

RAPPORT D'ACTIVITÉ

Centre de calculs
AZZURRA



UNIVERSITÉ
CÔTE D'AZUR

2020-2021

Maeva Antoine



Table des matières	
Le mot du président.....	4
Faits marquants.....	5
Azzurra en chiffres.....	6
Configuration matérielle.....	7
Nœuds pour le calcul CPU.....	8
Nœud à grande mémoire.....	8
Nœuds pour le calcul GPU.....	9
Nœud de visualisation.....	9
Nœuds d'administration et login.....	9
Stockage.....	10
Switches.....	10
Configuration logicielle.....	11
Système d'exploitation et drivers.....	11
Modules.....	11
Miniconda.....	11
OpenHPC.....	12
Intel Parallel Studio.....	12
SLURM.....	12
Utilisateurs d'Azzurra.....	13
OPAL.....	14
Statistiques d'utilisation.....	15
Heures consommées.....	15
Occupation du cluster.....	15
CPU.....	15
GPU.....	16
Formations.....	17
Formations et cours ayant bénéficié d'un accès à Azzurra.....	18
Profil des participants.....	19

Témoignages de participants	20
Enquête de satisfaction.....	21
Communication autour d’Azzurra	22
Site web Azzurra.....	23
Bilan scientifique	24
Récapitulatif des publications.....	26
Récapitulatif des projets.....	29
Descriptif des projets.....	30
Projets MSI	31
Chimie	37
Physique non linéaire, fluides complexes.....	52
Optique	63
Hydraulique urbaine	67
Dynamique des fluides.....	73
Géophysique interne	77
Mathématiques, informatique.....	87
Magnétohydrodynamique	99
Astrophysique.....	111
Biologie, santé	122
Projets industriels.....	129

Le mot du président

Le nouveau cluster HPC d'Université Côte d'Azur, baptisé Azzurra, a été lancé début 2020, grâce aux efforts conjoints de la MSI et de la DSI.

Azzurra a pour objectif de mettre à disposition des laboratoires de recherche et des étudiants de l'ensemble de l'Université une plate-forme informatique de qualité et souple d'accès offrant des performances de calcul intensif de haut niveau (CPU et GPU) et un espace de stockage ultra-performant.

En tant que mésocentre, Azzurra se positionne entre les machines de calcul de laboratoire ou d'équipes, et les centres nationaux ([GENCI](#)).

L'année 2021 a été riche en événements, au-delà du premier anniversaire d'Azzurra : ajout de nœuds sur les partitions AMD et GPU, nouveau nœud de visualisation, augmentation de la mémoire sur la partition SMP, formations OpenMP et GPU, ... Près de 7 millions d'heures de calcul ont été utilisées sur l'année 2021, et suite aux différents upgrades, le cluster dispose désormais de près de 17 millions d'heures CPU et 70.000 heures GPU disponibles sur une année.

Il y a une trentaine de projets qui calculent sur Azzurra, et grâce à la diversité des partitions disponibles, les utilisateurs peuvent calculer sur les processeurs les plus adaptés à leurs besoins.

Grâce aux efforts quotidiens de l'équipe technique qui apporte un support de très grande qualité, Azzurra bénéficie régulièrement de mises à jour et d'ajouts de bibliothèques et logiciels demandés par les utilisateurs.

Nous poursuivons désormais nos efforts avec de nouvelles évolutions à venir au cours de l'année 2022 (ajouts de nœuds, formations, ...). En attendant, bonne lecture, et bon calcul !

Didier Auroux

Faits marquants

Janvier 2020 : début de l'installation et de la configuration d'Azzurra

Mars 2020 : début de la phase de tests

Mai 2020 : mise en service officielle

Décembre 2020 : acquisition de licences Intel Parallel Studio

Mars 2021 : mise en service des 16 nœuds de calcul avec processeurs AMD

Septembre 2021 : formations autour du calcul à UCA

Octobre 2021 : mise à jour de l'intégralité des drivers et OS, ajout d'un second nœud GPU, d'un nœud de visualisation et augmentation de la RAM du nœud SMP à 1 To.

Azzurra en chiffres

49 nœuds dédiés au calcul CPU, soit **1 864** cœurs.

2 nœuds dédiés au calcul GPU, soit **8** cartes GPU Tesla V100.

320 To pour le stockage des données.

Entre mai 2020 (mise en service officielle) et décembre 2021 :

8 075 087 heures de calcul ont été consommées.

29 projets de recherche ont demandé une allocation de ressources sur Azzurra.

86 personnes ont bénéficié d'un compte utilisateur sur Azzurra.

126 étudiants et personnels UCA ont été accrédités OPAL par l'université.

Configuration matérielle



Azzurra fin 2021

Azzurra est physiquement hébergée par Inria Sophia Antipolis Méditerranée.

Nœuds pour le calcul CPU

Nœuds Intel



PowerEdge C6420

32 nœuds disposant chacun de :

- 2 processeurs Intel Xeon Gold 6248 @ 2.5GHz – 20 cœurs, soit 40 cœurs par nœud
- 192 Go de mémoire RAM

Mise en service : mars 2020

Nœuds AMD



PowerEdge C6525

16 nœuds équipés de :

- 2 processeurs AMD Epyc 7302 @ 3 GHz – 16 cœurs, soit 32 cœurs par nœud
- 256 Go de mémoire RAM

Mise en service : mars 2021

Nœud à grande mémoire



PowerEdge R840

Un nœud de type SMP à grande mémoire équipé de :

-
- 4 processeurs Intel Xeon Gold 5220 @ 2.2GHz x 18 cœurs
 - 1 To de mémoire RAM

Mise en service : mars 2021 (ajout de 512 Go de RAM en octobre 2021)

Nœuds pour le calcul GPU



PowerEdge C4140

2 nœuds pour le calcul GPU, chacun équipé de :

- 4 cartes GPU Nvidia Tesla V100 32 Go ;
- 2 CPU Intel Xeon Gold 5218 @ 2.30GHz x 16 cœurs
- 384 Go de mémoire RAM

Mise en service : mars 2020 (1 nœud), octobre 2021 (1 nœud)

Nœud de visualisation



PowerEdge R740

1 nœud de visualisation équipé de :

- 2 processeurs Intel(R) Xeon(R) Gold 6230R CPU @ 2.10GHz – 26 cœurs chacun
- 384 Go de mémoire
- Carte graphique Quadro RTX 6000

Mise en service : octobre 2021

Nœuds d'administration et login



PowerEdge R640

1 nœud de login pour la connexion des utilisateurs et le lancement des jobs.
2 serveurs d'administration en HA

Stockage



PowerEdge R740xd



Dell EMC PowerVault ME4024

80 To de stockage HomeDir (NFS)

240 To de stockage scratch (BeeGFS)

Switches

Ethernet :



Dell EMC PowerSwitch N3000E-ON Series

Infiniband :



Mellanox® Quantum(TM) HDR InfiniBand Switch MQM8790-HS2F

Interconnexion InfiniBand HDR 200Gb/s.

Configuration logicielle

Système d'exploitation et drivers

L'OS ainsi que les drivers d'Azzurra ont tous été mis à jour en octobre 2021 :

Système d'exploitation : CentOS 7.9

GPU driver NVIDIA : 470.57.02 – CUDA version 11.4

Drivers Mellanox OFED : 5.4-1.0.3.0

BeeGFS version 7.2.4

Modules

Les [modules](#) permettent de modifier de manière dynamique les variables d'environnement nécessaires à l'exécution de votre code (essentiellement PATH, LD_LIBRARY_PATH ou encore MAN_PATH), en fonction du module que vous chargez. Les modules sont utilisés par tous les centres de calculs nationaux et internationaux.

Une centaine de modules est actuellement disponible sur Azzurra. La liste peut être consultée sur le [site d'Azzurra](#).

Miniconda

Les utilisateurs ont la possibilité de créer leur propre environnement Python avec la distribution Miniconda plutôt que d'utiliser les distributions Python centralisées disponibles avec les modules du cluster. Ils peuvent ainsi travailler avec les dernières mises à jour plus rapidement, obtenir des améliorations de performances et éviter d'éventuelles incompatibilités entre différents modules.

Avec Miniconda, l'utilisateur peut créer son propre environnement Python et y installer les packages dont il a besoin.

Miniconda est une version minimaliste de Anaconda (donc requiert moins d'espace disque) et embarque un Python de base ainsi que le gestionnaire de packages Conda. Chacun peut ensuite installer des packages supplémentaires en suivant [une procédure](#).

OpenHPC

Azzurra utilise [OpenHPC](#), qui regroupe notamment un ensemble d'outils et bibliothèques scientifiques pour les plateformes HPC. OpenHPC facilite l'installation de certains des outils les plus utilisés sur un cluster. Cependant, l'éventail de logiciels n'est pas suffisamment large pour se reposer uniquement sur OpenHPC. La plupart des modules sur Azzurra ont donc été installés individuellement à partir des sources.

Intel Parallel Studio

En décembre 2020, deux licences flottantes Intel Parallel Studio XE Cluster Edition 2020 valables 3 ans ont été acquises.

Expiration des licences : 17 décembre 2023.

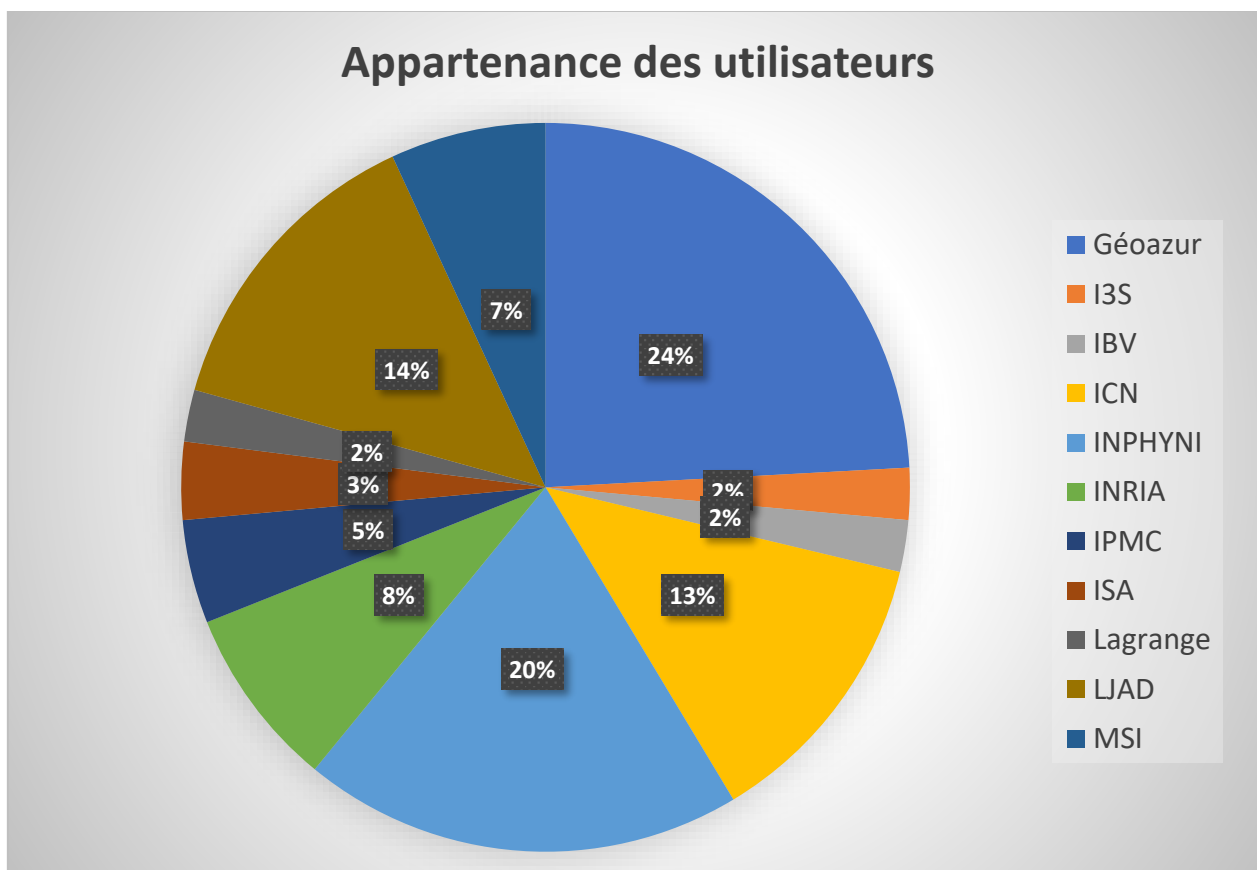
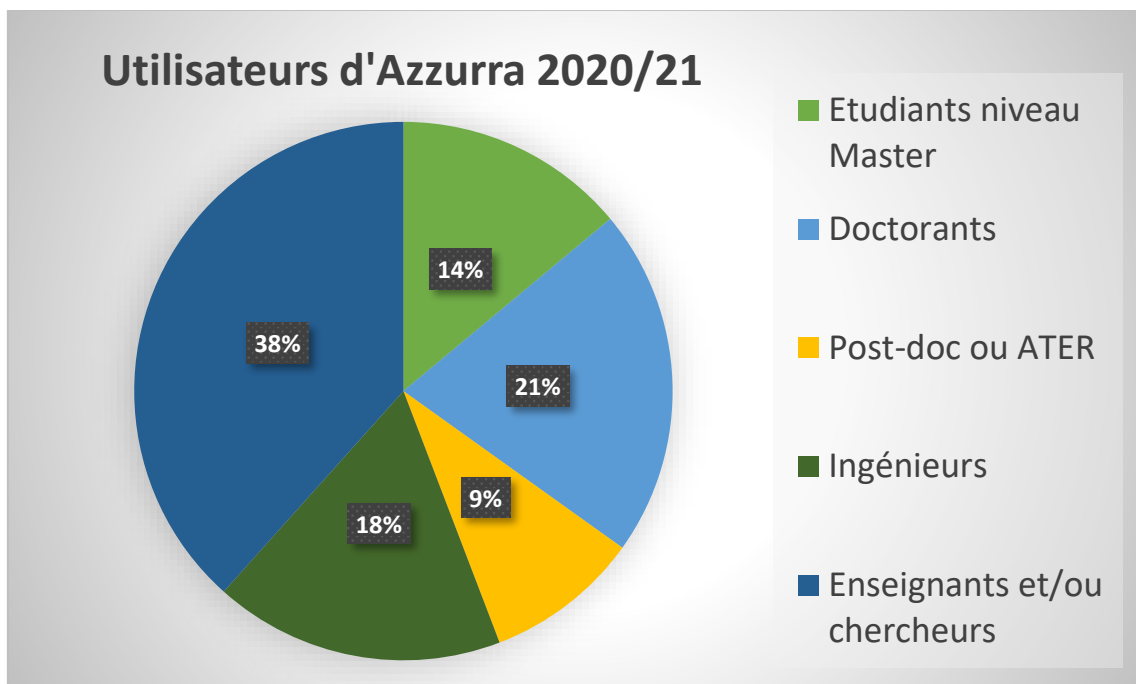
Sont notamment inclus les compilateurs Intel et les outils Intel MPI.

SLURM

Pour réserver les ressources et lancer les travaux de calculs sur le cluster, le Centre utilise la solution open source [SLURM](#).

Utilisateurs d'Azzurra

Au cours de la période 2020-2021, **86** personnes ont bénéficié d'un compte utilisateur sur Azzurra. Le profil des utilisateurs est le suivant :



OPAL

Azzurra fait partie de l'infrastructure OPAL, dont une présentation peut être consultée [sur cette page](#).

126 utilisateurs UCA ont été accrédités OPAL par l'université, parmi lesquels :

- **72** utilisateurs disposant d'un compte sur Azzurra pour un projet en cours de validité, qui ont automatiquement bénéficié de l'accréditation OPAL.
- **54** utilisateurs sans compte sur Azzurra, dans le but de calculer sur un autre cluster OPAL.

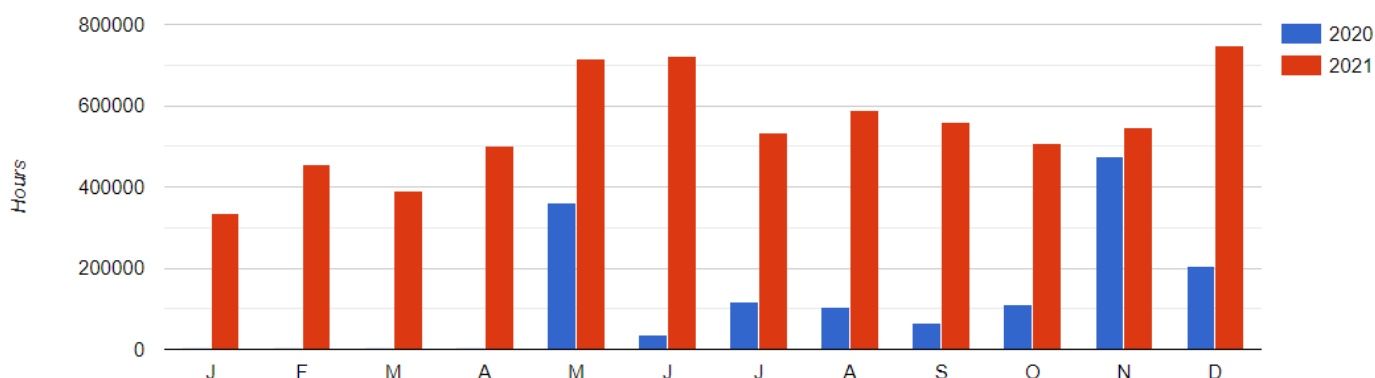
L'accréditation OPAL donnée par UCA est valable un an, renouvelable après [envoi d'un rapport des publications de l'année écoulée](#).

Statistiques d'utilisation

Heures consommées

Depuis son lancement officiel en mai 2020, **8 075 087** heures de calcul ont été consommées.

	2020	2021
Janvier		334067
Février		456286
Mars		390797
Avril		499427
Mai	362516	714615
Juin	35531	720977
Juillet	116920	534207
Août	105484	589224
Septembre	63870	560882
Octobre	110629	506338
Novembre	473759	547207
Décembre	204105	748244



Occupation du cluster

CPU

De mai 2020 à février 2021 : **996 480** heures de calcul disponibles par mois (30 jours).

De mars 2021 à septembre 2021 : **1 365 120** heures de calcul par mois

Depuis octobre 2021 : **1 425 600** heures par mois, soit 47520 heures de calcul disponibles quotidiennement.

Taux d'occupation du cluster (CPU) :

	2020	2021
janvier		27.25%
février		35.81%
mars		27.74%
avril		36.58%
mai	35.21%	50.66%
juin	3.57%	52.81%
juillet	11.35%	37.87%
août	10.24%	41.77%
septembre	6.41%	41.09%
octobre	10.74%	34.83%
novembre	47.54%	38.38%
décembre	19.82%	50.79%

GPU

De mai 2020 à septembre 2021 : **2 880** heures GPU disponibles par mois (30 jours).

Depuis octobre 2021 : **5 760** heures GPU disponibles par mois.

Taux d'occupation des ressources GPU :

	2020	2021
janvier		71.64%
février		73.10%
mars		75.69%
avril		47.69%
mai	n.c.	28.66%
juin	n.c.	32.12%
juillet	n.c.	28.25%
août	n.c.	88.42%
septembre	n.c.	70.01%
octobre	95.60%	43.62%
novembre	97.36%	40.62%
décembre	47.18%	50.63%

Formations



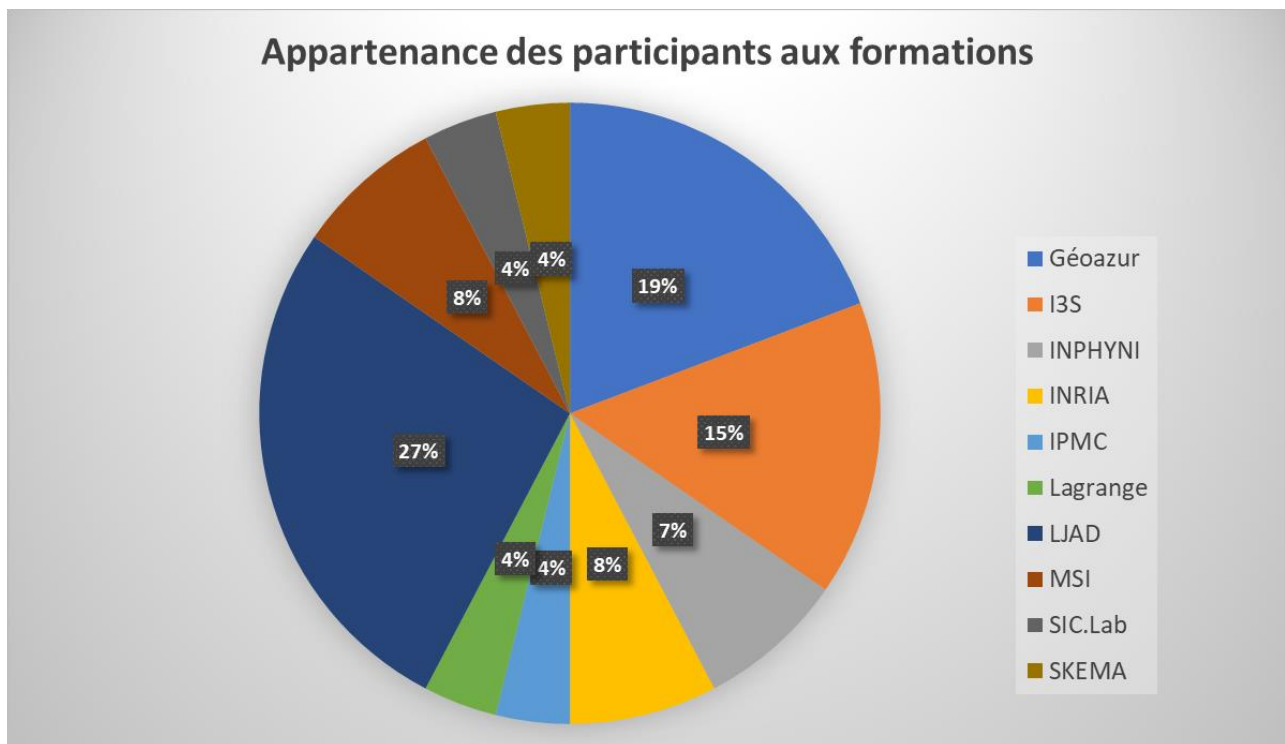
En 2021, Azzurra a été utilisée comme plateforme servant de support à différentes formations. Des comptes temporaires sur Azzurra sont fournis aux inscrits le temps du cours.

Université Côte d'Azur a accueilli en septembre 2021 trois formateurs de l'[IDRIS](#) (Orsay) venus dispenser deux formations (OpenMP et OpenACC GPU). Ces formations ont pu avoir lieu grâce au soutien de la MSI.

Formations et cours ayant bénéficié d'un accès à Azzurra

- **Introduction à l'utilisation d'un cluster de calcul HPC**
 - Formation
 - Durée : 6 heures
 - Nombre de participants : 10
 - Public : doctorants
 - Informations : sur le site des [formations ADUM](#)
- **OpenMP**
 - Formation
 - Durée : 14 heures
 - Nombre de participants : 13
 - Public : ouvert à tout UCA
 - Informations : sur le [site de l'IDRIS](#)
- **Introduction à OpenACC et OpenMP GPU**
 - Formation
 - Durée : 14 heures
 - Nombre de participants : 9
 - Public : ouvert à tout UCA
 - Informations : sur le [site de l'IDRIS](#)
- **ECUE Données massives**
 - Cours
 - Durée : 4 heures
 - Nombre de participants : 6
 - Public : M1 Biologie, informatique et mathématiques (EUR LIFE)

Profil des participants



Témoignages de participants

Chao LIANG, post-doc à Géoazur :

Les compétences acquises dans ces formations sont directement applicables à mes recherches et à l'optimisation de mon propre code. En plus du support de cours, les instructeurs ont également donné de nombreuses suggestions et des réflexions sérieuses sur la façon d'optimiser mon propre code. En 4 jours, j'ai énormément appris non seulement sur les bibliothèques pour HPC mais aussi sur le matériel, dont la connaissance est également importante pour obtenir de meilleures performances dans notre programme. J'espère vraiment que plus de formations sur le HPC seront données à l'avenir et plus de recherche...

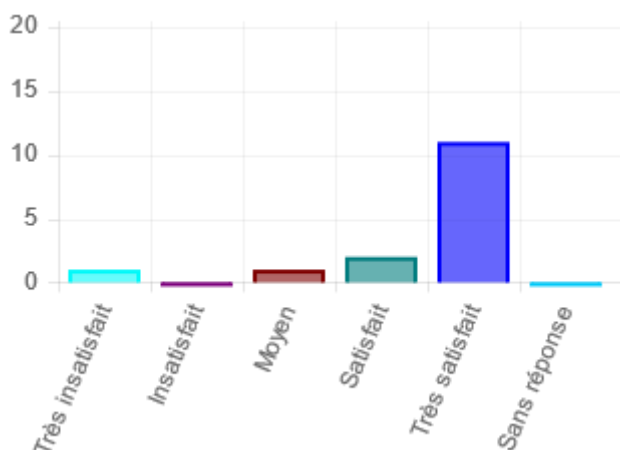
Michel ORSI, doctorant à l'INPHYNI :

La formation a été simplement parfaite. Les formateurs étaient très compétents et clairs dans les explications. La cours a été pensé avec un parcours très pédagogique qui nous a permis de bien suivre et apprécier : en partant de l'utilité de OpenMP et de ses aspects généraux nous sommes arrivés à des fonctionnalités plus profondes et pointues. Aussi, des exercices nous ont été proposés tout au long du cours pour appliquer les connaissances acquises : on avait le temps d'y travailler seuls et ensuite d'en discuter avec les formateurs de façon dynamique. De mon côté, je fais du calcul scientifique et j'ai donc besoin de toujours optimiser au mieux mes codes ; je vais sûrement utiliser ce que j'ai appris dans ce cours. Merci aux formateurs pour leur temps et aux organisateurs pour cette opportunité ! J'attends avec hâte d'autres formations !

