

# SCIENCES en FUSION

AVANCÉES SCIENTIFIQUES DES  
RECHERCHES EN FUSION PAR  
CONFINEMENT MAGNÉTIQUE

# #4

# *Simulations*

- Simulations d'un système complexe
- Théorie et simulation
- Instabilités macroscopiques en présence de particules énergétiques
- Atteindre l'exascale
- L'enjeu des maillages
- Chaîne de modèles pour l'interaction plasma-paroi
- Diagnostics synthétiques
- Modélisation des scénarios plasma
- En guise de conclusion

# SOMMAIRE

**EDITORIAL** - page 3

Sébastien Candel

**#1** - page 5

**SIMULATION D'UN SYSTÈME COMPLEXE**

Eric Serre & Philippe Ghendrih

**#2** - page 9

**THÉORIE & SIMULATION**

Maxime Lesur & Xavier Garbet

**#3** - page 16

**INSTABILITÉS MACROSCOPIQUES EN PRÉSENCE DE PARTICULES ÉNERGÉTIQUES**

Hinrich Lutjens & Rémi Dumont

**#4** - page 22

**ATTEINDRE L'EXASCALE**

Yanick Sarazin & Virginie Grandgirard

**#5** - page 30

**L'ENJEU DES MAILLAGES**

Hervé Guillard & Guido Huijsmans

**#6** - Page 34

**CHAÎNE DE MODÈLES POUR L'INTERACTION PLASMA-PAROÏ**

Guido Ciraolo & Yannick Marandet

**#7** - page 41

**DIAGNOSTICS SYNTHÉTIQUES**

Didier Vézinet & Guihem Dif-Pradalier & Anna Medvedeva

**#8** - page 47

**MODÉLISATION DES SCÉNARIOS PLASMA**

Clarisse Bourdelle & Gerardo Giruzzi

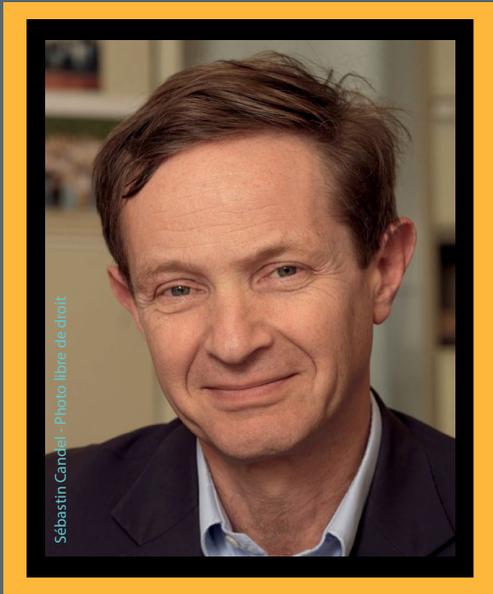
**#9** - page 51

**EN GUISE DE CONCLUSION**

Eric Serre & Philippe Ghendrih

**GLOSSAIRE** - page 53

par Sébastien Candell



La simulation numérique est aujourd'hui partie intégrante des activités de recherche dans tous les domaines scientifiques. Elle est au cœur de grands enjeux sociétaux, elle est aussi un moyen puissant sur le plan technologique et industriel d'amélioration de la compétitivité et de création de richesses. L'évolution récente du calcul haute performance consiste à utiliser un réseau de processeurs (une unité de calcul est appelée **cœur** dans ce type d'architecture) travaillant en parallèle et échangeant des informations nécessaires à l'avancement de la simulation. Les enjeux technologiques pour les supercalculateurs sont à la fois la réduction de leur consommation électrique pour satisfaire aux nouveaux défis environnementaux et l'accroissement de la vitesse et de la bande passante du réseau de communication, car le temps consacré aux communications est perdu pour le calcul, et le nombre de cœurs qui peuvent être mobilisés. C'est le principe du calcul **massivement parallèle** pouvant utiliser plusieurs milliers, voire des centaines de milliers de cœurs. La difficulté pour les scientifiques associée à la recherche de performances optimales est une complexité croissante à la fois dans la programmation et dans le coût en génie logiciel pour s'adapter à chaque nouvelle architec-

