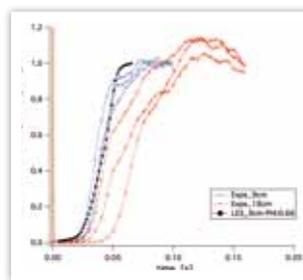


▲ **Figure 3** : Profils de vitesse moyenne axiale (a) et radiale (b) obtenues par la LES et les résultats expérimentaux

4. RÉSULTATS LES DE LA PROPAGATION DE LA FLAMME INTER-INJECTEURS

Un des principaux intérêts de cette étude est de décrire les mécanismes de propagation de la flamme sur la

configuration 5 injecteurs où la distance qui les sépare est relativement faible, permettant un allumage certain et rapide de la chambre complète. Les premiers instants du développement de la flamme sont consistants avec les expériences à partir du moment où le dépôt d'énergie est suffisamment fort pour assurer la survie du noyau. Le noyau de flamme grossit dans la mesure où le mélange environnant est globalement prémélangé. La ▼ **Figure 4** montre une évolution du volume de gaz dans la chambre de combustion qui coïncide avec les cas expérimentaux sur la configuration 5 injecteurs où l'espacement inter-injecteur est de 9 cm. Les cas expérimentaux de la configuration 4 injecteurs avec un espacement de 16 cm y figurent aussi montrant un temps d'allumage complet de la chambre plus long du fait d'un espacement inter-injecteur plus grand. Les ▼ **Figures 5, 6 et 7** mettent en évidence la convection radiale de la flamme, dans un premier temps autour du plus proche injecteur du fait de la rotation des branches swirlées. La flamme se propage ensuite radialement d'injecteur en injecteur, poussée par l'expansion des gaz brûlés. Le scénario d'allumage reste en total accord avec les expérimentations aussi bien sur le temps total d'allumage de la chambre complète que sur l'ordre dans lequel la flamme atteint successivement les différents injecteurs.



▲ **Figure 4** : Évolution temporelle de l'intégrale du signal lumineux



▲ **Figure 5** : Rendu volumique du dégagement de chaleur à $t=22,6$ ms



▲ **Figure 6** : Rendu volumique du dégagement de chaleur à $t=30,9$ ms



▲ **Figure 7** : Rendu volumique du dégagement de chaleur à $t=74,6$ ms

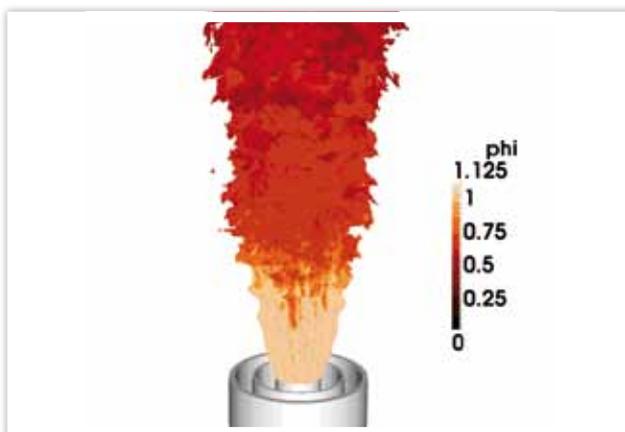
5. CONCLUSION

Cette étude a permis de mettre en valeur la capacité de la LES à reproduire le processus d'allumage et de propagation de la flamme entre différents injecteurs en comparant les données expérimentales avec les résultats numériques. À long terme, l'impact de l'espacement entre les injecteurs sur la propagation de la flamme menant à une réussite ou échec de l'allumage avec différents modes de propagation sera la question à étudier.

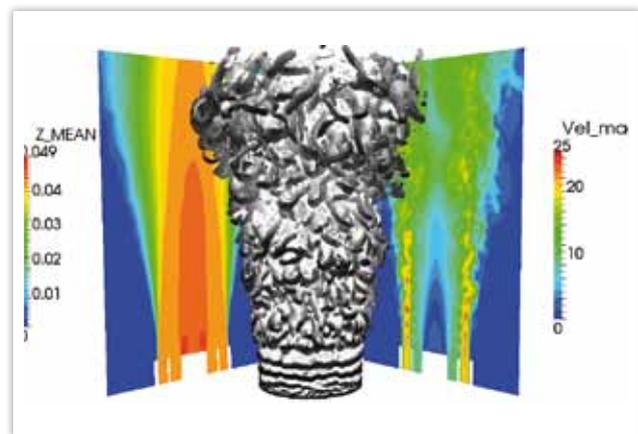
ECOPREMS Étude de la Combustion PREmélangée en Milieu Stratifié

Suresh Nambully, Catherine Gruselle, Ghislain Lartigue, Pascale Domingo, Luc Vervisch, Vincent Moureau - CORIA, CNRS UMR6614, INSA et Université de Rouen, Saint-Étienne-du-Rouvray

La combustion est un phénomène physico-chimique de conversion d'énergie dans lequel un combustible et un comburant réagissent en dégageant une grande quantité de chaleur. Lorsque le combustible et le comburant sont parfaitement mélangés avant de réagir, on parle de combustion prémélangée. Pour que la combustion soit complète, le combustible et le comburant doivent être mélangés dans des proportions bien spécifiques appelées rapport stœchiométrique. Si le combustible est en excès par rapport à la stœchiométrie, on parle de flamme riche et dans le cas contraire de flamme pauvre. Dans certaines applications telles que les moteurs aéronautiques et automobiles ou les fours industriels, le combustible et le comburant peuvent être mélangés dans des proportions différentes au sein de la chambre de combustion. La flamme prémélangée va donc se propager dans un milieu dit stratifié où la richesse varie spatialement. Dans les moteurs automobiles à allumage commandé, cette stratification est souhaitée car elle permet de réaliser le claquage de la bougie dans une zone riche pour favoriser l'allumage et la flamme se propage ensuite dans une zone pauvre afin de minimiser les risques d'auto-inflammation spontanée (cliquetis). Dans les turbines à gaz, où l'on cherche à limiter les émissions polluantes comme les



▲ **Figure 1** : Terme source de la variable d'avancement coloré par la richesse du mélange pour la configuration (I) avec stratification. Maillage de 400 millions de tétraèdres sur la machine Turing.

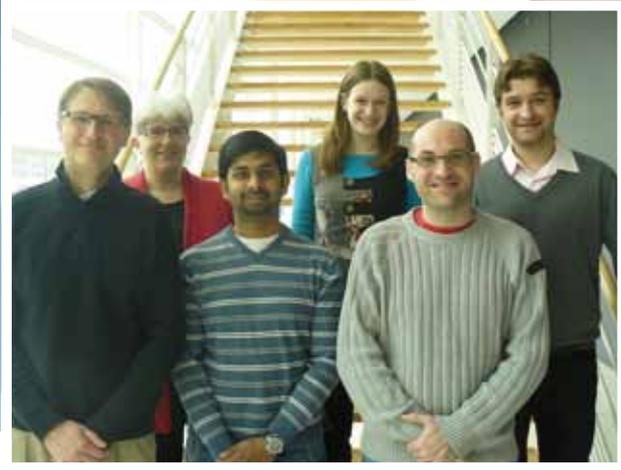


▲ **Figure 2** : Structures turbulentes obtenues pour la configuration (I) sans stratification. Maillage de 50 millions de tétraèdres sur la machine Turing

oxydes d'azote ou les suies, il est préférable de minimiser la stratification et d'éviter en particulier la combustion de poches riches.

L'objectif de ce projet est de contribuer à la modélisation des flammes prémélangées en milieu stratifié. Deux aspects sont étudiés dans le détail : i) la dynamique des flammes turbulentes stratifiées et ii) la prise en compte des effets de chimie complexe dans les simulations 3D. Dans ce projet, deux flammes de laboratoire sont simulées : la première en chimie tabulée, la deuxième plus petite en dimensions en cinétique complexe simplifiée.

La première configuration (I), un brûleur de type bluff-body fonctionnant en régime prémélangé ou stratifié, a été conçue à l'université de Cambridge en collaboration avec le laboratoire de Sandia (États-Unis). Des mesures de températures, de vitesses et d'espèces majoritaires sont disponibles. La simulation aux grandes échelles de ce brûleur a été effectuée au laboratoire CORIA en prémélange et en stratifié. L'objectif des simulations de ce projet est de construire une base de données numérique où une résolution spatiale de l'ordre de 40 microns dans les zones de combustion est



prescrite, permettant ainsi de s'affranchir de l'utilisation d'un modèle de sous-maille pour la combustion. Des exemples de résultats obtenus avec la machine Turing sont donnés sur les **Figures 1 et 2** avec et sans stratification et avec deux finesses de maillage différentes. Ces deux figures illustrent bien le caractère fortement turbulent de ces deux flammes. Ces simulations ont permis de valider un nouveau modèle de combustion capable de prendre en compte des effets de diffusion différentielle au travers de la flamme.

La deuxième configuration (II) est une installation expérimentale du CORIA mise en place par B. Lecordier et A. Cessou et étudiée dans la thèse de S. Balusamy. Il s'agit d'une chambre de combustion dédiée à l'étude de la propagation de flammes laminaires et turbulentes dans un milieu stratifié en richesse. Les expériences sont conduites en plusieurs étapes : I) la chambre est remplie d'un prémélange pauvre d'air et de propane, II) l'injection contrôlée d'un prémélange riche d'air et de propane est réalisée dans la chambre de manière à créer un écoulement stratifié, III) l'allumage du mélange est effectué

à l'aide d'électrodes au centre de la chambre. Une fois l'allumage effectué, plusieurs mesures expérimentales sont effectuées dans un plan 2D au centre de la chambre : vitesse dans les gaz frais, vitesse de déplacement absolu de la flamme et richesse locale du mélange. Le but des simulations réalisées avec la chimie complexe est d'analyser le comportement de la flamme soumise à la stratification en richesse et de le comparer aux mesures expérimentales. Les **Figures 3 et 4** montrent le développement d'un noyau de flamme dans un milieu stratifié en richesse. Ces simulations ont été réalisées avec un nouveau schéma cinétique pour le propane développé conjointement avec le Prof. Perrine Pepiot de l'université de Cornell, États-Unis. On retrouve avec ces simulations la forme typique en poire du noyau de flamme. Cette forme est donnée par une propagation de la flamme plus rapide dans le prémélange riche que dans le prémélange pauvre mais aussi par une aérodynamique particulière dans les gaz brûlés qui compense les différences de vitesses de propagation riche et pauvre.

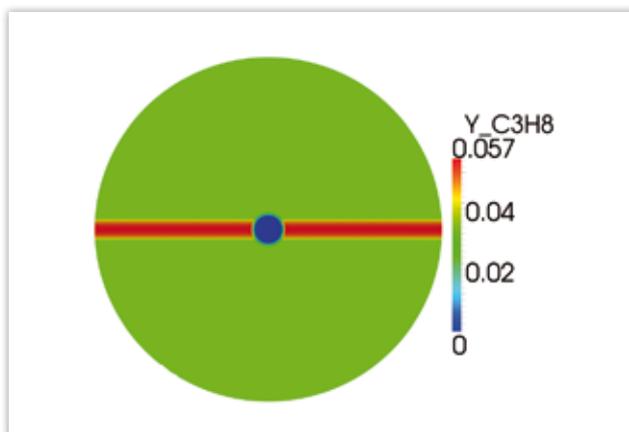


Figure 3 : Initialisation du noyau de flamme air/propane dans un milieu stratifié (configuration II). La zone pauvre en vert est au repos alors que la zone riche est en mouvement de gauche à droite. Maillage de 4 millions de triangles et une résolution de 40 microns dans la zone d'intérêt.

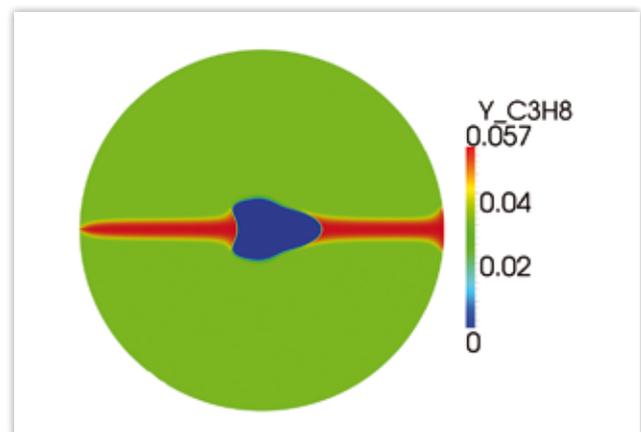


Figure 4 : Développement du noyau de flamme air/propane dans un milieu stratifié avec la forme en poire typique (configuration II). Maillage de 4 millions de triangles et une résolution de 40 microns dans la zone d'intérêt.