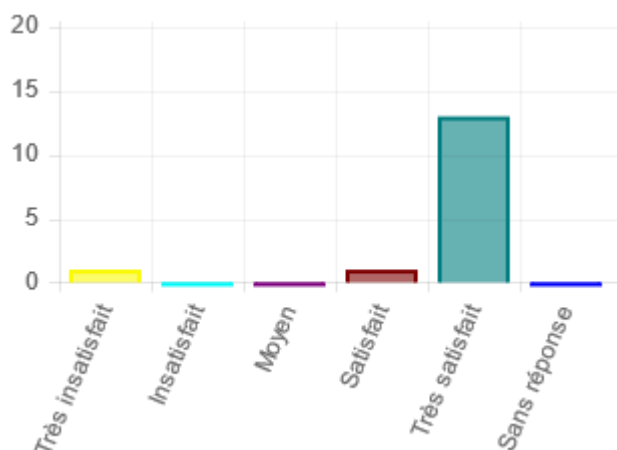
Enquête de satisfaction

Suite aux formations, une enquête de satisfaction anonymisée a été envoyée aux participants. 15 personnes y ont répondu :

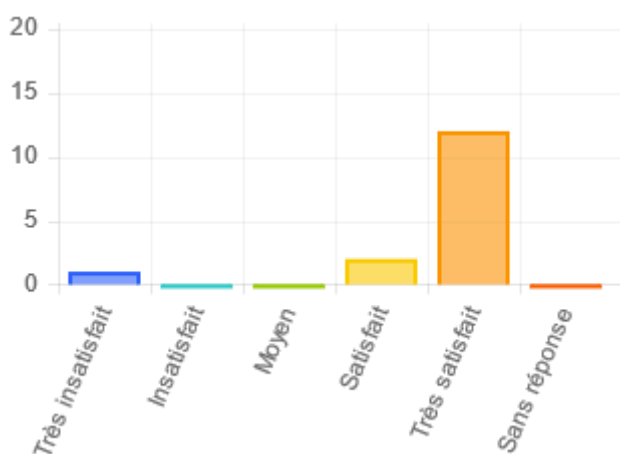
Organisation générale :



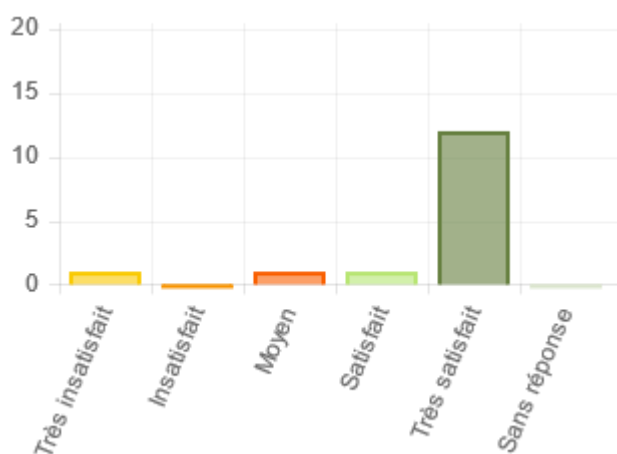
Thème et contenu des cours :



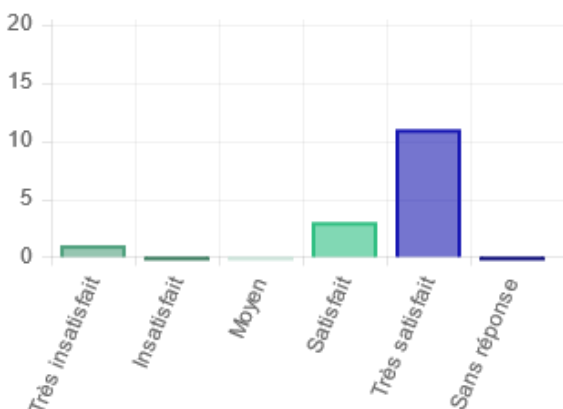
Connaissances acquises :



Durée de la formation :



Niveau de difficulté :



Communication autour d'Azzurra

L'actualité relative à Azzurra est relayée via différents canaux de communication au sein d'UCA. Quelques exemples :

Anniversaire d'Azzurra (1 an) sur le compte Facebook d'UCA :

<https://www.facebook.com/UnivCotedAzur/posts/10158218668033437>

(également diffusé dans la newsroom d'UCA)

Lancement des formations sur le compte Twitter de la MSI :

https://twitter.com/MSI_UCA/status/1437705192661819394

Mentions dans les Newsletters IDEX du :

26 juin 2020

9 octobre 2020

4 mars 2021

5 mai 2021

Articles régulièrement postés sur le site UCA MSI :

<https://msi.univ-cotedazur.fr/>

Site web Azzurra

<https://calculs.univ-cotedazur.fr/>

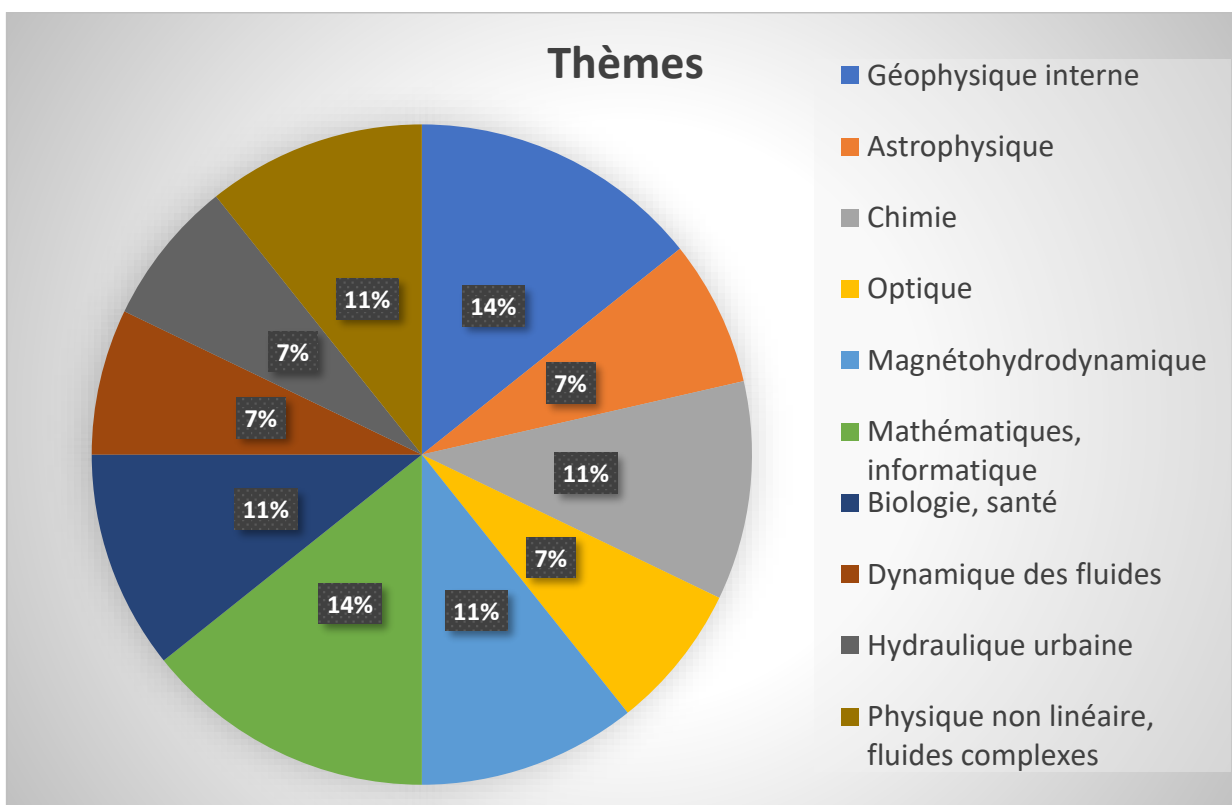
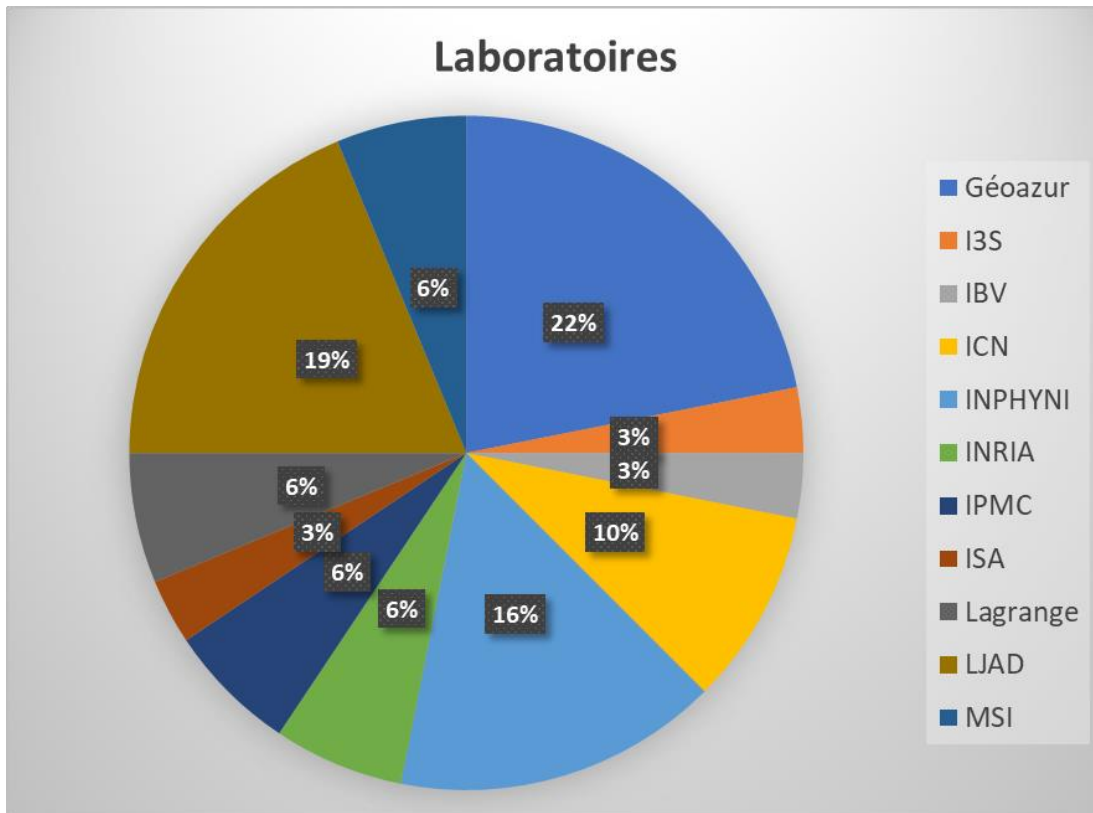
En français et anglais.

Ce site a été mis en ligne dès le printemps 2020 et contient les informations suivantes :

- Actualités du cluster
- Présentation générale et technique du cluster
- Statistiques d'utilisation mensuelles
- Présentation de certains projets
- Formulaire de demandes d'accès / renouvellement / accréditation OPAL
- Guide utilisateur complet pour prendre en main le cluster
- FAQ
- Formations autour du calcul : planning, inscriptions
- Contact

Bilan scientifique

Depuis mai 2020, 29 projets ont demandé une allocation de ressources sur Azzurra. Ces projets se répartissent ainsi :



Dans le détail :

Géophysique interne (Géoazur; EUR Spectrum)	4
Astrophysique (Géoazur, Lagrange; EUR Spectrum)	2
Chimie (ICN, LJAD; EUR Spectrum)	3
Optique (Inphyni; EUR Spectrum)	2
Magnétohydrodynamique (Lagrange, LJAD; EUR Spectrum)	3
Mathématiques, informatique (I3S, Inria, LJAD; EUR DS4H, Spectrum)	4
Biologie, santé (IPMC, ISA; EUR Life)	3
Dynamique des fluides (CEMEF, LJAD; EUR Spectrum)	2
Hydraulique urbaine (Geoazur; EUR Spectrum)	2
Physique non linéaire, fluides complexes (Inphyni; EUR Spectrum)	3

Récapitulatif des publications

Journaux :

- Davenel, V.; Puteaux, C.; Nisole, C.; Fontaine-Vive, F.; Fourquez, J.-M.; Michelet, V. "Iridium-Catalyzed Cycloisomerization of 1,6-Cyclohexenylalkynes". *Catalysts* 2021, 11, 546. <https://doi.org/10.3390/catal11050546>
- Topin, J., Bouysset, C., Pacalon, J. et al. Functional molecular switches of mammalian G protein-coupled bitter-taste receptors. *Cell. Mol. Life Sci.* 78, 7605–7615 (2021). <https://doi.org/10.1007/s00018-021-03968-7>
- Caballero-Vidal, G., Bouysset, C., Gévar, J. et al. Reverse chemical ecology in a moth: machine learning on odorant receptors identifies new behaviorally active agonists. *Cell. Mol. Life Sci.* 78, 6593–6603 (2021). <https://doi.org/10.1007/s00018-021-03919-2>
- Novel scaffold of natural compound eliciting sweet taste revealed by machine learning. C. Bouysset, C. Belloir, S. Antonczak, L. Briand, S. Fiorucci. *Food Chem.*, 2020, 324, 126864.

Conférences :

- 55eme Congrès du Groupe Français de Rhéologie (26-28 octobre 2021, Bordeaux) M. Orsi, L. Lobry et F. Peters. Simulations de suspensions non-Browniennes concentrées : formulation d'une correction de lubrification invariante par changement de référentiel
- Workshop organisé par le GDR MePhy à l'École de Physique des Houches (August 23-26, 2021, Les Houches) Michel Orsi, Laurent Lobry, François Peters. Simulation of particulate suspensions using OpenFOAM: frame-invariant sub-grid corrections to the Fictitious Domain Method
- Young Rheologist Days 2020 (prévu en 2020, 6-9 juillet 2021, Giron) Michel Orsi, Laurent Lobry, Stany Gallier, François Peters. Rheology non-brownian dense suspensions: an optimised implementation of the fictitious domain method in OpenFOAM
- 18th International Congress on Rheology (December 14-18, 2020, Rio de Janeiro) Michel Orsi, Laurent Lobry, Stany Gallier, François Peters. Rheology of non-Brownian concentrated suspensions: a parallel implementation of the Fictitious Domain Method in OpenFOAM
- 14th World Congress in Computational Mechanics (WCCM) ECCOMAS Congress 2020 (19 – 24 July 2020, Paris) Ayoub BADIA, Laurent LOBRY, François PETERS and Yves D'ANGELO Frame invariant model for suspension flows
- Modelling Culverts in Basilisk. Zied Amama, Nicolas Branco, Cheikh Mangara, Kevis Mbonyinshuti, Qiyu Yu, Thibaut Cottancin, Sarah Vigoureux, Pierre Brigode, Olivier Delestre and Pierre-Yves Lagrée. SimHydro 2021 6TH INTERNATIONAL CONFERENCE 16TH-18TH JUNE 2021 SOPHIA ANTIPOLIS – FRANCE
- J. Topin, J. Golebiowski, Numerical modeling of odorant receptors activation dynamics. Pacific Chem, Honolulu, December 2021.
- Binding site identification of the highly conserved insect odorant co-receptor (ORco) J. Pacalon, G. Audic, C. Moreau, J. Topin, J. Golebiowski. Réunion annuelle du GDR-O3, webinar, 25 novembre 2021.
- Olfactory receptor ligand prediction via graph neural networks and representation learning M. Hladiš, S. Fiorucci, J. Golebiowski, J. Topin. Sophia summit 2021, Sophia Antipolis (France), 17-19 novembre 2021.
- Representation learning to overcome scarce data in machine learning. Application to chemosensory receptors. M. Hladiš, S. Fiorucci, J. Golebiowski, J. Topin. 23e congrès du GGMM et 10e journées de la SFCi, Lille (France), 29 septembre - 1er novembre 2021.

- Functional olfactomics in the crop pest *Spodoptera littoralis* (Lepidoptera, Noctuidae) E. Jacquin-Joly, G. Caballero-Vidal, C. Bouysset, A. de Fouchier, C. Song, G. Wang, J. Golebiowski, S. Fiorucci, N. Montagné. Intl conf of insect science, Baoding (China), 2-6 juillet 2021.
- Numerical models contribute to expand the sweet taste chemical space. C. Bouysset, C. Belloir, S. Antonczak, L. Briand, S. Fiorucci. 16th Weurman Flavour Research Symposium, webinar, 3-7 mai 2021.
- Molecular bases of chemoreception in a crop pest moth. E. Jacquin-Joly, N. Montagné, G. Caballero-Vidal, B.H. Lucie, A. de Fouchier, W. Walker, T. Chertemps, F. Koutroumpa, G. Wang, S. Cao, C. Bouysset, J. Golebiowski, S. Fiorucci. Entomological Society of America ESA2020, webinar, 11 novembre 2020.
- J. Topin, C.A. de March, J. Golebiowski, Numerical modeling of odorant receptors activation dynamics. Numerical modeling of odorant receptors activation dynamics, International Symposium of Olfactory and Taste, Portland (USA), August 2020.

Thèses :

- Cédric Bouysset « Molecular basis of chemosensory perception », 2021. Institut de Chimie de Nice.
- Dynamique et statistiques de particules allongées et flexibles dans des écoulements turbulents, Sofia Allende, 2021 <https://www.theses.fr/2021COAZ4005> Centre de mise en forme de matériaux - MINES ParisTech.
- Ayoub Badia, « Modélisation numérique de suspensions non-browniennes concentrées en écoulement rhéométrique ou général » 2021. Encadrants : Yves D'Angelo (LJAD), François PETERS (INPHYNI) et Laurent LOBRY (INPHYNI).

Posters :

- 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM) 2020+1 (prévu en 2020, tenu en 2021, Milan) Michel Orsi, Laurent Lobry, Stany Gallier, François Peters. Rheology non-brownian dense suspensions: an optimised implementation of the fictitious domain method in OpenFOAM
- Insect odorant co-receptor ORco agonists binding mechanism. J. Pacalon, G. Audic, C. Moreau, J. Topin, J. Golebiowski. 23e congrès du GGMM et 10e journées de la SFCi, Lille (France), 29 septembre - 1er novembre 2021.
- Integrative structural modeling reveals functional molecular switches of human G protein-coupled bitter-taste receptors.
- C. Bouysset, J. Topin, Y. Kim, J. Pacalon, M. Rhyu, S. Fiorucci, J. Golebiowski. 23e congrès du GGMM et 10e journées de la SFCi, Lille (France), 29 septembre - 1er novembre 2021.
- Odor prediction via graph neural networks and representation learning. M. Hladiš, S. Fiorucci, J. Golebiowski, J. Topin, ECRO 2021, Cascais (Portugal), 13-16 septembre 2021.
- Functional molecular switches of mammalian G protein-coupled bitter-taste receptors C. Bouysset, J. Topin, Y. Kim, J. Pacalon, M. Rhyu, S. Fiorucci, J. Golebiowski. ECRO 2021, Cascais (Portugal), 13-16 septembre 2021.
- Binding site identification of the highly conserved insect odorant co-receptor (ORco) J. Pacalon, G. Audic, C. Moreau, J. Topin, J. Golebiowski. ECRO 2021, Cascais (Portugal), 13-16 septembre 2021.
Bitter-Taste Receptors: From Sequence to Structure. C. Bouysset, J. Topin, S. Antonczak, M. Rhyu, J. Golebiowski, S. Fiorucci. International Symposium on Olfaction and Taste (ISOT 2020), webinaire, 3-7 aout 2020.

Pré-publications ou en cours d'écriture :

- Pasquier, C., Guerlais, V., Pallez, D., Rapetti-Mauss, R., & Soriani, O. (2021). Identification of active modules in interaction networks using node2vec network embedding. bioRxiv. HAL Id : hal-03354986, version 1. DOI : 10.1101/2021.09.22.461345
- Learning to predict target location using turbulent odor plumes. Nicola Rigolli, Nicodemo Magnoli, Lorenzo Rosasco and Agnese Seminara <https://arxiv.org/pdf/2106.08988>
- Learning to alternate between different sensory modalities by alternating airborne and ground odors cues. Nicola Rigolli, Gautam Reddy, Massimo Vergassola and Agnese Seminara
- Michel Orsi, Laurent Lobry, François Peters Frame-invariant sub-grid corrections to the Fictitious Domain Method for the simulation of particulate suspensions in non-linear flows using OpenFOAM (en vue d'une soumission à Journal of Computational Physics)
- Ayoub Badia, François Peters Yves D'angelo, Laurent Lobry Frame invariant modeling for non-Brownian suspension flows (en vue d'une soumission à Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics)
- Systematic identification of subcritical dynamo seeds. Florence Marcotte and Yannick Ponty
- A systematic route to subcritical dynamo branches. Paul M. Mannix, Yannick Ponty, Florence Marcotte <https://arxiv.org/abs/2112.11376>
- Zhu, Y., Semisalov, B., Krstulovic, G., & Nazarenko, S. (2021). Testing wave turbulence theory for Gross-Pitaevskii system. arXiv preprint arXiv:2111.14560.

Stages et projets étudiants niveau master :

- Expanding the chemical space of bitter taste receptors by structure-based virtual screening. Maxence Lalis. 2021. Stage à l'ICN (UCA) encadré par Sébastien Fiorucci. Master's degree Biomathematics, Bioinformatics, and Computational Biology - Université de Paris (2021)
- BlobNet A Convolutional Neural Network to detect particles on images. David Paulovics. Stage à l'INPHYNI encadré par Frédéric Blanc. Master 1 Ondes, Atomes, Matière, Université Côte d'Azur (2020) <http://master-oam.unice.fr/stages/2019-2020-M1-posters/David.pdf>
- Theoretical study of naphthalene neutral and cation vibrational spectra with the VMFCI method. Clélia Bastelica, stage au LJAD encadré par Patrick Cassam-Chenaï. M1 Ondes Atomes Matière (UCA 2021) <http://master-oam.unice.fr/stages/2020-2021-M1-posters/Clelia.pdf>
- El Hassan Afddas, rapport de M2 Chimie Théorique et Modélisation (Université de Montpellier). Stage au LJAD encadré par Patrick Cassam-Chenaï.
- Zied Amama, stage de GE4 (Polytech) encadré par Pierre Brigode (Géoazur) et Olivier Delestre (LJAD). 2020
- Mickaël Lastes, stage de GE4 (Polytech) encadré par Pierre Brigode (Géoazur) et Olivier Delestre (LJAD). 2020
- Master thesis report - Johannes Nickel "Characterisation of the 2020 Flood Impacts within the Bieugne Catchment through 2D-Modelling with TELEMAC" M. Sc. Hydroinformatics and Water Management (Polytech), 2021.
- Master thesis report Yan Joron « Modélisation hydro-sédimentaire des impacts de la tempête Alex sur les bassins de la Vésubie et de la Roya » - M. Sc. Hydroinformatics and Water Management (Polytech), 2021 <https://msi.univ-cotedazur.fr/modelisation-hydro-sedimentaire-des-impacts-de-la-tempete-alex-sur-les-bassins-de-la-vesubie-et-de-la-roya>
- Rapport PFE Génie de l'eau 5ème année Polytech "Restauration efficiente et durable du tronçon du Lac des Gaves" - étudiants E. Fernandez, A. Matard, A. Moutinho, E. Sautel, Y. Sofyane.
- Stage de Thomas Ponthieu - Master 2 Météorologie, Océanographie, Climat (Sorbonne Université, 2021). EPC CALISTO (INRIA)

Récapitulatif des projets

Porteur	Laboratoire	Discipline	EUR	CLASSIFICATION
Becavin	IPMC	Pharmacologie	Life	Biologie, santé
Masson	LJAD	Mathématiques	Spectrum	Mathématiques, informatique
Operto	Geoazur	Géophysique	Spectrum	Géophysique interne
Lanteri	Inria	Mathématiques	Spectrum	Mathématiques, informatique
Dolean	LJAD	Mathématiques	Spectrum	Mathématiques, informatique
Fienga	Geoazur/OCA	Astrophysique	Spectrum	Astrophysique
Sigloch	Geoazur	Géophysique	Spectrum	Géophysique interne
Aubry	InPhyNi	Physique	Spectrum	Optique
Doya	InPhyNi	Physique	Spectrum	Optique
Vincenzi	LJAD	Mécanique des fluides	Spectrum	Dynamique des fluides
Glaichenhaus	IPMC	Pharmacologie	Life	Biologie, santé
Bossy	Inria	Mathématiques	Spectrum	Mathématiques, informatique
Fiorucci	ICN	Chimie	Spectrum	Chimie
Sladen	Geoazur	Géophysique	Spectrum	Géophysique interne
Sangam	LJAD	Mathématiques	Spectrum	Magnétohydrodynamique
Yassine	Geoazur	Mécanique des fluides	Spectrum	Hydraulique urbaine
Danchin	Agrobiotech	Génomique	Life	Biologie, santé
Méheut	Lagrange/OCA	Astrophysique	Spectrum	Astrophysique
Cassam-Chenai	LJAD	Chimie	Spectrum	Chimie
Nazarenko	InPhyNi	Physique/Mécanique des fluides	Spectrum	Physique non linéaire, fluides complexes
Marcotte	LJAD	Mathématiques	Spectrum	Magnétohydrodynamique
Ponty	Lagrange/OCA	Mécanique des fluides	Spectrum	Magnétohydrodynamique
Pasquier	I3S	Informatique	DS4H	Mathématiques, informatique
Fontaine-Vive	ICN	Chimie	Spectrum	Chimie
Duclaux	Geoazur	Géophysique	Spectrum	Géophysique interne
Bec	Mines ParisTech	Mécanique des fluides	Spectrum	Dynamique des fluides
Brigode	Geoazur	Mécanique des fluides	Spectrum	Hydraulique urbaine
Peters	InPhyNi	Physique/Mécanique des fluides	Spectrum	Physique non linéaire, fluides complexes
Seminara	InPhyNi	Physique	Spectrum	Physique non linéaire, fluides complexes

Descriptif des projets

Projets MSI

La Maison de la Modélisation, de la Simulation et des Interactions (MSI) doit sa création au projet UCA^{JEDI} pour lequel en 2016 la ComUE Université Côte d'Azur a remporté le prix Initiatives d'Excellence (IDEX) du gouvernement français.

Son but : favoriser et structurer les échanges transdisciplinaires dans la recherche académique et les partenariats de recherche public privé dans la région SUD sur tous les domaines qui sollicitent des expertises fortes en matière de modélisation, de simulation et de traitement de données massives. La MSI intervient en appui du réseau d'acteurs qui constituent et animent Université Côte d'Azur.

La MSI est pilotée par un comité composé de huit chercheurs issus de différents laboratoires d'Université Côte d'Azur et présidé par un directeur nommé par le Président du projet IDEX UCA^{JEDI} ; ce comité s'appuie sur une équipe de chercheurs et d'ingénieurs experts et sur une chargée de mission.

Les ingénieurs de la MSI s'investissent sur des projets scientifiques développés au sein de centres d'expertise de la MSI ou au niveau d'Université Côte d'Azur. De plus, dans le cadre d'appels à projets, la MSI soutient des projets de recherche interdisciplinaires et/ou tournés vers des partenariats industriels. Elle propose également une offre de formation pour chercheurs et ingénieurs via des séminaires réguliers et des écoles thématiques.

La MSI ayant financé Azzurra, ses ingénieurs ont accès au cluster pour leurs différentes activités. Au cours de la période 2020-21, ces activités ont principalement été les suivantes :

- En collaboration avec l'Ircan, parallélisation d'un certain nombre de pipelines d'analyse pour les données d'ARN. Il s'agissait principalement de pipelines scikit-learn qui devaient être optimisés et améliorés en termes de performances.
- Dans le cadre du projet Tara (toujours avec l'Ircan) : analyse d'images d'espèces de coraux. Organisation de la base de données d'images sur l'espace de stockage. Analyses statistiques sur les propriétés de l'image (taille, résolution, spectre de couleurs, densité de l'image, etc.). Travail avec des architectures d'apprentissage en profondeur pour classer ces images. Conception d'un CNN pour la classification et passage au traitement GPU en 2022.
- Encadrement d'étudiants (sorte de pré-stage en Master Data Science et IA) sur les sujets suivants :

-
- Transfer Learning: application de réseaux de neurones pré-entraînés pour augmenter la précision de la classification
 - CTGAN : application de frameworks et d'algorithmes d'apprentissage en profondeur pour obtenir une augmentation des données (c'est-à-dire augmenter la taille du training set).

Au cours de la période 2020-21, les deux principaux projets MSI ayant nécessité des ressources de calculs sont DeepWILD et Tara, décrits ci-dessous.

Projet DeepWILD



© Parc national du Mercantour

Projet MSI et 3IA Côte d'Azur en partenariat avec le Parc national du Mercantour.

L'objectif du projet est de localiser, classifier et compter les espèces du Parc national du Mercantour à l'aide d'un algorithme de deep learning. Les images utilisées sont issues de vidéos extraites de pièges photographiques installés dans la Vallée de la Roya. L'ensemble des vidéos et des images utilisées pour ce projet sont stockées sur Azzurra. Azzurra a permis le traitement de ce gros volume de données et l'application d'un modèle de détection d'objet (Faster R-CNN avec Inception-ResNet-v2) capable de reconnaître les différentes espèces présentes dans le Parc national du Mercantour.

Un article est en cours de rédaction et devrait être publié au 1^{er} trimestre 2022.

L'équipe travaillant sur ce projet est composée de Charles Bouveyron, Frédéric Precioso et Fanny Simões pour UCA, et Nathalie Siefert et Stéphane Combeaud pour le Parc national du Mercantour.

Projet Tara



© Megan Clampitt

Projet de l'IRCAN dont le but est d'évaluer si une approche IA permet d'estimer la santé des colonies coralliennes à l'aide d'un dispositif automatisé et facilement applicable.

On utilise en premier lieu des images sous-marines collectées au cours de l'expédition Tara Pacific. Cette expédition a produit ~14000 photos (correspondant à 2216 colonies individuelles) qui étaient annotées manuellement. Ces annotations comprennent plusieurs facteurs : l'identification taxonomique jusqu'au rang du genre, la prédation, le contact avec d'éventuelles algues, la présence d'organismes perforants, le contact avec les sédiments, ainsi que d'autres facteurs directement liés à la santé des coraux (i.e. coloration, blanchissement, maladies, pigmentation). Grâce aux études de l'expédition Tara, plusieurs autres bases de données sont pareillement disponibles, elles contiennent notamment des facteurs biologiques (biomarqueurs et télomères) et environnementaux.

Nous avons débuté une approche IA pour extraire les catégories d'annotations qui avaient été faites manuellement. Plus spécifiquement, nous utilisons la méthode dite du

« Convolutional neural network (CNN) ». La première étape de cette approche est d'identifier le genre auquel appartient les colonies photographiées. Avec notre réseau qui comprenait les photographies et les annotations manuelles (qui ne visaient pas à identifier le genre), nous avons réussi à identifier les genres avec une exactitude de 66.28%.

L'étape en cours est d'augmenter l'exactitude de cette prédiction avec des approches IA comme le « transfer learning » ou les modèles génératifs. De plus, nous prévoyons de compléter ce réseau avec davantage de variables qui étaient annotées manuellement (blanchissement, présence de maladies, prédation, etc.) et nous espérons aussi pouvoir utiliser l'algorithme pour prédire les facteurs biologiques (télomères et biomarqueurs) qui sont considérablement plus difficile à obtenir. Mais il nous faudra plus d'échantillons pour construire l'algorithme.

Chimie

EUR Spectrum

Simulations de complexes biomoléculaires impliqués dans les sens chimiques (olfaction, gustation).

Responsable scientifique du projet : Sébastien Fiorucci

Laboratoire : ICN

Conférences sur invitation :

- J. Topin. De la molécule à l'odeur. Cynogend, Archamp (France), November 2021. (invited talk)
- J. Topin. Dessine-moi une odeur. Congrès Goût et Arômes, Paris (France), September 2021. (invited talk)
- From genes to perception: decoding chemical senses by numerical and molecular modeling approaches. S. Fiorucci. 8e Journée Méditerranéenne des Jeunes Chercheurs (JMJC2020), SCF PACA, webinar, 20 novembre 2020.

Séminaire :

- A la découverte des sens chimiques ! (Centre de Recherche Paul Pascal, CNRS UMR 5031, 33600 Pessac), June 2021.

Communications grand public :

- 42^{eme} forum territorial culture science PACA, Musée International de la Parfumerie Grasse, October 2021.
- Cité des sens, Cité des sciences Paris, September 2021.
- Inauguration of the Neuromod institute (Université Côte d'Azur), Nice, April 2021.
- Cité des sens, Cité des sciences Paris, September 2020.

Communications orales :

J. Topin, J. Golebiowski, Numerical modeling of odorant receptors activation dynamics. Pacific Chem, Honolulu, December 2021.

Binding site identification of the highly conserved insect odorant co-receptor (ORco)

J. Pacalon, G. Audic, C. Moreau, J. Topin, J. Golebiowski. Réunion annuelle du GDR-O3, webinar, 25 novembre 2021.

Olfactory receptor ligand prediction via graph neural networks and representation learning
M. Hladiš, S. Fiorucci, J. Golebiowski, J. Topin. SophIA summit 2021, Sophia Antipolis (France), 17-19 novembre 2021.

