



Journée CCRT 2019

1. Optimisation des accélérateurs présents et futurs du synchrotron SOLEIL

Laurent Nadolski (Soleil)

SOLEIL est le centre français de rayonnement synchrotron, situé sur le plateau de Saclay près de Paris. Il s'agit d'un instrument pluridisciplinaire et d'un laboratoire de recherche, ayant pour mission de conduire des programmes de recherche en utilisant le rayonnement synchrotron, de développer une instrumentation de pointe sur les lignes de lumière et de mettre celles-ci à la disposition de la communauté scientifique. Le synchrotron SOLEIL, outil unique à la fois en matière de recherche académique et d'applications industrielles, a ouvert en 2008. Il est utilisé annuellement par plusieurs milliers de chercheurs français et étrangers, à travers un large éventail de disciplines telles que la physique, la biologie, la chimie, l'astrophysique, l'environnement, les sciences de la terre, etc. SOLEIL s'appuie sur une source de rayonnement remarquable à la fois en termes de flux, de brillance et de stabilité. Cette Très Grande Infrastructure de Recherche, partenaire de l'Université Paris-Saclay, est constituée en société « civile » fondée conjointement par le CNRS et le CEA. Un programme d'avant-projet simplifié est également lancé depuis début 2019 pour construire une source de très faible émittance avec une réduction d'un facteur 50 permettant d'ouvrir de nouvelles perspectives scientifiques. Nous présenterons comment les ressources de calcul du CCRT permettent d'optimiser les performances des accélérateurs d'aujourd'hui et demain.

2. Intérêt du calcul haute performance dans le domaine des risques industriels

Benjamin Truchot - Georges Picot (INERIS)

3. Is Deep Reinforcement Learning Really Superhuman on Atari?

Emilie WIRBEL (Valeo)

L'apprentissage par renforcement est une piste particulièrement prometteuse de l'intelligence artificielle (IA) : on cherche à apprendre des actions optimales, et donc potentiellement surhumaines, à l'aide d'un système de recherche de récompense. Dans cette optique, Valeo étudie les possibilités d'utilisation du renforcement pour le véhicule autonome, dans le cadre d'une thèse CIFRE au sein du Driving Assistance Research (Valeo CDA/CDV). Pour évaluer ces techniques, la communauté scientifique s'intéresse aux jeux, qui sont un terrain d'expérimentation très adapté et contrôlé. De tels systèmes ont récemment obtenu des résultats extrêmement impressionnants, par exemple en battant les meilleurs joueurs humains au Go, réputé pendant longtemps inatteignable pour une IA. Un ensemble de jeux sert régulièrement de référence pour le renforcement: la série de jeux Atari 2600, qui comporte 61 jeux différents, dont les célèbres Space Invaders, Pong etc.

Journée CCRT 2019

C'est donc ce cadre qui a été choisi pour des premiers travaux d'étude d'un nouvel algorithme de renforcement par le doctorant CIFRE, afin notamment d'évaluer son efficacité.

La communauté scientifique considère généralement que les IA par renforcement ont obtenu des performances surhumaines sur les jeux Atari, qui sont donc souvent considérés comme résolus. Cependant, ce résultat doit être nuancé par plusieurs facteurs. Tout d'abord, la "crise de reproductibilité" que traverse le domaine du renforcement : de nombreux articles négligent des facteurs qui ont un impact potentiellement énorme sur la performance finale de l'IA, ou ne le rapportent pas correctement. Cette imprécision est aggravée par la difficulté particulière à reproduire des résultats dans ce domaine, du fait des ressources très importantes nécessaires. De plus, la comparaison avec les humains est basée sur une série de scores de référence, car ces jeux ne sont pas basés sur un duel avec un autre joueur. Dans cet exposé, nous montrons que non seulement la référence traditionnellement utilisée sous-estime très fortement la meilleure performance humaine possible, mais aussi que certains facteurs d'entraînement et d'évaluation de l'IA ont un impact drastique sur les résultats. Nous présentons une série de recommandations pour l'évaluation sur Atari, et une étude d'impact réalisée à l'aide des machines du CCRT.

4. Current Use of High Fidelity CFD Simulation at VALEO THS - Nicolas FRANCOIS (Valeo)

Valeo Systèmes Thermiques développe et fabrique des systèmes, échangeurs de chaleur et composants pour optimiser la gestion thermique des véhicules et le confort des passagers en cabine, c'est à dire :

- Réduire les émissions polluantes produites par les véhicules équipés de moteurs à combustion interne,
- Optimiser l'autonomie et de la durée de vie des batteries des véhicules hybrides et électriques,
- Protéger la santé et le bien-être des passagers.