DEUS-PUR Dark Energy Universe Simulation: Parallel Universe Run

Vincent Reverdy, Linda Blot, Jean-Michel Alimi, Pier-Stefano Corasaniti, Yann Rasera, Laboratoire Univers et Théories, CNRS, Observatoire de Paris, Université Paris Diderot

CONTEXTE SCIENTIFIQUE : COSMOLOGIE ET ERGODICITÉ

Dans le paysage de la Science et dans celui de la Physique, la Cosmologie a un statut très particulier : son objet d'étude, l'Univers, est unique, et il est impossible de s'en extraire pour l'observer de l'extérieur. C'est pourquoi, au cours des dernières décennies, les simulations numériques se sont révélées être un outil particulièrement pertinent dans cette discipline : elles permettent de produire des Univers virtuels avec leurs lois et leurs constantes physiques afin de tester les modèles cosmologiques et de les confronter aux observations.

Toutefois, lorsque l'on réalise des expériences numériques ou lorsque l'on réalise des relevés observationnels sur des échelles cosmologiques (c'est-à-dire sur des échelles de l'ordre de la dizaine ou de la centaine de mégaparsecs, un mégaparsec valant environ 3,26 millions d'années-lumière), on suppose que notre échantillon de données est représentatif de tout l'Univers. Et plus l'on dispose d'échantillons, plus les barres d'erreurs sur les observables cosmologiques sont alors faibles.

Ce raisonnement est basé sur une hypothèse fondamentale empruntée à la physique statistique nommée « hypothèse ergodique ». Dans le cadre de la Cosmologie, cette hypothèse revient à supposer que la moyenne d'une quantité physique sur un ensemble statistique de réalisations (les simulations ou les relevés observationnels) est équivalente à la moyenne de cette même quantité physique sur le volume entier d'une seule réalisation (en l'occurrence l'Univers). L'idée du projet Dark Energy Universe Simulation: Parallel Universe Run (DEUS-PUR) est de tester de façon rigoureuse cette hypothèse.

DÉFINITION ET OBJECTIFS SCIENTIFIQUES DU PROJET DEUS-PUR

Le projet Grand challenge Parallel Universe Run fait écho à un projet réalisé quelques mois plus tôt, le Full Universe Run (DEUS-FUR) sur le supercalculateur Curie, qui avait permis la réalisation des premières simulations cosmologiques de la taille de tout l'Univers Observable [Alimi et al 2012, Supercomputing

2012, Salt Lake City, 10-16 novembre 2012, Proceeding IEEE, article 73, <http://sc12.supercomputing.org/>]. Le principe de ces simulations consiste à faire évoluer une distribution de matière au sein d'un Univers virtuel en expansion accélérée : nous avons ici choisi l'Univers du modèle de concordance pour lequel l'accélération est due à la présence d'une constante cosmologique. Tous les paramètres physiques (géométrie, quantité de matière, valeur de la constante cosmologique, ...) sont fixés pour rendre compte des données observationnelles actuelles sur les Supernovae et sur le fond de rayonnement cosmologique. Cette distribution est échantillonnée sous la forme de particules et est compatible avec le spectre des fluctuations primordiales observées. Sous l'effet de la gravitation, ces particules s'attirent pour former des structures de plus en plus grandes et permettent ainsi de résoudre la dynamique non-linéaire de la formation et de l'évolution des grandes structures de l'Univers : filaments galactiques, amas et superamas de galaxies.

Disposant de la structuration dans un volume équivalent à celui de l'horizon cosmologique par le Full Universe Run, nous pouvons donc évaluer les quantités physiques moyennées sur un volume très important. Ces quantités physiques sont le spectre de puissance, la fonction de masse ou toute autre observable rendant compte des propriétés statistiques du champ de matière. Pour tester alors la validité de l'hypothèse ergodique, nous comparerons le calcul de ces quantités aux mesures résultant d'une moyenne statistique sur des volumes plus réduits. Pour cela nous pouvons soit extraire ces sous-volumes du volume de la DEUS-FUR, soit réaliser un très grand nombre de simulations cosmologiques de volumes réduits issus de réalisations statistiques résultant de conditions initiales stochastiques différentes. Nous avons choisi de réaliser un nombre de simulations tel que le volume combiné de celles-ci redonne le volume de la simulation de référence soit $(10\ 500\ h^{-1}\text{Mpc})^3$, c'est-à-dire 4 096 simulations de tailles $(656,25\ h^{-1}\text{Mpc})^3$ ou 512 simulations de tailles $(1\ 312,5\ h^{-1}\text{Mpc})^3$. Nous avons finalement conservé pour chaque simulation la même résolution en masse, fixée par le nombre de particules, et la même résolution spatiale, fixée par le nombre de cellules de la grille de niveau le plus lâche, cette grille étant adaptative de manière à augmenter la résolution là où la densité augmente. L'ensemble des simulations est présenté dans la table 1. Lorsque nous moyennons les mesures sur des réalisations différentes de



volumes réduits, nous sommes également capables d'estimer les effets de couplages de modes qui sont inexistantes lorsque l'on a tronqué le volume simulé. C'est à l'ensemble de ces objectifs que s'attelle DEUS-PUR.

UN GRAND CHALLENGE NUMÉRIQUE DE PLUS DE 12 000 SIMULATIONS

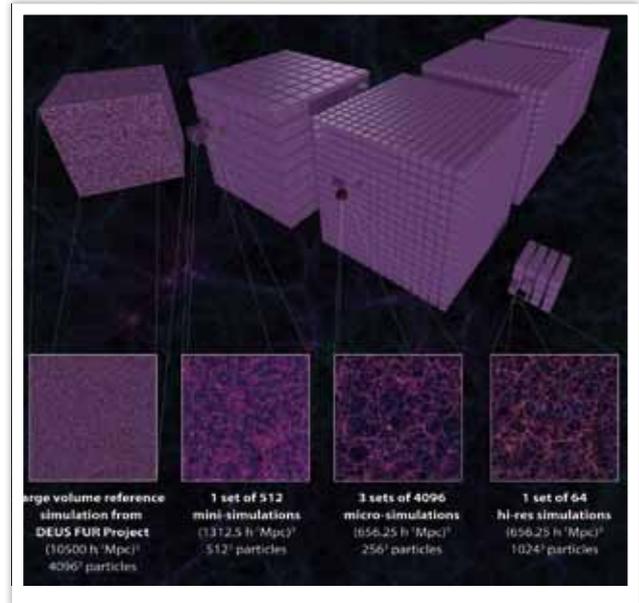
Pour apporter des réponses à ces problématiques scientifiques, la complémentarité des supercalculateurs Curie et Ada a été utilisée : le premier pour réaliser une simulation de grand volume, en l'occurrence une simulation de $10\,500\text{ h}^{-1}$ Megaparsecs de côté avec $4\,096^3$ particules, soit $1/8$ du volume de tout l'Univers observable, et le second dans le cadre du Parallel Universe Run pour réaliser le plus grand ensemble de simulations cosmologiques jamais réalisé.

Cet ensemble consiste en plus de 12 000 simulations de tailles et résolutions variées présentées en ► **Figure 1** : trois groupes de 4 096 simulations à 16 millions de particules, un groupe de 512 simulations à 134 millions de particules, et un groupe de 64 simulations haute résolution à plus d'un milliard de particules chacune. Un traitement individuel étape par étape de ces simulations étant inenvisageable, nous avons utilisé l'application AMA-DEUS mise en place dans le cadre du projet Full Universe Run et comprenant une chaîne de codes allant de la génération des conditions initiales à la réduction des données en passant par la résolution de la dynamique gravitationnelle.

Habituellement, lorsque l'on réalise des simulations sur un supercalculateur, l'on configure et l'on soumet individuellement chaque script de chaque simulation. Dans notre cas, des « meta-scripts » ont été conçus afin d'automatiser un certain nombre de tâches et afin de contrôler plus facilement les erreurs. Ces derniers s'occupaient en effet de générer et de configurer les travaux

pour chaque simulation, de les soumettre, de surveiller leur bon déroulement et de produire un fichier d'erreur facilement repérable en cas d'arrêt imprévu d'un code ou en cas de fichier de résultat non conforme. Cela nous a permis de considérablement faciliter la gestion du Grand challenge DEUS PUR du point de vue utilisateur.

À l'issue du calcul, nous avons obtenu pour chacune des simulations cosmologiques la totalité de la structuration échantillonnée par les particules, les spectres de puissance associés à la distribution de matière au cours de l'histoire de l'Univers, des catalogues regroupant les halos détectés au



► **Figure 1** : Simulations cosmologiques du Grand challenge Dark Energy Universe Simulation: Parallel Universe Run (DEUS-PUR). Plus de 12 000 simulations cosmologiques reproduisant la formation des grandes structures dans l'Univers ont été réalisées en vue d'étudier la validité de l'hypothèse ergodique. Les conditions initiales d'une simulation de $10\,500\text{ h}^{-1}\text{Mpc}$ de côté ont été redécoupées de manière à réaliser un ensemble de 512 simulations à 512^3 particules d'une part et un ensemble de 4 096 simulations à 256^3 particules d'autre part, à chaque fois de même volume total. En plus de cela, l'évolution de la structuration de l'Univers a été simulée dans 2 autres groupes de 4 096 simulations à 256^3 particules avec de nouvelles conditions initiales. Enfin, 64 simulations à plus d'un milliard de particules sont venues compléter ce Grand challenge pour évaluer les effets liés à la résolution. Les données ainsi produites permettront de tester jusqu'à quel point et pour quelles observables cosmologiques une moyenne statistique sur un grand nombre de réalisations est équivalente à une moyenne sur un grand volume.

sein des grandes structures, et enfin les propriétés physiques de ces halos. Chacun de ces ensembles de données va permettre de tester différents aspects de l'ergodicité et des effets de volumes finis dans les simulations. Peut-être va-t-il s'avérer, par exemple, qu'effectuer des moyennes sur un grand

nombre de réalisations permet de calculer correctement le spectre de puissance aux échelles accessibles par ces simulations mais échoue à reproduire les propriétés statistiques d'ordre supérieur. Le travail d'analyse à venir permettra notamment, au travers de réponses à ce type de questions, de mieux comprendre la validité d'une mesure lorsqu'elle est effectuée sur un nombre restreint de simulations de taille donnée.

Bruit blanc utilisé pour la génération des conditions initiales	Nombre de simulations	Nombre de particules par simulation	Volume physique de chaque simulation	Nombre de cœurs par simulation	Temps équivalent mono-cœur par simulation
#1	1	$4096^3 \approx 68 \times 10^9$	$(10500\text{ h}^{-1}\text{Mpc})^3$	9504	260 000 heures
#1	512	$512^3 \approx 134 \times 10^6$	$(1312.5\text{ h}^{-1}\text{Mpc})^3$	64	120 heures
#1	4096	$256^3 \approx 16 \times 10^6$	$(656.25\text{ h}^{-1}\text{Mpc})^3$	32	16 heures
#2	4096	$256^3 \approx 16 \times 10^6$	$(656.25\text{ h}^{-1}\text{Mpc})^3$	32	16 heures
#3	4096	$256^3 \approx 16 \times 10^6$	$(656.25\text{ h}^{-1}\text{Mpc})^3$	32	16 heures
#4	64	$1024^3 \approx 1 \times 10^9$	$(656.25\text{ h}^{-1}\text{Mpc})^3$	512	16 000 heures

► **Table 1** : Résumé des caractéristiques de l'ensemble des simulations du projet DEUS-PUR

MHDTURB

Turbulence magnétohydrodynamique dans les disques d'accrétion

1. INTRODUCTION

Les disques d'accrétion sont des structures cylindriques, essentiellement gazeuses, en rotation autour d'un objet central. Ils sont observés à toutes les échelles de l'univers : étoiles jeunes, naines blanches, étoiles à neutrons, trous noirs au centre des galaxies (voir par exemple le projet ZOOMBHA). Dans chacun de ces cas, le gaz tombe petit à petit sur l'objet central en perdant son moment cinétique. Celui-ci est transporté depuis les parties internes des disques vers leurs parties externes. Une question centrale en astrophysique est de mettre en évidence un mécanisme générique responsable de ce transport dans toutes les situations.

Il est admis depuis les années 70 (Shakura & Synyaev 1973, Lynden-Bell & Pringle 1974) que l'écoulement dans les disques d'accrétion est turbulent. De la même manière que la turbulence de l'air dans une pièce permet de transporter rapidement des molécules de parfum d'un point à un autre, la turbulence dans les disques d'accrétion transporte efficacement le moment cinétique. L'origine physique de cette turbulence a longtemps été mystérieuse. Il semble aujourd'hui vraisemblable qu'elle soit d'origine magnétique. En effet, les orbites circulaires décrites par le gaz sont déstabilisées par la présence d'un faible champ magnétique (Balbus & Hawley 1991). C'est l'instabilité magnétorotationnelle (MRI), dont le mécanisme physique repose sur l'action de la force de Lorentz dans un écoulement cisailé. Depuis 20 ans, de nombreuses simulations numériques ont montré que l'écoulement devient rapidement turbulent sous l'action de la MRI, offrant ainsi une explication au problème du transport de moment cinétique dans les disques d'accrétion.