Representation learning to overcome scarce data in machine learning. Application to chemosensory receptors

M. Hladiš, S. Fiorucci, J. Golebiowski, J. Topin. 23e congrès du GGMM et 10e journées de la SFCi, Lille (France), 29 septembre - 1er novembre 2021.

Functional olfactomics in the crop pest *Spodoptera littoralis* (Lepidoptera, Noctuidae)

E. Jacquin-Joly, G. Caballero-Vidal, C. Bouysset, A. de Fouchier, C. Song, G. Wang, J. Golebiowski, S. Fiorucci, N. Montagné. Intl conf of insect science, Baoding (China), 2-6 juillet 2021.

Numerical models contribute to expand the sweet taste chemical space.

C. Bouysset, C. Belloir, S. Antonczak, L. Briand, S. Fiorucci. 16th Weurman Flavour Research Symposium, webinar, 3-7 mai 2021.

Molecular bases of chemoreception in a crop pest moth.

E. Jacquin-Joly, N. Montagné, G. Caballero-Vidal, B.H. Lucie, A. de Fouchier, W. Walker, T. Chertemps, F. Koutroumpa, G. Wang, S. Cao, C. Bouysset, J. Golebiowski, S. Fiorucci. Entomological Society of America ESA2020, webinar, 11 novembre 2020.

J. Topin, C.A. de March, J. Golebiowski, Numerical modeling of odorant receptors activation dynamics. Numerical modeling of odorant receptors activation dynamics, International Symposium of Olfactory and Taste, Portland (USA), August 2020.

Posters :

Insect odorant co-receptor ORco agonists binding mechanism.

J. Pacalon, G. Audic, C. Moreau, J. Topin, J. Golebiowski. 23e congrès du GGMM et 10e journées de la SFCi, Lille (France), 29 septembre - 1er novembre 2021.

Integrative structural modeling reveals functional molecular switches of human G protein-coupled bitter-taste receptors.

C. Bouysset, J. Topin, Y. Kim, J. Pacalon, M. Rhyu, S. Fiorucci, J. Golebiowski. 23e congrès du GGMM et 10e journées de la SFCi, Lille (France), 29 septembre - 1er novembre 2021.

Odor prediction via graph neural networks and representation learning.

M. Hladiš, S. Fiorucci, J. Golebiowski, J. Topin, ECRO 2021, Cascais (Portugal), 13-16 septembre 2021.

Functional molecular switches of mammalian G protein-coupled bitter-taste receptors.

C. Bouysset, J. Topin, Y. Kim, J. Pacalon, M. Rhyu, S. Fiorucci, J. Golebiowski. ECRO 2021, Cascais (Portugal), 13-16 septembre 2021.

Binding site identification of the highly conserved insect odorant co-receptor (ORco)

J. Pacalon, G. Audic, C. Moreau, J. Topin, J. Golebiowski. ECRO 2021, Cascais (Portugal), 13-16 septembre 2021.

Bitter-Taste Receptors: From Sequence to Structure.

C. Bouysset, J. Topin, S. Antonczak, M. Rhyu, J. Golebiowski, S. Fiorucci. International Symposium on Olfaction and Taste (ISOT 2020), webinaire, 3-7 aout 2020.

Publications :

Topin, J., Bouysset, C., Pacalon, J. et al. Functional molecular switches of mammalian G protein-coupled bitter-taste receptors. *Cell. Mol. Life Sci.* 78, 7605–7615 (2021).

<https://doi.org/10.1007/s00018-021-03968-7>

Caballero-Vidal, G., Bouysset, C., Gévar, J. et al. Reverse chemical ecology in a moth: machine learning on odorant receptors identifies new behaviorally active agonists. *Cell. Mol. Life Sci.* 78, 6593–6603 (2021). <https://doi.org/10.1007/s00018-021-03919-2>

Novel scaffold of natural compound eliciting sweet taste revealed by machine learning.

C. Bouysset, C. Belloir, S. Antonczak, L. Briand, S. Fiorucci. *Food Chem.*, 2020, 324, 126864.

Description du projet :

Nous cherchons à décrypter les bases moléculaires de la perception chimiosensorielle (i.e. les sens chimiques : olfaction et gustation) qui est par nature un processus neuronal complexe. Pour tenter de déchiffrer le code combinatoire de la perception chimiosensorielle nous mettons au point des modèles numériques basés sur des approches de modélisation moléculaire, de machine learning, ou encore de bioinformatique structurale. Pour décrire les mécanismes moléculaires sous-jacents, nous tirons profit de l'expertise de nos collaborateurs, notamment en biologie moléculaire et neurobiologie (Figure 1).

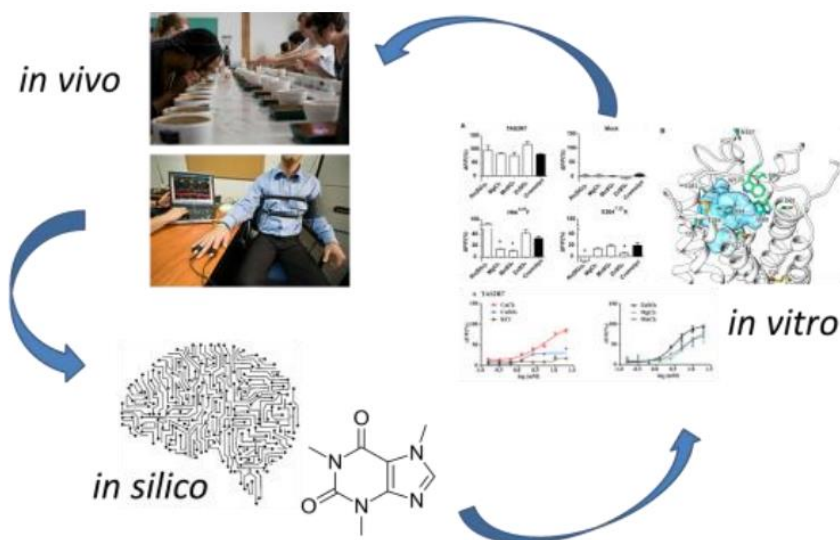
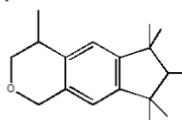


Figure 1 Synergie de l'approche pluridisciplinaire

odorant compound



+ 400 Olfactory Receptors in humans



= combinatorial coding scheme



1. Décrypter le codage de l'information chimique par notre système sensoriel.

Notre cerveau est fait de milliards de neurones et est considéré comme l'organe le plus complexe de notre corps. Parmi nos cinq sens, l'odorat et le goût sont les deux sens chimiques permettant aux êtres vivants d'identifier et de réagir aux substances présentes dans leur environnement. L'extraordinaire capacité de discrimination de notre cerveau provient de l'organisation de notre

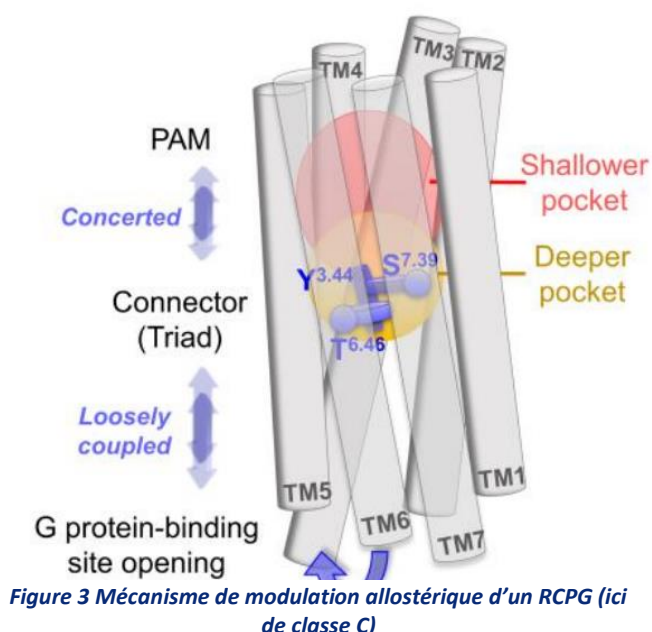
Figure 2 Codage combinatoire de la perception des odeurs

système de détection. Nous possédons environ 400 récepteurs olfactifs et 30 récepteurs gustatifs. Sachant qu'une molécule (odorante ou sapide) peut activer plusieurs récepteurs sensoriels, qu'un récepteur peut répondre à plusieurs molécules différentes et que la perception d'une odeur ou d'une saveur peut provenir d'une seule molécule ou d'un mélange de molécules, la combinatoire est virtuellement infinie¹ (Figure 2). L'homme peut par exemple distinguer plus de mille milliards de molécules odorantes. L'espace chimique des molécules pouvant activer notre odorat ou notre goût est immense et l'un des objectifs de nos travaux est d'identifier les liens chémo-génomiques de ces espaces de grande dimensionalité et de mettre au point des modèles moléculaires et numériques capables de prédire de façon rationnelle des composés olfactifs et sapides nouveaux.

Faits marquants : Les travaux de l'équipe ont notamment permis de mieux comprendre les relations entre la structure d'un composé et son activité biologique² et permis d'élargir le spectre de reconnaissance de récepteurs olfactifs humains³, de poissons⁴ ou encore d'insectes⁵ mais également de récepteurs gustatifs humains^{6,7}.

2. Développer de nouveaux composés pour moduler l'activation des récepteurs chimiosensoriels.

La détection des odeurs et des saveurs sucré, amère et umami nécessitent l'activation des récepteurs de la famille des Récepteurs Couplés aux Protéines G (RCPG) dont le mécanisme d'activation est similaire à celui de la Rhodopsine, récepteur prototypique des RCPG de classe A. Ils agissent comme des «



¹ Topin et al. Submitted. <https://doi.org/10.1101/2020.10.23.348706>

² Bushdid et al. *Science*, 2014, 343, 1370-1372

³ Licon et al. *Plos Comput. Biol.* 2019, 15(4), e1006945

⁴ Cong et al. *J. Biol. Chem.*, 2019, 294, 6762-6771

⁵ Caballero-Vidal et al. *Sci. Rep.* 2020,10, 1655

⁶ Chéron et al. *Food. Chem.* 2017, 221, 1421-1425

⁷ Bouysset et al. *Food. Chem.* 2020, 324, 126864

pinces » moléculaires qui peuvent « s'ouvrir » lorsqu'un agoniste (odorant ou molécule sapide) s'associe avec eux, ou « se refermer » s'il s'agit d'un agoniste inverse (Figure 3). La nature versatile de ces récepteurs (subtil équilibre entre différents états conformationnels dont la forme active même en l'absence de ligand, i.e. état basal) rend leur pharmacologie complexe. En l'absence de structure cristallographique de récepteur chimiosensoriel, le développement rationnel de nouveaux composés olfactifs et gustatifs reste un défi. L'un des objectifs de nos travaux est de tirer parti des outils de simulation moléculaire (validés par des études de mutagénèse dirigée) pour étudier la dynamique des interactions ligands-récepteurs et développer de nouveaux modulateurs du goût et de l'odorat. Faits marquants : Les travaux de l'équipe ont notamment montré qu'il était possible de prédire le mécanisme d'activation et le spectre de reconnaissance de récepteurs chimiosensoriels à l'aide de modèles moléculaires et numériques.

On peut mettre en avant les résultats sur les récepteurs olfactifs de mammifères^{8 9 10 11} mais également sur la famille des récepteurs gustatifs^{12 13} et plus largement sur les RCPG^{14 15 16}, famille de récepteurs impliqués dans la signalisation cellulaire et naturellement une des premières cibles pharmacologiques pour de nombreuses pathologies.

3. Collaborations et importance pour le tissu socio-économique

Le projet s'appuie sur une approche pluridisciplinaire chimie-informatique-neurobiologie. Il permettra d'envisager la mise au point d'un « nez ou d'une langue computationnelle » physiologiquement inspiré(e) capable de prédire l'odeur, la saveur et/ou la réponse émotionnelle d'un composé sur la base de sa structure moléculaire. Pour l'industrie des arômes et parfums, la recherche de nouvelles molécules est un enjeu majeur. Par analogie avec d'autres molécules connues, il serait possible de prédire les structures de nouvelles molécules ayant des effets de modulation de l'odorat ou du goût

⁸ Yu et al. PNAS, 2015, 112(48), 14966-1497

⁹ de March et al. JACS, 2015, 137(26), 8611-8616

¹⁰ de March et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 4554-4558

¹¹ Bushdid et al. CMLS, 2019, 76(5), 995-1004

¹² Chéron et al. Chem. Senses, 2019, 44, 303-310

¹³ Wang et al. Chem. Senses, 2019, 44, 339-347

¹⁴ Cong et al. J. Chem. Theory Comput., 2018, 14(8), 4467-4473

¹⁵ Cong et al. J. Chem. Info. Model. 2019 59(6), 2871-2878

¹⁶ Cong et al. PCCP, 2018, 20, 24915-24920

(inhibition notamment). De plus, les récepteurs chimiosensoriels sont également exprimés dans d'autres organes que ceux de nos sens du goût et de l'odorat (expression ectopique) et leur rôle sur notre santé est encore mal connu. On peut donc envisager des applications de notre projet dans de grands secteurs économiques aussi divers que la santé, l'industrie des arômes et parfums ou l'industrie agroalimentaire, particulièrement bien représentés dans la région PACA. Notre travail de de recherche mobilise de nombreux partenaires au niveau local avec des experts du domaine de la santé (CHU Nice, IPMC) et de l'intelligence artificielle (thèse 3IA qui démarrera en octobre 2020 en collaboration avec l'IS3), au niveau national avec des experts des sens chimiques chez l'homme (CRNL-Lyon, CSGA-Dijon) ou chez l'insecte (INRAE Versailles) ainsi qu'au niveau international avec des experts en neurosciences à Duke (USA), au Monell (USA) ou encore au DGIST (Corée). A noter également que le projet entre dans les thématiques prioritaires de l'Université Côte d'Azur liées à la science des odorants à travers l'Institut d'Innovation et de Partenariat en Arômes, Parfums & Cosmétiques et aux neurosciences computationnelles et aux sciences de la cognition notamment soutenues à travers l'institut Neuromod ou encore la structure CoCoLab.

4. Méthodologies employées

D'un point de vue computationnel, nos travaux s'appuient sur des outils de modélisation moléculaire et d'apprentissage statistique (machine / deep learning). La modélisation d'un récepteur chimiosensoriel dans un environnement physiologiquement inspiré (prise en compte explicite de la membrane, du solvant ou encore des ions) nécessite des simulations moléculaires d'environ 60 000 à 100 000 atomes et pouvant aller jusqu'à 400 000 atomes pour des systèmes multimériques (Figure 4). Nous étudions les changements de conformations qui ont lieu lors des processus de liaison d'un odorant ou d'une molécule sapide avec un récepteur. Cela nécessite des simulations de dynamique moléculaire de plusieurs dizaines de microsecondes. Pour cela nous utilisons les logiciels Amber et Gromacs, par ailleurs déjà installées sur l'ancien supercalculateur de l'Université (CICADA), que ce soit pour des calculs sur CPU ou GPU. Les analyses des trajectoires de simulations se font souvent sur les machines de l'équipe et il peut arriver que ponctuellement nous ayons besoin de réaliser une analyse (calculs de mode normaux par ex.) qui nécessite une ressources mémoire plus importante. Dans ce cas, Azzurra nous permettra de réaliser ces calculs. Par ailleurs, les structures de ces récepteurs et les interactions ligand-récepteurs sont déduites de contraintes expérimentales et théoriques par des approches de reconstruction par homologie et de docking.

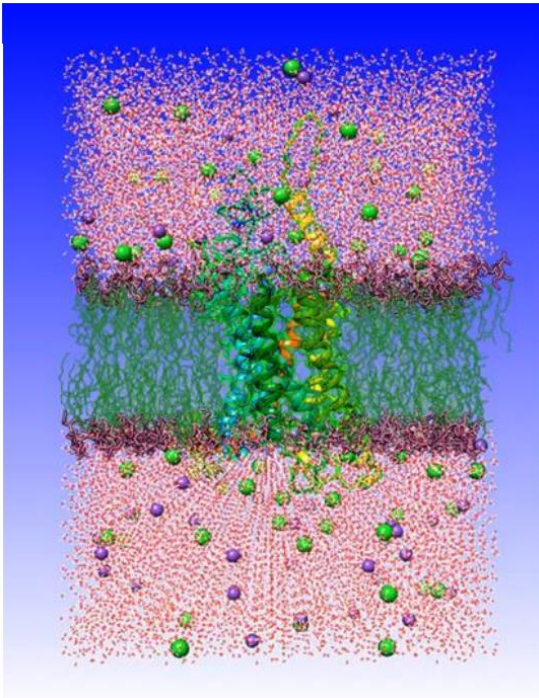
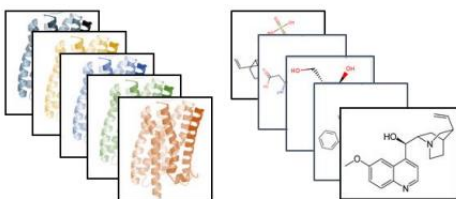


Figure 4 Boîte de simulation d'un RCPG dans environnement physiologique.

Pour cela nous utilisons les logiciels Modeller et Autodock, également installés sur CICADA et parfaitement adaptés pour du calcul parallèle et distribué sur CPU. Ponctuellement nous pouvons utiliser des logiciels de chimie quantique (Gaussian) pour le calcul de propriétés électroniques des systèmes étudiés. L'identification et la prédiction des liens chemo-génomiques et des relations structure-activité nécessite d'intégrer de grandes bases de données sur la structure des molécules odorantes ou sapides et sur la structure des récepteurs chimiosensoriels. Les descripteurs moléculaires permettront d'encoder les structures chimiques et serviront de millions d'entrées aux modèles de machine learning (SVM, RF, ...) ou de deep learning

qui seront ensuite validés par des expériences *in vitro* chez nos collaborateurs (Figure 5). Ces nouveaux résultats alimenteront in fine les bases de données initiales et permettront selon un principe de cercle vertueux d'améliorer les modèles *in silico*. L'ensemble de ces méthodes sont notamment implémentées dans différentes librairies Python (Scikit-learn, Pytorch) optimisées pour le calcul CPU et GPU ou inclus dans les extensions du logiciel R.

1. Database (DB) of chemosensory receptors and odorants/tastants



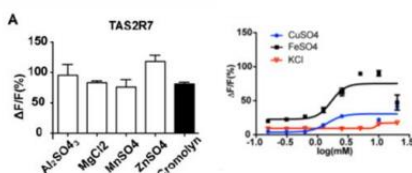
2. Encoding molecular structures into numerical descriptors

0.42	0.18	0.37	0.35	0.36	0.58	0.36	0.49
0.17	0.29	0.63	0.30	0.70	0.26	0.39	0.08
0.80	0.08	0.18	0.23	0.25	0.68	0.03	0.71
0.29	0.53	0.51	0.49	0.61	0.64	0.00	0.13
0.13	0.15	0.50	0.13	0.61	0.28	0.33	0.08
0.15	0.34	0.75	0.15	0.99	0.00	0.33	0.08
0.07	0.17	0.17	0.48	0.11	0.86	0.03	0.21
0.26	0.22	0.50	0.34	0.49	0.43	0.36	0.17
0.57	0.12	0.30	0.23	0.36	0.55	0.14	0.29
0.20	0.15	0.16	0.44	0.12	0.85	0.00	0.33

5. Feeding DB

Computational modeling of olfaction & taste

4. Prediction & *in vitro* validation



3. Machine learning (SVM, RF, ...)

3'. Deep Learning (ANN, ...)

Figure 5 Différentes étapes de la construction du modèle numérique prédictif basé sur des approches d'apprentissage automatique.

Modélisation de molécules d'intérêt biologique, catalytique et éco-compatible

Responsable scientifique : Fabien Fontaine-Vive

Laboratoire : ICN

Publication associée :

Davenel, V.; Puteaux, C.; Nisole, C.; Fontaine-Vive, F.; Fourquez, J.-M.; Michelet, V. "Indium-Catalyzed Cycloisomerization of 1,6-Cyclohexenylalkynes". *Catalysts* 2021, 11, 546.

<https://doi.org/10.3390/catal11050546>

Description des activités :

Le Service de Modélisation Moléculaire est un service de la Plateforme Technologique de Chimie dont les missions premières sont d'appuyer les travaux de recherche de l'ICN en créant des modèles numériques corroborant les expériences et permettant ainsi de les interpréter et les prédire. J'ai la responsabilité (maintenance, mise en œuvre, conception de méthodes et de modèles numériques, disponibilité et formation) pour les équipes de recherche de l'ICN ainsi que pour le tissu industriel local et national. Les problématiques que l'on est à même d'étudier avec les matériels et logiciels du service peuvent se classer comme suit :

Déterminer les conformations d'énergie minimale, dynamique moléculaire (AMBER)

Calculs de propriétés moléculaires et spectroscopiques (UV, ECD, IR, RMN, neutrons)

Etude de la réactivité chimique par les méthodes de la chimie quantique.

Applications aux sciences des matériaux.

Depuis 10 ans, le service de modélisation moléculaire est spécialisé dans l'étude des propriétés catalytiques de complexes métalliques et de nanoparticules et la compréhension des mécanismes d'inhibition de molécules antivirales.

Les 3 types de calculs de modélisation moléculaire peuvent être présentés ci-après :

Calculs ab-initio	Calculs semi-empiriques	Calculs empiriques
Optimisation de structures, calculs d'énergie électroniques, spectres électroniques de dichroïsme circulaire et UV, spectres vibrationnels IR	Détermination des conformations d'énergie minimale, dynamique moléculaire	Détermination des conformations d'énergie minimale, dynamique moléculaire

Présentation scientifique du projet :

Pour le groupe « Produits Naturels Marins » de l'équipe « Molécules Bioactives », les calculs de TD-DFT avec GAUSSIAN permettent d'élucider la configuration absolue de molécules bioactives chirales grâce aux calculs de spectres électroniques de dichroïsme circulaire électronique. Au préalable, une recherche conformationnelle au moyen de méthodes de dynamique moléculaire empirique et semi-empirique avec AMBER est nécessaire afin d'identifier les conformations les plus probables des molécules.

La figure 1 illustre la recherche de la configuration absolue de molécules extraites d'éponges marines : les anchinopeptolides qui diffèrent par les groupements R et R'.

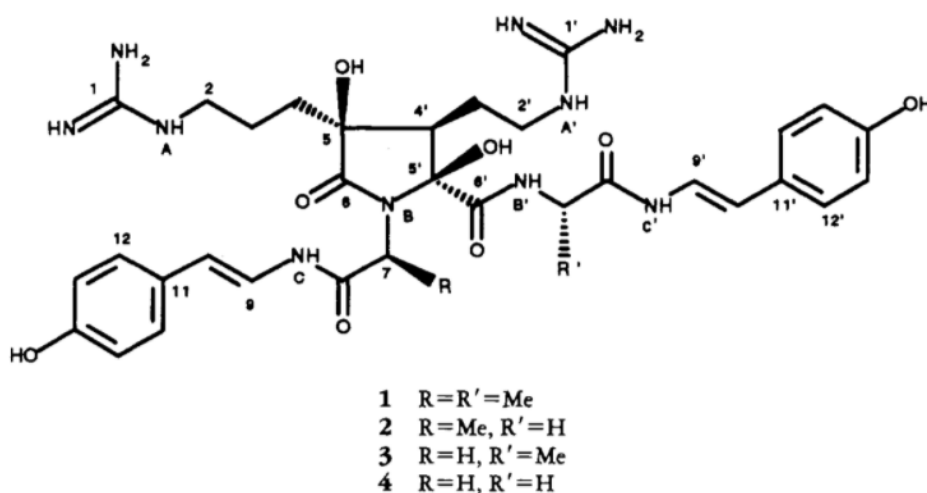


Fig. 1. Stéréochimie relative des molécules anchinopeptolides extraites d'éponges marines

Dix conformations pour chaque molécule conduisent à un calcul d'optimisation DFT puis à un calcul d'états excités TD-DFT, et la moyenne des spectres pondérée par le facteur de Boltzmann a été affichée dans la figure 2 pour une molécule. La publication sur ces travaux est en cours de rédaction et la configuration absolue des trois autres molécules restent à identifier.

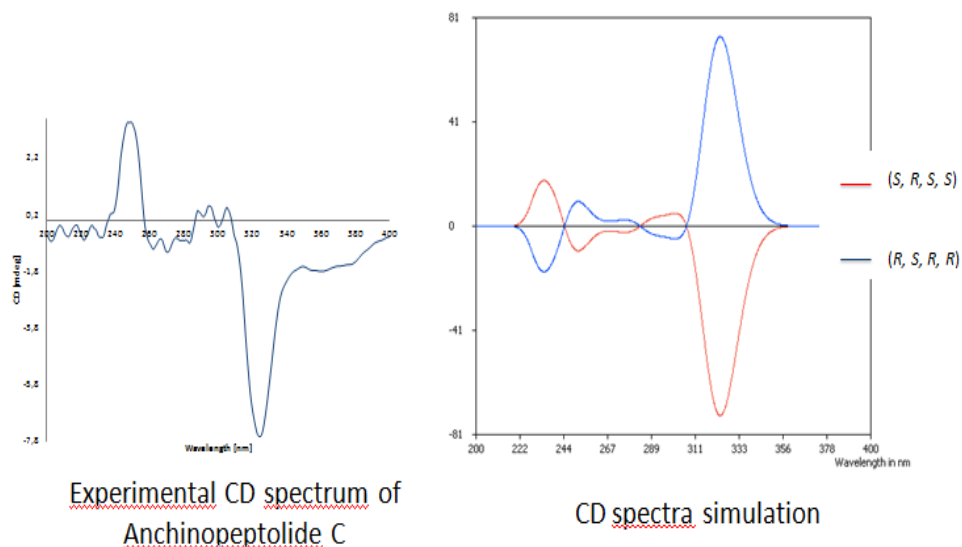


Fig. 2. Spectres ECD expérimental et calculé par TD-DFT de la molécule chirale anchinopeptolide C.

Des calculs similaires, conduits au sein du cluster CICADA ont dors et déjà permis de publier plusieurs articles de rang A référencés ci-dessous ^{17,18,19}.

Pour le groupe « Catalyse, Méthodologies de Synthèse et Chimie Fine » de l'équipe « Arômes Parfums Synthèse et Modélisation », les calculs DFT et TD-DFT permettront d'élucider la configuration absolue de molécules chirales et d'effectuer une étude mécanistique afin d'élucider le mécanisme réactionnel. La figure 3 illustre le projet en cours concernant la cyclisation catalysée par un complexe d'or. Le but du calcul sera de proposer une étude mécanistique permettant d'expliquer la catalyse asymétrique et déterminer si la réaction est cinétiquement ou thermodynamiquement limitante.

¹⁷ New bioactive chlorinated cyclopentene derivatives from the marine-derived Fungus *Phoma* sp., M. Elsebai, H.A. Ghabbour, N. Legrave, F. Fontaine-Vive, M. Mehiri, *Med Chem Res* 27, 1885–1892 (2018).

¹⁸ Pan-genotypic Hepatitis C Virus Inhibition by Natural Products Derived from the Wild Egyptian Artichoke, M. Elsebai, G. Koutsoudakise, V. Saludese, G. Pérez-Vilaró, A. Turpeinen, S. Mattila, A. M. Pirttilä, F. Fontaine-Vive, M. Mehiri, A. Meyerhans and J. Dieze, *J. of Virology*, 2016, vol. 90 no. 4 1918-1930.

¹⁹ New isocyanide antibiotics with broad spectrum against Gram-negative pathogens produced by cultures of an unidentified fungus, N El Aouad, V Gonzalez, M De la Cruz, L Lorenzo, JR Tormo, J Martin, I Perez-Victoria, C Diaz, F Vicente, F Fontaine-Vive, OP Thomas, O Genilloud, F Reyes, *Planta Med* 201480-P1L72.

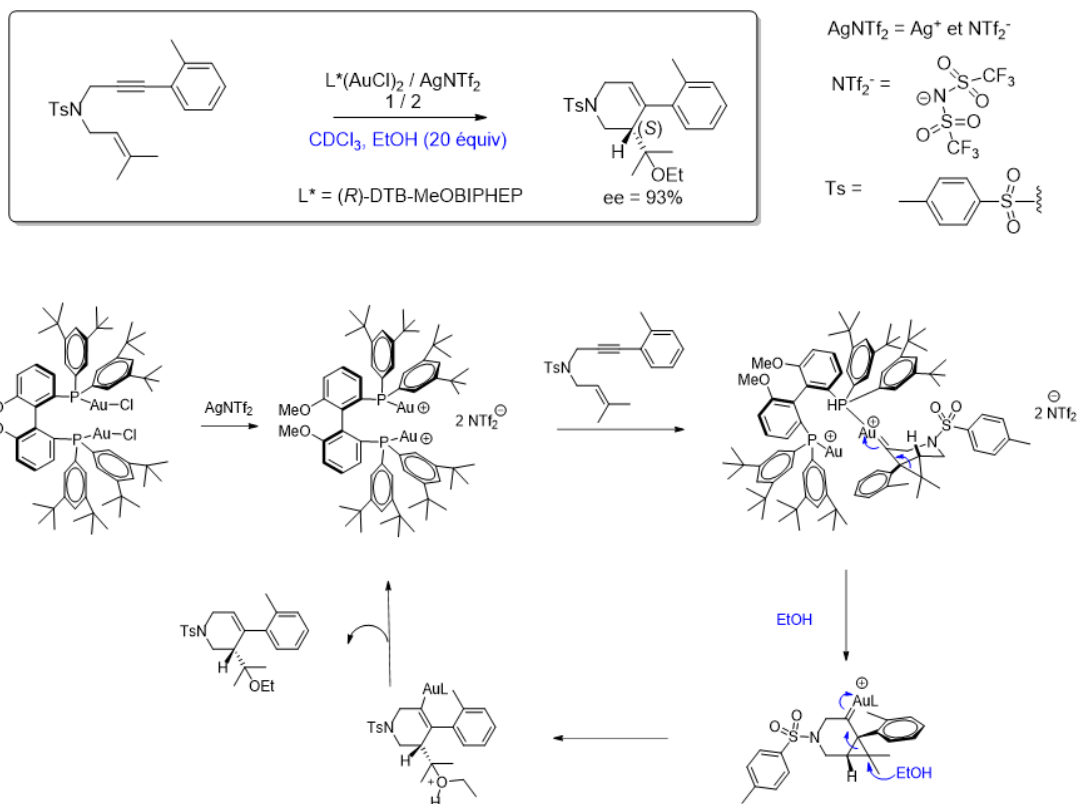


Fig. 3. Mécanisme de cyclisation asymétrique catalysée par des complexes organiques d'or

Des calculs similaires, conduits au sein du cluster CICADA ont d'ors et déjà permis de publier plusieurs articles de rang A référencés ci-dessous^{20,21,22,23,24,25}.

