

Rapport sur le renouvellement de la Chaire de Calcul Scientifique

1. **Résumé (1 à 2 pages).**

Intitulé de la chaire : Calcul Scientifique

EPN : 6 ; Laboratoire : M2N

Rapporteur : Jean-François Zagury

Domaines d'expertise, mots-clés : *Calcul scientifique, simulation, méthodes numériques, optimisation, couplage machine learning, algorithmique et ses applications, réduction de modèles numériques*

État de l'art au CNAM, en France, à l'international : 10 lignes max. 5 références max.

Le développement des super-calculateurs puissants pour des calculs parallèles CPU/GPU et l'accès au *Cloud Computing* ou des systèmes *Docker* d'une part et les avancées phénoménales en conception des méthodes numériques innovantes [1, 2] applicables aux problèmes d'ingénierie [3] ces dix dernières années d'autre part, montrent que la thématique du calcul scientifique reste un domaine phare de la recherche appliquée internationale et industrielle. Ces avancées ont engendré une forte transversalité des approches de simulation numérique, pouvant d'ailleurs inclure des techniques d'intelligence artificielle [4], pour créer des modèles numériques robustes alliant la prédiction au contrôle et optimisation numérique [5]. Ces aspects sont de plus en plus utilisés dans l'industrie car il est souhaitable de remplacer au maximum des expérimentations lourdes et coûteuses de prototypes par des tests *in silico*. Ainsi aujourd'hui, avant de tester les prototypes, les modèles de voiture ou d'avions sont déjà totalement fonctionnels "*in silico*". La Chaire de Calcul Scientifique a existé depuis des décennies au Cnam et a contribué aux progrès réalisés dans le domaine. Elle développe ses activités tant sur le plan pédagogique au sein de l'EPN6 Mathématiques, que sur le plan de la recherche au sein du Laboratoire M2N dédié au calcul scientifique. Le Cnam a donc, de longue date, une présence et une contribution forte dans le domaine du Calcul Scientifique.

[1] Mirheo: High-performance mesoscale simulations for microfluidics, D. Alexeev, L. Amoudruz, S. Litvinov, P. Koumoutsakos, *Computer Physics Communications*, 2020, 107298.

[2] A domain-specific language and editor for parallel particle methods, S. Karol, T. Nett, J. Castrillon, I.F. Sbalzarini, *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* 44 (3), 2018, 1-32.

[3] Estimating a planetary magnetic field with time-dependent global MHD simulations using an adjoint approach, C. Nabert, C. Othmer, K.H. Glassmeier, *Annales Geophysicae*, 35 (3) 2017, 613-628.

[4] Machine-Learning Methods for Computational Science and Engineering, M. Frank, D. Drikakis, V. Charissis, *Computation* 8 (15) 2020, 1-35.

[5] A gradient-based framework for maximizing mixing in binary fluids, M.F. Ettl, P.J. Schmid, *Journal of Computational Physics* 368, 2018, 131-153.

Résumé et enjeux, incluant impact économique et sociétal : 15 lignes max.

Le domaine du calcul scientifique, avec notamment les nouveaux outils de calcul haute performance et la modélisation de systèmes complexes, ne cesse d'évoluer et de progresser. Il s'est transformé sur le plan de ses capacités de calcul et algorithmiques avec l'arrivée des Clouds, du calcul haute performance (GPU, CPU, ainsi que le développement des futurs calculateurs quantiques ultrapuissants), et d'une puissance de stockage à accès immédiat incomparable. Ces nouveaux outils touchent tous les secteurs de l'industrie que ce soit par exemple l'automobile, l'aéronautique, ou l'environnement pour la mécanique et la dynamique des fluides, le secteur pharmaceutique pour le calcul quantique et le développement de nouveaux médicaments, ou l'assurance ou la finance avec la nécessité de faire des calculs puissants pour simuler des modèles ou valoriser des produits de plus en plus complexes. Ces progrès nécessitent la mise en place de nouvelles formations correspondantes au niveau ingénieur ou de spécialisation qui seront importantes en formation initiale (diplômes d'ingénieur du Cnam) comme en spécialisation pour les professionnels de l'industrie. Ils nécessitent aussi un recrutement de haut niveau pour la recherche et devrait permettre au Laboratoire M2N du Cnam, très reconnu dans ce secteur, de poursuivre son expansion et répondre aux sollicitations venant du monde académique et industriel.