ture. Sur le plan pratique les gains scientifiques peuvent être considérables. Ainsi, des simulations nécessitant un million d'heures de calcul sur un processeur unique, donc demandant plus d'un siècle pour être réalisés, peuvent être effectués en deux semaines par calcul parallèle sur 10000 processeurs. Ce qui était inaccessible est désormais faisable mais il faut évidemment que le calcul puisse être parallélisé.

L'augmentation de la puissance de calcul disponible se mesure en nombre d'opérations réalisables par le supercalculateur par seconde, ou FLOPS. Au tournant du XXI<sup>ème</sup> siècle on atteignait presque  $5.10^{12}$  FLOPS, à l'heure actuelle c'est presque  $5.10^{17}$ , de l'ère du **petascale** ( $10^{15}$  FLOPS) on entre dans l'ère de l'**exascale** ( $10^{18}$  FLOPS). Cette croissance exponentielle étend les possibilités de simulation à des domaines scientifiques et technologiques très variés notamment les systèmes complexes, la combustion, les plasmas de fusion nucléaire en **tokamak**, les sciences de l'environnement et du climat, le développement de nouveaux vaccins (comme par exemple ceux qui ont été élaborés pour se protéger du Covid 19), etc. mais elle s'accompagne de nouveaux enjeux et défis, comme la fiabilité de la simulation réalisée, la crédibilité accordée à celle-ci, enfin la compréhension de ses résultats et de ses limites par tous les acteurs, public et décideurs, quand il s'agit d'enjeux sociétaux. Pour les physiciens ces nouvelles possibilités sont autant de nouveaux défis. Quel que soit le domaine de recherche, que ce soit dans mon domaine de prédilection, celui de la combustion ou encore dans celui de la simulation des plasmas en lien avec ITER présentées dans ce numéro de Sciences en Fusion, les difficultés sont considérables et les enjeux de recherche sont très semblables.

Dans mon domaine de recherche, la simulation s'intéresse à la structure et à la dynamique des flammes, à l'allumage, à l'extinction, à la turbulence et aux instabilités, aux couplages avec les modes acoustiques dans des configurations fondamentales ou dans des systèmes proches de configurations industrielles réalistes qu'il s'agit

d'optimiser. Il faut traiter de situations dans lesquelles, l'injection peut être réalisée sous forme de brouillards de gouttelettes, parfois dans des situations transcritiques dans lesquelles la pression dépasse la valeur critique mais la température est inférieure à la température critique. Ce sont par excellence des systèmes fortement exothermiques où la mesure est difficile et met en jeu à la fois des problèmes de physique multi-échelles comme la turbulence, des **cinétiques** complexes impliquant des centaines d'espèces et des milliers de réactions, l'ensemble définissant des problèmes mathématiquement raides. Dans ce contexte, comme dans celui de la physique d'ITER, la simulation est devenue un outil incontournable pour concevoir les expériences, les compléter, les interpréter et faire progresser la recherche.

La complexité des problèmes à traiter dans ce nouvel environnement du calcul haute performance nécessite autour de ces codes de simulation la mise en œuvre d'équipes interdisciplinaire rassemblant des mathématiciens, des informaticiens, des physiciens et des mécaniciens des fluides numériques. Le temps du code de simulation développé par un chercheur au sein d'un laboratoire est révolu. Ces équipes de scientifiques vont devoir s'assurer que le problème est bien posé mathématiquement, proposer des schémas numériques adaptés à la fois aux performances des calculateurs mais aussi à la gamme d'échelles spatiales et temporelles à considérer pour la physique d'intérêt. Cette complexité, ainsi que le nombre très élevé d'instructions réunies dans le code soulèvent la question de la **vérification** : s'assurer que le code est consistant avec les équations à résoudre, que la précision nécessaire est atteinte pour la physique étudiée et l'absence d'erreur de programmation. Se pose aussi le lien avec les expériences, une confrontation qui est au cœur de la physique. Dans le domaine de la fusion, et dans celui de la mécanique des fluides, cette confrontation prend le nom de **validation**. Dans tous les systèmes complexes où la mesure est parcellaire, souvent difficile, possiblement avec des barres d'erreur importantes, la confrontation avec l'expérience est un échange, une