Pour l'équipe « Matériaux et Polymères Eco-Compatibles », les calculs DFT dans l'état solide avec le logiciel VASP nous permettront d'interpréter les spectres vibrationnels et de prédire la structure de polymères biosourcés destinés à remplacer les dérivés de produits pétroliers. Les changements conformationnels induits par des étirements

²⁰ Gold-catalyzed cycloisomerization of 1,6-cyclohexenylalkyne: an efficient entry to bicyclo[3.2.1]oct-2-ene and bicyclo[3.3.1]nonadiene, Davenel V., Nisole C., Fontaine-Vive F., Fourquez J.-M., Chollet A.-M., Michelet V., *The Journal of Organic Chemistry*, 2020.

²¹ Silver-catalyzed intramolecular [4+2] cycloaddition reaction of amide-1,6-enynes, X. Chen, F. Fontaine-Vive, S. Martini, V. Michelet, *Catalysis Communications*, 2020, 106117.

²² In(OTf)₃-Catalysed Easy Access to Dihydropyranocoumarin and Dihydropyranochromone Derivatives, Boufroua N., Dunach E., Fontaine-Vive F., Achouche-Bouzroua S., Poulain-Martini S., *New Journal of Chemistry*, 2020.

²³ Synergies in the catalytic activity of bimetallic nanoparticles and new synthetic methods for the preparation of fine chemicals, I. Francesco, F. Fontaine-Vive, S. Antoniotti, *Chem. Cat. Chem.*, 2014, 6, 2784–2791.

²⁴ Novel radical tandem 1,6-enynes thioacylation / cyclisation : Au-Pd nanoparticles catalysis versus thermal activation as a function of the substrate specificity, I. Francesco, J. Giauffret, F. Fontaine-Vive, J. Edwards, G. Hutchings, S. Antoniotti, *Tetrahedron*, 2014, Volume 70, Issue 51, 9635-9643.

²⁵ Access to polycyclic derivatives by triflate-catalysed intramolecular hydroarylation, B. Cacciuttolo, S. Poulain-Martini, F. Fontaine-Vive, M. A. H. Abdo, H. El Kashef, E. Dunach, *EuroJOC* 2014, Issue 33, 7458-7468.

pourront ainsi être élucidés. Par exemple, le PET est un polymère thermoplastique pétrosourcé dont la structure chimique est donnée à la figure 4. Nous travaillons actuellement sur un projet qui vise à l'industrialisation de son « analogue » 100% biosourcé, le PEF. Les structures chimiques de ces 2 polymères sont proches mais diffèrent par la présence d'un noyau furanique dans le PEF à la place du noyau aromatique du PET. Il a été montré expérimentalement que certaines propriétés du PEF sont très différentes de celles du PET, ce qui s'explique par les différences de structures. Il a notamment été proposé que ces différences pourraient provenir du fait que le cycle benzénique peut tourner alors que le cycle furanique ne le peut pas. La présence de l'oxygène sur le cycle furanique est également un élément important (interactions dipolaires) pour expliquer les différences de propriétés. Nous souhaitons donc réaliser un travail plus fondamental, en modélisant les structures de ces composés et en faisant les prédictions des spectres IR, afin d'essayer d'expliquer de façon plus académique les différences de comportement observées expérimentalement.

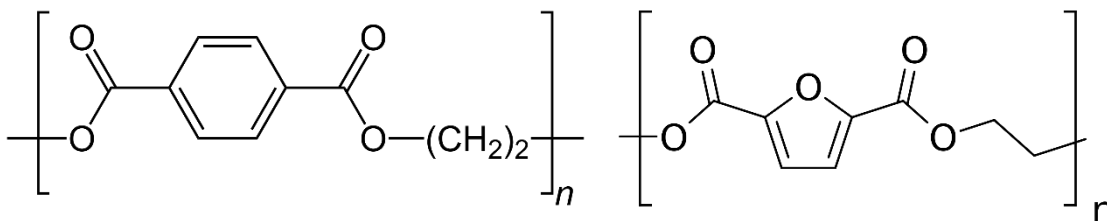


Fig. 4. Unités de répétition de PET (gauche) et PEF (droite)

Calcul ab initio de spectres de molécules réservoirs pour le carbone interstellaire et circumstellaire

Responsable scientifique : Patrick Cassam-Chenaï

Laboratoire : LJAD

Publications :

Rapports de stages:

Clélia Bastelica, rapport de M1 Ondes Atomes Matière (UCA) + poster : <http://master-oam.unice.fr/stages/2020-2021-M1-posters/Clelia.pdf>

El Hassan Afddas, rapport de M2 Chimie Théorique et Modélisation (Université de Montpellier)

Description :

Le projet se concentrera sur l'étude de 2 familles de molécules considérées comme piégeant une grande partie du carbone interstellaire et circumstellaire, et qui pour cela jouent un rôle clé dans l'astrochimie organique, et possiblement prébiotique. Il s'agit des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAPs) et des fullerènes.

Les HAPs forment une famille de composés organiques constitués de cycles aromatiques d'atomes de carbones dont les valences périphériques sont saturées par des atomes d'hydrogènes. Les HAPs (ou des espèces dérivées proches) sont considérés comme les porteurs des "Bandes Infra-rouges Aromatiques" (BIAs) à ~3.3, 6.7, 7.7, 8.6, 11.3 μm . Ces bandes caractéristiques sont parmi les plus fortes observées en infra-rouge (IR) dans le milieu interstellaire et présentent une certaine variabilité en fonction des sources observées. Ainsi, la spectroscopie IR des HAPs est d'importance capitale pour l'astrochimie et l'astrophysique: une meilleure compréhension de celle-ci est essentielle pour déduire des observations IR, des informations sur la composition des HAPs et les paramètres physiques de leur environnement [1].

Le fullerène le plus emblématique est le buckminsterfullerène, C₆₀, parfois également appelé footballène. Ses propriétés physiques uniques sont l'objet de recherches très actives. Elle a été détectée dans une grande variété d'environnements circumstellaires et interstellaires, y compris dans des nébuleuses protoplanétaires [2], grâce à son spectre dans l'infra-rouge (IR) résultant de transitions entre ses niveaux d'énergie vibrationnels. De plus, une expérience récente de spectroscopie haute résolution sur molécules isolées

vient de livrer des données d'une qualité sans précédent [3], dont l'interprétation reste très incomplète. C'est pourquoi, une étude théorique du spectre de rotation-vibration du C60 est du plus vif intérêt.

Nous avons mis au point au laboratoire un code, CONVIV, qui résout l'équation de Schrödinger avec une précision qui correspond à l'état de l'art, pour les degrés de liberté de rotation-vibration moléculaires [4]. Il peut être utilisé pour calculer ab initio le spectre IR de molécules de tailles arbitraires, y compris le C60 qui comporte 174 degrés de liberté internes. Il a permis de tester les champs de force actuellement disponibles pour ce système dans la littérature [5]. Les résultats ab initio obtenus avec CONVIV seront confrontés aux données expérimentales et observationnelles, afin d'extraire le plus d'informations possible de ces dernières, en particuliers les données de l'interféromètre Matisse et surtout du James Webb space telescope qui devrait être mis en orbite cette année.

Références :

- [1] G. Mulas, C. Falvo, P. Cassam-Chenaï, C. Joblin, J. Chem. Phys. 149, 144102 (2018).
- [2] Y. Zhang, S. Kwok, Astrophys. J. 730, 126 (2011).
- [3] P. B. Changala, M. L. Weichman, K. F. Lee, M. E. Fermann, J. Ye, Science 363, 49 (2019).
- [4] P. Cassam-Chenaï, J. Liévin, Journal of Computational Chemistry 27, 627-640 (2006).
- [5] Daniel A. Jelski, Laszlo Nemes, and S Broughton Journal of Cluster Science 16, 1 (2005).

Physique non linéaire, fluides complexes

EUR Spectrum

Rhéologie des suspensions concentrées

Responsable scientifique : François Peters

Laboratoire : INPHYNI

Articles non encore soumis :

Michel Orsi, Laurent Lobry, François Peters Frame-invariant sub-grid corrections to the Fictitious Domain Method for the simulation of particulate suspensions in non-linear flows using OpenFOAM (en vue d'une soumission à Journal of Computational Physics)

Ayoub Badia, François Peters Yves D'angelo, Laurent Lobry Frame invariant modeling for non-Brownian suspension flows (en vue d'une soumission à Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics)

Présentations :

55eme Congrès du Groupe Français de Rhéologie (26-28 octobre 2021, Bordeaux) M. Orsi, L. Lobry et F. Peters. Simulations de suspensions non-Browniennes concentrées : formulation d'une correction de lubrification invariante par changement de référentiel

Workshop organisé par le GDR MePhy à l'École de Physique des Houches (August 23-26, 2021, Les Houches) Michel Orsi, Laurent Lobry, François Peters. Simulation of particulate suspensions using OpenFOAM: frame-invariant sub-grid corrections to the Fictitious Domain Method

Young Rheologist Days 2020 (prévu en 2020, 6-9 juillet 2021, Giron) Michel Orsi, Laurent Lobry, Stany Gallier, François Peters. Rheology non-brownian dense suspensions: an optimised implementation of the fictitious domain method in OpenFOAM

18th International Congress on Rheology (December 14-18, 2020, Rio de Janeiro) Michel Orsi, Laurent Lobry, Stany Gallier, François Peters. Rheology of non-Brownian concentrated suspensions: a parallel implementation of the Fictitious Domain Method in OpenFOAM

14th World Congress in Computational Mechanics (WCCM) ECCOMAS Congress 2020 (19 – 24 July 2020, Paris) Ayoub BADIA, Laurent LOBRY, François PETERS and Yves D'ANGELO Frame invariant model for suspension flows

Posters :

25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM) 2020+1 (prévu en 2020, tenu en 2021, Milan) Michel Orsi, Laurent Lobry, Stany Gallier, François Peters. Rheology non-brownian dense suspensions: an optimised implementation of the fictitious domain method in OpenFOAM

BlobNet A Convolutional Neural Network to detect particles on images. David Paulovics. Stage à l'INPHYNI encadré par Frédéric Blanc. Master 1 Ondes, Atomes, Matière, Université Côte d'Azur (2020) <http://master-oam.unice.fr/stages/2019-2020-M1-posters/David.pdf>

Thèse :

Ayoub Badia, « Modélisation numérique de suspensions non-browniennes concentrées en écoulement rhéométrique ou général » 2021. Encadrants : Yves D'Angelo (LJAD), François PETERS (INPHYNI) et Laurent LOBRY (INPHYNI).

Description du projet :

L'équipe Rhéologie des Suspensions Concentrées de l'Institut de Physique de Nice s'intéresse aux propriétés d'écoulement des suspensions de particules solides en écoulement lent. Du point de vue macroscopiques, ces propriétés sont prises en compte par des lois de comportement de fluides continus décrivant des relations mathématiques entre grandeurs macroscopiques (contraintes, taux de déformation, flux de particules). Les fonctions matérielles (viscosité généralisées, coefficient de diffusion de particules etc.) mises en jeu reflètent, de façon encore partiellement incomprise, les mécanismes physiques actifs à l'échelle des particules (interactions hydrodynamiques, interactions directes entre particules, en particulier contact). Ces mécanismes microscopiques mettent en jeu des paramètres microscopiques assez divers (propriétés rhéologiques du fluide suspendant, taille, forme des particules, ainsi que leur élasticité et leurs propriétés de surface). Depuis une dizaine d'année, l'équipe RSC tente d'approfondir la compréhension des liens entre ces mécanismes à l'échelles microscopiques et le comportement mésoscopique à une échelle supérieure. Pour ce faire, nous nous appuyons sur des approches combinées d'expériences de rhéologie macroscopique classique, de mesures locales (à l'échelle de la particule), de simulations résolues à l'échelle des particules, de modélisation et de calcul d'écoulement en milieux continus. Plusieurs de ces approches nécessitent la mise en œuvre de calculs assez lourds, c'est pourquoi le projet présenté ici se décline en plusieurs volets qui seront détaillés ci-dessous. On notera qu'une partie de ces travaux fait l'objet d'un projet ANR (AMARhéo 2019- 2022) qui a notamment financé la machine SMP du cluster Azzurra.

Simulations discrètes de suspensions

Les simulations discrètes ont pour but de décrire la dynamique des particules et du fluide en tenant compte des interactions pertinentes au sein de la suspension, et d'en déduire, au moyen de moyenne, les lois de comportements macroscopiques permettant en retour de décrire le matériau comme un milieu continu. La difficulté de cette démarche réside dans le haut niveau de couplage existant entre la dynamique du fluide (partie « fluide » du code) et celle des particules (partie DEM: Discrete Element Method). Nous utilisons pour ce faire une méthode de domaines fictifs, qui permet de calculer un écoulement dans tous le volume représentatif de la suspension. La présence des particules, notamment leur caractère indéformable, est prise en compte via une densité de force calculée à chaque pas de temps, et qui traduit les relations de conservations mécaniques fondamentales. L'écoulement ainsi déterminé permet de calculer les interactions hydrodynamiques entre particules qui en résultent. Les écoulements à une échelle plus petite que la maille ne sont évidemment pas accessibles et donnent lieu à des corrections de force et de moment hydrodynamiques « sousmaille » sur les particules. Du point de vue des particules, outre ces interactions hydrodynamiques, les interactions directes sont de première importance. Dans notre cas, il s'agit d'interactions de contact, mettant en jeu à la fois des forces élastiques, de frottement et d'adhésion. Cette approche, qui nécessite de décrire des échelles inférieures à la taille des particules dans des systèmes comptant un nombre suffisant de particules pour obtenir des statistiques suffisantes, demande une puissance de calcul importante. Elle a contribué ces dernières années à clarifier l'influence du frottement entre particules sur la rhéologie des suspensions.²⁶ ²⁷

²⁸ ²⁹

²⁶ Stany Gallier, Elisabeth Lemaire, Laurent Lobry, and François Peters. A fictitious domain approach for the simulation of dense suspensions. *Journal of Computational Physics*, 256:367–387, 2014.

²⁷ Stany Gallier, Elisabeth Lemaire, François Peters, and Laurent Lobry. Rheology of sheared suspensions of rough frictional particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 757:514–549, 2014.

²⁸ François Peters, Giovanni Ghigliotti, Stany Gallier, Frédéric Blanc, Elisabeth Lemaire, and Laurent Lobry. Rheology of non-brownian suspensions of rough frictional particles under shear reversal: A numerical study. *Journal of rheology*, 60(4):715–732, 2016.

²⁹ Laurent Lobry, Elisabeth Lemaire, Frédéric Blanc, Stany Gallier, and François Peters. Shear thinning in non-brownian suspensions explained by variable friction between particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 860:682–710, 2019.

Deux codes différents fondés sur deux méthodes légèrement différentes, seront mis en oeuvre. Le premier utilise la méthode FCM (Force Coupling Method). L'écoulement est calculé en utilisant des méthodes spectrales (typiquement F.F.T.) implémenté dans le langage Fortran. Ce code, faiblement parallélisé (procédure OpenMP), permet de gérer des systèmes de petite taille (typique 1000 particules) pour des durées de calcul d'une quinzaine de jours sur 4 coeurs. Ce code a déjà été validé et utilisé sur le cluster Cicada, et a donné lieu à plusieurs publications, . Un deuxième code (Domaine fictif sous OpenFOAM) a donné lieu sous une forme différente à plusieurs publication, . Son adaptation à l'environnement OpenFOAM est en cours de mise au point. Il s'agit ici de paralléliser massivement les calculs en vue de simuler des systèmes de très grande taille. Ceci permettra de décrire la dynamique des particules jusqu'à des échelles intermédiaires (mésoscopiques) entre la taille des particules et les distances typiques caractéristiques des écoulements pertinents pour les applications. C'est notamment crucial pour les écoulements où la fraction volumique de solide et le taux de cisaillement présentent des gradients spatiaux et imposent donc au système une telle échelle intermédiaire. Ces gradients sont à l'origine de flux de particules qui, s'ils ont été étudié depuis longtemps du point de vue expérimental, sont actuellement mal compris du point de vue microscopique, et imparfaitement décrits par les modèles de milieux continus actuels. La majorité des simulations s'est jusqu'ici limitée à des systèmes homogènes. La simulation discrète de tels systèmes hétérogènes est donc d'un très grand intérêt dans ce domaine. Le calcul des écoulements est réalisé par la méthode des volumes finis dans l'environnement libre OpenFOAM qui offre des outils standards de résolution des équations de Navier-Stokes / Stoke de façon parallèle (procédure MPI). L'adaptation de la méthode des domaines fictifs à cet environnement, avec en particulier la parallélisation de la partie DEM de la méthode, constitue une partie du travail de thèse de Michel Orsi, dont le contrat est également financé par l'ANR AMARhéo. Il est prévu que des jobs puissent être lancés sur typiquement 100-200 coeurs.

Simulations en milieux continus

L'objet de cette partie est de développer et utiliser des modèles en milieux continus capables de décrire l'écoulement des suspensions, y compris la diffusion des particules, dans des géométries d'écoulement complexes rencontrées soit dans des expériences de recherche menées dans l'équipe, soit dans le traitement de problématiques industrielles. Le verrou principal de cette activité réside dans la nécessité de décrire les équations de transport de la quantité de mouvement et de la masse de la suspension vue comme un

milieu continu, ainsi que le transport des particules (diffusion) par rapport à ce milieu continu. L'approche suivie, classique, consiste en la définition, en plus de la phase moyenne (suspension), d'une phase solide, certes transportée par la suspension, mais également capable de mouvement relativement à elle. La problématique principale dans ce domaine consiste à définir les lois de comportement décrivant le transport de cette phase solide à partir de contraintes développées dans la phase particulaire. Les modèles actuels peinent en effet à reproduire les résultats expérimentaux de l'équipe RSC et plus largement de la communauté scientifique qui s'intéresse à ces problèmes. Les équations aux dérivées partielles issues des modèles adoptés sont résolus par la méthode des volumes finis dans l'environnement OpenFOAM, qui comme cela a déjà été rappelé, permet une parallélisation par la procédure MPI. Ce travail, déjà en cours depuis quelques années³⁰, a été mis en oeuvre au sein du cluster Cicada, et constitue le travail de thèse d'Ayoub Badia, dirigé conjointement par Yves D'Angelo au laboratoire J.A.D. et Laurent Lobry au laboratoire InPhyNi.

Traitement d'images expérimentales par des méthodes d'intelligence artificielle

L'équipe RSC a développé des méthodes de rhéologie locale capable de mesurer, en plus des grandeurs rhéologiques intégrées classiques (couple, taux de cisaillement), des grandeurs locales au sein de la suspension (fraction volumique locale, taux de déformation local). Ces mesures locales constituent une très grande valeur ajoutée pour l'étude quantitative des lois responsables du transport de la suspension et de la phase solide au sein d'un écoulement. Elles permettent en effet de mesurer directement les gradients de vitesse, taux de cisaillement, fraction volumique qui déterminent les différents flux (matière, quantité de mouvement etc). Elles ont notamment permis de mettre en évidence le rôle primordial des contacts entre particules dans les propriétés rhéologiques des suspensions non-browniennes.^{31 32}

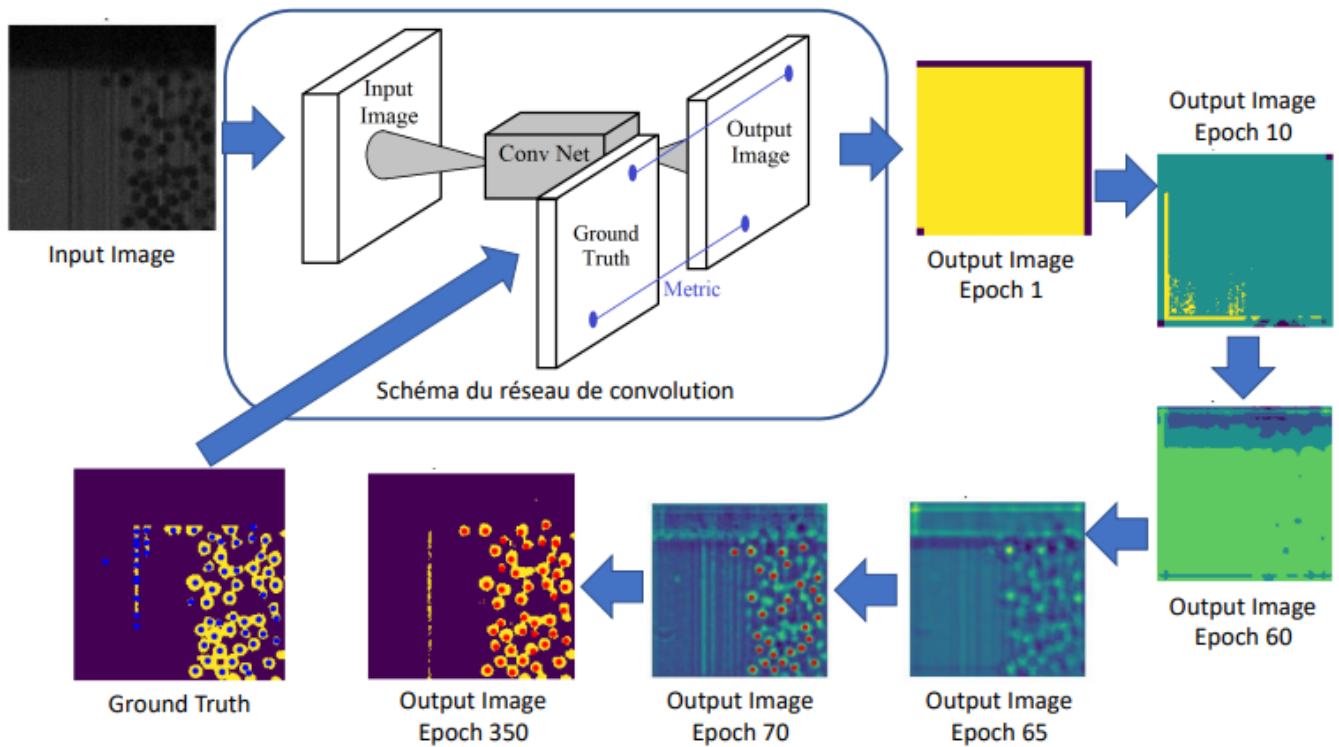
³⁰ Talib Dbouk, Elisabeth Lemaire, Laurent Lobry, and F Moukalled. Shear-induced particle migration: Predictions from experimental evaluation of the particle stress tensor. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 198:78–95, 2013.

³¹ Frédéric Blanc, François Peters, and Elisabeth Lemaire. Experimental signature of the pair trajectories of rough spheres in the shear-induced microstructure in noncolloidal suspensions. *Physical review letters*, 107(20):208302, 2011.

³² Frédéric Blanc, Elisabeth Lemaire, Alain Meunier, and François Peters. Microstructure in sheared non-brownian concentrated suspensions. *Journal of rheology*, 57(1):273–292, 2013.

Ceci se fait au prix d'expériences complexes et d'un traitement de données assez lourd. En effet les suspensions utilisées doivent être rendues transparentes en adaptant l'indice des particules à celui du fluide, qui est lui-même rendu visible par l'adjonction d'un colorant fluorescent activé par une nappe laser, dont l'image est enregistré par une caméra. L'épaisseur de la nappe laser étant plus fine que le taille des particules, celles-ci apparaissent comme des disques noirs sur les images enregistrées par la caméra. L'essentiel du traitement de ces images consiste à les segmenter pour séparer l'intérieur des particules du liquide avant de déterminer la position des centres des particules. Ce traitement est classiquement réalisé par des méthodes morphologiques, mais cela nécessite le réglage de nombreux paramètres qui sont fortement dépendant des conditions d'éclairages liées à de subtiles variations de l'indice de réfraction de la suspension. Pour accélérer le traitement et ne plus dépendre du réglage de ces paramètres, nous nous sommes tournés vers des techniques d'intelligence artificielle. Ce travail, effectué en collaboration avec Bruno Figliuzzi du Centre de Morphologie Mathématique de Mines ParisTech, est basé sur un algorithme de réseau neuronal convolutif³³ (CNN). « L'apprentissage » du réseau se fait en utilisant des images de nos expériences de rhéologies locales, segmentées par une méthode classique. Une image alimente l'entrée du réseau et la sortie calculée par le réseau est comparée à la « vérité terrain » (i.e l'image segmentée). Une fonction de « coût » calcule alors l'écart entre la sortie et cette vérité terrain. Pour minimiser ce « coût », les nombreux paramètres du réseau sont subtilement modifiés par un processus de « descente de gradient ». Ce processus est itéré avec une série d'images différentes jusqu'à minimiser le « coût ». Le schéma ci-dessous illustre cet apprentissage. Les images de sorties sont calculées à partir d'une même image d'entrée sur la base des paramètres d'apprentissages obtenus au bout d'un nombre d'itération (epoch). Les points rouges sur l'image de l'epoch 350 correspondent aux particules détectées par le réseau sur l'image segmentée. Ce résultat contient moins d'erreurs de détection que sur la vérité terrain (points bleus).

³³ Chen, Qifeng, Jia Xu, and Vladlen Koltun. "Fast image processing with fully-convolutional networks." Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision. 2017.



Fort de ces premiers résultats prometteurs, nous orientons nos travaux vers l'apprentissage sur une banque d'images de synthèse dans le but d'adapter la détection à tout type de forme de particules (cubes, fibres, etc ...) ainsi qu'à une extension à des images en trois dimensions. La programmation et l'apprentissage supervisé du réseau sont réalisés en python 3.7 à l'aide des bibliothèques Pytorch-Cuda, Numpy, scikit-learn et scikit-image. Les calculs sont effectués sur GPU (Pytorch gère CUDA de manière transparente). La base de données d'images nécessite une volumétrie d'environ une dizaine de Go (voir plus dans le cas de la 3D) stockée transitoirement sur Azzurra.

Olfactory navigation

Responsable scientifique : Agnese Seminara

Laboratoire : INPHYNI

Publications à venir :

- (1) Learning to predict target location using turbulent odor plumes. Nicola Rigolli, Nicodemo Magnoli, Lorenzo Rosasco and Agnese Seminara <https://arxiv.org/pdf/2106.08988>
- (2) Learning to alternate between different sensory modalities by alternating airborne and ground odors cues. Nicola Rigolli, Gautam Reddy, Massimo Vergassola and Agnese Seminara

Description du projet :

Living systems continuously operate decision-making, based on a large array of sensory inputs that inform their understanding of the world. Chemical cues bear a fundamental source of information, and all domains of life have evolved sophisticated mechanisms to extract, store and process this information. Olfaction is one of the major distant senses and animal species use it to target their computational needs under different physical constraints. Remarkably, the neural architecture underlying the sense of smell is widely conserved. Olfactory navigation often targets the source of an odor, e.g. to survive predators and forage for food. At microscopic scales, where diffusion dominates over advection, chemical signals vary smoothly in space and their gradient typically points to the source. It is well known that individual bacteria take advantage of this property to move towards attractants or away from repellents. However, gradient climbing requires that signals vary smoothly in space, and this is rarely the case at macroscopic scales, where advection dominates over diffusion. Animals living within the atmospheric surface layer, often experience highly fluctuating conditions due to turbulence. The gradients of a chemical substance transported passively by a turbulent flow does not necessarily point to its source. Deriving useful information from turbulent signals is notoriously hard, and this makes olfactory navigation both fascinating and obscure. In this project, we target a three dimensional numerical simulation of odor transport a turbulent channel flow. The work is divided in three parts:

(1) develop a massive dataset of turbulent odor fields, varying the Reynolds numbers based on mean flow as well as on fluctuations. To this end we will vary geometry and we will introduce an obstacle of various sizes which will tune the level of fluctuations (which is otherwise quite universal in channel flows). We will employ a spectral element

algorithm to solve the Navier Stokes equations as well as equation of transport of a passive scalar emitted from a concentrated source. We will use the open source code Nek5000, which is optimized for parallel computing.

(2) develop supervised learning algorithms based on classical regularized empirical risk minimization, using linear; linear-non linear and fully non linear models (using dictionary of features, kernel methods, neural networks – collaboration Lorenzo Rosasco and Nicodemo Magnoli University of Genova). This will elucidate what features of these spatio temporal signals hold the most useful information about the location of the odor source. We will study how inference varies in different flow conditions, especially depending on intermittency, which is a crucial challenge for olfactory navigation (Gire et al, 2016). Apply our understanding to analyze neural representation of odors in mice olfactory bulb (collaboration D Gire).