Conclusion

La Chaire de Calcul Scientifique existe depuis des décennies au Cnam et a accompagné le développement de cette discipline en formant des ingénieurs et des chercheurs et en contribuant aux progrès de la recherche dans ce domaine. Le Laboratoire de recherche M2N du Cnam s'est d'ailleurs constitué autour de cet ADN initial. L'existence de cette chaire reste vitale dans un contexte de progrès constants voire accélérés dans les technologies de calcul haute performance. Un excellent candidat avait été retenu lors d'un concours récent, mais n'a pu venir pour des raisons administratives, et on avait d'ailleurs noté la haute qualité des autres candidats classés. Il semble important que cette chaire soit à nouveau pourvue rapidement compte-tenu du rôle croissant et majeur de cette discipline pour modéliser les systèmes complexes dans l'industrie. Ce besoin est d'autant plus flagrant que l'équipe du laboratoire M2N du Cnam a gagné une bonne notoriété dans ce domaine en tissant des liens industriels et académiques solides et reçoit des demandes continues de la part des acteurs socio-économiques aussi bien pour des formations adaptées que pour des contrats de recherche. Elle a clairement besoin de se renforcer pour porter ce domaine et répondre à ces demandes.

2. Argumentaire (ne pas dépasser 4 pages)

-État de l'Art Mathématiques : le calcul scientifique actuel.

Le calcul scientifique regroupe toutes les phases de l'approche mathématique d'un problème extrinsèque aux mathématiques : la modélisation, l'analyse mathématique, l'analyse numérique, l'implémentation. Sa forme actuelle relève de frontières non étanches et d'allers-et-retours entre chacun de ces items. Avec les nouveaux outils de calcul haute performance et la modélisation de systèmes complexes, le calcul scientifique ne cesse d'évoluer et de progresser. Il s'est transformé sur le plan de ses capacités de calcul et algorithmiques avec l'arrivée des Clouds, du calcul haute performance (GPU, calculs quantique), et d'une puissance de stockage à accès immédiat incomparable. Ces nouveaux outils touchent tous les secteurs de l'industrie que ce soit par exemple l'automobile, l'aéronautique, ou l'environnement pour la mécanique et la dynamique des fluides, le secteur pharmaceutique pour le calcul quantique et le développement de nouveaux médicaments, la médecine pour la robotique chirurgicale, ou l'assurance ou la finance avec la nécessité de faire des calculs puissants pour simuler des modèles ou valoriser des produits exotiques de plus en plus complexes.

A titre d'exemple, on retrouve la problématique des phénomènes de turbulence et de vitesse des écoulements, qui est intimement liée à la compréhension des équations de Navier-Stokes, dans plusieurs industries (automobile, aéronautique, réseaux municipaux des eaux usées, climatologie, cristaux liquides etc..). Le modèle lui-même est toujours un objet d'étude d'une extrême complexité à la fois pour la description physique multi-échelle, les aspects théoriques et les aspects numériques théoriques, en particulier pour les conditions aux limites et la turbulence, nœuds gordiens de l'aérodynamique en vue de l'implémentation pour la simulation qui nécessite le traitement d'un nombre de plus en plus conséquent de données.

Une grande diversité d'approches par le calcul scientifique ont été développées et peuvent être combinées. A titre d'exemple, depuis peu, des méthodes de réduction de modèles et des méthodes d'intelligence artificielle (*machine learning*) ont été introduites dans le calcul scientifique. Ces approches hybrides encore peu exploitées dans le monde socio-économique sont très prometteuses pour encore accroître la puissance des outils du calcul scientifique et ses succès dans le monde de la recherche industrielle.

En résumé, le calcul scientifique moderne requiert une vision transverse et experte de ses composantes et une excellente connaissance de multiples modèles de référence.

-Enjeux pour le Cnam

La Chaire de Calcul Scientifique a existé au Cnam depuis plusieurs décennies et correspond à un véritable besoin industriel et sociétal qui s'est accru avec le temps avec les performances et la complexité des systèmes de calcul. Besoin industriel pour réaliser des modélisations/simulations de systèmes complexes, et besoin sociétal pour une R&D plus verte. Le besoin en calcul scientifique existe encore plus aujourd'hui qu'avant au niveau industriel, et formation et recherche doivent suivre les progrès technologiques.

Au sein du Cnam, le domaine du calcul scientifique relève d'une facette de la formation au niveau ingénieur qui nécessite une refonte pour intégrer les approches modernes requises