Malgré ces résultats encourageants, le taux de transport de moment cinétique qui résulte de la MRI reste encore difficile à quantifier. En effet, les paramètres physiques pertinents sont difficilement accessibles à la simulation car deux échelles très différentes apparaissent naturellement : l'échelle de dissipation du champ magnétique et l'échelle de dissipation des mouvements du gaz. Leur rapport peut être évalué qualitativement grâce au nombre de Prandtl magnétique P_m , qui est égal au rapport entre la viscosité cinématique du plasma et sa résistivité. Par exemple, dans

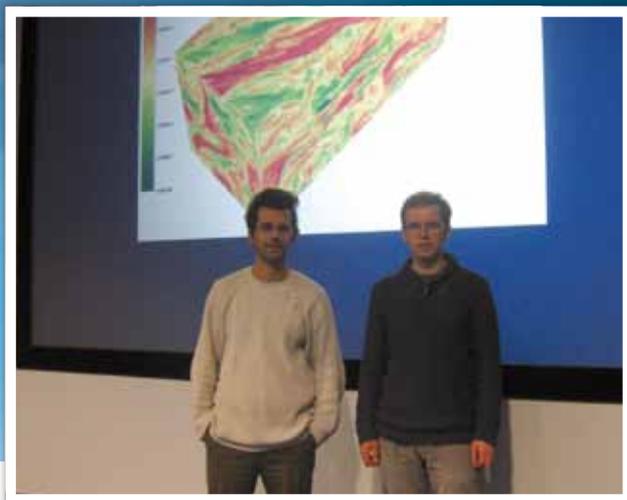
les disques protoplanétaires dans lesquels se forment les planètes, P_m est très petit devant l'unité (il peut atteindre des valeurs de l'ordre de 10^{-5}) car le milieu est froid et dense, et donc peu ionisé. En conséquence, l'échelle de dissipation résistive est très grande par rapport à l'échelle de dissipation visqueuse. La simulation numérique de l'écoulement dans ce régime est un challenge en terme de résolution, car il faut être capable de résoudre ces deux échelles très différentes. L'objectif du grand challenge MHDTURB est d'utiliser les possibilités offertes par le calculateur Turing pour explorer le régime $P_m \ll 1$.

2. APPROCHE NUMÉRIQUE

Malgré les performances importantes des supercalculateurs modernes, de nombreuses simplifications restent nécessaires. Il est d'usage de simplifier en particulier la géométrie du système : la grille de simulation couvre un volume réduit du disque d'accrétion (on parle d'approche locale). L'idée est alors de diminuer la viscosité (à résistivité fixée) jusqu'à obtenir un régime asymptotique où les propriétés de la turbulence à grande échelle ne varient plus. Evidemment, plus la viscosité est petite, plus la résolution de la simulation doit être importante afin de résoudre correctement l'échelle de dissipation visqueuse.

La simulation du grand challenge MHDTURB a été réalisée avec le code RAMSES (Teyssier 2002, Fromang et al. 2006). La résolution de la grille de calcul est de $800 \times 1600 \times 832$ (soit plus d'un milliard de cellules) et l'évolution du gaz a été suivie pendant plus de 800 000 pas de temps. Le champ magnétique est initialement horizontal et uniforme. Les coefficients de dissipation utilisés sont tels que $P_m = 0,03$. Cela représente une des plus petites valeurs de P_m jamais atteinte !

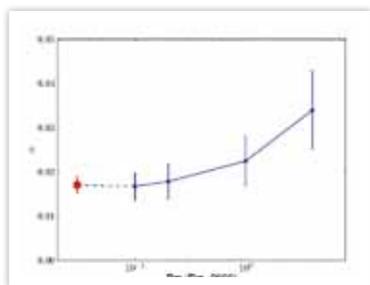
Un milliard de cellules, 800 000 pas de temps : cette simulation entre véritablement dans le domaine du calcul massivement parallèle. Plus de 32 000 cœurs ont été nécessaires pour la réaliser (soit la moitié du calculateur Turing) pour un total de 11 millions d'heures de temps de calcul CPU. Ce gigantisme n'est pas sans contrainte, en particulier pour l'écriture des résultats sur disque et pour la visualisation des données. La sauvegarde du cube représentant la simulation produit plus de 200 Go de données. Le traitement et la visualisation



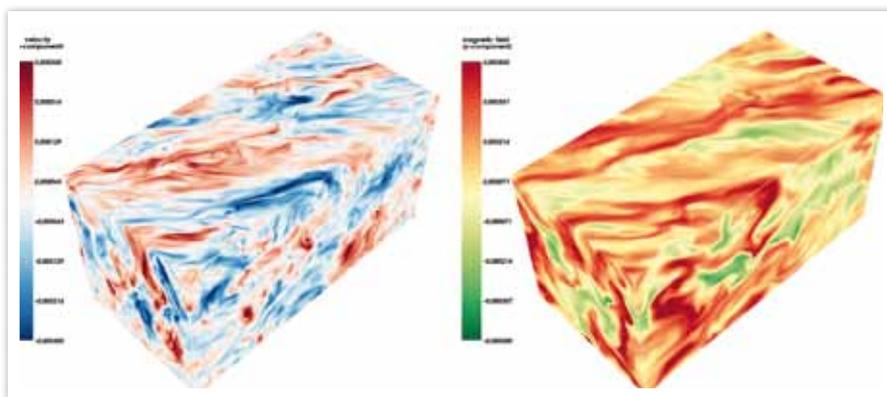
Équipe ayant participé au projet :

Marc Joos, Sébastien Fromang & la collaboration MHDTURB : Pierre Kestener (CEA/Saclay, Maison de la simulation), Geoffroy Lesur (IPAG, Université de Grenoble), Héloïse Méheut (CEA/Saclay, Sap), Daniel Pomarède (CEA/Saclay, SEDI), Bruno Thooris (CEA/Saclay, SEDI), Service d'astrophysique, CEA/Saclay

De gauche à droite : Marc Joos, Sébastien Fromang.



▲ **Figure 1** : Évolution du taux de transport de moment cinétique avec le nombre de Prandtl magnétique P_m . Le point rouge a été obtenu grâce au grand challenge MHDTURB.



▲ **Figure 2** : Rendu volumique de la vitesse suivant z (image de gauche) et du champ magnétique suivant y (image de droite)

de ces données sont un challenge. Comment visualiser et analyser l'information contenue dans cette simulation ? Les solutions que nous avons développées permettent un accès rapide aux résultats (visualisation, films 3D) sans menacer la production de résultats scientifiques (propriétés statistiques de la turbulence).

3. LES RÉSULTATS

Les résultats sont illustrés au moyen de la ▲ **Figure 2** qui montre les variations volumiques de deux champs caractéristiques de l'écoulement. La vitesse (image de gauche) montre des fluctuations à une échelle plus petite que le champ magnétique (image de droite). Cette différence illustre le rapport important entre les échelles de dissipation visqueuse et résistive.

Le grand challenge MHDTURB nous a permis de compléter une série de simulations que nous avons réalisées depuis deux ans à l'IDRIS et au CCRT. Les résultats complets sont résumés sur la ▲ **Figure 1** Ils démontrent sans ambiguïté l'existence d'un régime asymptotique à faible P_m : le

paramètre α (qui mesure le taux de transport de moment cinétique) converge vers une limite indépendante de P_m dans la limite où $P_m \rightarrow 0$. Cette convergence traduit l'apparition d'une cascade turbulente purement hydrodynamique à petite échelle, découplée du champ magnétique et où l'énergie est transférée depuis les grandes vers les petites échelles (Lesur & Longaretti 2011).

Les résultats du grand challenge MHDTURB complètent d'autres simulations réalisées à l'IDRIS en 2010/2011 pour lesquelles le champ magnétique initial est purement vertical. Les résultats obtenus dans ce cas montrent la même indépendance du taux de transport de moment cinétique à petit P_m . L'ensemble de ces résultats sert actuellement de base au développement de modèles sous-mailles de la turbulence MHD dans la limite des faibles nombres de Prandtl magnétique. Ces modèles seront ensuite incorporés dans des simulations globales réalistes de disques protoplanétaires qui viseront à contraindre les modèles existants de formation planétaires.

Références : Balbus, S. and Hawley, J., 1991, *ApJ*, 376, 214. Fromang, S., Hennebelle, P. & Teyssier, R., 2006, *A&A*, 457, 371. Lesur, G. & Longaretti, P.-Y., 2011, *A&A*, 528, 17. Lynden-Bell, D. & Pringle, J., 1974, *MNRAS*, 168, 603. Shakura, N. & Sunyaev, R., 1973, *A&A*, 24, 337. Teyssier, R., 2002, *A&A*, 385, 337.

ZOOMBHA Zoomed simulations of Black Hole Accretion

Un petit monstre vit au centre de chaque galaxie, grossissant au fil du temps, explosant parfois violemment : un trou noir. Ces trous noirs nous semblent énormes avec des masses allant de quelques millions à quelques milliards de fois celle de notre soleil – et pourtant ils sont beaucoup plus petits que les galaxies qui les hébergent et qui peuvent contenir plusieurs centaines de milliards de soleils. L'influence gravitationnelle d'un trou noir super massif peut s'étendre sur plus de 100 années-lumière (environ 100 000 fois la taille de notre système solaire entier). Pourtant, leurs galaxies hôtes s'étendent sur des dizaines de milliers d'années-lumière. On peut le comparer à un petit pois posé au centre d'une pizza.

Malgré leur petite taille par rapport à leur galaxie hôte, on pense que les trous noirs super massifs exercent une grande influence sur la masse et la structure de ces dernières. Les galaxies riches en étoiles ont une forte tendance à contenir des trous noirs, et les galaxies qui ont une forme plus sphéroïdale contiennent des trous noirs plus larges que leurs homologues ayant une forme de disque.

Comment ces trous noirs sont-ils devenus si massifs et comment peuvent-ils influencer la formation des étoiles dans leur galaxie ? Les réponses à ces questions clés pourraient expliquer la masse et la forme des galaxies.

Les observations faites avec des télescopes à rayons X nous montrent que beaucoup de trous noirs se sont développés quand l'univers était jeune. Quand un trou noir avale le gaz environnant – un processus appelé accréation – le gaz forme un petit disque appelé disque d'accréation. Avant de tomber dans le trou noir, le gaz est surchauffé par la libération de l'énergie gravitationnelle et devient si chaud qu'il émet des rayons X très énergétiques.

Les astronomes observent ce processus sous la forme de quasars lumineux, qui leur servent d'indicateurs de croissance des trous noirs.

Les quasars étaient beaucoup plus courants quand l'univers avait environ le tiers de son âge actuel. Et comme les galaxies contenaient plus de gaz, certains astrophysiciens spéculent sur le fait que plus il y a de gaz disponible, plus il y en aura qui ira dans le trou noir. Mais nous ne comprenons toujours pas comment ce gaz passe de la galaxie externe au disque d'accréation du trou noir.

Dans le projet ZOOMBHA, nous avons mis en lumière la croissance des trous noirs en zoomant à partir de la galaxie entière jusque dans les régions centrales influencées par le trou noir. L'alimentation d'un trou noir est un problème extrêmement difficile parce qu'il implique une très large gamme d'échelles, de la galaxie au trou noir. C'est un peu comme regarder la tour Eiffel de loin et déterminer si un touriste à l'étage porte des lunettes. En utilisant simultanément jusqu'à 8 192 cœurs de calcul, nous avons simulé une galaxie en forme de disque riche en gaz avec une résolution normale pour quelques centaines de millions d'années. Puis nous avons sélectionné des épisodes intéressants – par exemple quand un grumeau de gaz passe près du trou noir – et relancé la simulation en zoomant sur les régions centrales. Cela nous a permis d'obtenir une résolution jusqu'à 128 fois supérieure à la résolution normale pour de courtes périodes d'environ un million d'années. La ► **Figure 1** illustre le niveau de détails rendu possible par notre technique de zoom.

Nos simulations montrent que les galaxies dans l'univers jeune ont des grumeaux de gaz condensé très turbulents par rapport aux galaxies actuelles. Les grumeaux et filaments de gaz interagissent les uns avec les autres à

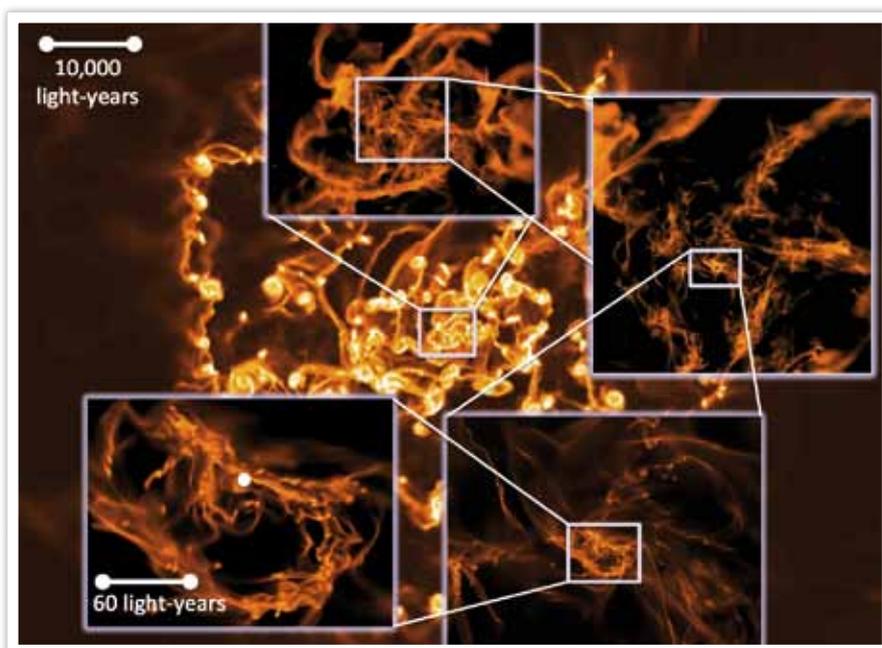


Jared Gabor, jared.gabor@cea.fr
CEA Saclay, DSM/IRFU/SAP,
Bât. 709,
91191 Gif-sur-Yvette,
France.