(3) Use these data to develop reinforcement learning algorithms for navigation in an abstract setting (collaboration with M. Vergassola ENS Paris, G. Reddy and C Rycroft at Harvard University); and to model animal behavior (experiments on mice, octopuses and fishes conducted by D Gire U Washington and N Bellono Harvard University)

Wave turbulence simulations and theory

Responsible scientifique : Sergey Nazarenko

Laboratoire : INPHYNI

Publication :

Zhu, Y., Semisalov, B., Krstulovic, G., & Nazarenko, S. (2021). Testing wave turbulence theory for Gross-Pitaevskii system. arXiv preprint arXiv:2111.14560.

Description :

The proposed research project is part of the Simons Foundation international collaboration project “Wave Turbulence”. Our research aims at developing solid theoretical foundations for wave turbulence systems and modelling experiments in wave turbulence performed in laboratory by partners of this collaboration. In this work, large-scale numerical simulations of different wave systems will be performed. We focus on those systems (e.g. Bose-Einstein Condensate (BEC) and nonlinear optics) which can be described by the Gross-Pitaevskii equation (GPE). Then we propose to confront the numerical and theoretical results coming from Weak Wave Turbulence theory (WWT) for BEC, and also numerical and experimental results for nonlinear optics. The Gross-Pitaevskii equation

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x},t) + g |\psi(\mathbf{x},t)|^2 \psi(\mathbf{x},t) + F + D$$

is also known as the nonlinear Schrödinger equation, where $\psi^{(\mathbf{x},t)}$ is the order parameter indicating the condensate wave function in BEC ($\psi^{(\mathbf{x},t)}$ may represent different physical quantities in other physical contexts), F and D represent possible external forcings and dissipation mechanisms, $\hbar = h / 2\pi$ and $g = (4\pi \hbar^2 a_s) / m$ is the coupling constant fixed by the s-wave scattering length as that models a local interaction between bosons. Here we set $g=1$ corresponding to the defocusing GP.

Optique

EUR Spectrum

Comportement spatial de la propagation d'une pompe hautement multimode dans des amplificateurs et lasers à fibre

Responsable scientifique : Valérie Doya

Laboratoire : INPHYNI

Description :

Les lasers à haute puissance sont aujourd'hui utilisés dans une grande variété d'applications industrielles et environnementales. Afin d'améliorer leur robustesse et leur efficacité, ces systèmes sont maintenant majoritairement fibrés, c'est-à-dire que l'ensemble des éléments qui composent le laser est contenu dans une fibre optique. Le milieu amplificateur est obtenu par un dopage aux ions terres rares de la fibre et les miroirs (appelé réseaux de Bragg) qui constituent la cavité sont en général photo-inscrits dans le cœur de la fibre. Afin d'optimiser le schéma de pompage du laser, des réflecteurs sont en général employés pour recycler la pompe dans la cavité laser. L'un des enjeux actuels est de pouvoir les fabriquer directement dans la gaine de la fibre optique. L'aspect fortement multimode de la pompe se propageant dans la gaine rend l'interaction avec un réseau de Bragg non triviale. Les relations couramment employées dans le cadre d'un faisceau monomode ne sont plus valables et une connaissance fine du contenu modale de la pompe devient alors indispensable.

L'objectif de ce projet est donc de calculer numériquement l'évolution du signal de pompe au sein d'une fibre optique amplificatrice afin de pouvoir optimiser le design d'un réflecteur de pompe fibré. La géométrie du système et le schéma numérique employé nécessite actuellement un temps de calcul de plusieurs semaines empêchant toute étude paramétrique. Parallèlement à un travail d'optimisation du code, nous sollicitons les ressources dédiées du centre de calcul pour diminuer notablement le temps de calcul.

Ce projet s'inscrit dans le cadre d'une collaboration actuelle avec le Centre Optique Photonique et Laser (Université Laval, Québec) et TeraXion (entreprise québécoise spécialisée dans la fabrication de composants et lasers fibrés). Nous avons aussi amorcé une collaboration avec OptiWave, une entreprise canadienne qui édite un logiciel de calcul optique dédié à l'interaction laser/réseaux de Bragg.

Light scattering in disordered systems with correlations

Responsible scientifique : Geoffroy Aubry

Laboratoire : INPHYNI

In this project, I plan to realize different kinds of numerical simulations in order to better understand the influence of correlated disordered dielectrics on the propagation of electromagnetic waves (light) in these systems.

Disordered dielectrics like clouds, foams, powders, etc. appear white because light propagate into it not in a straight line, like in vacuum, but get scattered, i.e., changes its propagation direction much more than once in the medium. This explains the reason why the sun position can't be seen on a cloudy day, although the sun light still arrive to our eyes. In a cloud, there is, a priori, no correlation between the scatterers (i.e. the water droplets) positions: this medium is referred to as an "uncorrelated disordered system". In a "correlated disordered system", the positions of the scatterers are not completely independent from each other. The limit of this class of system are photonic crystals, where all the positions of the scatterers are linked to each other, and no disorder is present anymore.

Using correlated disorder, it is possible to tune light transport in order to observe a wide variety of regimes: from transparency, to light hindered to enter the medium (like in a photonic bandgap) including light diffusion or even light stuck in the medium, the so called Anderson localized regime.

In my previous work done during my postdocs in Konstanz (Germany) and Fribourg (Switzerland), I already did some experimental and numerical work on these kinds of systems (see selected references at the end of this paragraph). As a new permanent researcher in the Institut de Physique de Nice, I plan to continue these studies that are of great interest for applications such as supercontinuum fiber lasers and for data processing using optical modules based on 2D silicon photonic crystal technology. Technological applications for 3D PBG bandgap materials offer great potential in lasing, wave-guiding, light-harvesting and even optical computers.

Selected references:

Aubry, G. J.; Schertel, L.; Chen, M.; Weyer, H.; Aegerter, C. M.; Polarz, S.; Cölfen, H. & Maret, G. Resonant transport and near-field effects in photonic glasses

Phys. Rev. A 96, 043871 (2017) <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.96.043871>

Aubry, G. J.; Froufe-Pérez, L. S.; Kuhl, U.; Legrand, O.; Scheffold, F. & Mortessagne, F.

Experimental Tuning of Transport Regimes in Hyperuniform Disordered Photonic Materials Phys. Rev. Lett. 125, 127402 (2020)

<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.127402>

Aeby, S.; Aubry, G. J.; Muller, N. & Scheffold, F. Scattering from controlled defects in woodpile photonic crystals Advanced Optical Materials, 9, 2001699 (2021)

<http://dx.doi.org/10.1002/adom.202001699>

Yazhgur, P.; Aubry, G. J.; Froufe, L. S. & Scheffold, F. Light scattering from colloidal aggregates on a hierarchy of length scales Opt. Express, 29, 14367 (2021)

<http://dx.doi.org/10.1364/OE.418735>

Hydraulique urbaine

EUR Spectrum

Modélisation d'emprise d'inondation sur la Côte d'Azur

Responsable scientifique : Pierre Brigode

Laboratoire : Géoazur

Conférence :

Modelling Culverts in Basilisk

by Zied Amama, Nicolas Branco, Cheikh Mangara, Kevis Mbonyinshuti, Qiyu Yu, Thibaut Cottancin, Sarah Vigoureux, Pierre Brigode, Olivier Delestre and Pierre-Yves Lagrée

SimHydro 2021 6TH INTERNATIONAL CONFERENCE 16TH-18TH JUNE 2021 SOPHIA ANTIPOLIS – FRANCE

Rapports étudiants UCA :

- Rapport de stage GE4 Polytech de Zied Amama (2020)
- Rapport de stage GE4 Polytech de Mickaël Lastes (2020)
- Rapport PFE Génie de l'eau 5ème année Polytech "Restauration efficace et durable du tronçon du Lac des Gaves" - étudiants E. Fernandez, A. Matard, A. Moutinho, E. Sautel, Y. Sofyane.
- Master thesis report - Johannes Nickel "Characterisation of the 2020 Flood Impacts within the Bieugne Catchment through 2D-Modelling with TELEMAC" M. Sc. Hydroinformatics and Water Management (Polytech), 2021.
- Master thesis report Yan Joron - M. Sc. Hydroinformatics and Water Management (Polytech), 2021

Résumé publié sur le site d'Azzurra et diffusé dans la newsletter IDEX du 05/05/21 :

« Modélisation hydro-sédimentaire des impacts de la tempête ALEX sur les bassins de la Vésubie et de la Roya » Par Rabab YASSINE (ATER) et Pierre BRIGODE (Maître de Conférences) de l'équipe Risques, UMR Géoazur, et par Yan JORON (étudiant en Génie de l'eau à Polytech Nice Sophia). 2021

https://calculs.univ-cotedazur.fr/?page_id=1838

Description des activités :

Le 3 octobre 2012, un épisode pluvieux particulièrement intense a touché la partie côtière du département des Alpes Maritimes, et a engendré des crues éclairs dévastatrices sur plusieurs fleuves côtiers du département, impactant principalement les communes de Cannes, Mandelieu, Antibes et Biot. Le bilan de cet épisode est lourd, avec 20 victimes et plus de 600 millions d'euros de dégâts assurés. La Brague est l'un des fleuves côtiers qui a le plus réagi aux intenses précipitations, endommageant notamment la seule station hydrométrique présente sur le cours d'eau. D'importantes investigations de terrain menées suite à l'épisode ont permis de constituer une base de données importantes de laisses de crues et d'estimations de débits de pointe sur plusieurs vallons (e.g. Lebouc & Payrastre, 2017). Ces données permettent d'estimer l'emprise de la zone

inondée, et également de quantifier les performances d'outils de modélisation par comparaison entre hauteur d'eau relevée sur le terrain et hauteur d'eau simulée.

Dans ce contexte, le logiciel libre Basilisk (<http://www.basilisk.fr>) a été récemment testé pour simuler l'extension de l'inondation d'octobre 2015 sur plusieurs vallons de la région (Kirstetter et al., 2020). La comparaison avec les données observées a révélé une bonne performance générale du modèle sur la Brague. Une approche novatrice de couplage de modélisations hydrologique et hydraulique a également été testé avec ce même logiciel et sur le même cas d'étude, et a permis d'obtenir des résultats particulièrement intéressants (Charpentier – Noyer, 2019). Enfin, un travail d'analyse statistique des pluies rares observées et d'estimation de courbes Intensité-Durée-Fréquence (IDF) sur les vallons d'intérêts a permis de gagner en expertise sur les cumuls potentiels dans la région et de pouvoir générer des épisodes pluvieux synthétiques (Auffret, 2019).

En parallèle de l'utilisation de Basilisk, nous avons également comme objectif de réaliser des simulations de référence à l'aide de l'outil Telemac (<http://www.opentelemac.org/>) qui est développé par EDF R&D et qui fait référence dans le domaine de la simulation en hydraulique à surface libre. Avec Telemac, notre objectif sera de réaliser des simulations à une échelle aussi fine que possible, avec le maximum d'éléments de détails (prise en compte des bâtiments, des structures hydrauliques, de l'occupation du sol) afin de constituer une base de données complémentaire des observations et d'effectuer une validation complète d'une méthodologie basée sur l'utilisation d'un outil tel que Basilisk pour de la prévision en temps réel.

L'utilisation des logiciels Basilisk et Telemac pour la simulation d'emprise d'inondations nécessite des ressources de calculs importantes, ce qui justifie cette demande d'attribution de ressources informatiques sur le cluster HPC d'Université Côte d'Azur (Azzurra).

Projets étudiants encadrés par Rabab Yassine

Lac de Gaves

Le Lac des Gaves, un lac artificiel situé en aval du bassin versant du Gave de Pau dans les hautes Pyrénées, a été sujet à d'importantes pressions anthropiques au cours du XXème siècle. En effet, plus de trois millions de mètres cubes de granulats ont été extraits de son lit mineur ce qui a provoqué de sérieux désordres. Ces activités ont conduit à la

construction de deux seuils, un en amont (seuil de Beaucens) et un en aval du lac (seuil de Préchac), afin de stabiliser le lit de la rivière. Le lac agit aujourd'hui comme un piège à sédiments et se retrouve comblé de matériaux suite à une crue exceptionnelle ayant eu lieu en juin 2013 et une crue décennale en juin 2018 (Fig. 1). Une réduction brutale de la pente est alors observée ce qui augmente les risques d'avulsion vers les enjeux de la zone. En aval, un déficit important de matériaux est observé avec une incision prononcée du lit provoquant une dégradation des fondations des ouvrages, une rétractation de la bande active, un abaissement de la nappe alluviale, etc. Il apparaît donc nécessaire de proposer des solutions de réaménagement pertinentes et durables prenant en compte le caractère multicritères imposé par cette zone : la sécurité des biens et des personnes, le développement économique et social du secteur et le rétablissement de la continuité écologique et sédimentaire. Une thèse à ce sujet a permis de :

- Comprendre les évolutions historiques du tronçon du Lac des Gaves et du système torrentiel en amont. Il s'agissait d'identifier les différentes pressions (naturelles et anthropiques) ayant conduit au contexte hydro-sédimentaire actuel ;
- Comprendre et quantifier le comportement des flux liquides et solides provenant des sous-bassins versants amont et s'écoulant à travers le tronçon du Lac des Gaves à l'aide de calculs du transport solide et d'un modèle hydrosédimentaire 2D.

La situation du tronçon du Lac des Gaves soulève un certain nombre d'interrogations auxquelles il est urgent de répondre. Afin de définir le programme de travaux le plus approprié à intégrer aux futurs plans de gestion du tronçon, il est nécessaire d'étudier des scénarios d'aménagement visant à améliorer la situation actuelle sur la base des critères suivants :

1. Sécurité des biens et des personnes ;
2. Coûts d'investissement et de fonctionnement ;
3. Milieux aquatiques et continuité écologique.

Les objectifs de ce projet concernent donc la réflexion à des scénarios d'aménagement efficaces et durable du tronçon du Lac des Gaves. Ce travail devra s'appuyer sur la reprise du modèle hydrosédimentaire 2D développé avec le système TELEMAC2D (<http://www.opentelemac.org/>) dans le cadre du travail de recherche rapidement présenté. Il s'agirait de réfléchir et d'implémenter les scénarios suivants :

1. Réfléchir à la pertinence du maintien des seuils de Beaucens et de Préchac à travers la simulation de la situation actuelle sur plusieurs échelles temporelles ;

-
2. Arasement ou dérasement du seuil de Préchac ;
 3. Arasement ou dérasement des deux seuils (Beaucens et Préchac) ;
 4. Évaluer l'intérêt de mettre en place d'autres solutions d'aménagement du tronçon ;
 5. Réflexion et implémentation de mesures d'accompagnement visant à réduire les risques vers les enjeux de la zone en fonction de la solution retenue.

Tempête Alex

Dans le Sud-Est de la France, les crues torrentielles dues à des pluies particulièrement abondantes qui s'abattent sur des bassins versants à fort relief, représentent une réelle menace pour la population et les infrastructures. Dans la journée du vendredi 2 au samedi 3 octobre 2020, le passage de la tempête ALEX, a été particulièrement dévastateur avec 9 décès confirmés, 9 personnes encore disparues, plus de 210 millions d'euros de dégâts assurés et des vallées coupées du monde pendant plusieurs semaines. Ce phénomène hydrométéorologique exceptionnel, a généré localement des cumuls de précipitations supérieurs à 500 mm ayant conduit à des crues dévastatrices sur les affluents du Var (Vésubie et Tinée) et de la Roya.

Plusieurs questions scientifiques portant sur les interactions complexes entre les variables hydrométéorologiques et morphologiques ont émergé à la suite de cet épisode. En effet, l'épisode du 2 octobre a provoqué des évolutions du fond importantes et des taux de transport sédimentaire impressionnants dans les torrents et rivières torrentielles des vallées de la Vésubie et de la Roya, essentiels à quantifier. L'utilisation de modèles numériques peut donc être un réel atout pour comprendre ces phénomènes aider les gestionnaires à décider de solutions de restauration et de protection pérennes.

L'utilisation de ces modèles sur des terrains aussi complexes que les torrents et rivières torrentielles (granulométrie hétérogène, pentes fortes, forts apports solides) est encore un vrai challenge. Ce stage contribuera donc à l'enrichissement de ce domaine scientifique à travers l'application d'un modèle 2D à l'aide du système TELEMAC-MASCARET (www.opentelemac.org) sur deux sites d'étude ayant fortement été impactés par la tempête Alex.

L'utilisation du modèle TELEMAC2D servira à effectuer une première reconstitution par modélisation hydro-sédimentaire de l'épisode du 2 octobre 2020. Il s'agira de reproduire les emprises d'inondation observées sur le terrain ainsi que les évolutions morphologiques impressionnantes ayant eu lieu lors de l'événement. Les tronçons étudiés ont une longueur supérieure à 5 km et les maillages utilisés dépasseront très certainement les 200 000 nœuds ce qui nécessite des ressources de calcul importantes.

C'est pourquoi nous souhaiterions pouvoir accéder au cluster pour accélérer les temps de simulation.

Dynamique des fluides

EUR Spectrum

Dynamique de sphéroïdes inertiels dans les écoulements turbulents

Responsable scientifique : Jérémie Bec

Laboratoire : Equipe-Projet CaliSto (Inria – CNRS Cemef)

Publications liées :

1. Dynamique et statistiques de particules allongées et flexibles dans des écoulements turbulents, S. Allende, 2021 <https://www.theses.fr/2021COAZ4005>
2. Projet POPART : Modélisation du transport et du dépôt de particules non-sphériques par des écoulements turbulents Livrable n°3, J Bec M Bossy, C Henry, L Campana and S. Allende, 2019 <https://hal.univ-lille.fr/INRIA/hal-02375912>

Description :

De nombreux processus naturels et industriels impliquent le transport de petites particules de taille finie dans un écoulement turbulent. La quantification de leurs propriétés est essentielle pour comprendre et optimiser la conception et les performances de ces systèmes. Les approches actuelles simplifient souvent de manière excessive les effets à petite échelle, en particulier dans le cas des particules non sphériques. L'amélioration des modèles macroscopiques reste à ce jour un véritable défi. Ces questions font l'objet d'un partenariat entre UCA et EDF R&D portant sur les modèles de transport de particules complexes dans les fluides turbulents. La contribution de notre équipe est de fournir une description microscopique des particules afin d'alimenter la conception, l'éligibilité physique et l'étalonnage des modèles qui sont ensuite implémentés dans les codes CFD industriels. Notre tâche est d'effectuer des simulations numériques directes de particules sphéroïdales lourdes transportées de façon passive par une turbulence 3D développée, homogène, isotrope. La dynamique des particules couple leur rotation et orientation à leur traînée avec le fluide à travers l'équation de Jeffery. L'écoulement du fluide est obtenu en intégrant les équations de Navier–Stokes incompressibles, forcées, à l'aide du solveur spectral MPI LaTu développé par H. Homann de Lagrange. Notre objectif est de comprendre comment la non-sphéricité affecte les vitesses, les accélérations et les propriétés de concentration des particules. Nous avons lancé pour cela une étude paramétrique sans précédent impliquant la dynamique à long terme de 90 différents types de particules en variant leur rapport d'aspect (effets de la non-sphéricité) et leur temps de réponse (effet de l'inertie des particules). Une première série de simulations a été réalisée sur le serveur Jean-Zay de l'IDRIS dans le cadre des allocations GENCI (appel A6). Nous avons utilisé 5123 et 10243 points de collocation, obtenant des nombres de Reynolds respectivement de l'ordre $R\lambda \approx 198$ et $R\lambda \approx 325$. Pour

chaque classe de particules, plusieurs centaines de milliers de trajectoires sont intégrées. Des analyses statistiques préliminaires révèlent des corrélations très intéressantes entre les fluctuations de l'orientation des particules et les structures intermittentes de l'écoulement. En outre, il semble que certaines propriétés dynamiques des particules non sphériques pourraient être expliquées en termes d'un analogue sphérique avec un rayon efficace. L'objectif de cette demande est de consolider ces observations en augmentant la quantité de statistiques à notre disposition. Nous avons trouvé des comportements intéressants dans les autocorrélations lagrangiennes de l'accélération. Cependant, nos données actuelles ne nous permettent pas d'accéder à des laps de temps suffisamment longs. Notamment, pour le 10243, nous n'avons que quelques temps de retournement à grande échelle dans l'état statiquement stationnaire. Nous souhaitons doubler cette durée de simulation en utilisant les ressources du cluster Azzurra. Ce travail fait partie du projet de thèse de Sofia Allende qui a été embauchée par UCA dans le cadre du partenariat avec EDF R&D. Ce dernier travail, qui ne conditionne en aucun cas les réalisations de sa thèse, sera un réel bonus. Il corroborera largement un travail en cours et permettra une publication de meilleure qualité. Le code est déjà en production sur Jean Zay et est donc prêt à être exécuté sur Azzurra.

Dynamique de polymères en turbulence et turbulence élastique

Responsable scientifique : Dario Vincenzi

Laboratoire : LJAD

Description :

Le projet est composé de deux volets. Le premier porte sur la dynamique lagrangienne de polymères élastiques dans un écoulement turbulent isotrope et sur la transition coil-stretch. Nous étudierons l'effet des interactions hydrodynamiques et de volume exclu. Le calcul numérique consiste en la simulation d'équations différentielles stochastiques et en l'analyse statistique des solutions.

Le deuxième volet porte sur la turbulence élastique, un régime chaotique que l'on observe dans les solutions de polymères visqueuses. Nous effectuerons des simulations numériques pseudo-spectrales du modèle FENE-P, qui décrit l'évolution couplée du tenseur de conformation des polymères et du champ de vitesse (donnée par les équations de Navier–Stokes). Les simulations seront d'abord effectuées en deux dimensions dans un carré avec conditions de bord périodiques. Le projet à plus long terme est de réaliser des simulations en trois dimensions.

Géophysique interne

EUR Spectrum

Continental Transpression: Deciphering Deformation Digitally (CT3D)

Responsable scientifique : Guillaume Duclaux

Laboratoire : Géoazur

Description :

Ce projet propose d'étudier le partitionnement de la déformation dans les systèmes continentaux en transpression à l'aide de modèles numériques thermomécaniques en trois dimensions (3D). Cette approche computationnelle nous permettra 1) de mieux comprendre la manière dont les fabriques des roches métamorphiques apparaissent et sont reliées les unes aux autres dans l'espace et dans le temps, et 2) de déterminer le niveau de couplage entre les différents niveaux structuraux de la croûte continentale dans les systèmes transpressifs. Dans les domaines orogéniques transpressifs anciens que nous connaissons, les roches ont subi une histoire de déformation polyphasée, résultant de la compétition des forces tectoniques et de volume évoluant au cours du temps, qui conduit au développement de fabriques finies complexes et variées à toutes les échelles. Dans les niveaux supérieurs de la croûte continentale on observe des systèmes de failles qui forment des structures en fleur, de zones de relais transpressifs et transtensifs, ainsi que des bassins étroits dont la géométrie semble fortement influencée par les fabriques pré-existantes. Dans la croûte intermédiaire à profonde la déformation est marquée par le développement de grandes zones de cisaillement ductiles verticales limitant des dômes marqués par un aplatissement sub-horizontale et un étirement sub-parallèle aux zones de cisaillement. Des plis d'axes obliques à la direction de raccourcissement principal se forment par fluage longitudinal synchrone de la transpression. Les questions que nous souhaitons adresser peuvent-être résumés comme suit : Comment ces fabriques dans les roches métamorphiques sont-elles reliées les unes aux autres dans l'espace et dans le temps ? Quel niveau de couplage existe entre les différents niveaux structuraux dans les systèmes orogéniques transpressifs ?

L'évolution de la nature et de l'orientation des structures au sein de la croûte sera modélisée à partir d'un code thermomécanique 3D (pTatin 3D : *May et al., 2014*³⁴ ;

³⁴ *Duclaux, G., Huismans, R. S., & May, D. A. (2020). Rotation, narrowing, and preferential reactivation of brittle structures during oblique rifting. Earth and Planetary Science Letters, 531, 115952.*

*Duclaux et al., 2019*³⁵) et analysée en post-processing à partir de scripts Python que nous avons développés. Ces travaux répondent également à un enjeu sociétal majeur et visent à améliorer notre compréhension du couplage mécanique entre les niveaux profonds des grandes zones de cisaillement ductiles et les systèmes de failles décrochantes et décro-chevauchantes sismogènes observées en surface dans les zones de convergence obliques.

³⁵ *May, D. A., Brown, J., & Le Pourhiet, L. (2014, November). pTatin3D: High-performance methods for long-term lithospheric dynamics. In SC'14: Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (pp. 274-284). IEEE.*

WIND (Waveform Inversion of Node Data)

Responsable scientifique : Stéphane Operto

Laboratoire : Geoazur

Description :

Présentation générale du projet

Ce projet porte sur le développement d'une méthode d'imagerie sismique par inversion des formes d'ondes complètes (FWI: Full Waveform Inversion). La FWI consiste à reconstruire les propriétés mécaniques du sous-sol gouvernant la propagation des ondes en résolvant un problème d'optimisation sous contrainte par des approches locales (méthodes de gradient). Le problème direct résout l'équation d'onde, une équation aux dérivés partielles (EDP) linéaire dont la solution et le second membre sont respectivement le champ d'onde et la source. Les observables sont les enregistrements des champs d'onde aux capteurs. La FWI minimise une distance entre ces observables et leur analogues simulés numériquement pour mettre à jour les paramètres contenus dans les coefficients de l'EDP.

Les applications sismiques concernent (1) l'imagerie des bassins sédimentaires pour l'exploration pétrolière (projet WIND financé par un consortium industriel) et (2) l'imagerie de la croûte terrestre des zones de subduction (chantiers Geoazur). Ces deux applications sont effectuées à partir d'acquisitions de fond de mer mises en oeuvre avec des sources artificielles et des câbles sous-marins (OBC) ou des stations sous-marines multi-composantes (OBSs). En sismologie (sources passives), l'imagerie de la croûte et du manteau supérieur des Alpes à partir de téléseismes (projet LisAlps financé par l'ANR).

Nous implémentons la FWI dans les domaines temps-espace (codes GeoInv3D_fwk et LITHOS) et fréquence-espace (code FFWI). Le problème direct y est respectivement décrit par un problème d'évolution avec conditions initiales et un problème de conditions aux limites nécessitant la résolution de systèmes d'équations linéaires creux à seconds membres multiples. Dans ce dernier cas, nous utilisons le solveur multifrontal MUMPS et un solveur hybride direct/itératif préconditionné par la méthode de décomposition en domaine ORAS (Optimized Restricted Additive Schwarz). Suivant les codes et les

applications, nous utilisons des schémas de discrétisation fondés sur des différences finies, des éléments finis sur maillage tétraédrique et des éléments spectraux.

Les codes `GeoInv3D_fw`, `LITHOS` et `FFWI` sont parallélisés avec MPI et OpenMP et ont été exécutés en production sur le mésocentre CRIMSON, sur Occigen et sur Jean Zay. Ils sont basiquement écrits en Fortran 90 avec des ingénieries de C++. Nos travaux récents portent sur une reformulation de la FWI visant à étendre son régime linéaire via une méthode de Lagrangien augmenté et l'interfaçage de régularisations hybrides pour réduire son espace nul. Ces travaux ont été implémentés sous Matlab et doivent être transférés dans les trois codes pour tester les concepts sur des cas d'étude de grande dimension.

Demande sur Azzura

La présente demande portant spécifiquement sur l'accès à Azzura concerne deux aspects:

- Le premier concerne le portage progressif du code `GeoInv3D_fw` sur GPU.
- Le deuxième concerne une application d'intelligence artificielle fondée sur des "physics-informed neural networks". Dans le cadre de la thèse de Yanqi WU à Geoazur, nous souhaitons commencer à évaluer si la résolution de l'équation d'onde (le problème direct) et la mise à jour des paramètres constitutifs du milieu (problème inverse) peuvent être effectués avec des approches de deep learning où la fonction coût est respectivement formée par la norme L2 de l'erreur sur l'équation d'onde (problème direct) et une fonction de pénalité ou de Lagrangien augmenté combinant la norme L2 de l'écart entre les données observées et simulées et la norme L2 de l'erreur sur l'équation d'onde. Des tests préliminaires ont été effectués sur les CPUs d'un serveur local de Geoazur. Néanmoins, nous avons maintenant besoin d'accéder à des GPUs pour traiter des applications de dimension plus représentatives.

References sur PINN (Physics-Informed Neural Networks with applications to wave equation solution and seismic waveform inversion)

M. Raissi, P. Perdikaris and G. Karniadakis, Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, 378, 686--707, 2019.

C. Song and T. Alkhalifah and U. B. Waheed, Solving the frequency-domain acoustic VTI wave equation using physics-informed neural networks, *Geophysical Journal International*, 225(2), 846--859, 2021.

C. Song and T. Alkhalifah, Wavefield reconstruction inversion via machine learned functions, SEG Technical Program Expanded Abstracts 2020, 1710-1714, 2020.

Study of the rheological controls on vertical sinking of subducting slabs through numerical modeling

Responsible scientifique : Karin Sigloch

Laboratoire : Geoazur

Description :

This is a numerical investigation of the modes in which the solid earth recycles material and heat between its surface and its deep interior, on geological time scales. Specifically, we study whether thermo-mechanical modeling of the subduction of tectonic plates into the earth's mantle can match recent geometric constraints on the deformed plate geometries in the Earth's mantle, as observed by geophysical imaging. We use the fluid-dynamics finite-element code Fluidity [Davies et al., 2011], which solves for the conservation of mass and momentum in 2-D geometries, with non-linear rheologies suitable for the study of rock deformation. The code uses an adaptive remeshing technique to tackle the strong viscosity contrasts that characterize geodynamical flows (up to 4 orders of magnitudes). Tectonic plates form in ocean basins from upwelling mantle rock, and spend several tens of millions of years cooling at the surface. Then these ocean plates dive back into the earth's mantle at subduction zones and slowly sink towards the core, cooling the ambient mantle in the process. This material cycle, which makes the earth the only habitable planet in the solar system, is thought to be driven by the "slab pull" force, i.e., the excess density of plate margins that have entered a subduction zone relatively recently, and which keep pulling down after them the tectonic surface plate they are still attached to [Forsyth and Uyeda, 1975].