dans les industries concernées. Une personne ayant une vision du calcul scientifique dans sa globalité est à même de construire ce type de formation ainsi que des certificats de spécialisations. Cela permettrait des partenariats avec d'autres EPN, chaires ou thématiques comme Mécanique, Construction durable, Bio-informatique, Aérodynamique industrielle, Informatique, Données massives. Des industriels ont déjà manifesté leur intérêt pour une nouvelle formation d'ingénieur et pour un certificat de spécialisation dans cette thématique (Peugeot et Plastic Omnium). Par ailleurs, l'apparition récente d'outils de l'intelligence artificielle dans le calcul scientifique doit permettre de croiser la thématique avec les approches statistiques et informatiques des données incitant à panacher des unités d'enseignement dans des certificats de spécialisation ou des masters (MR123 et CS59, par exemple) existants. Des expériences numériques récentes faites grâce au calcul scientifique sur les questions de submersion des côtes en cas d'épisodes météorologiques ou climatiques extrêmes ou de la conjonction d'épisodes non extrêmes pourraient aussi faire l'objet de formations ad-hoc destinées aux responsables de juridictions locales ou aux assureurs par exemple. Le conseil de l'EPN 6 a, par une *motion du 23/9/2020, soutenu fortement la demande de recréation de la chaire de calcul scientifique dont elle estime les enjeux transverses fondamentaux pour l'EPN6 et pour l'établissement tant au niveau des partenariats industriels que de l'enseignement et de la recherche*. Ceci demande une connaissance pointue du domaine et souligne l'importance de recruter un collègue de haut niveau, avec une vision large des applications, ce qui correspond bien au profil d'un PRCM.

Sur le plan de la recherche, le laboratoire M2N mène plusieurs projets de recherche en lien avec le calcul scientifique, et travaille notamment sur la conception de méthodes de calcul robustes en mécanique des fluides ainsi que la mise en œuvre de techniques de contrôle et d'optimisation numérique en utilisant des modèles réduits et des techniques d'apprentissage. Ainsi, un des axes de recherche porte sur la simulation et le contrôle aérodynamique pour les véhicules terrestres. Des collaborations industrielles importantes ont été mises en place avec PSA et Plastic Omnium. Les développements sur des cas simplifiés étant très prometteurs, ces projets s'orientent maintenant vers des applications réalistes avec possibilité d'industrialisation à court et moyen termes. Un autre axe porte sur les réseaux de distribution d'eau potable. Le calcul scientifique y est fondamental à la fois dans les problèmes directs de la distribution d'eau potable et les problèmes de contrôle et de sécurité. Il s'agit de réaliser une modélisation multi-échelle de systèmes physiques complexes ainsi qu'un contrôle effectif, et d'être capable aux vues des simulations de satisfaire la demande des usagers en garantissant 1. que les observations faites par les capteurs et les informations numériques transmises prouvent la fiabilité du système, 2. la qualité de l'eau qui arrive chez les usagers, et 3. une réponse adaptée vis à vis d'attaques Cyber ou physico-chimiques ou de pannes du réseau. Cet axe de recherche fait l'objet une collaboration dans le cadre d'un partenariat de recherche avec l'INRAE, la communauté urbaine de Strasbourg et M2N. Ce projet a aussi permis de prévoir une collaboration interne avec l'équipe Cyber du CEDRIC et Véronique Legrand dans le cadre d'un projet ANR. Vu l'ampleur et l'importance des projets de recherche, le titulaire de chaire permettrait de faire le lien, superviser et pérenniser tous les projets liés au calcul scientifique.

En résumé, il y a un réel besoin de recruter quelqu'un de haut niveau, tant pour orienter les enseignements que pour coordonner la recherche en calcul scientifique, niveau qui avait bien été atteint pour les candidats classés lors du concours qui avait eu lieu récemment et

dont le premier classé n'est finalement pas venu au Cnam pour des raisons d'ordre administratif.

-Impact économique et sociétal :

Le développement des super-calculateurs puissants pour des calculs parallèles CPU/GPU et l'accès au Cloud computing ainsi que les avancées phénoménales en conception de méthodes numériques innovantes applicables aux problèmes d'ingénierie ces dix dernières années font que le calcul scientifique reste un domaine très évolutif de la recherche appliquée et industrielle. Les outils modernes du calcul scientifique sont de plus en plus utilisés dans l'industrie car il est souhaitable de remplacer au maximum des expérimentations lourdes et coûteuses de prototypes par des tests *in silico*. Le calcul scientifique est la première étape de la numérisation des processus complexes de production, particulièrement lorsque la physique qui décrit ces processus relève de systèmes complexes (par exemple les systèmes multi-échelles).

Pour revenir à l'exemple précédent des véhicules terrestres, le calcul scientifique permet de diminuer le nombre d'essais en soufflerie (sans toutefois le remplacer complètement car l'acquisition de données reste importante) pour étudier le contrôle d'écoulement pour les véhicules terrestres ou les aéronefs, la réduction de traînée des convois de véhicules pour respecter les normes environnementales drastiques imposées aux constructeurs. Un autre exemple concerne la création de matériaux nouveaux particulièrement demandés dans l'industrie aérospatiale, pétrochimique, nucléaire, des énergies renouvelables, du bâtiment. La qualification des propriétés physico-chimiques de certains matériaux est fondamentale pour de nombreuses industries et nécessite la mise place de méthodes numériques performantes pour traiter les problèmes inverses sous-jacents : les matériaux au comportement non-linéaire, composites, homogénéisés, polymères, les formes optimales obtenues par réalisation additive. En plus il permet de faire des prévisions de constructibilité dans des zones submersibles ou inondables. La médecine constitue un troisième exemple tant du point de vue prédictif qu'opérationnel : détection et traitement de cancers, assistance chirurgicale en temps réelle. D'une manière générale, le calcul scientifique intervient dans de nombreuses industries comme l'automobile, l'aérospatiale, l'énergie, l'environnement, l'informatique, l'industrie pharmaceutique, la finance, l'industrie du pneu, la médecine prédictive, la réalité virtuelle, la robotique et même pour industrialiser des méthodes d'intelligence artificielle (par exemple rétro-propagation et gradient).