Contributeurs :
Frédéric Bournaud, Florent Renaud, Romain Teyssier

travers leur interaction gravitationnelle mutuelle, et de temps en temps un grumeau est dispersé au hasard vers le centre de la galaxie. Une fois au centre de la galaxie, un grumeau turbulent en rotation peut alimenter le trou noir. Les simulations ZOOMBHA montrent pour la première fois que ces grumeaux massifs de gaz se fragmentent davantage en petites structures et filaments qui tourbillonnent à grandes vitesses près du trou noir. Alors que le champ gravitationnel du trou noir capture une partie du gaz, la plupart de celui-ci passe à côté du trou noir si rapidement qu'on le détecte à peine. Ceci entraîne que les modèles simples de disque fin et symétrique alimentant le trou noir seraient à revoir. Les centres de galaxies sont plus turbulents et chaotiques que la plupart des modèles ne le présument.

Dans le futur, les résultats du projet ZOOMBHA pourront être utilisés pour améliorer les simulations de disques d'accrétion des trous noirs. De telles simulations ont une meilleure résolution et comportent plus de physique complexe, mais ne peuvent pas être reliées à des échelles plus grandes de la galaxie qui, en fin de compte, fournit le gaz pour le disque d'accrétion. À partir de la simulation ZOOMBHA, nous pouvons spécifier les conditions limites pour le déplacement du gaz dans le disque d'accrétion, ouvrant la voie à une simulation plus réaliste de l'accrétion.



▲ **Figure 1** : La simulation ZOOMBHA zoome à partir de la galaxie jusqu'au trou noir. L'image de fond montre la distribution du gaz dans la totalité de la galaxie simulée, avec une série de zooms montrant avec de plus en plus de détails le centre de la galaxie. L'image la plus détaillée (en bas à gauche) montre les grumeaux et les filaments de gaz tourbillonnant à proximité du trou noir dont la position est marquée par un cercle.

Simulations multi-espèces turbulentes dans les plasmas de Tokamak

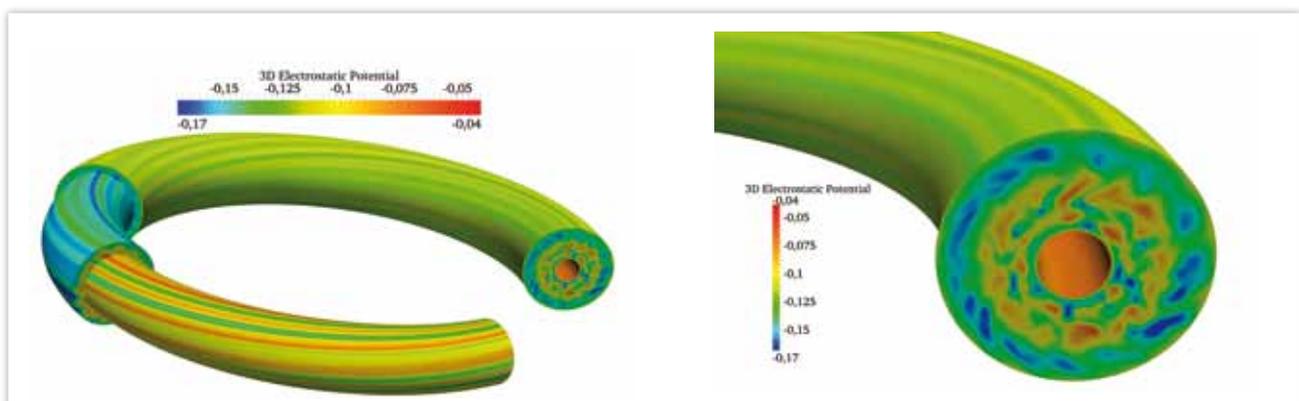
Guillaume Latu et l'équipe Gysela, CEA/IRFM
Julien Bigot, CEA/Maison de la simulation

L'un des challenges en physique des plasmas de fusion par confinement magnétique est la prédiction de la performance en termes de facteur d'amplification : le ratio de la puissance générée par la fusion par rapport à celle injectée, notamment pour amener le plasma à des températures permettant à la réaction de fusion d'avoir lieu. Ce facteur est une fonction non-linéaire du temps de confinement de l'énergie qui mesure les propriétés d'isolation thermique de l'enceinte magnétique torique dans laquelle est piégé le plasma. Il se trouve que c'est la turbulence du plasma qui influe pour l'essentiel sur le transport de chaleur du cœur vers les parois. Comprendre et prédire le transport turbulent sur les réacteurs actuels et de prochaine génération (dont le tokamak international ITER en construction à Cadarache, dans le sud de la France) repose sur deux piliers. Le premier consiste en l'étude expérimentale des lois empiriques (appelées lois d'échelle) qui gouvernent ce transport, à partir de mesures réalisées sur les divers tokamaks de par le monde. Le second consiste en la simulation numérique qui s'appuie sur ces résultats expérimentaux pour pousser plus loin la compréhension des phénomènes.

Dans ce cadre, les simulations les plus pertinentes résolvent des équations en n'utilisant pas ou peu de paramètres ajustables (modélisation dite « de premiers principes »). L'évolution des champs électromagnétiques, régie par les équations de Maxwell, est couplée de façon auto-consistante à la dynamique du plasma. Cette dernière s'appuie sur la description gyrocinétique, qui opère dans un espace à 5 dimensions, 3 de position et 2 de vitesse. Ces dimensions

sont discrétisées de manière à couvrir des échelles spatiales allant de la turbulence millimétrique (voire submillimétrique) à la taille métrique des réacteurs et des échelles temporelles allant de la dizaine de microsecondes de la turbulence aux quelques secondes du temps de confinement. Sans surprise, ce type de simulation nécessite donc des ressources de calcul particulièrement importantes. Le code GYSELA est optimisé pour s'exécuter de manière efficace sur plusieurs dizaines de milliers de cœurs, cette parallélisation étant indispensable à la conduite de simulations à des échelles caractéristiques réalistes. De fait, nos simulations actuelles, qui ne résolvent pourtant encore que les échelles ioniques (celles électroniques étant de 1 à 2 ordres de grandeurs plus petites), requièrent déjà plusieurs millions d'heures de calcul mono-cœur, et plusieurs téraoctets de mémoire vive.

La prise en compte de la dynamique des électrons est une étape à venir indispensable pour deux raisons essentielles. Ils portent certaines instabilités qui contribuent notablement au transport turbulent de matière. Cette évolution a un prix. Le nombre de points de la grille 5D doit croître d'environ 3 ordres de grandeur et le pas de temps numérique doit être raffiné d'environ 1 ordre de grandeur. De ce fait, le code GYSELA est un excellent candidat pour les machines Exascale prévues à l'horizon 2020 – c'est-à-dire des machines réalisant un trillion (10^{18}) d'opérations par seconde. Les domaines de calculs seront en effet nécessairement considérables, plusieurs pétaoctets pour réaliser des simulations de plasmas d'ITER. Il est donc primordial d'être en mesure de traiter dès



▲ **Figure 1** : Fluctuations du potentiel électrique lorsque la turbulence s'est développée dans le Plasma.

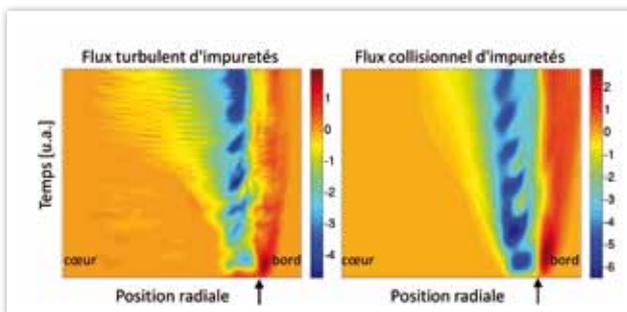


◀
Guillaume Latu
Julien Bigot

aujourd'hui des maillages de plusieurs dizaines de milliards de nœuds avec GYSELA, avec en outre un nombre de pas de temps bien plus grand que celui utilisé jusqu'à maintenant.

Le cas physique simulé durant ce grand challenge s'est appuyé sur un maillage comportant plus de 34 milliards de points (256x256x128 en espace et 128x32 en vitesse) soit l'un des plus grands que nous ayons employés. La dimension temporelle a été discrétisée en 43 000 pas de temps. Cette simulation a utilisé jusqu'à plus de 100 000 threads (tâches élémentaires de calcul) simultanément en parallèle pour un temps cumulé équivalent à 6,6 millions d'heures d'utilisation d'un processeur mono-cœur.

La particularité de cette simulation est double : le temps de simulation approche un temps de confinement, et une deuxième espèce ionique a été injectée en cours de simulation. Le premier point met en lumière l'auto-organisation de la turbulence caractérisée par l'interaction entre la turbulence microscopique et les écoulements macroscopiques auto-générés. Ce mécanisme est illustré sur la ◀ **Figure 1** représentant le potentiel électrique à un instant donné. Le deuxième est à la fois une étape préparatoire à l'introduction des électrons cinétiques, et représente un intérêt crucial pour étudier le transport d'impuretés lourdes telles que le tungstène (dont seront faits des éléments de paroi d'ITER) susceptibles de modifier significativement le transport de chaleur. Les résultats préliminaires que nous avons obtenus montrent en particulier la pénétration des impuretés de la périphérie vers le cœur de la décharge, du fait de la coopération entre le transport turbulent et celui dû aux collisions, ▼ **Figure 2**



▲ **Figure 2** : Cartes spatio-temporelles des flux radiaux turbulent et collisionnel d'impuretés. Les valeurs négatives indiquent un transport du bord vers le cœur de la décharge. Les flèches repèrent la position d'injection des impuretés.

Afin de traiter des cas physiques réalistes, il est nécessaire d'optimiser les codes parallèles : tout d'abord pour réduire les coûts en terme de temps de calcul, mais aussi pour que les masses de données manipulées par le code tiennent en mémoire vive. Ce travail d'optimisation nécessite une compréhension fine du comportement des codes sur chaque nouvelle architecture de machine. Cette remarque est particulièrement vraie sur le supercalculateur Turing dont l'architecture IBM BlueGene/Q est novatrice à plus d'un titre. Par exemple par le traitement vectoriel de certaines instructions élémentaires, le nombre important de threads qui sont gérés, les mécanismes avancés de pré-chargement des données depuis la mémoire principale vers les mémoires cache, l'architecture du réseau et la gestion des communications entre les cœurs et vers les périphériques de stockage. Ces éléments constituent des mécanismes spécifiques et différents des architectures plus communes de supercalculateurs utilisant les puces Intel ou AMD. On considère que cette architecture préfigure par certains aspects les architectures des futures machines Exascale.

Pour tirer pleinement parti de cette architecture, certains algorithmes ont dû être adaptés pour utiliser efficacement les 64 threads par nœud alors que, sur les autres supercalculateurs, le nombre de threads dépasse rarement 16 par nœud. Ce changement a demandé de rechercher du parallélisme supplémentaire dans les calculs réalisés. D'autre part, une remise en cause de schémas de communication impliquant l'ensemble des cœurs simultanément a permis de réduire les temps de simulation. De plus, un défi majeur concernait la consommation mémoire. Sur Turing, le nombre de threads est important mais la mémoire disponible pour chacun est relativement faible : 256 mégaoctets. Si une partie de la consommation mémoire est globalement constante quel que soit le nombre de threads, une autre partie est constante par thread et croît linéairement avec le nombre de threads au niveau global. Des développements ont été entrepris dans GYSELA pour diminuer la consommation mémoire et en particulier dans cette deuxième catégorie. Ces investigations nous ont affranchis du verrou que constituait la faible mémoire disponible par thread.

Des analyses de performance ont été réalisées de 8 192 cœurs jusqu'à 65 536 cœurs, correspondant à l'intégralité de la machine. Nous avons effectué un test dit de « Weak scaling » pour lequel on compare le temps d'exécution entre plusieurs configurations où la quantité de données croît linéairement avec le nombre de cœurs de calcul. Idéalement dans ce test, le temps de la simulation devrait rester constant puisque la quantité de données traitée par chaque cœur l'est. Le code GYSELA est proche de cet objectif, l'efficacité relative étant de 95 % à 65 536 cœurs par rapport à 8 192 cœurs (on s'écarte de seulement 5 % du temps idéal).