Although geodynamic conceptual and numerical models often show these slabs as remaining plate-like, thin sheets to great mantle depths, geophysical imaging (seismic 3-D tomography) is increasingly clear that from relatively shallow depths of only a few hundred kilometers, the slabs appear thickened to several times lithospheric thickness. This is a fundamental geometry difference that implies completely different rheological, advection and cooling characteristics for the earth's mantle. Presumably the thickening occurs through slab folding, as seen in Figs. 2&3, although these spatial details are currently not resolvable by geophysical imaging. In order to constrain the plausible range of rheologies and deformation styles, we add a number of observations from plate

kinematic and from the land geology of accretionary mountain belts, which form the surface record of subduction.

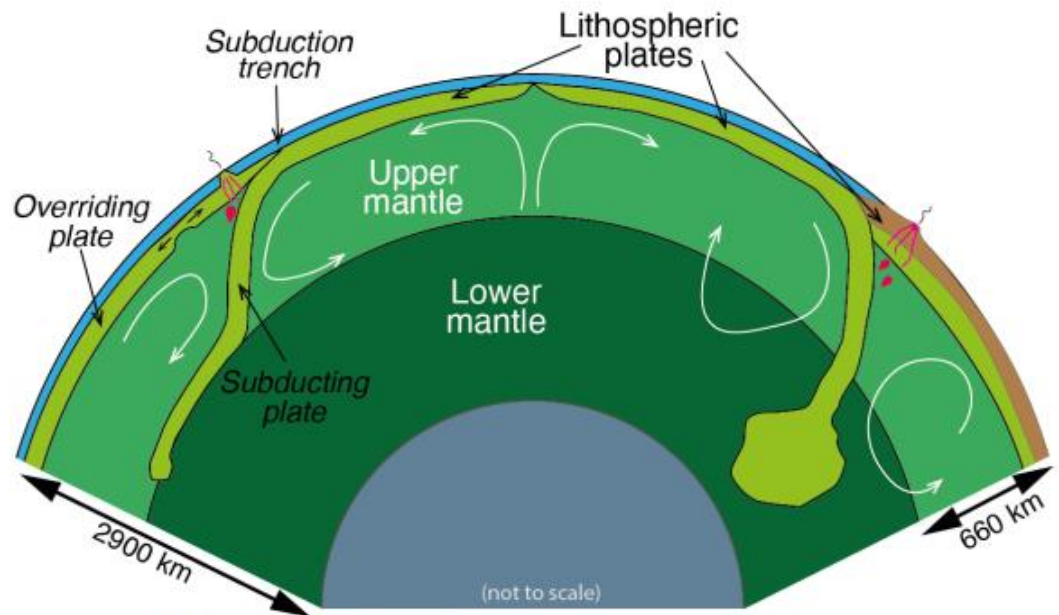


Figure 1 : Schematic view of two subduction zones.

Over the past decade, such “tomo-tectonic” analysis has revealed that many past subduction zones were quasi-stationary in an absolute reference frame [Sigloch and Mihalynuk, 2013; Mohammadzaheri et al., 2021]. The tomographic images also showed that stationary trenches are associated with wide “slab walls” in the lower mantle (400-700-km wide), a special-case geometry that rather strongly points to slab thickening (folding?) at the mantle transition zone (Fig. 2). In contrast to these observations, state-of-the-art numerical models of subduction zone dynamics suggest that non-stationary trenches (slab-rollback and subduction-trench retreat) are the most common dynamical response of slab sinking in the mantle (fig. 3, [Garel et al., 2014]). Hence, a strong conceptual discrepancy has recently opened between observational constraints and current numerical geodynamic models, which has not been addressed quantitatively. Here we want to close this gap and numerically explore the mantle and slab properties that would result in thickened slabs under stationary trenches, while also reproducing realistically fast subduction rates.

This work is conducted as part of the PI’s ERC Starting Grant “DEEPTIME” (639003). In May 2021, I moved from the University of Oxford to a Directeur de Recherche position at the CNRS and Geoazur. My ERC grant has moved with me to the CNRS, as has the postdoctoral associate who has been working on the sub-project presented here, Dr. Nestor Cerpa. With this request for computing time on Azzurra, we are hoping to replace

the institutional computing resources that were available to us in Oxford, in order to successfully conclude and publish our investigation.

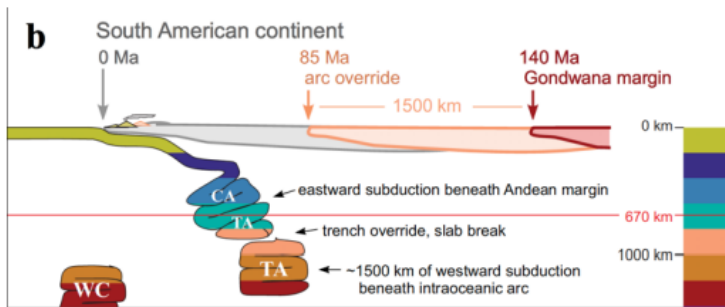


Figure 2 : Tomo-tectonic interpretation of the evolution of the South American subduction zone [from Mohammadzaheri et al. 2021].

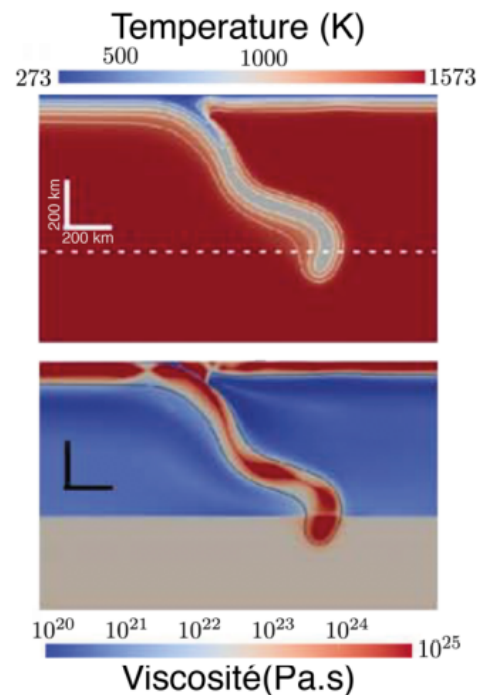


Figure 3 : Two-dimensional numerical model of a subduction zone [from Garel et al., 2014].

References

- Davies, D. R., Wilson, C. R., & Kramer, S. C. (2011). Fluidity: A fully unstructured anisotropic adaptive mesh computational modeling framework for geodynamics. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 12(6).
- Forsyth, D, and Uyeda, S. (1975). On the relative importance of the driving forces of plate motion. *Geophysical Journal International* 43, no. 1: 163-200.
- Garel, F., Goes, S., Davies, D. R., Davies, J. H., Kramer, S. C., & Wilson, C. R. (2014). Interaction of subducted slabs with the mantle transition - zone: A regime diagram from 2 - D thermo - mechanical models with a mobile trench and an overriding plate. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 15(5), 1739-1765.
- Mohammadzaheri, A., Sigloch, K., Hosseini, K., & Mihalynuk, M. G. (2021). Subducted Lithosphere under South America from Multi - frequency P - wave Tomography. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 126, e2020JB020704.
- Sigloch, K., & Mihalynuk, M. G. (2013). Intra-oceanic subduction shaped the assembly of Cordilleran North America. *Nature*, 496(7443), 50-56

Imaging large earthquakes across a 3D Earth (3DQUAKE)

Responsable scientifique : Anthony Sladen

Laboratoire : Géoazur

Description :

The project centers on developing a new generation of earthquake source models better accounting for 3D complexities of the Earth's interior. It builds upon recent improvements in seismic waveform simulations, novel parallel computational approaches and description of regional Earth complexities at a whole new level. The project will involve work both at the level of methodological developments and practical implementations as well as data analysis. This work fosters fruitful international collaborations and shall impact both the research community and the management of earthquake disasters.

Mathématiques, informatique

EUR DS4H, Spectrum

Descente d'échelle à très haute résolution pour la prévision de vent local Dimensionnement de simulation de bassin de navigation sportive

Responsable scientifique : Mireille Bossy

Laboratoire : EPC CALISTO (Inria)

Publications :

Rapport de stage Thomas Ponthieu - Master 2 Météorologie, Océanographie, Climat (Sorbonne Université, 2021).

Ce stage s'inscrit dans la dynamique de l'accueil des épreuves de voile olympique pour les JO de PARIS2024 à Marseille :

- Simulation de vent à haute résolution par Downscaling sur le bassin de Marseille
- Mise en place d'une méthodologie de simulation par descente d'échelle depuis un fichier WRF
- Evaluation du modèle SDM-WindPoS jusqu'à 50 m de résolution horizontale.
- Traitement et visualisation des données via Python, CDO, NCO.
- Test de sensibilité des simulations

Un résumé des résultats obtenues à partir de prévision météo fournies par nos partenaires (Sportrizer et Riskweathertech) est disponible ici :

<https://windpos.inria.fr/projects/avantage/>

Description :

Contexte scientifique

La prévision météorologique est un domaine d'expertise qui s'appuie sur un modèle numérique qui résout les équations de la physique et de la dynamique de l'atmosphère, alimenté par des données d'observation. Le modèle numérique produit une donnée de prévision pour des périodes de plusieurs jours à large échelle (25 à 50 km) sur l'ensemble du globe. Ensuite, une chaîne de traitement numérique dite de descente d'échelle va raffiner la résolution spatiale et temporelle de la prévision sur une région géographique en particulier.

Dans ce projet nous nous intéressons plus particulièrement à la prévision de condition de vent dans les basses couches de l'atmosphère, là où les effets de la turbulence atmosphérique sont les plus prépondérants et où la description des conditions de terrains (topographie et type de surface, urbaine, mer, végétation) peut apporter

beaucoup plus de finesse et mieux résoudre la variabilité des conditions de vent prédites à l'échelle locale.

SDM-WindPoS est un logiciel développé dans l'EPC CALISTO qui met en œuvre une méthode innovante de simulation du vent qui s'appuyant sur la formulation lagrangienne des équations de la turbulence pour proposer un solveur numérique qui supporte des résolutions spatiales très fines. Ce solveur numérique peut être utilisé dans le domaine ou sous-domaine pertinent pour l'analyse du vent, la dynamique au bord de ce domaine pouvant être extrapolée à partir d'une simulation météorologique de plus grande échelle.

SDM-WindPoS est notamment conçu pour être utilisé en association avec les sorties d'un solveur météorologique fournissant une prévision de vent dans les premières centaines de mètres de l'atmosphère, et seulement dans la zone où l'information locale de vent est décisive pour l'application visée. Des informations topographiques sont également introduites en entrée de la simulation pour enrichir la donnée de plus grande échelle, et ainsi saisir le plus finement possible les effets du relief et du terrain.

Description et objectifs

Le projet vise à caractériser les performances du modèle SDM-WindPoS sur de la prévision de vent à de très hautes résolutions spatiales, qui sont complètement innovantes dans une chaîne de prévision. Le domaine cible de cette descente d'échelle est le bassin de navigation sportive de la ville de Marseille, sur une plage horaire de quelques heures correspondant à la durée d'un événement sportif sur l'eau.

Différentes situations de vent, par secteur et force sont fournis par le modèle WRF en chaîne opérationnel de prévision. Le modèle WRF est descendu jusqu'à 1km de résolution sur la région de Marseille. Un run de WindPoS prend ensuite le relais de cette descente à quelques dizaines de mètres de résolution.

L'accès à Azzurra pour ce projet nous aidera à évaluer l'apport de SDM-windPoS dans la chaîne de prévision, via

- une validation qualitative des simulations (impact des reliefs naturels et urbains, sillages, recirculations, turbulence).
- une évaluation contre des mesures de vent (sous réserve de leur disponibilité dans la durée du projet).

Azzurra nous aidera également à dimensionner et à d'évaluer plus exhaustivement l'apport et l'impact des simulations emboîtées intermédiaires.

Complex Network Mining

Responsable scientifique : Claude Pasquier

Laboratoire : I3S

Publication :

Pasquier, C., Guerlais, V., Pallez, D., Rapetti-Mauss, R., & Soriani, O. (2021). Identification of active modules in interaction networks using node2vec network embedding. bioRxiv. HAL Id : hal-03354986, version 1. DOI : 10.1101/2021.09.22.461345

Description :

La modélisation des données sous forme de réseau est apparue dans diverses disciplines comme une manière unifiée de représenter des données relationnelles complexes. Formellement, ces réseaux complexes (que nous appelons réseaux multidimensionnels) sont des multigraphes dans lesquels les nœuds et les arêtes sont (multi-)étiquetés. L'analyse de ces réseaux est difficile car l'espace de recherche est beaucoup plus grand que pour les graphes étiquetés. Mais il est cependant nécessaire de disposer de méthodes efficaces qui peuvent aider à identifier les motifs cachés ou qui peuvent mettre en évidence des relations entre des attributs des nœuds. Le cœur de l'activité de recherche proposée se concentre sur l'analyse de ces réseaux complexes à des fins d'extraction d'informations. Le champ d'application privilégié de nos méthodes est la biologie moléculaire. Les traitements que nous sommes amenés à effectuer nécessitent d'avoir accès à beaucoup de RAM et/ou beaucoup de processeurs. Nous avons, ces dernières années, utilisé les ressources de CICCADA pour développer et exécuter des algorithmes génétiques [1, 2], effectuer des tests de nos algorithmes selon diverses configurations [3] et analyser les résultats générés par des équipes de biologistes avec lesquelles nous collaborons [4, 5]. Les collaborations en cours [4, 5] vont se poursuivre au minimum jusqu'à la fin de l'année 2021. Des demandes de financement d'autres projets collaboratifs, qui nécessiteront des ressources de calculs, sont en cours d'évaluation (AAPG21 ANR CALDAMIR avec Frédéric Flouvat (Université de Nouvelle Calédonie), AAPG21 ANR FEST avec Bernard Mari (IPMC)).

[1] Pallez, D., Gardès, J., & Pasquier, C. (2017). Prediction of miRNA-disease associations using an evolutionary tuned latent semantic analysis. *Scientific reports*, 7(1), 1-13.

[2] Correa, L., Pallez, D., Tichit, L., Soriani, O., & Pasquier, C. (2019, December). Population-based meta-heuristic for active modules identification. In *Proceedings of the*

Tenth International Conference on Computational Systems-Biology and Bioinformatics (pp. 1-8).

[3] Pasquier, C., Guerlais, V., Pallez, D., Rapetti-Mauss, R., Soriani, O. Identification of active module in interaction networks using node2vec network embedding. En préparation

[4] Collaboration avec Olivier Soriani (iBV) financée par l'Université Côte d'Azur et la fondation ARC

[5] projet GlioSplice, impliquant Mathieu Gabut (Centre de recherche en cancérologie de Lyon – CRCL), Thierry Virolle (Institut de Biologie valrose, Nice), Corinne Auge-Gouillou (Université de Tours) et financé par l'institut National de Cancer.

Simulations numérique de nanophotonique computationnelle avec le solveur Galerkin discontinue massivement parallèle DIOGENeS

Responsable scientifique : Stéphane Lanteri

Laboratoire : INRIA

Atlantis (<http://www-sop.inria.fr/atlantis/>) est une équipe-projet commune entre l'Inria, le CNRS et l'Université Côte d'Azur par son association avec le Laboratoire de Mathématiques J.A. Dieudonné (UMR 7351).

Ses activités de recherche se concentrent sur la conception, l'analyse, le développement et l'application de techniques de calcul avancées pour des systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) modélisant des problèmes d'interaction lumière-matière à l'échelle du nanomètre. Le domaine correspondant est celui de la nanophotonique, aussi connue sous le nom de nano-optique, la nanophotonique vise à exploiter les interactions lumière-matière à des échelles nanométriques afin d'atteindre un haut niveau de contrôle de la lumière. La nanophotonique englobe une grande variété de sujets, notamment les métamatériaux, la plasmonique, l'imagerie haute résolution, la nanophotonique quantique et les matériaux photoniques fonctionnels.

C'est dans ce contexte que nous travaillons sur différentes problématiques et des applications en collaboration avec des chercheurs physiciens, notamment de laboratoires SNRS du périmètre UCA (notamment le CRHEA et INPHYNI) et des partenaires industriels (notamment, STMicroelectronics).

Les recherches de l'équipe projet ATLANTIS sont appuyées et soutenues par la suite logicielle DIOGENeS (<http://diogenes.inria.fr>). Cette suite logicielle comprend plusieurs solveurs numérique type élément fini basés sur la méthode Galerkin discontinue. Cette méthode, particulièrement adaptée au calcul parallèle, permet de simuler des configurations réalistes de structures nanophotoniques. Ces simulations peuvent permettre de valider des nouveaux modèles physiques pour la représentation des caractéristiques des matériaux à des échelles nanométriques, peuvent également permettre de valider de nouvelles méthodes numériques (schéma en temps particulier, etc..) ou bien encore de faire de l'optimisation paramétrique.

Numerical solution for a hand-held high-resolution medical scanner (MEDSCAN)

Responsable scientifique : Victorita Dolean

Laboratoire : LJAD

PhD project MEDSCAN (BoostUrCareer program - cofunded by EU, IDEX, Région PACA)

Microwave tomography is a novel, early development stage way of imaging with a number of potentially attractive medical applications. With microwave tomography in the frequency range of several hundred MHz to several GHz, tissues are well differentiated and, consequentially can be imaged, based on differences in dielectric properties (i.e. contrast). It has been proven in a number of studies that dielectric properties of biological tissues are a strong indicator of their functional and pathological conditions. A very small data acquisition time (within 10-20 msec range) is another attractive feature of microwave tomography. The possibility of functional and fast imaging combined with decent spatial resolution (5-7 mm), cost efficiency and use of safe, very low dose non-ionizing radiation make microwave tomography very competitive with traditional imaging modalities, widely used in clinical practice, such as CT, MRI, PET, SPECT and ultrasound. Microwave imaging (MI) has attracted significant research interest in recent times. By exposing tissues to low-level microwave incident field and capturing the scattered field by an array of antennas, the estimation of the dielectric properties of the tissues can be approximated and a diagnosis inferred. Physicians primarily rely on medical imaging systems such as computed tomography (CT) and magnetic resonance imaging (MRI) for confirmation of the diagnosis. There are, however, not fast, cost effective nor portable, and nor carried by first response paramedical teams. Furthermore, the increase use of CT scans has brought to light health concerns due to the ionizing radiation the technology relies upon. However, imaging the human tissues is an ambitious task; it is composed of multi-layered dielectrics of high loss.

From computational point of view, we expect a development of a parallel computing simulation tool which will be based on FreeFEM++ (and thus open source). The linear systems resulting from the discretization of the three-dimensional time harmonic Maxwell equations using continuous or discontinuous finite element methods designed on tetrahedral meshes are characterized by large sparse, complex coefficients and

irregularly structured matrices. Classical preconditioned iterative methods (such as the GMRES Krylov method preconditioned by an incomplete LU factorization) generally behave poorly on these linear systems. A standard alternative solution strategy calls for parallel sparse direct solvers, but they generally fail to solve very large three-dimensional problems, due to the potentially huge memory requirements for these cases. Iterative methods can be used to overcome this memory problem. In the past years, a class of parallel solution methods namely two-level overlapping Schwarz methods already developed for some scalar partial differential equations was recently extended to Helmholtz and Maxwell equations in some particular cases. These equations are notoriously difficult, and more investigation is needed especially in heterogeneous cases.

There are two major challenges at the numerical level.

1. Developing a numerical tool for solving the forward problem to realize a realistic model of the data acquired by the microwave imaging system is novel and challenging. The modeling must have to take account accurately of the high heterogeneity and complexity of human tissues (skin, fat, muscle, veins and arteries...) for normal cases and for different possible pathology cases. The tissues are dissipative dielectric media in the microwave domain, i.e. they exhibit a complex permittivity. They are moreover dispersive (the complex permittivity varies versus frequency). The wave/matter interaction must take also in account accurately of the field transmitted and received from imaging system (Evanescent Imaging Matrix).

2. Developing a new numerical method for solving the inverse problem able to reconstruct tomographic microwave images from experimental data (for different realistic phantoms models) acquired with the system.

Both points rely on the solution of large problems of millions of unknowns for which scalable methods from the state of the art need to be tested and others to be developed.

EURAD project

Responsable scientifique : Roland Masson

Laboratoire : LJAD

Description :

Coupling non-isothermal compositional liquid gas Darcy and free gas flows

Flow and transport processes in domains composed of a porous medium and an adjacent free-flow region appear in a wide range of industrial and environmental applications such as food processing, wood or paper production, salinization of agricultural land, prediction of convective heat and moisture transfer at exterior building surfaces, or also the study of the mass and energy exchanges at the interface between a nuclear waste disposal and the ventilation tunnels. Typically, in such processes, the porous medium initially saturated with the liquid phase is dried by suction in the neighborhood of the interface between the porous and free flows. To model such physical processes, one needs to account in the porous medium for the flow of the liquid and gas phases including the vaporization of the water component in the gas phase. In the free flow domain, a single phase gas free flow can be considered assuming that the liquid phase is instantaneously vaporized at the interface. This single phase gas free flow has to be compositional and non-isothermal to account for the change of the relative humidity and temperature in the tunnel which has a strong feedback on the liquid flow rate at the interface.

If many works have been performed to model and discretize the coupling of single phase Darcy and free flows, there is very little work on the coupling of a two phase gas liquid compositional Darcy flow with a single phase compositional free flow. Such a coupled model has been recently proposed in [3, 4] using proper matching conditions at the interface between the porous medium and the free flow regions. This model will be the starting point of our work and will be simplified taking into account the physical characteristics of our problem focusing on the drying processes at the interface between the nuclear waste repository and the ventilation excavated tunnels. To obtain our simplified model, we will assume that the longitudinal dimension of the free flow domain, typically a tunnel, is large compared with its transversal dimensions. This allows to reduce the model in the tunnel to a 1D free flow coupled with the 3D flow in the porous medium.

In the spirit of [6], we will extend to the non-isothermal case the approach proposed in [5].

The discretization of the 3D non-isothermal compositional liquid gas Darcy flow is based on the nodal Vertex Approximate Gradient scheme [1]. The coupling with the 1D free gas flow will be based on non-matching meshes between the 3D Darcy flow domain and the 1D domain in order to account for complex geometries of the tunnels. In order to allow for a modular implementation of the coupled liquid gas Darcy and free gas flows, a nonlinear Robin Robin domain decomposition algorithm based on the previous works [2, 7] will be designed.

The coupled liquid gas Darcy and free gas flows will be implemented in the open source parallel code ComPASS [1, 8] <http://www.anr-charms.org/page/compass-code>. The COMPASS parallelization is based on mesh partitioning and MPI communications. It uses the Petsc and Hypre libraries for the solution of the linear systems. Since the size of the mesh of the 1D free gas flow is negligible compared with the size of the mesh of the 3D Darcy flow, the domain decomposition approach will allow a simple parallel implementation of the coupled model. The code ComPASS <http://www.anr-charms.org/page/compass-code> is an open source parallel code initiated by LJAD-Inria and BRGM (Bureau de Recherches Géologiques et Minières – French Geological Survey) in 2015 [1, 8]. It is devoted to the simulation of multiphase non-isothermal Darcy flows and includes complex network of fractures/faults represented as interfaces of co-dimension one coupled to the surrounding matrix. The discretization is based on vertex and cell unknowns and is adapted to polyhedral meshes and heterogeneous media. The ComPASS code is co-developed since 2017 by the partners of the ANR CHARMS project including BGRM, LJAD-Inria, Storengy, la Maison de la Simulation and the Jacques Louis Lions laboratory.

References

- [1] F. Xing, R. Masson, S. Lopez, Parallel numerical modeling of hybrid-dimensional compositional non-isothermal Darcy flows in fractured porous media, *Journal of Computational Physics*, 345, pp. 637-664, 2017, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01420361>
- [2] R. Masson, L. Trenty and Y. Zhang, Coupling compositional liquid gas Darcy and free gas flows at porous and free-flow domains interface, *Journal of Computational Physics*, 321, pp. 708-728, 2016.

-
- [3] Mosthaf, K., Baber, K., Flemisch, B., Helmig, R., Leijnse, A., Rybak, I. and Wohlmuth, B., A coupling concept for two-phase compositional porous-medium and single-phase compositional free flow, *Water Resources Research*, 47, 10, 2011.
- [4] Vanderborght, J., Fetzner, T., Mosthaf, K., Smits, K.M. and Helmig, R., Heat and water transport in soils and across the soil-atmosphere interface: 1. Theory and different model concepts, *Water Resources Research*, 53,2, pp. 1057-1079, 2017.
- [5] Brenner, K., Masson, R., Trenty, L., Zhang, Y., Coupling of a two phase gas liquid compositional 3D Darcy flow with a 1D compositional free gas flow, 50,5, pp. 1491-1522, 2016.
- [6] Beau de Laurence and Brenner, Konstantin and Lopez, Simon and Masson, Roland and Smaï, Farid, Non-isothermal compositional liquid gas Darcy flow: formulation, soil atmosphere boundary condition and application to high-energy geothermal simulations, *Computational Geosciences*, 23,3, pp. 443-470, 2019.
- [7] Birgler, Nabil and Masson, Roland and Trenty, Laurent, A domain decomposition method to couple nonisothermal compositional gas liquid Darcy and free gas flows, *Journal of Computational Physics*, 368, pp. 210-235, 2018.
- [8] Lopez, Simon and Masson, Roland and Beau de Laurence and Birgler, Nabil and Brenner, Konstantin and Kern, Michel and Smaï, Farid and Xing, Feng, Geothermal Modeling in Complex Geological Systems with the ComPASS Code, *Stanford Geothermal Workshop 2018 - 43rd Workshop on Geothermal Reservoir Engineering*, february 2018.

Magnétohydrodynamique

EUR Spectrum

Effet Dynamo et Instabilités Magnétohydrodynamiques

Responsable scientifique : Yannick Ponty

Laboratoire : Lagrange / OCA, CNRS

Publication en cours d'écriture :

Systematic identification of subcritical dynamo seeds
Florence Marcotte and Yannick Ponty

Description :

Ce projet comporte trois volets, qui utilisent différentes techniques numériques et deux codes pseudo-spectraux. Ces projets seront conduits pendant au moins deux ans 2020 et 2021. Nous avons déjà obtenu du temps de calcul à GENCI (2020), notamment sur les machines Occigen (500 000 h/mono procs) et Curie (400 000 h/mono procs). La production de long et coûteux runs seront essentiellement effectués sur les clusters de GENCI. Le mésocentre Azzurra sera utilisé pour des tests et des simulations de plus faible consommation.

I) Effet dynamo dans le Von Karman (Yannick Ponty Lagrange)

II) Effet dynamo de fluctuation (Dario Vincenzi LJAD & Yannick Ponty)

III) Optimisation par méthodes adjointes pour la dynamo (Florence Marcotte INRIA/LJAD & Yannick Ponty).

Contexte et historique :

L'origine des champs magnétiques est abordée par l'effet dynamo, c'est à dire l'amplification spontanée d'un germe magnétique dans des fluides électriquement conducteurs en mouvement. Depuis de nombreuses années, plusieurs projets de dynamo expérimentales voient le jour tant en France qu'à l'étranger. Deux projets de dynamo expérimentales (Riga (novembre 1999 et juillet 2000) et Karlsruhe (décembre 1999) ont obtenu un effet dynamo dans des écoulements hélicitaires très contraints dans des tubes, présentant un champ de vitesse avec très peu de fluctuations [1]. L'équipe française de Von Kàrmàn Sodium dont l'expérience est basée à Cadarache a essayé d'obtenir l'effet dynamo avec un écoulement très fluctuant et turbulent. Ils ont mené plusieurs campagnes d'expériences depuis les années 2000, où seuls les phénomènes d'induction

avaient pu être étudiés. Mais en septembre 2006, le projet a obtenu ce qui semble être la première dynamo turbulente de l'histoire [2]. Une moisson de résultats expérimentaux a été obtenue malgré la difficulté des mesures dans les métaux liquides. Les simulations numériques qui ont accès à toutes les quantités physiques en même temps vont donc jouer un rôle important dans la compréhension de l'effet dynamo et de sa saturation [3].

L'avenir expérimental de la dynamo se trouve actuellement en Allemagne dans le centre Helmholtz zentrum à Dresden [4], où une expérience est en train de se construire dans un nouveau bâtiment. Un cylindre de 2m de diamètre rempli de sodium liquide sera forcé par un système de précession sur une énorme plateforme tournante. Ils espèrent obtenir un effet dynamo, dans un écoulement turbulent. En collaborant directement avec des équipes expérimentales et dans un souci permanent de comparer les simulations et les résultats expérimentaux, ce projet numérique commencé depuis 2002, a permis explorer et de comprendre les propriétés d'un tel système, et notamment l'influence de la turbulence sur le seuil critique de l'instabilité dynamo, la relation entre la topologie émergente à grande échelle et les fluctuations à petite échelle. Cette étude paramétrique, en nombre de Reynolds cinétique et magnétique nécessite des simulations temporelles longues et des résolutions spatiales élevées pour approcher les régimes turbulents, que seuls des codes parallèles peuvent atteindre.*

[1] Special issue : Magnetohydrodynamics (2002).