activité complémentaire, entre recherche expérimentale et simulations. Avec l'augmentation de la puissance de calcul, l'information issue des simulations suit la croissance exponentielle de la puissance de calcul. Pour l'étude des systèmes complexes, celle qui vise à comprendre les mécanismes mis en œuvre, comme les instabilités ou la turbulence, il faut sauvegarder le maximum d'information –qui n'est cependant une petite fraction de celle manipulée par la simulation–. Les bases de données qui en résultent sont importantes et l'intelligence artificielle et les données massives deviennent naturellement les nouveaux outils en appui des simulations.

Enfin, pour conclure sur des questions plus épistémologiques, se pose la question de la connaissance générée par la simulation, où se situe-t-elle entre connaissances théoriques et expérimentales ? Pour les simulations utilisant les données extrinsèques, quel est l'impact de petites variations de ces données, ce que l'on appelle la propagation d'incertitude ? Pour des simulations de systèmes complexes, où le chaos est souvent un élément constitutif, quel est la capacité prédictive des simulations ? Jusqu'à quel niveau de détail ? On le voit, la simulation est non seulement un outil puissant mis au service de la recherche, c'est aussi un outil renouvelant la démarche scientifique au service de la connaissance.

#### **Sébastien Candel**

Professeur des universités émérite,  
CentraleSupélec, Université Paris-Saclay.  
Membre et ancien président de l'Académie des sciences.

# SIMULATION D'UN SYSTÈME COMPLEXE

par Eric Serre & Philippe Ghendrih

La simulation prend une part croissante dans la recherche scientifique notamment pour l'étude des systèmes complexes comme les plasmas confinés magnétiquement pour la fusion contrôlée. Dans ces derniers, la difficulté des mesures, la complexité et le coût des expériences incitent à considérer la simulation comme un complément indispensable de l'expérience, voire un moyen pour accélérer la recherche. La construction du **tokamak** ITER, défi exceptionnel pour l'humanité, est aussi un enjeu pour la simulation, notamment pour optimiser l'utilisation de ce réacteur expérimental, maîtriser les risques et maximiser la production scientifique. Le rendez-vous avec ITER, un défi pour la simulation des plasmas de tokamak.





La simulation numérique est un monde fascinant qui s'est développé au rythme des ordinateurs, d'abord dans le cadre militaire, et dès 1953 pour les applications civiles. La simulation est précisée numérique car il existe aussi des simulations analogiques, par exemple l'utilisation de circuits électriques pour reproduire un transport de chaleur. La simulation numérique qui a ouvert la voie en 1953 est celle de Fermi-Pasta-Ulam ([http://www.scholarpedia.org/w/index.php?title=Fermi-Pasta-Ulam\\_nonlinear\\_lattice\\_oscillations&oldid=91257](http://www.scholarpedia.org/w/index.php?title=Fermi-Pasta-Ulam_nonlinear_lattice_oscillations&oldid=91257)).

Elle est emblématique dans la mesure où elle n'a pas donné les résultats attendus, stimulant la recherche depuis cette date. Dans le domaine de la fusion par confinement magnétique les simulations numériques se développent fortement à partir des années 70 et sont marquées au tournant des années 80 par le problème du chaos. Une des applications de référence pour le **chaos**, le « standard map » ou « mapping de Chirikov Taylor » a été développée par Taylor pour étudier l'impact d'une perturbation magnétique dans un tokamak. Les simulations numériques sont aussi utilisées à cette époque pour la conception du tokamak Tore Supra.

