Bilan de l'action exploratoire EXPLORAGRAM (2016-2017)

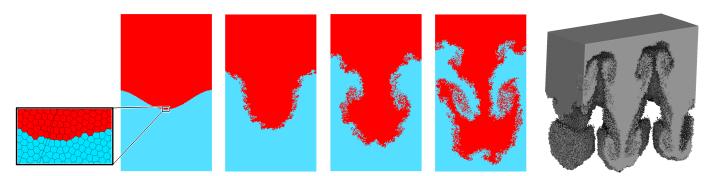


Fig. 1: Premiers résultats en dynamique des fluides: simulation de l'instabilité de Taylor-Rayleigh en 2D et en 3D \(^1\).

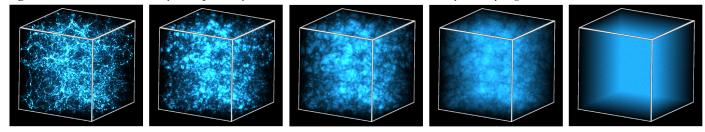


Fig. 2: Résultats de l'algorithme développé dans le cadre d'EXPLORAGRAM, appliqué à des simulations de reconstruction de l'état primordial de l'univers, sur un cube de 600 millions d'années lumières de côté. Les points correspondent à 16 millions d'amas de galaxies. Reconstruction du mouvement vers la densité uniforme (données Institut d'Astrophysique de Paris, Roya Mohayaee et Jean-Michel Alimi)

L'action de recherche EXPLORAGRAM portait sur le développement de nouveaux schémas numériques et algorithmes de calcul pour le transport optimal semi-discret ainsi que leurs applications en physique computationelle. Le financement a permis de recruter une mathématicienne post-doctorante, Erica Schwindt, pendant une durée de 18 mois. Le travail a porté sur la mise au point de schémas de calcul dits "semi-discrets", leur application à des problématiques de simulation numérique de dynamique des fluides et des problèmes inverses en cosmologie. Le travail a donné lieu aux publications suivantes (une soumise et deux en cours d'écriture, prévues d'être soumises en Janvier):

- Notions of optimal transport and how to implement them on a computer, B. Lévy and E. Schwindt, soumis à Computer and Graphics, https://arxiv.org/abs/1710.02634;
- Incompressible navier-stokes with solid-fluid coupling, a scheme "a la Brenier", E. Schwindt, Q. Mérigot, T. Gallouet, B. Lévy, en cours de rédaction;
- A scalable and dimension-independent algorithm for semi-discrete optimal transport, B. Lévy, E. Schwindt, Q. Mérigot, en cours de rédaction.

Le projet a permis de significativement renforcer la coopération entre ALICE et MOKAPLAN, en intensifiant les échanges et projets communs, d'une part autour des schémas de calculs Lagrangiens en dynamique des fluides initialement proposés par MOKAPLAN en 2D et étendues en 3D grâce aux algorithmes ALICE (c.f. Figure 1). Dans ce contexte, EXPLORAGRAM a permis de développer une analyse mathématique d'une configuration plus générale, où le domaine du fluide varie au cours du temps (couplage fluide-solide).

D'autre part, le projet a permis d'initier une coopération avec les astrophysiciens de l'Institut d'Astrophysique de Paris (Roya Mohayaee et Jean-Michel Alimi), sur des problématiques d'études de modèles de la dynamique de l'univers à grande échelle. Le principal résultat d'EXPLORAGRAM est d'une part un noyau algorithmique permettant d'envisager une résolution numérique de ces problèmes, et d'autre part, de manière plus importante, la mise en réseau de mathématiciens (Mérigot, Benamou, Brenier, Gallouet, Schwindt), de physiciens (Mohayaee et Alimi) et d'informaticiens (Lévy) pour attaquer ces problèmes numériques très difficiles que seuls une attaque combinée sous les trois angles maths/info/physiques permet de résoudre. Les premiers résultats sont prometteurs (c.f. Fig. 2) et permettent d'envisager une étude numérique à très grande échelle. La suite de ce document présente succintement les objectifs scientifiques et les suites, conduisant à la soumission d'un projet "grand challenge" pour le nouveau super-calculateur IRENE du GENCI.

¹Vidéos: https://www.youtube.com/channel/UCbAgtporwncbos33AkZRrXw

Pour étudier le Big-Bang et les structures à grande échelle de l'univers, deux grands types de mesures sont possibles:

- d'une part, la mesure du *décalage vers le rouge* (redshift) du spectre de certaines étoiles, dû à l'effet Doppler, permet d'estimer la vitesse à laquelle elles s'éloignent de nous. Cette vitesse est liée à leur distance par la constante de proportionalité de Hubble, ce qui permet d'obtenir une carte 3D d'une partie du cosmos en cartographiant ainsi un grand nombre d'amas de galaxies (des dizaines de millions dans les dernières campagnes d'acquisition);
- d'autre part, la mesure des hétérogénéités dans le *fond de rayonnement cosmologique*, récemment cartographié à haute résolution par la sonde Planck. Il s'agit de la lumière émise aux premiers instants de l'univers, 380 000 ans après le Big-Bang (avant celà, l'univers était opaque) ².