[2] R. Monchaux, M. Berhanu, M. Bourgoïn, M. Moulin, Ph. Odier, J.-F. Pinton, R. Volk, S. Fauve, N. Mordant, F. Pétrélis, A. Chiffaudel, F. Daviaud, B. Dubrulle, C. Gasquet, L. Marié, and F. Ravelet. "Generation of a Magnetic Field by Dynamo Action in a Turbulent Flow of Liquid Sodium" Phys. Rev. Lett. 98, 044502 (2007).

<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.044502>

[3] M. Berhanu, R. Monchaux, S. Fauve, N. Mordant, F. Pétrélis, A. Chiffaudel, F. Daviaud, F. Ravelet, M. Bourgoïn, Ph. Odier, J.-F. Pinton, R. Volk, B. Dubrulle, L. Marie "Magnetic field reversals in an experimental turbulent dynamo" Europhys. Lett. 77, 59001 (2007). doi:10.1209/0295-5075/77/59001

[4] André Giesecke, Tobias Vogt, Thomas Gundrum, and Frank Stefani. "Nonlinear Large Scale Flow in a Precessing Cylinder and Its Ability To Drive Dynamo Action" Phys. Rev. Lett. 120, 024502 – Published 12 January 2018.

l) Effet dynamo dans le Von Karman.

{ Holger Homann & Yannick Ponty (Lagrange, OCA)}

Forçage par des disques en mouvement avec un perméabilité magnétique variable: Effet dynamo fluide-structure.

Dans cette approche nous simulons complètement le forçage des disques qui tournent en contra-rotation pour produire un écoulement turbulent proche des écoulements observés en laboratoire [2-3]. Nous avons obtenu des résultats similaires aux expériences dans des simulations purement hydrodynamiques. Un article sur des résultats hydrodynamiques de ce système est publié dans New Journal of Physics (La méthode de pénalisation est expliquée dans notre l'article publié). Nous avons introduit le champs magnétique pour étudier l'effet dynamo dans un tel système et le comparer aux dynamos trouvées dans l'expérience de VKS [2, 3]. Il s'agit surtout de modéliser l'effet de la perméabilité magnétique de la structure disques-pales sur le mode dynamo. Nous avons tous les ingrédients hydrodynamiques (champ moyen, tourbillons le long des pales). Il nous reste à explorer et à comprendre l'interaction fluide-structure.

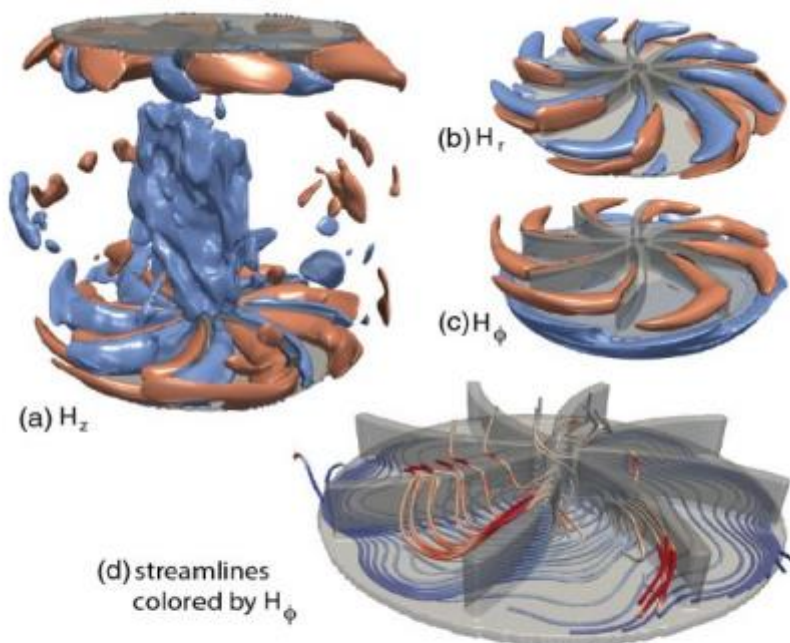


FIG. 4. (a) H_z , (b) H_r , (c) H_ϕ isoamplitude contours (red, positive value; blue, opposite negative value), and (d) magnetic streamlines colored by the H_ϕ value. $Re = 1500$, $Rm = 500$, and $\mu_r = 14$.

Fig1 : Visualisation des composantes du champ magnétique H_z , H_r , H_ϕ et des lignes de champ autour de la structure solide du disques-pales, du mode dynamo ($m=0$).

En 2016-2019:

Nous avons pu faire une série de simulations où un effet dynamo est produit par notre von Karman numérique. Lors de cette série, nous avons varié la perméabilité magnétique de la structure solide de l'expérience (les disque-pâles). Nous avons pu montrer que la géométrie des pâles et le saut de perméabilité joue un rôle moteur pour obtenir le mode dynamo ($m=0$) observé dans les expériences (voir Fig 1). Le saut de perméabilité magnétique pousse les lignes de champ vers le disque, qui devient un attracteur et un amplificateur de champ. Cet effet est fortement présent dans le régime de saturation. Notre article est publié dans Phys. Rev. Lett³⁶

Pour 2021 et ...

- Nous devons continuer à explorer la dynamique non linéaire présente dans le régime de saturation (inversion erratique du champ magnétique) avec des simulations plus longues.

Nous avons observé des inversions du champ magnétique, comme dans l'expérience VKS. Nous devons produire des simulations longues pour étudier la dynamique de ces inversions, leurs statistiques et les différents mécanismes associées (voir Fig 2).

- Nous pourrions aussi explorer une autre géométrie expérimentale qui n'a pas produit de dynamo (sphère) avec deux disques-pâles identiques à VKS.

³⁶ Dynamo Enhancement and Mode Selection Triggered by High Magnetic Permeability S. Kreuzahler, Y. Ponty, N. Plihon, H. Homann, and R. Grauer Phys. Rev. Lett. 119, 234501 – Published 6 December 2017 [PDF] Une illustration de cette publication a fait l'objet de la COVER PAGE du journal Phys. Rev. Lett. (PRL).

Magnetic inversions with differential rotation $\theta = 0.23$

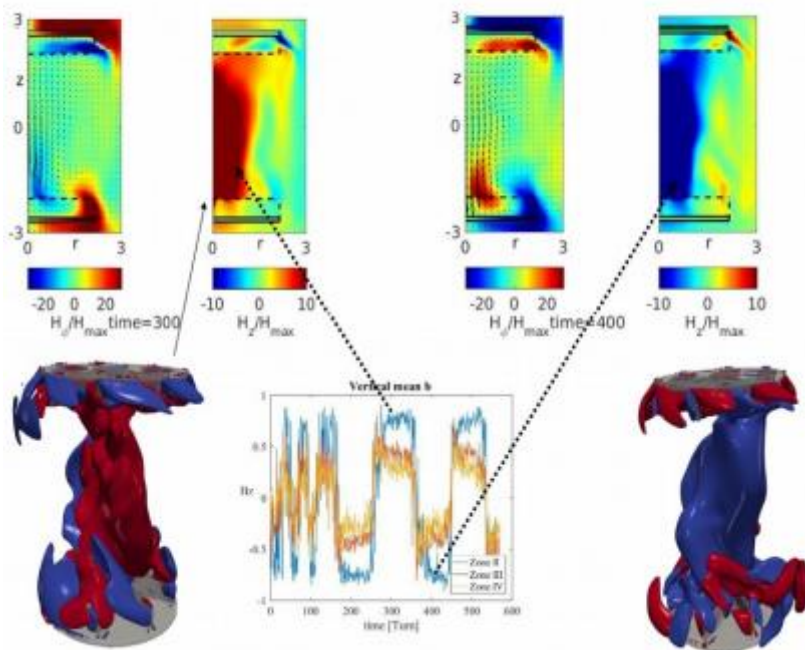


Fig 2: Inversion du champ magnétique dans une simulation où les deux disques ne tournent pas à la même vitesse : $\theta = (\Omega_2 - \Omega_1)/(\Omega_2 + \Omega_1)$.

II) Effet dynamo de fluctuation

{ Dario Vincenzi (LJAD) & Yannick Ponty (Lagrange, OCA) }

En collaboration avec Dario Vincenzi (Lab Dieudonné Nice), nous voulons explorer numériquement la dynamo de type Kazantsev. Une contribution fondamentale à la théorie de la dynamo turbulente (ou de fluctuation) a été donnée par Kazantsev³⁷ (1968), qui a étudié analytiquement la croissance de l'énergie magnétique dans un écoulement aléatoire incompressible, gaussien et à temps de corrélation très court. Le modèle de Kazantsev continue à revêtir une grande importance dans la théorie de la dynamo^{38 39}, car il est l'un des rares modèles de dynamo turbulente qui peut être traité analytiquement. Il a ainsi fait l'objet d'un grand nombre d'études et plusieurs généralisations du modèle ont été proposées afin de prendre en compte des propriétés d'un écoulement turbulent qui ne figuraient pas dans le modèle original. Même s'il est très utile pour une compréhension qualitative de l'effet dynamo turbulent, le modèle de Kazantsev est néanmoins assez limité à cause des hypothèses d'isotropie et de

³⁷ Kazantsev, AP (1968) Sov. Phys. JETP 26, 1031

³⁸ Rincon, F (2019) J. Plasma Phys. 85, 205850401

³⁹ D. Vincenzi, The Kraichnan–Kazantsev Dynamo J. Stat. Phys. 106, 1073-1091 (2002)

décorrélation temporelle. La compréhension de la dynamo turbulente dans des conditions réalistes se fonde donc nécessairement sur la simulation numérique et la comparaison avec les expériences de laboratoire. Ici nous proposons d'étudier numériquement différents écoulements de type Kraichnan soit avec un forçage delta corrélé en temps donc avec du bruit additif⁴⁰ soit une système PDE stochastique où l'écoulement (le bruit) est multiplicatif, où le schéma numérique prendra en compte de la stochasticité du système. De plus, l'effet de la compressibilité sera aussi étudié et comparé aux résultats analytiques⁴¹.

Ce projet utilisera le code Cubby. En utilisant la bibliothèque BOOST::RANDOM ou std::random, il y a une implémentation d'un contrôle de champ de vecteur aléatoire qui sont reproductibles avec un système de "seed" contrôlés et reproductibles. Cette propriété sera importante pour cette étude sur de la dynamo produite par des écoulements aléatoires et où le contrôle des séquences aléatoires seront importantes.

III) Optimisation par méthodes adjointes pour la dynamo

{Florence Marcotte (INRIA/LJAD) & Yannick Ponty(Lagrange, OCA)}.

Un autre volet du projet concerne le développement et la mise en œuvre d'un code de contrôle optimal d'écoulements MHD incompressibles. Le Direct Adjoint Looping (contrôle optimal) permet aujourd'hui d'optimiser dans des espaces de grande dimension des systèmes fluides instationnaires et gouvernés par une dynamique entièrement non-linéaire. Fondé sur des méthodes adjointes, le DAL détermine itérativement la variable d'optimisation (par exemple un forçage) minimisant ou maximisant une quantité d'intérêt (fonctionnelle de coût) tout en prescrivant un certain nombre de contraintes (équations d'évolution, conditions de bord, etc) à l'aide de multiplicateurs de Lagrange⁴². En pratique, sa mise en œuvre consiste, en partant d'une première estimation arbitraire de la variable d'optimisation, à intégrer les équations d'évolution gouvernant le problème physique considéré (« problème direct ») à partir d'un instant initial jusqu'au temps cible T (où la quantité d'intérêt est évaluée), puis à remonter par une intégration en temps rétrograde du problème adjoint (gouvernant les multiplicateurs de Lagrange) à une condition permettant de mesurer la distance à

⁴⁰ A A Schekochihin et al 2007 New J. Phys. 9 300

⁴¹ M. Martins Afonso, D. Mitra & D. Vincenzi "Kazantsev dynamo in turbulent compressible flows" Proc. R. Soc. A 475, 20180591 (2019).

⁴² D. Hill, Adjoint systems and their role in the receptivity problem for boundary layers, J. Fluid Mech (1995) 292.

l'optimalité. Une meilleure estimation de la variable d'optimisation est alors construite, et la procédure est répétée jusqu'à convergence de l'algorithme. Chaque itération (chaque passage dans la boucle DAL) représente en terme de coût de calcul l'équivalent de 2 simulations numériques directes (3 lorsque la mémoire requise nécessite l'utilisation de checkpointing). La méthode DAL a déjà été utilisée dans de nombreux contextes en hydrodynamique, notamment pour optimiser le mélange dans un fluide stratifié⁴³. L'application de la méthode DAL pour la première fois à des écoulements instationnaires gouvernés par le système MHD non-linéaire complet (équations de Navier-Stokes, équation d'induction et conditions solénoïdales) nécessite le développement et la validation des outils numériques appropriés. Elle permettra d'étudier les conditions optimales pour l'obtention d'une dynamo fluide (en terme d'abaissement du seuil de l'instabilité dynamo par un forçage approprié). Ce type d'étude est notamment motivé par l'intensification, au niveau international, de l'effort de recherche pour le développement de dynamos expérimentales, notamment à Dresde (projet DRESHDYN⁴⁴) ou à Madison (projet MPDX⁴⁵). Ce projet utilisera le code Cubby qui permet facilement d'implémenter de nouvelles physiques ou des systèmes d'équations. Sa construction modulaire est adaptée à la procédure DAL : DNS-Adjoint ou les équation adjointes changent à chaque changement de contraintes. L'algorithme d'optimisation nécessite de nombreuses boucles DNS-Adjoint pour converger, soit un cycle de 30/40 simulations pour une seule contrainte. Méthodes numériques: Les calculs seront effectués sur le codes «Latu» et «Cubby» qui sont deux codes pseudospectraux qui calculent des EPD dans un espace periodique. Le code «Latu» est un code pseudo-spectral parallélisé avec la bibliothèque MPI construit par Holger Homann (Laboratoire Lagrange, OCA). Il peut donc tourner sur toutes les plateformes. Il est écrit en C++ et utilise les transformées de Fourier (FFTW3) et P3DFFT. Ce code est efficace, il a été utilisé pour un projet PRACE en 2011 avec un scaling pour des runs en 4096^3 jusqu'à 64000 cores . Il permet d'étudier la dynamique des fluides, de MHD, de particules inertielles, modèles bifluide ou de traceur. Il y a aussi une implémentation des techniques de pénalisation pour des parois immersives et des objets en mouvement comme la rotation les disques à pales de VKS. Il est maintenu par un suiveur de version GIT. Récemment, il y a eu un effort récent pour le mettre le système de compilation sur CMAKE, et implémenter des tests automatiques.

⁴³ F. Marcotte & C.P. Caulfield, Optimal mixing in 2D stratified plane Poiseuille flow at finite Peclet and Richardson numbers. *J. Fluid Mech.* (2018) 853.

⁴⁴ F. Stefani et al., Dresdyn - a new facility for mhd experiments with liquid sodium, *Magnetohydrodynamics* (2014) 48

⁴⁵ C. Cooper et al., The Madison plasma dynamo experiment: a facility for studying laboratory plasma astrophysics, *Physics of Plasmas* (2014) 21

Le code « Cubby » est un code pseudo-spectral parallélisé avec MPI et pthread. Il y a donc une double parallélisation . Il a été originellement construit par Yannick Ponty (Laboratoire Lagrange OCA) et ensuite il a été re-designé par un IR Alain Miniussi (OCA) en C++ (design pattern), de façon extrêmement modulaire. Il a un très bon scaling. Il est maintenu par un suiveur de version Subversion, et va passer prochainement sous GIT. Sa construction modulaire permet l'implémentation d'un nouveau système de PDE ou de schéma numérique très facilement. Il utilise CMAKE comme système de compilation, avec plus de 150 tests automatiques unitaires ou complets.

Contrôle optimal de dynamos sous-critiques

Responsable scientifique : Florence Marcotte

Laboratoire : LJAD / INRIA

Publication :

A systematic route to subcritical dynamo branches. Paul M. Mannix, Yannick Ponty, Florence Marcotte
<https://arxiv.org/abs/2112.11376>

We were able to demonstrate the feasibility of a new and flexible numerical approach for tracking systematically subcritical dynamo transitions in electrically conducting flows, using nonlinear optimal control. These results have important implications for the modeling of magnetized astrophysical flows, and have been submitted to Physical Review Letters on Dec 21st. The preprint is available at: <https://arxiv.org/abs/2112.11376> (A systematic route to subcritical dynamo branches. Paul M. Mannix, Yannick Ponty, Florence Marcotte)

We will now use the code developed and validated last year to 1) improve the numerical methods used for estimating the gradient in order to speed-up convergence and 2) use the code to probe subcritical dynamo action in quasi-Keplerian (cylindrical) Couette flow, a flow choice motivated by the modeling of accretion discs.

Description du projet :

Le projet vise à développer une méthode d'analyse de stabilité non-linéaire d'écoulements magnétohydrodynamiques (MHD) fondée sur le contrôle optimal, en considérant dans un premier temps le cas particulier des instabilités dynamos sous-critiques. Le code de contrôle optimal développé dans le cadre de ce projet s'appuie sur un code déjà existant, validé, massivement parallèle et librement distribué (DEDALUS) pour intégrer les équations de la MHD incompressible instationnaire en 3D (équations de Navier-Stokes + équation d'induction + contraintes solénoïdales pour le champ de vitesse et le champ magnétique) en temps avant, ainsi que leurs équations adjointes en temps rétrograde. Ce code permettra d'étudier les conditions optimales pour l'obtention d'une instabilité dynamo fluide dans un domaine à géométrie cylindrique, en particulier dans un écoulement linéairement stable. Ce type d'étude est notamment motivé par

l'intensification, au niveau international, de l'effort de recherche pour le développement de dynamos expérimentales, notamment à Dresde (projet DRES-DYN) ou à Madison (projet MPDX). Il doit permettre à terme de caractériser, dans un contexte plus général, la stabilité non-linéaire d'autres types d'écoulements MHD (applications en fusion à confinement magnétique notamment).

Schéma d'ordres élevés pour l'hydrodynamique

Responsable scientifique : Afeintou Sangam

Laboratoire : LJAD

Description :

Dans des géométries complexes comme les tokamak ou les étoiles, des schémas précis et stables sont requis pour la simulation des phénomènes physiques modélisés par l'hydrodynamique. Ce projet consistera à construire de tels schémas.

Astrophysique

EUR Spectrum

Couplage turbulent gaz-grains solides dans les disques protoplanétaires

Responsable scientifique : Héloïse Méheut

Laboratoire : Lagrange / OCA

Description :

Etat de l'art

Les disques protoplanétaires sont des pouponnières de planètes, en permettant leur formation à partir de la poussière interstellaire. Il s'agit de systèmes particulièrement complexes composés de gaz stratifié, cisailé et en rotation autour d'une étoile jeune et de solides de tailles allant de la centaine de microns jusqu'à celles des planètes. Les observations récentes (ALMA, SPHERE) de disques protoplanétaires ont montré la présence de structures complexes dans la distribution de poussière (spirales, croissants, asymétries). Leur interprétation nécessite de mieux comprendre la dynamique des solides dans ces disques gazeux. Cette problématique rejoint des questions encore ouvertes pour la compréhension de la formation des planètes. D'une part, le transport dans les disques protoplanétaires ne peut pas être expliqué exclusivement par la turbulence magnéto-rotationnelle, mais nécessite d'autres effets. D'autre part, il est nécessaire de mieux comprendre les mécanismes conduisant à une croissance rapide des planétésimaux. Le couplage dynamique entre la poussière et la turbulence du gaz constitue une réponse possible à ces questions. Par exemple, l'instabilité d'entraînement (streaming instability) permet d'expliquer en partie une agrégation rapide. Elle résulte de la rétroaction de la poussière sur le gaz et se matérialise par une excitation locale de la dynamique et l'apparition de filaments avec de très fortes concentrations de solides. Bien que de nombreuses études aient porté sur le développement macroscopique de cette instabilité, les propriétés de la turbulence générée lors du couplage entre le gaz et la poussière, ainsi que son impact sur la concentration de poussière et le transport dans les disques, restent à ce jour mal compris. Aussi, l'effondrement gravitationnel de ces concentrations de solides est encore mal connu, du fait des limites des méthodes numériques à ce jour utilisées. Ce projet s'appuiera sur les résultats obtenus lors du stage d'Anand Kapoor financé par l'EUR Incise qui a permis de démontrer la faisabilité de ce projet.

OBJECTIFS

Le but de ce projet est d'apporter de nouvelles perspectives à ce problème en proposant une approche novatrice, transdisciplinaire de l'étude du couplage entre la dynamique de la poussière et la turbulence du gaz porteur. Nous développerons des outils de pointe pour la simulation directe du fluide et d'une phase solide qui sera modélisée soit par un grand nombre de particules ponctuelles, soit par une approche hydrodynamique. La collaboration interdisciplinaire entre l'OCA et l'INRIA est ici cruciale pour étudier la turbulence avec les outils théoriques et numériques utilisés en mécanique des fluides et ses applications industrielles, et ainsi débloquent un verrou scientifique dans la compréhension de la formation des planètes.

Les travaux proposés s'articulent en trois objectifs principaux :

1. Étude de la dynamique et de la concentration des particules solides dans un fluide turbulent cisailé et en rotation, en fonction de la fraction massique de particules solides et de leur taille. Les particules sont déjà prises en compte dans notre code, et cet objectif ne nécessitera pas de nouveaux développements.
2. Quantification des modulations de la turbulence incompressible par ces petites particules. Cet objectif nécessite d'implémenter dans le code existant l'effet retour des particules sur le fluide. Ces développements seront achevés dans les mois qui viennent.
3. Extension au cas d'écoulements faiblement compressibles. L'idée est de reproduire les conditions propres aux disques protoplanétaires. Il sera alors possible d'étudier les différents mécanismes de concentration des solides ainsi que leur effet sur le transport dans les disques.

Le but de cette demande est de s'attaquer au premier objectif. Les deux autres objectifs, à plus long terme, seront l'objet de demandes de temps complémentaires sur les moyens de calcul régionaux ou nationaux.

OUTILS

Ce projet utilisera notre code spectral développé en C++ pour l'étude de la turbulence d'un fluide cisailé. Il s'agit d'un code à mémoire partagée (utilisant FFTW3 et POSIX threads), ce qui est adapté pour cette étude bi-dimensionnelle avec une charge mémoire légère. Nous prévoyons de faire une étude de paramètres (vitesse de rotation et temps d'arrêt des particules) en deux dimensions, sur des grilles de taille 2048^2 et avec 106 particules. Nous envisageons d'effectuer 36 simulations correspondant à 6 valeurs de

vitesse de rotation et 6 valeurs de temps d'arrêt. L'écoulement doit être intégré sur plusieurs dizaines de temps de retournement pour garantir des statistiques suffisamment convergées. Le temps de calcul d'une simulation est estimé à environ 5000 hCPU.

Construction of the Bayesian next generation of planetary ephemerides, B-INPOP

Responsable scientifique : Agnès Fienga

Laboratoire : Geoazur

Description du projet pages suivantes.

CONSTRUCTION OF THE BAYESIAN NEXT GENERATION OF PLANETARY EPHEMERIDES, B-INPOP

Supervisor: A. Fienga, Géoazur
agnes.fienga@oca.eu

Co-fundings: ERC AstroGeo (J. Laskar, IMCCE, Observatoire de Paris)
jacques.laskar@imcce.fr

Abstract

This project aims at initiating paths for the future development of planetary ephemerides. With the income of new very accurate and very numerous data from space missions such as ExoMars, Bepi-Colombo and JUICE, the maintenance and the development towards new scientific applications of INPOP planetary ephemerides will be very challenging. The INPOP planetary ephemerides are worldwide famous and used planetary ephemerides allowing, beside the regular delivery of positions and velocities of about 14,000 objects of the solar system (major and minor planets as well as the Earth and Moon orbital and rotational states) to common users by also space agencies (such as CNES and ESA), to test general relativity and alternative theories of gravitation and to constraint the mass distribution in the solar system by determining masses for main belt and Kuiper belt objects and consequently the possible existence of an unobserved planet P9. INPOP is also used as an important benchmark for long-term ephemerides dating geological samples. INPOP is currently built using about 200,000 observations from sources very different in technics but also in accuracies and on the basis of a classic least-square inversion. However because of the important number of unknowns in the dynamical modeling (i.e. about 800 parameters for the planetary orbits, 102 for the Moon libration and 42,000 for the minor planets) the inversion of such a system is non-linear and, since (Fienga *et al.*, 2015), new approaches have been tested for improving the inversion (Fienga *et al.*, 2020a). In this project, we propose to investigate new directions starting from algorithms developed in the frame of artificial intelligence and deep learning. For example we plan to investigate the Metropolis Algorithm and the Highly Parallelized Neighborhood Algorithm (Sambridge, 1999a) for improving the determination of about 350 main belt asteroid masses that perturb heavily the inner planet orbits. These perturbations are the most limitative factor for the accuracy of the modern planetary ephemerides (Kuchynka *et al.*, 2010) but are also a important source of information for measuring the masses of these poorly known objects (only about 50 asteroids have their masses known in precision). By improving the characterization of these masses we will improve the accuracy of the Mercury orbit (important for the Bepi-Colombo mission (Iess *et al.*, 2021)), the orbit of Mars (fundamental for ExoMars missions) but also for the Earth (which is a critical point for paleoclimatology and the ERC AstroGéo). We will also apply these algorithms for constraining the distribution of mass in the Kuiper belt. We will do this application together with a densification and re-analysis of old observations for Uranus and Neptune which are very sensitive to the perturbations induced by these big but far objects. This aspect is also of crucial interest for the ERC AstroGéo as an important keypoint for the improvement of long-term ephemerides. Finally, as in (Fienga *et al.*, 2020b; Bernus *et al.*, 2019; 2020), we will apply these AI approaches to test alternative theories of gravitation.

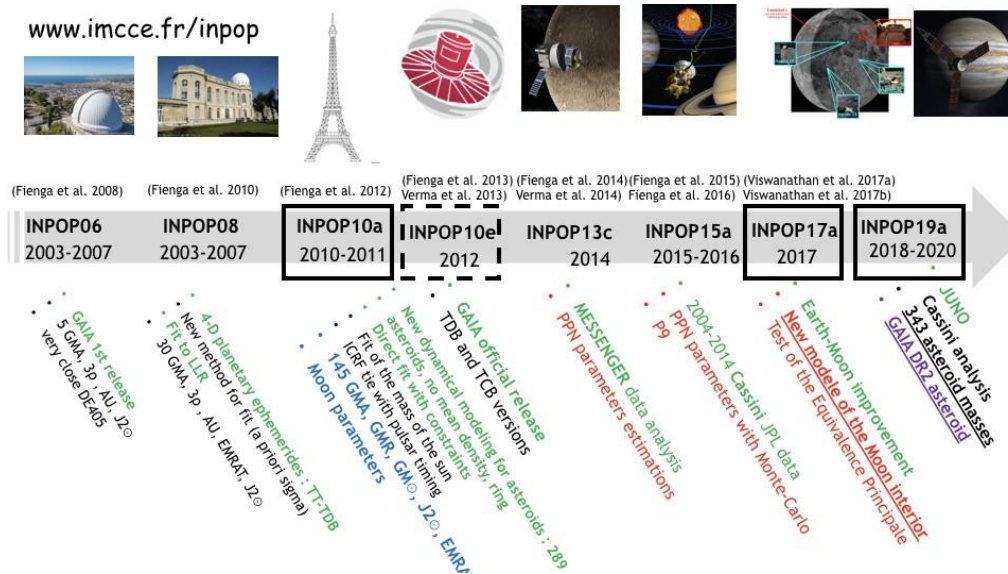


Figure 1: INPOP planetary, lunar and asteroid ephemerides Evolution

1 INTRODUCTION

The INPOP (Intégrateur Numérique Planétaire de l’Observatoire de Paris) planetary ephemerides have started to be built in 2003 by J. Laskar and A. Fienga and their team. With the years, INPOP has become a worldwide standard acknowledged by the community (Archinal *et al.*, 2018; Hilton *et al.*, 2016). On Figure 1, are summarized the different evolutions of the INPOP planetary ephemerides: from the first 4-D position, velocity and time-scale ephemerides in 2013 (INPOP10a and its version delivered for the Gaia DPAC, INPOP10e) and the improved Earth-Moon modeling in 2017 (INPOP17a) and its applications in selenophysics (Viswanathan *et al.*, 2019) to the first partially derivative-free inversion algorithms applied to fundamental physics testings and asteroid mass determinations (Fienga *et al.*, 2015; Bernus *et al.*, 2019; 2020; Fienga *et al.*, 2020a) and the implementation of the almost 2 millions of Gaia solar system object observations in INPOP19a (Deram *et al.*, 2021).