PrecLQCD

Calculs de précision en QCD sur réseau

L'objet de ce projet Grand challenge est d'utiliser la QCD sur réseau pour déterminer de façon la plus rigoureuse possible — en tenant compte en particulier des effets non perturbatifs et des seuils en masses de quarks — la constante de couplage forte α_s , paramètre fondamental du Modèle Standard de la Physique des Particules.

L'enjeu de notre projet de recherche est de contribuer à la compréhension des interactions entre particules élémentaires portant une charge de couleur (quarks et gluons). La théorie qui décrit ces interactions (« interactions fortes ») est la Chromodynamique Quantique (QCD), dont les principaux auteurs ont reçu le prix Nobel en 2004. Le but de la QCD est d'expliquer la cohésion des noyaux ainsi que la structure des protons et des neutrons, c'est-à-dire l'essentiel de la matière visible de l'univers.

Cette théorie ne compte que sept paramètres : une masse pour chacun des 6 quarks et une constante de couplage qui règle l'intensité de l'interaction forte. Elle permet d'interpréter un nombre immense de phénomènes physiques à partir de peu de paramètres et d'un formalisme mathématique bien défini et très compact. C'est l'une des théories physiques les plus élégantes de l'histoire des sciences.

DES CALCULS DE PRÉCISION

Conçu pour la découverte du boson de Higgs et la physique au-delà du Modèle Standard, le LHC (Large Hadron Collider) est essentiellement une « machine à QCD », fonctionnant dans une gamme d'énergie jamais explorée jusqu'alors. Les quatre expériences construites sur le trajet de cet accélérateur sont confrontées à un taux d'événements QCD sans précédent. Le potentiel de découverte du LHC dépend donc de façon cruciale de la qualité des prédictions pour les processus de signaux QCD et de bruit de fond QCD. Or ces prédictions sont actuellement limitées en particulier par les incertitudes sur les paramètres du Modèle Standard, et en premier lieu par celles sur la constante de couplage forte renormalisée α_s , qui intervient directement dans le calcul des sections efficaces. De légères différences sur α_s peuvent entraîner des différences considérables dans les prédictions. La détermination précise de cette constante fondamentale

du Modèle Standard — en tenant en particulier compte des effets non perturbatifs et des seuils en masses de quarks — est donc l'une des tâches importantes des calculs de QCD, et le but de ce projet Grand challenge.

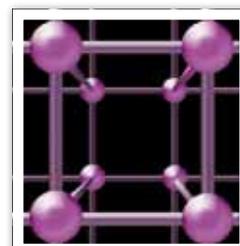
Or cette théorie, au formalisme séduisant, s'avère extrêmement difficile à résoudre. Cette complexité est le prix à payer pour une théorie qui, à basse énergie, est capable de rendre compte du confinement des quarks et des gluons dans les hadrons. La seule méthode de calcul systématique et rigoureuse est la chromodynamique quantique sur réseau (LQCD pour lattice QCD).

L'objectif de la LQCD est donc de résoudre rigoureusement la théorie quantique des interactions fortes, c'est-à-dire de trouver les solutions de cette théorie fondamentale de la matière, sans hypothèses incontrôlées et avec des précisions rivalisant avec celles atteintes par les expériences.

QCD SUR RÉSEAU

La LQCD utilise des méthodes qui s'inspirent de la Physique Statistique, et consiste à représenter l'espace-temps par un réseau quadridimensionnel dont la longueur est typiquement de 3 à 5 fm et dont la maille a mesure moins de 0,1 fm. Les gluons y sont représentés par des matrices de SU(3), associées à chaque lien du réseau (l'ensemble de ces matrices formant une « configuration de jauge ») et les quarks se propagent de site en site.

Les calculs, basés sur des méthodes stochastiques, sont très lourds, en particulier quand ils prennent en compte l'apparition et la disparition de paires de quarks et d'antiquarks virtuels (calculs « unquenched »). Ces fluctuations quantiques sont cruciales pour respecter des symétries fondamentales de la théorie (en particulier l'unitarité) mais le temps de calcul pour les traiter croît quand la masse des quarks diminue. Or la nature



▲ **Figure 1** : Les gluons (représentés par des matrices unitaires dans l'espace de couleur) sont associés à chaque lien du réseau. Les quarks sont quant à eux associés aux sites du réseau.



Mariane Brinet, Laboratoire de Physique Subatomique et de Cosmologie de Grenoble (CNRS/IN2P3/UJF)

Benoît Blossier, Philippe Boucaud, Olivier Pène, Francesco Sanfilippo
Laboratoire de Physique Théorique, Orsay (CNRS/INP/Université).
Vincent Morenas, Laboratoire de Physique Corpusculaire, Clermont Ferrand (CNRS/IN2P3/Université). Konstantin Petrov, Laboratoire de l'Accélérateur Linéaire (CNRS/IN2P3/Université). José Rodríguez-Quintero
Dpto. Física Aplicada, Fac. Ciencias Experimentales, Huelva, Espagne.

possède deux quarks particulièrement légers, le u et le d , qui constituent l'essentiel des protons et neutrons. C'est la raison pour laquelle ce type de calculs ne peut se faire que grâce aux supercalculateurs.

Discretiser la QCD sur un réseau d'espace-temps laisse un large arbitraire dans le choix de l'action discrétisée, dont la limite du continu doit redonner l'action de la QCD. Les simulations de QCD sont effectuées par différentes collaborations internationales, qui utilisent chacune divers choix d'action discrétisée. Parmi ces collaborations de calculs sur réseau, la collaboration ETMC (European Twisted Mass Collaboration, <http://www-zeuthen.desy.de/~kjansen/etmc/>) est particulièrement active.

IMPLÉMENTATION SUR BG/Q

Les calculs se déroulent en deux parties. L'objectif de la première, la plus coûteuse numériquement, consiste à produire selon une loi aléatoire bien établie, une « configuration de jauge » à partir d'une autre configuration de jauge. Ces dernières décrivent les gluons, et sont constituées d'une matrice de $SU(3)$ par lien du réseau. Le système part d'une configuration arbitraire (aléatoire ou pas) et plusieurs centaines de configurations sont nécessaires pour thermaliser. Plusieurs milliers d'autres sont ensuite générées, qui seront utilisées pour les « mesures », i.e. pour le calcul des propagateurs, puis de diverses observables. L'algorithme utilisé pour générer les configurations est dérivé

d'algorithmes de dynamique moléculaire (« hybrid Monte-Carlo » ou « polynomial hybrid Monte-Carlo »).

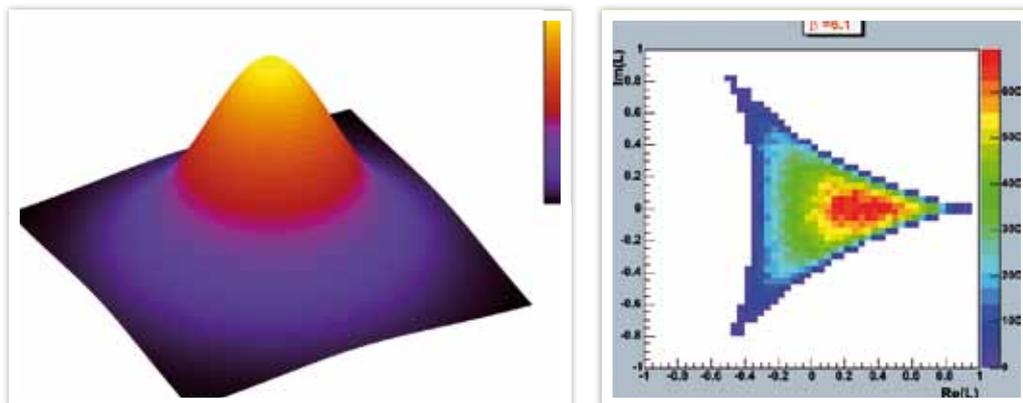
La seconde partie du calcul consiste à calculer les propagateurs des quarks à partir de ces configurations de jauge, en résolvant un large système linéaire creux (par gradient conjugué et ses variantes). Toutes les analyses, i.e. les calculs d'observables extraites en combinant les propagateurs de quarks suivant la quantité physique que l'on souhaite obtenir, se font ensuite sur des PCs ou de petits clusters.

RÉSULTATS ATTENDUS

Afin de contrôler au maximum le calcul de la constante de couplage forte, un nouvel ensemble de configurations a été généré sur Turing, avec une action discrétisée modifiée, mise au point dans le cadre de la collaboration ETMC. Ceci va nous permettre de mieux contrôler les calculs lorsque la masse des quarks devient petite, ainsi que les artefacts réseau.

Une fois extraits, à partir des configurations générées, les propagateurs de quarks et de gluons, ces calculs devraient conduire à la première détermination totalement contrôlée de α_s , et à la comparaison la plus fiable existante entre valeur théorique, extraite des premiers principes, et valeur expérimentale de ce paramètre fondamental du Modèle Standard, fournissant par là même un test de cette théorie.

Enfin, précisons que les configurations générées dans le cadre de notre projet sont mises à la disposition de la collaboration et peuvent être utilisées, de façon générale, pour des études physiques très diverses (physique des mésons, structure des hadrons, ...).



▲ **Figure 2** : Exemple de distribution de champs gluoniques (profil d'instanton, figure de gauche) et boucle de Polyakov (quantité invariante de jauge construite à partir des champs de gluons, figure de droite)

STABMAT

De la stabilité de la matière ordinaire : électromagnétisme et différence de masse des quarks u et d

La stabilité et l'existence même de la matière ordinaire reposent en grande partie sur le fait que le neutron est légèrement plus massif que le proton. Si tel n'était pas le cas, le plus simple des atomes (l'hydrogène) n'existerait pas car son noyau, le proton, se désintégrerait en un neutron, un positon et un neutrino. Par ailleurs, si cette différence de masse était trop grande, le neutron se désintégrerait si rapidement en un proton que les noyaux atomiques plus lourds n'auraient pas vu le jour lors de la nucléosynthèse primordiale.

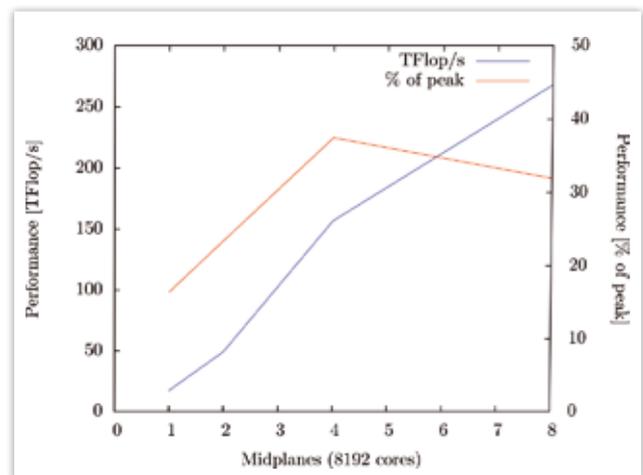
La différence de masse entre neutron (composé de deux quarks d et un u) et proton (composé de deux u et un d) est mesurée de façon très précise : elle ne représente que 0,14 % de leur masse moyenne. Nous avons de fortes raisons de croire que cette différence résulte de la compétition de deux petits effets qui brisent la symétrie d'isospin approximative entre quarks u et d. D'un côté le proton, qui a une charge électrique, voit sa masse augmentée par l'énergie du champ électrique qui l'entoure. De l'autre, le neutron, qui lui est neutre, est rendu plus lourd par la masse un peu plus grande de ses constituants. Si l'expérience suggère clairement que c'est le second effet qui l'emporte, encore faut-il le démontrer !

L'objectif principal de ce grand challenge est de développer les outils permettant de calculer ces petits effets directement à partir de la théorie fondamentale. Une difficulté majeure réside dans le fait que ces effets représentent de toutes petites corrections à des interactions fortes très complexes entre les quarks. Une seconde difficulté importante provient du fait que l'électromagnétisme est une interaction à longue portée que l'on doit pouvoir simuler dans un volume fini tout en contrôlant les distorsions que ce volume induit.

En 2008, notre équipe a contribué à montrer que la masse du proton et, plus généralement, celle des hadrons légers provient, à plus de 95 %, de l'énergie associée aux interactions fortes et non de la masse de leurs constituants. Ces résultats ont été obtenus par des calculs massivement parallèles en chromodynamique quantique (QCD) définie

sur des réseaux d'espace-temps hypercubiques. Ils ont une précision de quelques pour-cents. Les effets que nous souhaitons mettre en évidence aujourd'hui avec Turing, la nouvelle Blue Gene/Q de l'IDRIS (et celle du FZ Jülich en Allemagne), sont de l'ordre du pour-mille.