Le calcul scientifique peut aussi avoir un gros impact sur les politiques publiques. Ainsi, pour valider la problématique du changement climatique, on ne peut se contenter de faire des calculs sans garantir un taux de confiance dans les résultats. Seuls les experts en calcul scientifique appliqué au climat sont capables de garantir à la fois la pertinence des modèles utilisés et la qualité de leurs simulations. Ce type de compétences apparaît très clairement au niveau du GIEC qui associe des scientifiques climatologues avec des gens de la société civile et des politiques, et ce sont les résultats obtenus par le calcul scientifique qui au final ont un impact fort dans les stratégies de lutte contre le réchauffement climatique proposées par les politiques. On peut aussi citer le pilotage de la voiture autonome avec les calculs puissants demandés en temps réel, qui constitue un enjeu sociétal et politique majeur.

-Rôle du titulaire de chaire de calcul scientifique au Cnam :

Le titulaire de chaire devra proposer de nouvelles formations qui correspondront à l'attente des industries consommatrices de calculs issus de la modélisation des systèmes complexes. Il devra remettre en route une formation d'ingénieur en calcul scientifique avec des approches modernes et transverses. Il devra également développer des formations plus en lien avec la recherche en créant ou s'associant à des certificats de compétences/spécialisation et proposer des déclinaisons de ces formations en version ou bien allégée pour en faire des unités d'approches au niveau bac+1 ou 2 ou bien courtes spécifiques à destination de publics professionnels en lien avec CNAM entreprise. Des partenaires industriels comme Peugeot, Plastic Omnium se sont montrés intéressés par cette chaire tant du point de vue recherche que formation, car elles sont et veulent rester à la pointe du développement, et souhaitent conforter l'expérience de leurs collaborateurs par des formations appropriées sur les techniques et les résultats nouveaux. Sur un plan quantitatif, si on prend l'exemple de l'EiCnam avec ses 1000 élèves diplômés annuels, il existe déjà de très nombreux cours de mathématiques assurés par l'EPN6, et on peut estimer qu'il y a 4 diplômes d'ingénieurs liés directement au calcul scientifique avec la délivrance de 400 diplômes annuels où des méthodes de calcul scientifique sont enseignées. Les enseignants de l'EPN6 sont en surcharge horaire forte (plusieurs collègues avec plus de 250 HED supplémentaires), et il y a donc un réel besoin sur le plan pédagogique. Le nouveau PRCM devra bien-sûr revoir les programmes pour les adapter aux besoins actuels de formation dans le domaine.

Le titulaire de la chaire devra aussi développer une activité de diffusion de la culture scientifique et technique en mettant en valeur par exemple l'évolution des capacités de prédictions pour des événements naturels destructeurs, car il est important que le grand public et les médias prennent conscience du rôle important du calcul scientifique au sein de la société, le rapport Torossian-Villani avait d'ailleurs bien souligné l'importance de l'éducation par les mathématiques. Des séminaires grands-publics réguliers sur l'impact des calculs, mais aussi la confiance que l'on peut y porter, la manière de les organiser pour ce faire, le lien avec l'afflux massif de données, et les difficultés conceptuelles des modèles peuvent aider le public à comprendre que la modélisation du vivant, de nos sociétés, ou le développement d'applications industrielles, relèvent d'abord et avant tout d'une connaissance large et ne peut simplement s'appuyer sur des calculs faits hors de tout esprit critique sur des modèles pré-établis (très souvent à partir de systèmes complexes). Il devra expliquer l'importance de l'implémentation des calculs (les bonnes méthodes à utiliser et la quantification des incertitudes) et l'impact des machines sur lesquelles ils sont réalisés (par exemple parallélisme GPU ou CPU en fonction de la modélisation, l'impact de l'apparition des ordinateurs quantiques). Le lien avec l'histoire des sciences et techniques, la machine de Léon Bolley ou le Cray 2 du musée, les formes des avions, tout comme l'apport du pendule de Foucault dans la compréhension des mouvements océaniques pourront servir de base à ce type d'actions.