The planetary ephemerides are used for:

- Providing very accurate positions, velocities for 14,000 objects of the solar system (major and minor planets as well as the Earth and Moon orbital and rotational states and relativistic time-scales) to common users by also space agencies, such as CNES and ESA. The INPOP planetary ephemerides are used by ESA for the navigation and the data analysis of the missions Gaia, Bepi-Colombo and JUICE. The INPOP planetary ephemerides are accessible to the whole public on the IMCCE website www.imcce.fr/inpop.
- Enhancing the scientific return of space missions such as Mars orbiters (ExoMars, MEX, MRO...), Venus Express (VEX) but also Cassini and Juno missions. For example, with INPOP and the Cassini data, the mass of the Kuiper belt and constraint the existence of unknown and still undiscovered planet P9 have been estimated (Di Ruscio *et al.*, 2020; Fienga *et al.*, 2020b). VEX data were also used to improve mass estimations of main belt asteroids together with Mars orbiters navigation (Verma *et al.*, 2013) as well as solar physics parameters.
- Characterizing solar physics parameters such as the sun oblateness ((Fienga *et al.*, 2015)), the electronic densities of the fast and slow winds ((Verma *et al.*, 2013))
- Testing laws of gravitation in the solar system. Since 2015, INPOP has been intensively used for providing constraints on possible violation of General Relativity (Verma *et al.*, 2014; Fienga *et al.*, 2015) or for testing alternative theories of gravitation in the solar system (Bernus *et al.*, 2019; 2020).
- Estimating the mass distribution in the solar system with the introduction of the latest observations obtained with the Cassini and Juno missions ((Di Ruscio *et al.*, 2020)). With (Fienga *et al.*, 2020a), 100 main belt asteroid masses have been estimated with an accuracy better than 30%. This result doubles the number of asteroid masses obtained with such accuracy.
- Calibrating the datation of geological samples for paleoclimatologic studies. This latest aspect is at the center of the ERC AstroGeo. Indeed, for dating geologic samples, a long-term ephemeris LaX is used for estimating the Earth insolation (Laskar *et al.*, 2011) and LaX is calibrated in using INPOP. Furthermore as it has been demonstrated in

(Laskar, 1999), uncertainties on present ephemeris can have an important impact on its long-term extension, LaX. So INPOP improvements will impact LaX and geological datation.

g) Limiting the source of uncertainties for the detection of Cosmological Background (CMB) gravitational waves with pulsar timing arrays. The CMB gravitation waves are different from the one detected by VirgoLirgo as they are issued from the first ages of the Universe (expansion). As it has been demonstrated (Caballero *et al.*, 2018; Vallisneri *et al.*, 2020), the positions and velocities uncertainties of giant planet orbits are a limiting factor in the bayesian detection of CMB signatures in all pulsar timing arrays. Collaborations between the INPOP team and the European Pulsar Timing array (EPTA) and the US one (Nanograv) have started since 2019 on the question of the assessment of the planetary ephemerides accuracies.

2 STATE-OF-THE-ART

The regularly improved accuracies of the spacecraft navigation or radio experiment (below 1 m for Mars orbiters, about 1 cm for Bepi-Colombo, 20 m for Cassini and Juno missions) as well as the increasing number of data (i.e. 50,000 Mars orbiters observations and about 2 millions for the Gaia DR2) make the inversion of this complex dynamical modeling counting for up to 42,000 unknowns very challenging. When for the case of the construction of the 14,000 main belt asteroids, efficient linear algebra algorithm has been implemented successfully (Deram *et al.*, 2021), some cases remain complex to handle in the frame of the classic least-square minimization.

A good example is the problem of the main belt asteroid perturbations on the inner planets. As one can see on Figure 2, the main belt gathers hundreds of thousand of objects of different sizes and of unknown masses. The projection of these object perturbations on the inner planet orbits along the line-of-observations (i.e. the earth-mars distance as on Fig. 2) is non linear and induces correlated displacements that can reach several hundreds of meters, far above the present accuracies of the Mars orbiter observations (80 cm over 10 years). The individual contributions are then very difficult to disentangle and the determination of the masses becomes impossible without introducing specific algorithms. In 2020 (Fienga *et al.*, 2020a), we introduced a Monte Carlo Least-Square (MCLS) algorithm as a first attempt to combine Monte Carlo exploration of possible density constraints extracted from spectroscopic surveys and Least-Square minimization. We obtained 100 asteroid masses over 350 with an accuracy better than 30% but 250 asteroid masses are still not estimated accurately. Furthermore one can question the selection of 350 asteroids proposed by (Williams, 1984) as the most efficient representation of the asteroid perturbations.

The same type of approach combining Monte Carlo (MC) or Genetic Algorithm (GA) and least-square minimizations has been used for the estimation of highly correlated parameters imposed by alternative theories of gravitation (Fienga *et al.*, 2015; Bernus *et al.*, 2020) or for the localisation of the unknown and still undiscovered planet P9 (Fienga *et al.*, 2020b).

The good side of these mixed methods is the extension of the parameter domain exploration via the MC or the GA with a limited cost of time as these random walks are operated for a reduced number of parameters (the parameters of interest such as the angular positions and distances of P9) but not for all the INPOP parameters. The inconvenient of such methods is the use of least-square minimization for a non-linear model which can lead to local minima even if associated with a wider exploration of the parameter domain. Furthermore, up to now, the analysis of the obtained results were operated in using frequentist paradigm (χ^2 likelihood).

The goal of the proposed PhD is to develop a complete bayesian approach, never applied to the construction of ephemerides, in order to test new ways for disentangling signatures and exploring wider range of parameters in two major fields of application: the distribution of mass in the solar system and tests of alternative theories of gravitation.

3 DESCRIPTION OF THE PROJECT

The goal of this project is to create a new planetary ephemerides called B-INPOP, which will be the bayesian version of INPOP. The basic dynamical modeling will remain the same but the least-squares adjustment will be associated or totally replaced by a derivative-free approach. Several strategies will be investigated.

1) At the beginning, the student will have to investigate the case of the Post Parameterized Newtonian (PPN) parameters β and γ in the frame of the Bepi-Colombo simulations. This work is currently under development. Results have already been obtained with a frequentist method (χ^2 likelihood). PDFs of the problem have been obtained and a preliminary computation of the bayesian integrals has been done. From there, the student will have to implement a Metropolis algorithm (Tarantola, 1987) and see how efficient it could be in comparison with the results obtained with the likelihood. In a second step highly parallelized Neighborhood Algorithm (Sambridge, 1999a;b) will also be tested. Mixed strategies (MC for the two PPN parameters and least-square minimization for the rest of the parameters) or fully random samplings (priors for all the INPOP parameters, from planetary orbit initial conditions, oblateness and mass of the Sun, Earth-Moon mass ratio to asteroid masses but also PPN) will be tested and compared to the likelihood

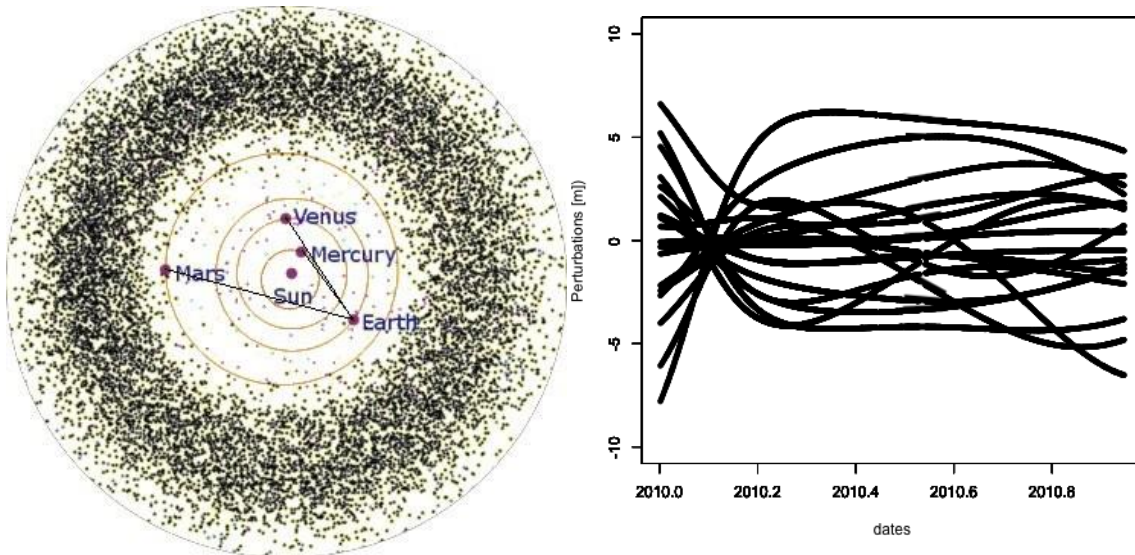


Figure 2: Main belt perturbations on inner planer orbits. On the right-hand side, is plotted an example of perturbations induced by 20 asteroids on the Earth-Mars distances over 1 year.

results. In terms of time of computation, the random sampling is faster than the mixed strategy (1 h for the MCLS versus 10 mn for the full random sampling when running on 40 processors Intel Xeon 2.3GHz) but requires a more important number of runs. A first publication should come out from this first step.

2) In a second step, a specific focus will be address the determination of the asteroid masses. This problematic has already been experimented with a MCLS approach (Fienga *et al.*, 2020a) but in this project the student will be asked to generalize the results that he or she will obtain with the PPN parameter determination to a more complex problem as the number of parameters to consider will be of about 350. Using the method developed by (Kuchynka and Folkner, 2013), the student will investigate if additional asteroids are not required in the model and will complete the INPOP dynamical modeling accordingly. Tests involving additional ring implementation will also be considered as a way to disentangle more easily the point-mass object signatures from signatures induced by objects too small to be detected. The same approach will be implemented and tested for the Kuiper belt objects. This task will be associated with an update of the Uranus and Neptune old optical observations based on a new analysis of their satellites observations, taking into account the Gaia catalog to provide improved positions for the planets. At least a second publication should come out from the step 2.

3) Additional applications to other types of theories of gravitation such as the dilaton theory would also be investigated.

4) During the PhD a Monte Carlo Markov Chain will be implemented in order to assess the planetary ephemerides accuracies. The assessment will be firstly compared to the INPOP covariance matrix estimated with the partial derivatives and distributed to the Pulsar timing array communities (EPTA and Nanograv). Publications in collaboration are planned.

We also expect the student to propose other strategies that can emerge from an intensive work of bibliography and discussion with UCA colleagues (i.e. Géoazur, Lagrange, Ecole des mines) using derivative-free inversion methods. In terms of computational power, we are currently using the PSL mesocentre but we will start using the UCA OPAL cluster this fall.

4 EXPECTED OUTPUTS

With the implementation of such bayesian approach and the creation of B-INPOP, we expect three major breakthroughs in planetology, fundamental physics and paleoclimatology:

1) With the determination of 350 asteroid masses, at least as this list could be extended, we will obtain the first lot of consistent mass determinations of this size. In collaboration with M. Delbo (Lagrange, OCA) we will combine the obtained masses with volumes extracted from the MP3C database for the 350 main belt bodies among which we have

planetesimals (expected 170) and collisionally generated asteroids. From the comparison of body bulk density to the composition and the mineralogical analogues we will infer the porosity, which informs about the internal structure. We will use composition and internal structure of planetesimals to constrain the properties of the different stages of their formations and we will infer properties of the protoplanetary disk collisional environments.

2) With the determination of the B-INPOP mass distribution in the Kuiper Belt, besides the new input for the models of solar system formation, we will improve significantly the accuracy on the Uranus and Neptune orbits which are key elements for the paleoclimatological datation. The mass distribution in the Kuiper belt plays an important role for the localisation of the whole solar system as it can induce a significant displacement on the solar system barycenter (SSB) relative to the sun. A displacement of about 100 km of the SSB (this is what was obtained with INPOP20a and the latest update of the Kuiper belt mass) leads to a modification of the Earth isolation of several degrees. The topic is directly associated with the ERC AstroGo, co-funder of this project, its aim being the improvement of the Astronomical Solutions over Geological Time.

3) With the B-INPOP implementation and its bayesian approaches for testing GR and alternative theories, we will increase the scientific return of the Bepi-Colombo mission by considering complexed theories such as the dilaton and SME (Standard Model Extension) theories. Based on recent simulations not yet published, we also expect to gain a factor 35 for the determination of the PPN parameter γ and about a factor 4 on PPN β thanks to the combination of Bepi-Colombo radio-science measurements and to derivative-free techniques.

4) A better assessment of the accuracy of the INPOP planetary ephemerides, specifically for the outer planet orbits, will also help for a better description of the pulsar timing sensitivity to the planetary orbits and for a better description of the planetary priors into the CMB gravitational wave detections.

In conclusion, this project aims at developing B-INPOP, the new generation of INPOP planetary ephemerides, a worldwide used and ERC granted ephemeris, that has shown its important impact in a wide field of topics from planetology, fundamental physics, paleoclimatology. With the new approaches that are proposed to be investigated in this project, B-INPOP will increase the scientific return of ESA missions such as Bepi-Colombo. It will participate at a new understanding of the stages of the solar system formation as well as a better calibration of geological datation, a mandatory step for the long-term studies in Earth climate evolution. Finally it will contribute to the detection of the relic CMB gravitational waves. The risks for this project are very low because of the well-established INPOP team and its strong collaboration in the field and a clear program of publication.

5 TECHNICAL ASSESSMENTS

The technical assessments for this project are based on the configuration used on the MesoPSL cluster since 2016. In the least-square configuration, each job is composed by the iteration of the following loop: the numerical integration (parallelized) of the planet and asteroid equations of motions over 1 century (10 mn), the computation of the residuals by comparison with observations (3 mn), the construction of the linearized Newton-Gauss equation (1 mn) and its inversion (3 mn). The stop of the iteration is given by the convergency of the χ^2 to a minimum. It usually takes 4 hours and each solution occupies, after removing auxiliary files, 150 Mb. The analysis of the results are very fast, based on R routines. In the bayesian configuration, the inversion of the jacobian matrix and the iterations are not necessary, leading to a job duration of about 10 mn and a size of the solution of less than 15 Mb. After analysis, only few Kb remains per solutions. In term of memory, 100 runs in the least square configurations use less than 32 Gb, the matrix inversion consuming the maximum of the memory. With the bayesian approach, the use is even less and should not be a limiting factor. A first step of development and construction of the bayesian approach will be done on our local cluster in Goazur (machine gpm with 72 nodes and 32 Gb of memory). An installation on Azzura will then be operated. By considering 4 cores of 32 nodes each, we will launch 160 runs per 10mn for the bayesian configuration. In asking for 400,000 hours this year over 4 cores, we guarantee 2,4 millions of runs for the bayesian approach which should be enough for the installation and the validation of the procedure as well as the first operational runs of the project. In the next three years, we should continue to work on the same basis.

REFERENCES

A. Fienga, J. Laskar, P. Exertier, H. Manche, and M. Gastineau, *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy* **123**, 325 (2015).

A. Fienga, C. Avdellidou, and J. Hanus, *MNRAS* **492**, 589 (2020a).

M. Sambridge, *Geophysical Journal International* **138**, 479 (1999a).

P. Kuchynka, J. Laskar, A. Fienga, and H. Manche, *A&A* **514**, A96 (2010), arXiv:1004.3119 [astro-ph.EP].

L. Iess, S. W. Asmar, P. Cappuccio, G. Cascioli, and al., *Space Sci. Rev.* **217**, 21 (2021).

A. Fienga, A. Di Ruscio, L. Bernus, P. Deram, D. Durante, J. Laskar, and L. Iess, *A&A* **640**, A6 (2020b).

L. Bernus, O. Minazzoli, A. Fienga, M. Gastineau, J. Laskar, and P. Deram, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 161103 (2019), arXiv:1901.04307 [gr-qc].

L. Bernus, O. Minazzoli, A. Fienga, M. Gastineau, J. Laskar, P. Deram, and A. Di Ruscio, *Phys. Rev. D* **102**, 021501 (2020), arXiv:2006.12304 [gr-qc].

-
- B. A. Archinal, C. H. Acton, M. F. A'Hearn, and al., *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy* **130**, 22 (2018).
- J. L. Hilton, C. Acton, J.-E. Arlot, and al., *Transactions of the International Astronomical Union, Series A* **29A**, 22 (2016).
- V. Viswanathan, N. Rambaux, A. **Fienga**, J. Laskar, and M. Gastineau, *Geophys. Res. Lett.* **46**, 7295 (2019), arXiv:1903.07205 [physics.geo-ph].
- P. Deram, A. Fienga, A. K. Verma, M. Gastineau, and J. Laskar, *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy* (2021).
- A. Di Ruscio, A. Fienga, D. Durante, L. Iess, J. Laskar, and M. Gastineau, *A&A* **640**, A7 (2020).
- A. K. Verma, A. Fienga, J. Laskar, K. Issautier, H. Manche, and M. Gastineau, *A&A* **550**, A124 (2013), arXiv:1206.5667 [physics.space-ph].
- A. K. Verma, A. Fienga, J. Laskar, H. Manche, and M. Gastineau, *A&A* **561**, A115 (2014), arXiv:1306.5569 [astro-ph.EP].
- J. Laskar, A. Fienga, M. Gastineau, and H. Manche, *A&A* **532**, A89 (2011), arXiv:1103.1084 [astro-ph.EP].
- J. Laskar, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A* **357**, 1735 (1999).
- R. N. Caballero, Y. J. Guo, K. J. Lee, and al., *MNRAS* **481**, 5501 (2018), arXiv:1809.10744 [astro-ph.EP].
- M. Vallisneri, S. R. Taylor, J. Simon, and al., *ApJ* **893**, 112 (2020), arXiv:2001.00595 [astro-ph.HE].
- J. G. Williams, *Icarus* **57**, 1 (1984).
- A. Tarantola, *Inverse problem theory: methods for data fitting and model parameter estimation*, edited by Elsevier (1987).
- M. Sambridge, *Geophysical Journal International* **138**, 727 (1999b).
- P. Kuchynka and W. M. Folkner, *Icarus* **222**, 243 (2013).

Biologie, santé

EUR Life

Automatic cell type annotation for cell atlas construction

Responsable scientifique : Christophe Bécavin

Laboratoire : IPMC

Description :

Chronic respiratory diseases (COPD, fibrosis, asthma, cystic fibrosis, ciliopathies) affect several hundred million people worldwide and the COVID pandemic has recently drawn world attention on the impact of infectious respiratory diseases. The tissue destruction that is associated with these diseases is often followed by a strong tissue remodeling of the airway tract, one of body's first line of defense. To better understand the importance of the different resident cell types in these processes and determine useful new targets for developing the therapeutical arsenal, we are developing single-cell analyses.

Single-cell technologies are becoming essential in many research projects to analyze complex biological systems. The power of these approaches, which allow the determination of cell composition and delineation of complex transcriptional regulatory networks in cellular subsets, involves a large panel of numerical methods to integrate properly many different biological modalities (information about RNA expression, splicing, editing, proteins, epigenome, genome, spatiotemporal expression). Many questions are emerging when working such massive data to optimize properly the integration of several separate datasets and be able to make comparisons between different experimental situations. Deep learning methods show great promise to automate classification or dimensionality reduction. We plan to use them in order to build the cellular atlas of the respiratory tree, after identification of the most appropriate deep network structure able to identify the different cell types.

The research project aims to:

- (1) determine the most suitable model of deep neural network to automate cell classification;
- (2) develop a visualization algorithm for dynamically annotate the cell types, linked to the deep learning model;
- (3) use these approaches for creating a lung cellular atlas that integrates in vivo and in vitro datasets, and document the variations observed under specific phenotypic/genotypic situations.

Exploring associations between serum cytokine levels and behavior abnormalities in children

Responsable scientifique : Nicolas Glaichenhaus

Laboratoire : Institut de Pharmacologie Moléculaire et Cellulaire

Description :

Les cytokines sont de petites protéines solubles produites par les cellules du système immunitaire. A ce titre, elles jouent un rôle déterminant dans la défense de l'organisme contre les agents pathogènes. Toutefois, ces molécules peuvent également perturber le fonctionnement du cerveau et provoquer des anomalies comportementales telles que l'hyperactivité ou des difficultés d'interactions sociales. Afin de mieux comprendre le rôle des cytokines sur le fonctionnement du cerveau, nous avons eu accès à des données cliniques et des prélèvements biologiques qui ont été collectés dans le cadre de la cohorte EDEN, une cohorte française généraliste dont l'objectif est l'étude des déterminants pré et post natal précoce du développement psychomoteur et de la santé de l'enfant. Ainsi, dans le cadre de la cohorte EDEN, plus de 2000 mères ont été recrutées pendant leur grossesse et suivies, ainsi que leur enfant, pendant plus de 5 ans.

De très nombreuses données psychosociales ont été collectées pendant la grossesse et après la naissance de l'enfant parmi lesquelles, la consommation de tabac et d'alcool de la mère pendant la grossesse, les niveaux d'éducation du père et de la mère, le revenu du foyer, le nombre de frères et de sœurs, les antécédents médicaux des parents, les événements de santé entre la naissance et l'âge de 5 ans, le poids et la taille de l'enfant. De plus, les enfants ont été évalués à l'âge de 5 ans par un(e) psychologue ce qui a permis de définir, pour chacun d'entre eux, 5 scores cliniques mesurant les performances de l'enfant dans 5 dimensions comportementales: les problèmes comportementaux, les problèmes d'interactions avec les autres, les problèmes émotionnels, l'hyperactivité et les problèmes d'inattention, et le comportement pro-social.

Parallèlement au recueil des données psychosociales, l'étude EDEN a permis de récolter des échantillons de sang qui ont été prélevés chez la mère pendant la grossesse, à la naissance dans le cordon ombilical, et chez l'enfant à l'âge de 5 ans. Ces échantillons ont ensuite été analysés pour la concentration de 33 cytokines différentes.

L'objectif de notre projet est d'effectuer des études d'association de prédiction, afin d'identifier les variables cliniques et biologiques associées aux différentes dimensions comportementales étudiées dans la cohorte EDEN.

Méthode(s) utilisée(s)

Nous utiliserons 3 méthodes/algorithmes de régression pour comparer les résultats :

1- La régression logistique standard dans le cadre des modèles linéaires généralisés qui utilise l'estimateur usuel des moindres carrés.

2- Elastic Net est une méthode de contraction des coefficients de régression qui permet d'ajuster des modèles de régression logistique pénalisée. Elastic Net est normalement utilisé dans des problèmes de grande dimension ($n \ll p$), un cas où des méthodes plus classiques ne fonctionnent pas. Elastic Net utilise des algorithmes consommateurs de temps de calcul et de stockage. En pratique, Elastic Net est testé de manière itérative pour différentes valeurs des paramètres λ et α de manière à identifier une solution optimale par validation croisée et une mesure de la performance par calcul de l'aire sous la courbe (AUC).

3 – Algorithmes de Gradient boosting (XGBoost, etc) pour créer des modèles prédictifs. L'objectif principal de Gradient Boost est de minimiser la fonction de perte en ajoutant des apprenants faibles à l'aide d'un algorithme d'optimisation de la descente de gradient. L'optimisation des paramètres de l'algorithme peut prendre un certain temps même si celui-ci a été spécialement conçu pour améliorer la vitesse et les performances.

Exécuter ces algorithmes dans un PC prend du temps car la parallélisation est réduite à quelques cœurs et les performances générales de la machine seront réduites.

Hi-C-Genomes

Responsable scientifique : Etienne Danchin

Laboratoire : Institut Sophia Agrobiotech - UMR INRAE -UCA -CNRS

Description :

La reproduction sexuée est ultra-majoritaire chez les animaux si bien que les rares espèces capables de se reproduire en l'absence de reproduction sexuée (par parthénogénèse) sont considérées comme des curiosités et des impasses évolutives. En effet, en l'absence de reproduction sexuée, les animaux ne sont pas capables de réaliser de brassage génétique et donc d'échanger des allèles favorables. Certains de ces animaux ont même perdu la capacité de réaliser la méiose et donc à éliminer via recombinaison les allèles délétères. Ces animaux dits strictement parthénogénétiques sont supposés avoir un désavantage sélectif et adaptatif en comparaison de leurs congénères capables de se reproduire sexuellement.

Dans notre laboratoire, nous travaillons sur des vers ravageurs de cultures responsables de dégâts considérables à l'échelle mondiale. Ces vers appartiennent au genre *Meloidogyne* dans lequel on retrouve à la fois des espèces à reproduction sexuée et d'autres asexuée obligatoire. Etonnamment, les espèces causant le plus de dégâts ont une reproduction asexuée obligatoire et ne font pas de méiose. Ces parthénogénétiques mitotiques sont capables d'attaquer une plus grande variété de plantes et ont une plus grande aire de répartition géographique que leurs congénères se reproduisant sexuellement. Ces observations semblent donc contradictoires avec la théorie qui voudrait que les asexués soient désavantagés et s'adaptent moins bien que les sexués.

Comment les animaux sont capables d'évoluer, de persister et de s'adapter en l'absence de sexe reste très peu connu et constitue une énigme dans le domaine de l'évolution. Pour en apprendre plus, nous avons réalisé le séquençage du génome d'une de ces espèces, *Meloidoyne incognita* en 2008 à l'aide de techniques de séquençage de 1ere génération⁴⁶. Ces travaux nous ont permis de découvrir que le génome avait une structure dupliquée particulière mais celui-ci étant incomplet il ne nous a pas été possible

⁴⁶ Abad, P. et al. Genome sequence of the metazoan plant-parasitic nematode *Meloidogyne incognita*. *Nat. Biotechnol.* 26, 909–915 (2008).

de lier cette structure à une capacité à survivre sans sexe. Plus récemment, grâce à l'emploi de techniques de séquençage de 2ème génération nous avons pu améliorer ce premier génome et séquencer ceux de deux autres espèces du genre *Meloidogyne*. Ces travaux ont montré que ces espèces sont polyploïdes et ont subi des événements d'hybridations⁴⁷.

Grâce à l'obtention d'un grand projet de séquençage France Génomique, nommé ALPAGA et dont je suis coordinateur, nous avons pu générer des données génomiques avec des technologies de séquençage d'ADN de 2ème et 3ème génération. Ces données nous ont permis de réaliser un bon considérable dans l'assemblage de ces génomes, passant de génomes fragmentés en dizaines de milliers de morceaux à des génomes fragmentés en centaines de morceaux. Ces fragments moins nombreux et plus grands nous ont offert un niveau de résolution inégalé sur la structure du génome.

Cependant, nous sommes encore loin d'avoir assemblé les génomes de ces différentes espèces à un niveau de résolution chromosomique puisque ces organismes possèdent 40 à 50 chromosomes.

De ce fait, notre connaissance de l'arrangement et de l'organisation des gènes le long de ces génomes reste encore limitée par cette fragmentation du génome. Récemment des techniques dites 3-C pour chromosome capture conformation et leurs dérivés de type Hi-C (pour high-throughput) permettent d'obtenir des informations de contact dans la chromatine et grâce à ces informations des outils bioinformatiques sont capables d'assembler les génomes à un niveau de résolution chromosomique⁴⁸. Cette avancée technologique a permis d'obtenir un assemblage de génome à l'échelle des chromosomes pour un nématode parasite de plante⁴⁹ et permet d'espérer des résultats similaires chez les nématodes du genre *Meloidogyne* se reproduisant par parthénogénèse.

⁴⁷ Blanc-Mathieu, R. et al. Hybridization and polyploidy enable genomic plasticity without sex in the most devastating plant-parasitic nematodes. *PLOS Genet.* 13, e1006777 (2017).

⁴⁸ Ghurye, J. & Pop, M. Modern technologies and algorithms for scaffolding assembled genomes. *PLOS Comput. Biol.* 15, e1006994 (2019).

⁴⁹ Lian, Y. et al. Chromosome-level reference genome of X12, a highly virulent race of the soybean cyst nematode *Heterodera glycines*. *Mol. Ecol. Resour.* 19, 1637–1646 (2019).

L'une des méthodes d'assemblage les plus performantes basée sur les informations de contact dans la chromatine Hi-C est la méthode Graal⁵⁰, implémentée dans le programme instaGraal⁵¹. Ce programme requiert l'utilisation intensive de GPU via la technologie cuda core sur cartes NVIDIA.

L'objectif de notre demande est de pouvoir accéder à des ressources GPU NVIDIA afin d'utiliser le programme instaGraal pour assembler les génomes de différentes espèces de nématodes présentant des modes de reproduction différents. Nous ne disposons pas de ressources de type GPU dans notre laboratoire et n'avons pas non plus accès à de telles ressources à l'extérieur.

A ce jour nous disposons de données Hi-C pour les génomes de 3 espèces, *M. incognita*, *M. javanica* et *M. arenaria*, et des données vont être générées dans les prochaines semaines pour 2 autres espèces. Nous espérons, grâce à ces données Hi-C et à l'utilisation d'instaGraal sur des cartes GPU NVIDIA pouvoir reconstruire les différents génomes à un niveau de résolution chromosomique. Ceci nous permettra d'enfin résoudre la structure de ces génomes, leur histoire évolutive et l'arrangement de la suite des gènes le long des chromosomes.

⁵⁰ Marie-Nelly, H. et al. High-quality genome (re)assembly using chromosomal contact data. *Nat. Commun.* 5, (2014).

⁵¹ Baudry, L. et al. instaGRAAL: chromosome-level quality scaffolding of genomes using a proximity ligation-based scaffold. *Genome Biol.* 21, 148 (2020).

Projets industriels

Début 2021 a été signée une convention de don de matériel par la société K-EPSILON pour Université Côte d'Azur. Le cluster Azzurra a donc bénéficié de l'apport en matériel suivant :

- 8 nœuds de calcul de type Dell PowerEdge C6525 équipés de processeurs AMD Epyc 7302
- 2 châssis de type Dell PowerEdge C6400
- 4 câbles IB Mellanox 2x100 Gb/s
- 8 câbles Ethernet

Ce don représente 56.835,00 EUR H.T. de matériel.

Les machines ont été mises à disposition des utilisateurs d'UCA fin mars 2021.

K-EPSILON, dont le siège est basé à Sophia Antipolis, bénéficie d'un accès aux ressources de calcul d'Azzurra pour ses différents projets de R&D.

K-EPSILON est un leader dans la simulation de l'hydrodynamique et de l'aérodynamique pour les applications marines et offshore.

Fondée en 2003 et pionnière en CFD, K-EPSILON propose une nouvelle génération de solutions sur mesure, des études numériques spécifiques, pour simuler et prédire le comportement de systèmes complexes en milieu marin et offshore.