Ces dernières années, la R&D connaît une véritable mutation et se rationalise avec une volonté d'augmenter son efficacité, réduire ses cycles et ses coûts de développement, et améliorer sa capacité à innover. La R&D se transforme. Tournée vers la digitalisation, elle s'appuie notamment sur la simulation numérique telle que la CFD (Computational Fluid Dynamics) pour optimiser les concepts, orienter ses choix techniques, prendre des décisions et s'engager auprès des clients. Son utilisation devient un atout majeur pour proposer des produits innovants et compétitifs. Cette forte sollicitation de la simulation par les équipes R&D, nécessite une grande rigueur dans la mise en place et la validation des simulations qui seront ensuite déployées et appliquées dans les projets. Pour répondre à ces nouveaux défis, la simulation CFD se tourne vers les simulations de haute-fidélité, complexes et coûteuses en temps et en moyens de calculs telles que les simulations des grandes échelles (Large Eddy Simulation), la méthode de Lattice Boltzmann (LBM) ... Grâce aux moyens de calculs intensifs que propose le CCRT, la simulation haute-fidélité devient donc accessible pour le secteur industriel afin de prédire des physiques complexes, d'améliorer la corrélation simulation-essais, et de garantir un indice de confiance élevé sur la précision des simulations.

Journée CCRT 2019

Quatre exemples d'application sont présentés. Le premier concerne une simulation diphasique pour appréhender les phénomènes d'ébullition dans les refroidisseurs de gaz d'échappement qui est un risque majeur pour la durée de vie de l'échangeur. La nouveauté de cette simulation est de tenir compte des effets d'ébullition nucléée sous-refroidie à la paroi. La deuxième présente des simulations instationnaires URANS/DES pour optimiser les performances aérauliques du système de ventilation. Le troisième détaille l'apport de la simulation LES pour étudier les phénomènes pariétaux induits par des micros structurations de surface afin d'augmenter les transferts thermiques des échangeurs de chaleur compacts. Et le quatrième aborde la simulation aéro-acoustique à partir de la méthode LBM pour prédire la puissance acoustique et identifier les sources de bruit des appareils de climatisation.

5. Le jumeau numérique : un levier d'amélioration de la compétitivité

Jean-Paul Martinaud, Guillaume Reille, Gilles Salin (Thalès)

THALES DMS est engagé dans une démarche d'amélioration constante de sa compétitivité. Parmi les leviers permettant de progresser dans cet axe, le recours à la simulation physique prend toute sa place. Parmi les équipements conçus par THALES DMS, nombreux sont ceux faisant intervenir une ou des antennes. Très tôt THALES DMS s'est doté d'un logiciel de simulation électromagnétique développé en interne permettant l'analyse et les études de design de ces antennes. Aujourd'hui ces simulations ont atteint un niveau de maturité permettant la construction de jumeaux numériques Ceci est illustré dans cette présentation en utilisant la problématique de la mise au point d'antennes actives. La technique du 'jumeau numérique' appliquée à ce type d'antenne est présentée, ainsi que la place du calcul HPC au sein de ce dernier. L'utilisation des données issues de ces simulations menées sur calculateurs parallèles dans un modèle global d'antenne (le jumeau numérique) est alors présentée. Cette utilisation permet d'envisager une nouvelle technique de calibration des antennes. Cette technique autorise la réduction du besoin en moyens lourds de mesures et une réduction très importante de la quantité de mesures nécessaire en comparaison des techniques habituellement utilisées. Ces deux points permettent un gain de temps substantiel dans la mise au point des antennes ce qui se traduit par une amélioration non négligeable de notre compétitivité.

6. Le calcul intensif au service du nucléaire de demain

Emeric Brun et Xavier Raepsaet (CEA/DEN)

Au centre des missions de la Direction de l'Energie Nucléaire du CEA (DEN) se trouve la simulation numérique complète et prédictive des réacteurs et des usines du cycle (amont et aval, jusqu'au stockage), en situations normales et accidentelles. Ces travaux de simulation mobilisent des disciplines-clés que sont la **neutronique**, associée à la **physique nucléaire**, la **radioprotection**, la **mécanique des fluides**, la **thermomécanique des structures**, la **science des matériaux** (simulation du combustible et des autres constituants des installations), la **chimie** (simulation de l'extraction liquide-liquide, de la corrosion, de la vitrification, ...). Compte tenu de l'interdépendance des phénomènes physiques qu'elles modélisent, ces disciplines interviennent souvent de façon liée et la simulation des réacteurs est donc nécessairement multi-physique.

Journée CCRT 2019

La démarche de simulation numérique de la DEN s'appuie sur le développement de méthodes et d'outils de calcul scientifique (OCS), sur leur validation et leur mise en œuvre à travers une approche par échelle que l'on retrouve au sein de chaque discipline. Pour ce faire, la DEN a de plus en plus recours aux moyens de calcul intensif. Cependant, deux composantes sont indispensables l'une pour l'autre : la simulation numérique et l'expérimentation. Le développement des simulations numériques a renforcé le besoin de mesures expérimentales ; il a accru l'efficacité de leur utilisation. Les progrès recherchés sont rendus possibles par l'amélioration des modèles, et par le progrès conjoint des ordinateurs, du génie logiciel et des mathématiques appliquées.