Pour atteindre cet objectif, nous avons développé des codes qui combinent chromodynamique et électrodynamique quantique (QED), et qui incluent les effets des quarks u, d, s et c. Nous avons fait tourner ces codes sur différentes partitions de Turing, allant du « midplane » (8 192 cœurs) au supercalculateur entier (4 « racks » = 8 « midplanes » = 65 536 cœurs). Les codes sont efficaces sur l'ensemble



▲ **Figure 1** : Performances de nos codes sur Blue Gene/Q. Il s'agit d'une analyse de « strong scaling » sur un réseau $64^3 \times 128$.

des partitions explorées, et nous avons même obtenu une efficacité maximale de 37,5 % du nombre total d'opérations théoriquement possibles sur 2 racks (▲ **Figure 1**).

Ces codes nous ont permis de générer de nombreux jeux de données, chacun contenant de 1 000 à 5 000 échantillons. Ces jeux de données diffèrent par les valeurs des paramètres fondamentaux de QCD et QED (masses



Laurent Lellouch,
Physique des particules élémentaires CNRS et
Aix-Marseille U. / Centre de Physique Théorique

Ces travaux sont menés au sein de la Budapest-Marseille-Wuppertal Collaboration [BMWc], formée d'équipes du Centre de Physique Théorique, de l'université de Wuppertal, du Forschungszentrum Jülich et de l'université de Budapest.

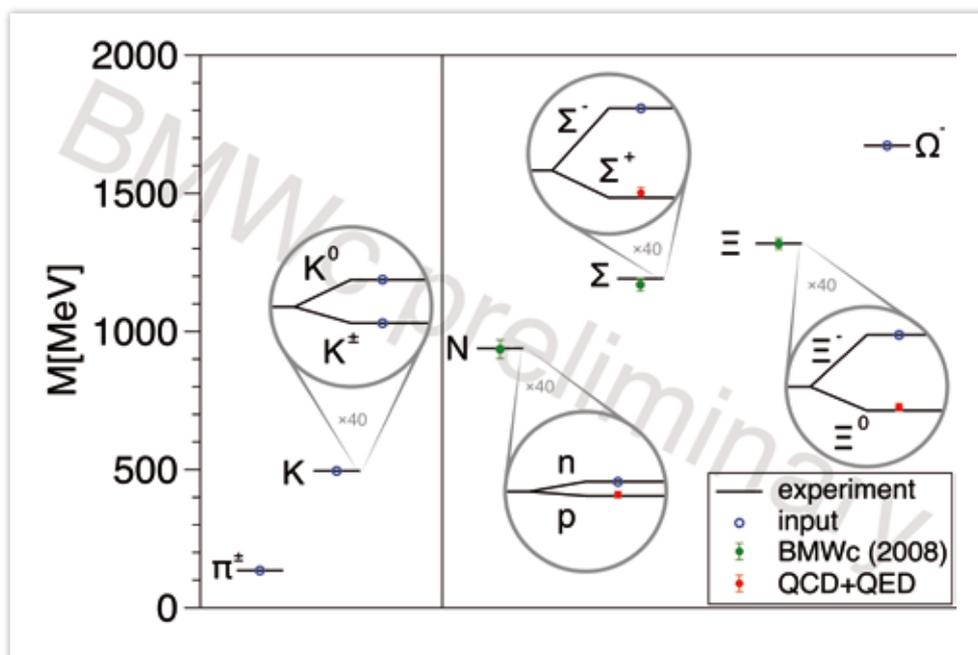
des quarks u, d, s et c, constante de structure fine, α) et par ceux du réseau (la maille et la taille du réseau). Ils nous permettent d'interpoler précisément nos résultats aux valeurs physiques des paramètres fondamentaux et de faire tendre la maille du réseau vers zéro, ainsi que son volume vers l'infini. Les résultats obtenus ne dépendent alors plus que des paramètres de la théorie fondamentale : ce sont des prédictions ab initio.

Étant données la nouveauté et la complexité de ce calcul, il nous reste beaucoup de travail pour comprendre pleinement nos résultats et finaliser le projet. Néanmoins, nous avons pu effectuer une analyse préliminaire qui suggère déjà que le neutron est plus massif que le proton et que les différences de

masse entre d'autres baryons légers, partenaires d'isospin, sont également en accord avec les mesures expérimentales (▼ Figure 2). De surcroît, ces calculs préliminaires semblent indiquer que la toute petite différence de masse neutron-proton est issue de la subtile compensation entre les contributions électromagnétiques et celles provenant de la différence de masse entre quarks u et d.

Outre la démonstration théorique de la stabilité de la matière ordinaire qu'il permettra, l'outil que nous sommes en train de développer sera, à terme, une première mise en œuvre complète du modèle standard des quarks, valable pour des énergies jusqu'à quelques GeV et à des précisions au niveau du pour-mille. Cet outil représente donc un premier pas vers

la prochaine génération de simulations numériques du monde hadronique. Combiné avec l'expérience, il permettra de tester le modèle standard des quarks avec une précision jamais atteinte jusqu'ici et pourrait aider à mettre en évidence une physique fondamentale nouvelle, si celle-ci est accessible.



▲ **Figure 2** : Masses de quelques hadrons légers. Le calcul des masses des particules correspondant aux points bleus sert à fixer les paramètres de la théorie : les masses des quarks u, d et s, et la maille en unités physiques. Les points rouges N, Σ et Ξ sont les masses calculées de ces baryons dans la limite d'isospin, avec QCD seule (S. Dürr et al. [BMWc], Science 322 (2008) 1224). Les encarts, qui représentent des détails agrandis d'un facteur 40, montrent les résultats préliminaires de nos nouveaux calculs en QCD+QED pour la structure « hyperfine » du spectre de masse, due à la brisure de la symétrie d'isospin. En particulier, ces résultats indiquent que le neutron est plus massif que le proton et que les autres différences de masse sont également en accord avec l'expérience.

SELTRAN Surface d'énergie libre de transfert d'acides aminés au travers de membranes biologiques

D. Bonhenry, F. Dehez et M. Tarek, CNRS, UMR 7565 Structure et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes Université de Lorraine, Nancy

La compréhension des phénomènes liés au transfert de composés organiques synthétiques ou naturels à travers des membranes biologiques, barrière naturelle de la cellule, peut apporter des réponses à des questions fondamentales tant sur les origines de la vie cellulaire que sur des thématiques plus d'actualité comme l'interaction et le transfert de molécules à visées thérapeutiques à travers de membranes cellulaires, sujet de notre étude. L'évolution des outils d'analyse et les procédures expérimentales actuelles ont permis de mieux quantifier le passage de molécules que ce soit dans des conditions in-vitro voire in-vivo. Cependant, ces outils ne possèdent pas la résolution nécessaire pour capturer les phénomènes se produisant à l'échelle moléculaire.

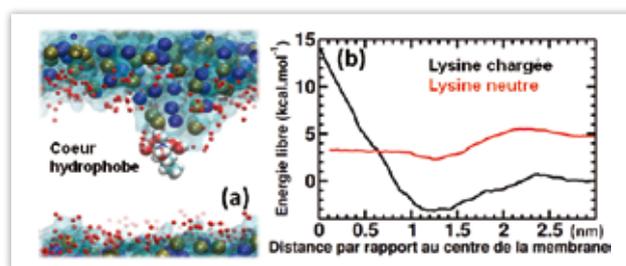
Une technique couramment utilisée pour étudier les systèmes membranaires est la dynamique moléculaire (DM). Au cours d'une simulation de DM, les équations du mouvement sont numériquement résolues pour chaque atome où les forces agissantes sur ce dernier sont dérivées d'un potentiel (ou champ de force) pré-établi contenant toutes les informations nécessaires afin de décrire les interactions entre atomes. La trajectoire de chaque atome peut ainsi être obtenue grâce à la résolution des équations du mouvement classiques. L'analyse de la trajectoire permet alors d'avoir accès à des grandeurs structurales (distance entre deux groupes d'atomes, nombre moyens de voisins, ...), ou encore dynamiques.

Des simulations classiques de DM ne sont cependant pas exploitables pour explorer des phénomènes aussi complexes et lents (échelle de temps de micro-secondes) que la translocation des espèces chimiques au travers de membranes. Il est donc nécessaire de recourir à des techniques spécifiques, comme les méthodes « d'énergie libre ». L'énergie libre constitue en effet la quantité thermodynamique la plus importante permettant la description de la façon dont les molécules s'identifient, s'associent ou bien réagissent. Plusieurs méthodes existent pour estimer des profils libres d'énergie le long d'une coordonnée de réaction ou variable collective (CV) choisie. Parmi celles-ci, la métadynamique permet d'explorer par exemple une surface d'énergie libre (SEL) le long d'un nombre limité de CVs en ajoutant successivement des biais au profil d'énergie afin

de permettre au système d'échapper aux puits de potentiels. Le choix de la CV est crucial au succès de cette méthode. Dans le contexte de notre étude, la CV choisie est la position des espèces le long de la normale à la membrane, combinée par exemple à d'autres CVs comme ceux qui décrivent l'hydratation du composé.

Les enjeux liés à ce grand challenge furent multiples, premièrement la possibilité d'avoir accès à des temps de simulations conséquents couplé à des machines de calcul désignées pour le calcul massivement parallèle. Ceci a permis de tester les capacités d'une nouvelle méthode d'énergie libre, méthode habituellement coûteuse en temps de calcul, récemment implantée dans le code de dynamique moléculaire Gromacs. Grâce à plusieurs simulations menées en parallèle (walkers ou replicas) et communiquant les résultats au cours du calcul, on optimise d'une manière significative le temps nécessaire pour l'exploration de la surface d'énergie libre. Notons que cette démarche est une première pour ce type de système/problématique.

Nous avons choisi des acides aminés simples (les formes neutres et chargées d'analogue de lysine) comme cas d'espèce pour notre étude. Nos investigations précédentes et des travaux d'autres chercheurs ont montré que l'obtention de profils d'énergie libre correctement convergés dans des systèmes aussi simples que ceux utilisés dans ce projet (eau + molécules lipidiques formant une bicouche + la molécule à transférer) n'est pas une tâche aussi évidente. Ceci est notamment lié à la réorganisation des lipides



▲ **Figure 1** : (a) Configuration d'une lysine chargée à l'intérieur d'une bicouche lipidique. La lysine reste hydratée par plusieurs molécules d'eau qui stabilisent sa présence au cœur hydrophobe. Notez la déformation de la membrane au niveau des têtes polaires lipidiques PO4 (bleu) et N(CH₃)₃ (brun.) (b) profils d'énergie libre 1D de transfert des espèces chargée et neutre de la lysine à travers la membrane.



▲ M. Tarek⁴

constituant la membrane dû à la présence du peptide pouvant altérer de manière plus ou moins importante la structure de la bicouche lipidique (▼ Figure 1a). Les profils d'énergie libre 1D (▼ Figure 1b) de la translocation d'un acide aminé à travers de bicouches lipidiques ont été estimés dans le passé en utilisant « des techniques conventionnelles » comme celle du biais de force adaptative (ABF) sur des machines Tier 1 (JADE, GENCI c2012075136). Nous avons utilisé ici la méthode DaFED-UFED qui propose un cadre général pour l'échantillonnage

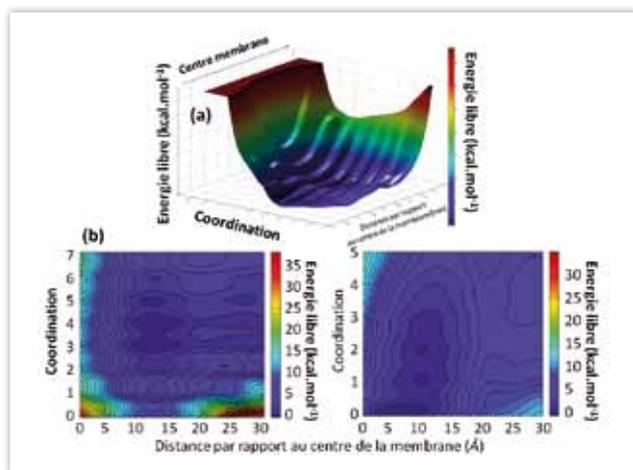
efficace des équilibres conformationnels dans les systèmes complexes et la génération d'hyper-surfaces d'énergie libre en fonction de plusieurs variables collectives. Testée sur des modèles simples, la méthode s'est avérée largement plus efficace (convergence 2 à 20 fois plus rapide) que la métadynamique ou l'ABF.