L'un des principaux défis en cosmologie concerne le test de certains modèles théoriques de l'évolution à grande échelle de l'univers. Pour tester ces modèles, une approche possible consiste à partir d'un ensemble d'amas de galaxies cartographié lors d'une campagne d'acquisition redshift et à **inverser le cours du temps** pour remonter 13.7 milliards d'années jusqu'au Big-Bang, où l'on suppose que la matière était répartie de manière homogène. Ceci permettra d'observer ensuite si les faibles variations correspondent aux hétérogénéités du fond de rayonnement cosmologique.

Le modèle de la dynamique à large échelle de l'univers utilisé a été décrit dans l'article publié en 2002 dans Nature par Frish, Matarrese, Mohayaee et Sobolevski (voir également la version plus longue avec Brenier, Hénon et Loeper). A cette échelle, l'univers peut être considéré comme une sorte de "fluide", dont les "atomes" correspondant aux amas de galaxies, feraient quelques millions d'années lumières de diamètre. L'équation correspondante est très similaire à l'équation d'Euler pour les fluides incompressibles évoquée dans la sous-section précédente, ce qui a conduit Brenier à proposer une méthode d'inversion fondée sur le transport optimal. Dans ce contexte, la dynamique devient très simple (les particules voyagent en ligne droite à vitesse constante), et le problème devient un problème d'assignement (retrouver la position d'origine de chaque particule de manière à minimiser l'énergie cinétique).

Dans l'article initial publié en 2002, Roya Mohayaee et ses collègues utilisaient pour le problème d'assignement un algorithme combinatoire (les enchères de Bersekas), en $O(n^3)$. Ils ont estimé qu'il serait illusoire d'appliquer cet algorithme au delà de 100 000 amas de galaxies. Récemment, avec les progrès de l'informatique, ils ont pu l'appliquer à 2 millions d'amas de galaxies, moyennant **deux mois de calcul**. Mon algorithme pour le transport semi-discret à réalisé le même calcul en **dix minutes**. Ceci est rendu possible parce que la formulation semi-discrete remplace un algorithme combinatoire (qui doit tester toutes les possibilités) par un algorithme numérique, qui minimise une fonction régulière C^2 grâce à ses dérivées secondes, et qui converge très rapidement. Ceci laisse espérer des découvertes intéressantes: en fournissant à nos collègues de l'Institut d'Astrophysique de Paris un outil permettant de **réaliser des expériences numériques en nombre et à une échelle inenvisageable auparavant**, il sera possible de tester une plus grande classe de modèles cosmologiques. A terme, ceci va nécessiter de calculer **des diagrammes de Laguerre avec des millards de cellules**.

Nous avons pour projet de soumettre tous ensemble un projet "Grand Challenge" au GENCI, à l'occasion du renouvellement du super-calculateur CURIE³ qui sera remplacé par IRENE. Quand le GENCI renouvelle un calculateur, il réserve quelques slots pour passer des jobs sur l'intégralité du super-calculateur, juste avant son ouverture en temps partagé à l'ensemble de la communauté des utilisateurs. Ces slots extrèmement précieux, sont attributés à l'issu d'un appel d'offre. Nore réponse à cet appel d'offre proposera de réaliser des reconstructions à très grande échelle (500 milliards de particules) afin de valider le transport optimal comme méthode pour "remonter le temps". Nous prévoyons d'expérimenter deux grandes classes d'algorithmes (le semi-discret développé dans le cadre d'EXPLORAGRAM, et une autre approche, développée par MOKAPLAN, utilisant une régularisation et des grilles régulières). Une fois la méthode de reconstruction par transport validée, ceci permettra de l'appliquer à des données réelles, pour mesurer ensuite certaines grandeurs au temps initial et les comparer aux prédictions de plusieurs modèles théoriques différents concernant l'énergie noire et la matière noire. J-M. Alimi a une bonne expérience de ce type de projet, avec la réalisation du projet DEUS⁴, qui lors de la mise en place de CURIE, a permis de simuler la formation des structures à très grande échelle dans l'univers en utilisant l'intégralité du super-calculateur.

²Vu que rien ne peut aller plus vite que la lumière, il peut paraitre surprenant que de la lumière issue du big-bang ne nous parvienne que maintenant, mais ceci s'explique parce que *l'espace* lui-même s'est étendu plus vite que la lumière.

³actuellement numéro 15 au Top 500 des super-calculateurs

⁴http://www.deus-consortium.org