La présentation DEN met en relief quelques exemples de cette démarche globale à travers des cas d'études menés dans le cadre des projets du CEA (amélioration des données nucléaires, projet RJH) ou bien dans le cadre de projets avec les industriels EDF et Framatome (cœur EPR).

7. Modélisation des écoulements diphasiques dans les pores déformables avec Smoothed Particles Hydrodynamics Magdalena DYMITROWSKA (IRSN)

Ces travaux s'inscrivent dans le cadre des recherches menées par l'IRSN en relation avec le projet Cigéo (projet d'installation de stockage géologique profond des déchets radioactifs HA/MAVL). Ces recherches visent tout particulièrement à comprendre et à modéliser les phénomènes physico-chimiques importants pour la sûreté de la future installation. Une importante production d'hydrogène étant attendue à l'intérieur du stockage géologique, cette phase gazeuse pourrait modifier les écoulements ainsi que les conditions mécaniques de la roche et des matériaux ouvragés et donc *in fine* potentiellement impacter le transport de radionucléides. Cependant, dans le contexte précis du stockage (i.e. matériaux argileux peu perméables et proches de la saturation totale en eau), la modélisation phénoménologique des écoulements diphasiques gaz – eau à l'échelle de Darcy reste encore un sujet largement ouvert [1,2], d'une part en raison de l'existence des pores de taille nanométrique impliquant des nombres capillaires extrêmement faibles (écoulements très lents) qui caractérisent ces écoulements. De plus, l'hypothèse de microstructure rigide lors du déplacement gaz-eau est aussi un sujet de débat.

Afin de mieux comprendre les mécanismes de transfert de gaz à l'échelle des pores et de fournir à terme les lois de comportement homogénéisées intégrables dans des codes de simulations macroscopiques, l'IRSN a développé récemment un code de simulation basé sur la méthode SPH (Smoothed Particles Hydrodynamics). Il permet de résoudre, pour une maquette 3D de milieux poreux, l'équation de Navier-Stokes biphasique en tenant compte de la tension de surface et de la capillarité. Il permet également de traiter la partie solide dans le même formalisme, qui peut être considérée élastique (matrice argileuse) ou rigide (inclusions carbonatées ou silicatées). Des critères d'endommagement ont été implémentés, pour contrôler la propagation de micro-fractures dans la partie solide. Le code a été parallélisé sous MPI, ainsi qu'avec CUDA pour une utilisation sur un GPU.

Dans l'exposé nous présenterons des exemples d'utilisation de notre code allant des études mécanistiques des écoulements confinés en nanopores aux applications plus réalistes au drainage des échantillons d'argilite.



Journée CCRT 2019

8. Quantum Computing à EDF, un état des lieux des projets en cours

Marc Porcheron (EDF R&D)

Nous présenterons un état des lieux des actions en cours à EDF R&D sur la thématique, ainsi que des perspectives dans les années à venir, avec un éclairage sur quelques cas d'usage particulièrement prometteurs. La présentation sera aussi l'occasion de dresser un bilan et de préciser les perspectives d'utilisation des moyens de calcul quantiques disponibles, dont la QLM d'Atos au CCRT.

9. Premiers développements Cerfacs sur QLM, un retour d'expérience

Adrien Suau (Cerfacs)

Le but de cette intervention est de présenter les résultats obtenus grâce à l'implémentation d'un solveur quantique d'équation d'onde 1D. Une courte introduction au calcul quantique présentera les concepts clés du domaine que sont la superposition d'état et l'intrication. Nous analyserons ensuite rapidement certains algorithmes quantiques en se focalisant sur les problèmes résolus par chaque algorithme, les restrictions de chacun d'eux et leurs performances théoriques par rapport aux algorithmes classiques connus. Une étude plus détaillée sera menée sur les algorithmes quantiques existants permettant de répondre à des problématiques liées au calcul scientifique, comme la résolution de système linéaire d'équation ou d'équations aux dérivées partielles. Puis nous analyserons les caractéristiques d'un solveur quantique d'équation d'onde 1D en terme de ressource nécessaires et de temps d'exécution.

10. Intérêt des calculs sur ordinateur quantique en physique de la matière condensée: contexte et projets sur la QLM du CCRT **François Jollet (CEA/DAM)**

11. Calcul quantique : le premier processeur français **Loïc Henriet (Pasqal)**

L'équipe d'Antoine Browaeys et Thierry Lahaye à l'institut d'optique a démontré depuis déjà plusieurs années la simulation de problèmes quantiques à N-corps hors d'atteinte pour des supercalculateurs classiques. Comment ? Avec un processeur quantique programmable constitué d'atomes froids contrôlés par des lasers, en développement depuis 2011. L'entreprise Pasqal s'appuie sur cette longue expertise, et les progrès techniques associés dans la gestion des lasers, systèmes à vide et systèmes de mesure, pour développer et construire des processeurs quantiques pouvant être utilisés pour la résolution de problèmes complexes.