Grâce au grand challenge mis en place par GENCI sur la machine Ada, nous avons utilisé cette méthode avec succès pour établir des SEL multidimensionnelles du transfert de la lysine chargée à travers une membrane lipidique où la SEL a pu être évaluée non seulement en fonction de la distance entre le soluté et le centre de la membrane (1D) mais également en fonction de l'hydratation du composé (▼ Figure 2). Comme pour le cas 1D, une importante barrière d'énergie est présente au centre de la membrane, mais nous avons mis en évidence que plusieurs degrés d'hydratation sont possibles pour une même position dans la bicouche. Ces résultats laissent apparaître une dégénérescence de l'état d'hydratation du soluté pour une position à l'intérieur de la

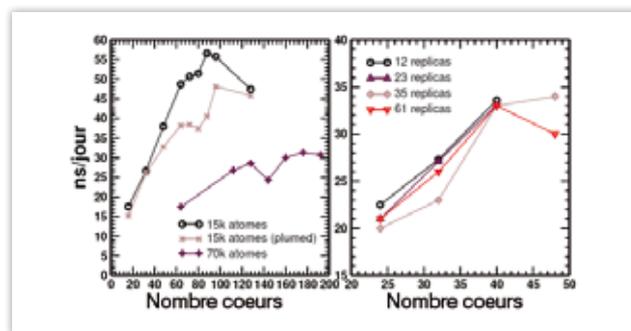
membrane, comme à 1,5 nm du centre où la première sphère de solvation contient de 2 à 5 molécules d'eau comparé à l'état en solution (>3,0 nm) où le nombre de coordination à énergie minimale se situe autour de 2-3. De surcroît, les résultats montrent qu'à l'intérieur de la membrane, la lysine chargée ne se retrouve jamais sans molécule d'eau à son voisinage, même dans la partie hydrophobe du lipide. Au contraire, des configurations avec une quantité d'eau relativement importante semblent possibles (jusqu'à 6 molécules). Un autre profil similaire, mais pour une molécule polaire neutre a également pu être construit où, dans ce cas, la coordination (taux d'hydratation) joue un rôle plus important au niveau de l'interface du lipide.

Les SEL de l'espèce chargée et de l'espèce non chargée peuvent être couplés pour déterminer le pKa local de la lysine, bien sûr la perméabilité de la membrane à cette espèce et les temps caractéristiques de transfert non assisté. Ces données sont capitales pour estimer le flux à travers des modèles de membranes, quantité souvent recherchée pour déterminer si oui ou non un composé, comme un médicament, peut atteindre sa cible à l'intérieur d'une cellule.

Au-delà de cet aspect, l'accès à de telles données dans des temps record est évidemment très recherché. Un des avantages des méthodes et protocoles utilisés ici est d'optimiser ce temps de calcul utilisant les moyens de GENCI. Les benchmarks effectués sur Ada (▼ Figure 3) pour nos systèmes (~ 15 000 atomes) montrent qu'on peut générer jusqu'à 50 ns de trajectoire de DM par jour en utilisant 64 cœurs de calcul et jusqu'à 30 ns / jour en utilisant la méthode d'énergie libre à tester (plug-in plumed). En utilisant ainsi 61 répliques (ou 61 calculs en parallèle qui échangent les données sur les SEL explorées), il était possible de générer jusqu'à 2 µs de trajectoire en une journée, sans aucune perte de performance. Une telle trajectoire est suffisante pour établir une SEL convergée, ce qui constitue à notre connaissance un challenge jusque-là non atteint.



▲ Figure 2 : Surface d'énergie libre multi-dimensionnelle où l'énergie libre n'est plus seulement évaluée en fonction de la seule distance entre le soluté et le centre de la membrane mais également en prenant en compte le degré d'hydratation de la partie chargée du soluté. (a) profil original pour la lysine chargée. (b) projection des profils de la lysine chargée (gauche) et de la lysine neutre (droite).



▲ Figure 3 : Performance sur la machine Ada. Benchmarks sur différents systèmes en utilisant GROMACS et GROMACS patché avec le plug-in PLUMED permettant d'utiliser la nouvelle méthode d'énergie libre. À droite : benchmark sur un système de 15 000 atomes avec plusieurs répliques en utilisant la version de GROMACS patché avec plumed.

Références : 1 - Neale, C., Bennett, W. F. D., Tieleman, D. P. & Pomès, R. Statistical Convergence of Equilibrium Properties in Simulations of Molecular Solutes Embedded in Lipid Bilayers. *J. Chem. Theory Comput.* 7, 4175–4188 (2011). 2 - Chen, M., Cuendet, M. A. & Tuckerman, M. E. Heating and flooding: A unified approach for rapid generation of free energy surfaces. *J. Chem. Phys.* 137, 024102 (2012). 3 - Une limitation temporaire propre à la configuration de la machine Ada pendant la période du grand challenge n'a pas permis d'augmenter au-delà le nombre de replicas. Nous avons toutefois vérifié que cela est possible en passant des tests concluants sur une machine équivalente jusqu'à 121 replicas, ce qui montre qu'on peut générer de telles SEL en moins de 12 h de calcul. 4 - mounir.tarek@univ-lorraine.fr

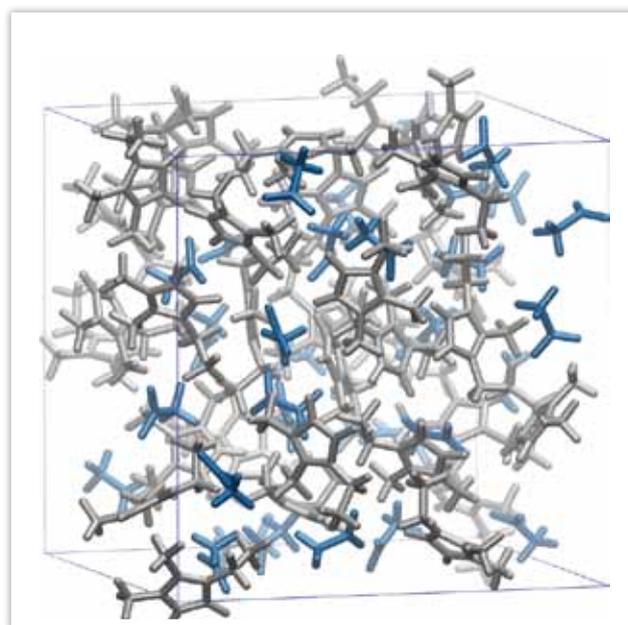
Simulations de phases liquides par dynamique moléculaire *ab initio*

La modélisation de phases liquides par des simulations de dynamique moléculaire a permis des avancées très importantes pour la compréhension de leurs structures, leurs comportements dynamiques et leurs propriétés physico-chimiques.

Actuellement, la majeure partie des recherches se concentrent sur l'eau, et mettent en jeu des simulations de dynamique moléculaire *ab initio*, qui impliquent la méthode de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Cependant, cette approche présente encore des défaillances puisque le liquide modélisé est généralement trop structuré et diffuse trop lentement par rapport à l'expérience. Le choix de la fonctionnelle est évidemment crucial et de nombreuses études sont menées actuellement pour mettre au point des protocoles de simulation fournissant une description plus réaliste de l'eau et des solutions aqueuses.

Cependant, peu d'études concernent les autres liquides. Il serait pourtant très important de comprendre en quelle mesure les résultats obtenus sur l'eau sont transposables à des liquides plus généralement utilisés comme solvants en chimie, en particulier pour effectuer des réactions de catalyse homogène qui nécessitent bien souvent un milieu anhydre.

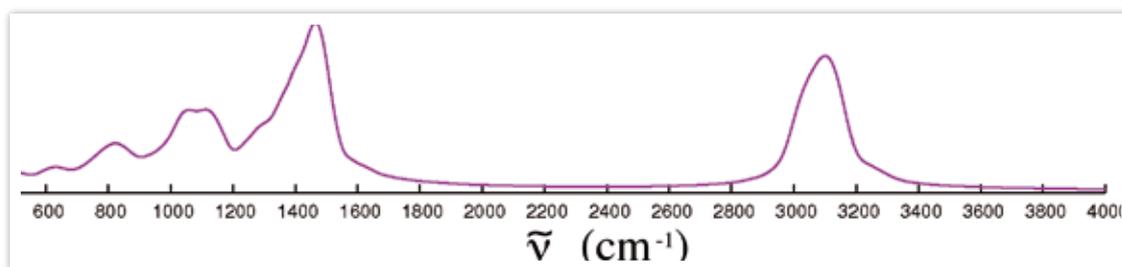
Dans le cadre de la campagne « Grands challenges scientifiques », des solvants non-aqueux ont été modélisés par dynamique moléculaire *ab initio*. Les performances de plusieurs fonctionnelles ont été évaluées pour décrire le comportement dynamique et la structure moyenne des liquides. Par exemple, la fonctionnelle PBE-D3 s'est révélée satisfaisante pour représenter un système modèle composé de 32 paires d'ions d'un liquide ionique (> 900 atomes) sur une durée de 20 picosecondes (▼ **Figure 1** les cations sont représentés en gris, et les anions sont représentés en bleu). Les interactions cations-anions ont été analysées et la



▲ **Figure 1** : Solution modèle : un liquide ionique simulé par dynamique moléculaire *ab initio*



Nicolas Sieffert - nicolas.sieffert@ujf-grenoble.fr
Département de Chimie Moléculaire. UMR CNRS 5250.
Université Joseph Fourier Grenoble I.
301 rue de la Chimie 38041 Grenoble Cedex 9



▲ **Figure 2** : Spectre de vibration du liquide calculé à partir des simulations, sur une échelle de temps de 15 ps

structure moyenne du liquide a pu être décrite à l'échelle de l'atome. Le spectre de vibration a également pu être calculé à partir des simulations (▲ **Figure 2**) ; celui-ci pourra être directement comparé à l'expérience.

Ces calculs ont également permis de valider un protocole DFT/MM, plus efficace en terme de temps machine, impliquant une description mixte du liquide : une partie est représentée au niveau DFT et une autre à un niveau de calcul inférieur (MM), sur le modèle de résultats récents obtenus sur le méthanol (Sieffert N. ; Bühl M. ; Gaigeot M.-P. ; Morrison. C. A., J. Chem. Theory. Comput. 2013, 9, 106). Ainsi, des solutions de taille supérieure (~ 10 000 atomes)

ont également été modélisées, ce qui a permis de décrire les modes de solvation de molécules réactives dans les liquides ioniques.

Ces simulations ont été réalisées avec le logiciel CP2K (www.cp2k.org) qui tire profit de l'utilisation du très grand nombre de cœurs disponibles sur la machine Ada. De plus, ce projet a bénéficié de l'assistance technique fournie par l'IDRIS. En particulier, Romuald Carpentier et Fabien Leydier sont remerciés.

BIGDFT

Étude *ab initio* de la structure et de la cinétique des matériaux d'anode pour les batteries ion-lithium

Sridevi Krishnan, Damien Caliste, Thierry Deutsch, Luigi Genovese et Pascal Pochet, Laboratoire de Simulation atomistique (L_Sim), SP2M, INAC, CEA-UJF, Grenoble

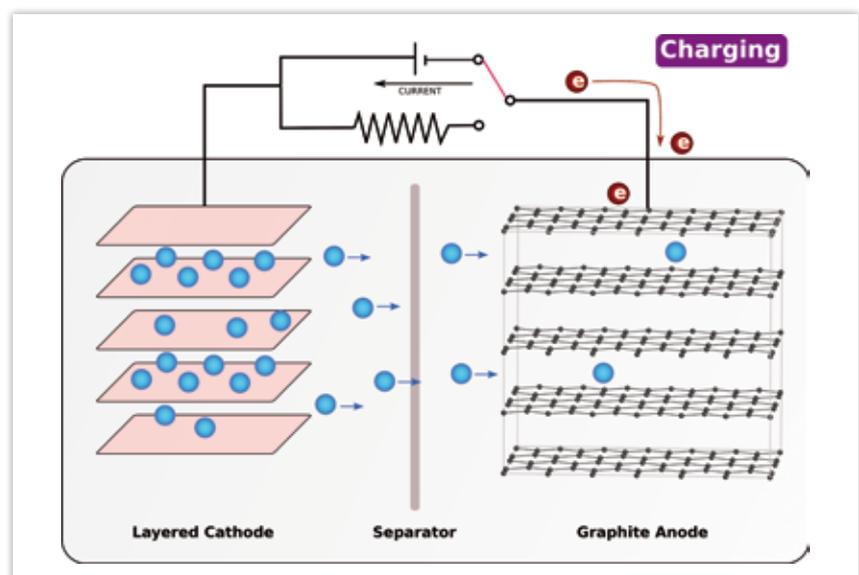
Les matériaux d'électrode sont des éléments clés dans les batteries ion-lithium qui alimentent nos appareils électroniques portables. Le principe-clé d'une telle batterie est de transférer des ions lithium entre les deux électrodes à travers un électrolyte. Ce mouvement continu de va-et-vient des ions lithium introduit des changements structuraux dans les deux électrodes (anode et cathode). Étudier le système à l'échelle atomique permet d'élucider, à l'échelle la plus fine, les changements structuraux, la stabilité des phases, les propriétés de l'interface, les mécanismes responsables du vieillissement, etc. Cette connaissance est cruciale pour contribuer à améliorer les matériaux d'électrode actuels et aider à la conception de meilleurs matériaux.

Les méthodes *ab initio* sont un excellent outil pour étudier les matériaux d'électrodes à l'échelle atomique, car elles prédisent les propriétés des composés en ne tenant compte que de la nature des atomes. Elles fournissent une prédiction fiable des propriétés structurales et électroniques des matériaux simulés. Ainsi la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) a déjà été utilisée avec succès pour prédire les propriétés de plusieurs matériaux d'électrodes avant leurs synthèses expérimentales¹. Il convient de noter que ce genre de calculs précis est très coûteux en temps de calcul. Toutefois, la disponibilité de codes robustes et efficaces et la puissance croissante des ordinateurs permettent de plus en plus de faire ces calculs sur des systèmes constitués de plusieurs centaines d'atomes.

BigDFT, le code utilisé dans cette étude, est un code DFT de structure électronique massivement parallèle utilisant les fonctions ondelettes dans l'approximation dite des pseudopotentiels (les électrons de cœur, inertes chimiquement, ne sont pas considérés explicitement). Les ondelettes forment une base de

fonctions qui permet un maillage adaptatif avec deux niveaux de résolution pour décrire précisément les états des électrons et la densité électronique. En particulier, l'équation de Poisson est résolue en utilisant un formalisme de fonctions de Green, que ce soit pour des systèmes périodiques, des surfaces ou des systèmes isolés en considérant les conditions aux limites appropriées.

Le graphite est un des matériaux les plus couramment utilisés pour l'anode dans les batteries ion-lithium, car il permet l'intercalation réversible des ions lithium avec une bonne stabilité structurale et une bonne interface. Pendant le cycle de charge d'une batterie ion-lithium (▼ Figure 1), les ions lithium s'oxydent à la cathode puis sont transportés à travers l'électrolyte jusqu'à l'anode (graphite), où ils sont réduits selon la réaction suivante: $x \text{Li}^+ + x \text{e}^- + \text{C}_6 \rightleftharpoons \text{Li}_x\text{C}_6$ ($0 \leq x \leq 1$). L'intercalation des ions lithium dans le graphite se fait en passant par quatre stades bien définis dont le composé concentré de graphite lithium intercalé en pleine charge LiC_6 et le graphite délithié pendant le cycle de décharge sont les deux étapes extrêmes. Le stade 'N' (en



▲ Figure 1 : Vue schématique d'un cycle de charge d'une batterie avec une anode en graphite



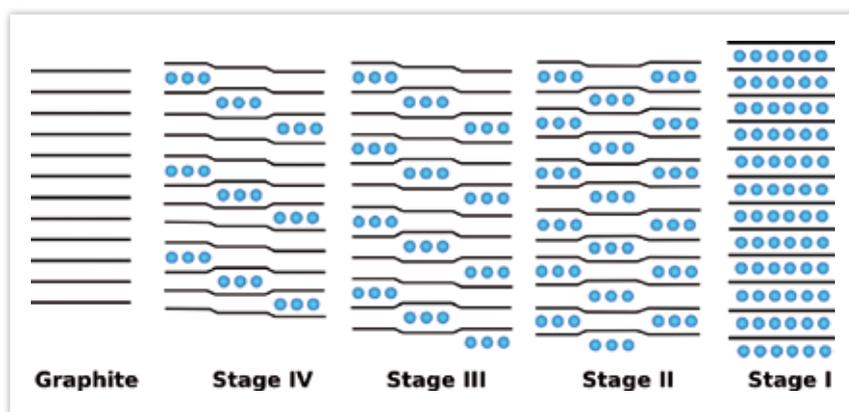
De la gauche vers la droite :
Thierry Deutsch, Sridevi Krishnan,
Pascal Pochet et Luigi Genovese

chiffre romain) correspond au nombre « n » de plans de graphène en sandwich entre deux plans lithium (« n » varie de IV à I dans le graphite intercalé au lithium). Nous nous sommes intéressés à étudier les propriétés du matériau de l'anode et les changements structuraux impliqués lors de l'utilisation de la batterie. La charge et le taux de décharge de la batterie sont pilotés par la cinétique de diffusion du lithium dans les électrodes, l'électrolyte et leurs interfaces. Au cours des cycles de charge, les ions lithium sont transportés vers l'anode en présence d'une tension. On est intéressé plus spécifiquement par l'énergie de la barrière de migration et le mécanisme correspondant pour la diffusion du lithium en présence d'un champ électrique externe. Ceci peut être simulé grâce à BigDFT en utilisant des conditions aux limites de surface. En outre, l'effet de la phase qui se forme à l'interface entre le graphite et l'électrolyte² peut également être pris en compte en simulant explicitement les molécules de l'électrolyte à l'interface.

Le mécanisme par stades et la transition entre ces stades dans ce composé ne sont pas aujourd'hui encore clairement compris. Daumas et Herald³ ont proposé un modèle structural appelé le modèle par domaine (▼ Figure 2), dans lequel les ions lithium s'intercalent dans chaque couche de graphite en formant des domaines. Ainsi, au lieu du modèle

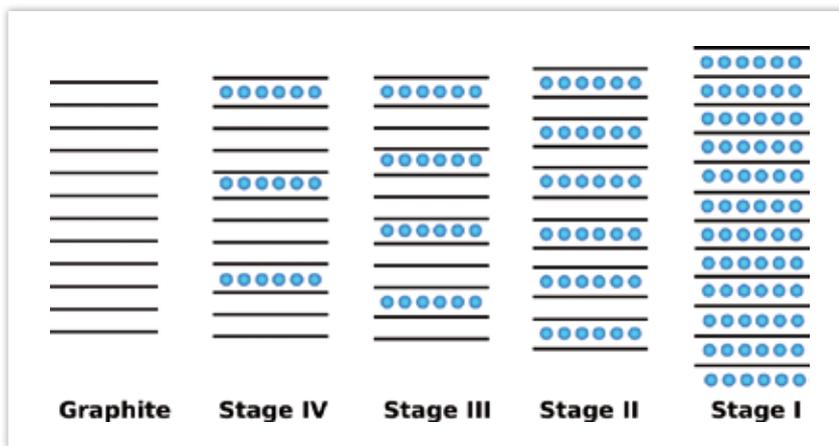
standard constitué de couches continues d'atomes de lithium intercalés entre les plans de graphite (▼ Figure 3), Daumas et Herald ont proposé l'idée que tous les plans de graphite peuvent contenir une couche intercalaire adjacente d'ions Li tant que le stade global considéré est localement maintenu comme étant le même. En outre, si les ions intercalés sont présents comme des domaines dans tous les plans, alors une transformation globale d'un stade à l'autre peut se produire par réarrangement des domaines sans élimination complète des ions intercalés.

Nous nous sommes ainsi intéressés à la simulation dans le formalisme DFT du modèle de domaine proposé pour le graphite lithium intercalé afin de reproduire ce comportement par stades. Dans la pratique, la cellule unité est petite dans le modèle standard (quelques dizaines d'atomes), autorisant sa modélisation depuis de nombreuses années. Au contraire, dans le modèle de domaine, la taille du système augmente de façon significative (en centaines d'atomes) et augmente encore avec la taille croissante des domaines et des étapes à considérer, nécessitant l'utilisation de supercalculateurs. Par conséquent, nous avons étudié deux systèmes où les domaines sont des bandes de lithium et un autre où ils forment des îlots. L'avantage d'utiliser des bandes est que l'on peut considérer des systèmes périodiques dans une direction parallèle à la longueur de la bande, ce qui réduit la taille de l'unité de répétition en cours d'étude et donc le nombre d'atomes à simuler.



▲ Figure 2 : Modèle en domaine proposé par Daumas et Herald pour les quatre stades d'intercalation du lithium dans le graphite.

Nous avons considéré les stades II et III pour trois tailles de domaines différentes à la fois dans le modèle de bande et dans le modèle d'îlot. La taille du système varie de 208 atomes pour le plus petit modèle (stade II en bande), à 625 atomes pour le modèle le plus grand (stade II en îlot). Par exemple, l'un des systèmes étudiés (le plus petit modèle stade III en bande) comporte 450 atomes avec un nombre d'électrons de 1 800. Ces calculs sont extrêmement



▲ **Figure 3 :** Modèle standard pour les quatre stades d'intercalation du lithium dans le graphite.

lourds, ainsi l'optimisation avec BigDFT de la structure d'un tel système en utilisant 256 nœuds chacun avec 16 cœurs de calcul prend près de 70 heures. Afin d'avoir des résultats cohérents pour chaque stade, nous avons planifié des calculs avec une taille croissante de domaine.

différentes. Par conséquent, une étude plus complète du modèle de domaine avec des tailles et des formes variables d'îlots est essentielle pour tirer des conclusions définitives sur la structure des domaines. Cette nouvelle étude sera très gourmande en temps de calcul !

Dans le cadre de ce grand challenge, l'étude a pu être complétée uniquement dans le cas du modèle de bandes qui présente des tailles de système moindres. Nos résultats démontrent une plus grande stabilité du modèle de domaine en bande, pour le stade III par rapport au modèle standard. Pour le stade II, les deux types de modèles ont des énergies comparables pour les trois tailles de domaine inclus dans cette étude. Bien que le modèle de domaines en bandes nous montre une tendance intéressante, cette forme de domaines en bandes est hautement improbable dans les systèmes réels où ils seront de préférence des îlots de formes et tailles

Références

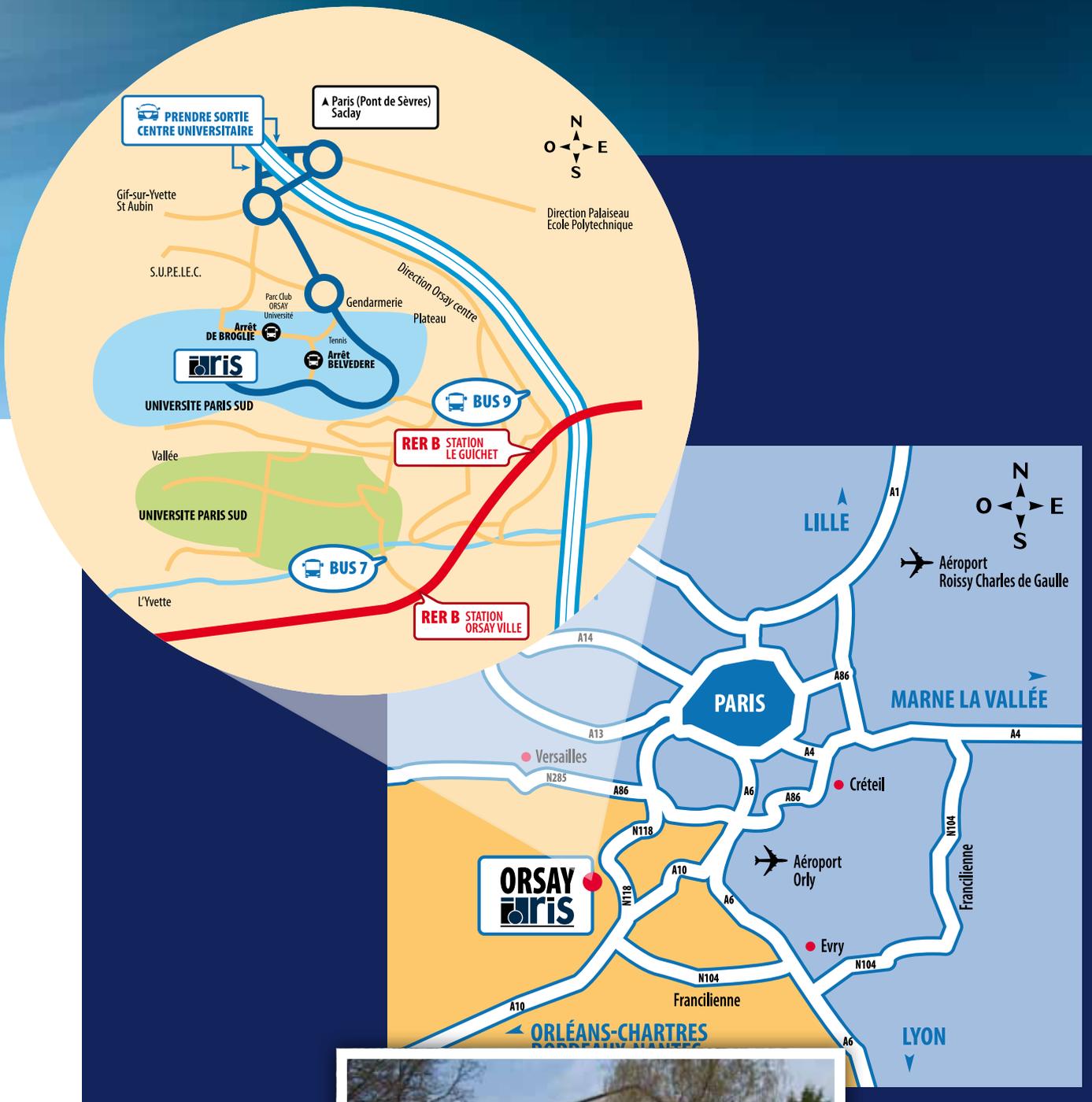
- 1 - G. Ceder, G. Hautier, A. Jain, and S. P. Ong, *MRS Bulletin* 36, 185–191 (2011).
- 2 - P. Verma, P. Maire, and P. Novák, *Electrochimica Acta* 55, 6332–6341 (2010).
- 3 - N. Daumas, A. Herold, *C.R. Acad. Sc. Paris* 268, 373–375 (1969).

▼ Ada, machine IBMX3750



▼ Turing, machine IBM BLUE GENE/Q





IDRIS-CNRS

Institut du développement et des ressources en informatique scientifique
 Rue John von Neumann, BP 167, Bâtiment 506, 91403 Orsay Cedex – France
www.idris.fr