## La simulation est devenue un des piliers de la physique des plasmas de fusion

La simulation est devenue un des piliers de la physique au même titre que la théorie et l'expérience. L'expérience peut être considérée comme une organisation de la réalité permettant notamment une reproductibilité et une caractérisation par un ensemble de mesures quantifiant, avec des barres d'erreur, les phénomènes en jeu. La théorie est l'élaboration du corpus de modèles se traduisant dans un système d'hypothèses par des équations et rendant compte des expériences. La simulation enfin prolonge la théorie et complète l'expérience dans l'exploration des solutions aux équations, ces dernières étant discrétisées sur un ensemble fini de points de l'espace et du temps pour être adaptées aux calculs sur ordinateur. On touche ici aux aspects épistémologiques et philosophiques de la démarche scientifique, dont certains ne doivent pas être perdus de vue quand on aborde la simulation. La pratique de la simulation numérique qui est abordée dans ce numéro de Sciences en Fusion est ainsi à l'interface de l'expérience, de la théorie, des mathématiques et de l'informatique. Elle est devenue un élément constitutif dans l'élaboration de la connaissance notamment sous la forme d'expériences numériques, qui comme pour la simulation de Fermi-Pasta-Ulam, peuvent donner des résultats inattendus questionnant aussi bien la théorie que l'expérience. Se pose aussi de manière récurrente la question de la validité du modèle numérique.

## La recherche sur l'auto-organisation des systèmes complexes par la simulation

Les plasmas de la fusion par confinement magnétique constituent

un ensemble complexe mettant en œuvre notamment les physiques décrites par les trois premiers numéros de Sciences en Fusion, la turbulence, la Magnéto-Hydro-Dynamique et l'interaction plasma-paroi. Ces physiques interdépendantes, et complétées par d'autres aspects comme la mesure et le contrôle, constituent la physique du tokamak, celle d'un système complexe. Cette complexité donne un relief important à la simulation numérique. En effet, la mesure dans ces plasmas est parcellaire et souvent difficile à interpréter, la gamme d'échelles spatiale et temporelle est très étendue, le nombre de variables est élevé et les effets non-linéaires et non-locaux nombreux, autant de difficultés pour l'expérience et la théorie. En même temps, on peut dire que les plasmas de tokamak constituent un des systèmes complexes simples. Ce paradoxe tient au fait qu'il constitue un système presque isolé, c'est l'objet du confinement, et que sa description est classique, les particules sont exceptionnellement en régime relativiste et les aspects quantiques sont restreints notamment aux effets associés à la paroi. Enfin, les collisions sont décrites par un modèle classique de champs électromagnétiques de telle sorte que la physique déterminant les interactions au niveau microscopique est d'une complexité connue.

## De la chaîne de modèles au tokamak numérique

L'augmentation de la puissance de calcul et de la performance des codes se traduit par un double mouvement, d'une part la convergence des modélisations vers une **simulation globale**, intégrant tout, on évoque souvent le tokamak numérique, et d'autre part un mouvement opposé de restructuration en une chaîne de modèles où le tokamak numérique est un

élément ultime, mais où la compréhension et la connaissance s'expriment dans tous les niveaux de modélisation de la plus complexe à la plus simple.

## Les ambitions de la simulation des tokamaks pour ITER

L'objet de ce numéro est d'explorer les enjeux et les ambitions de la simulation des tokamaks à l'heure d'ITER, donc au moment où les expériences mettront en œuvre des plasmas en régime de combustion thermonucléaire et où l'enjeu est la maîtrise des plasmas dans un régime qui sera celui des futurs réacteurs. Les expériences nucléaires dans ITER seront également une rupture dans l'histoire de la fusion qui renforce le rôle de la simulation. En effet, si le dimensionnement d'ITER a été réalisé sur une base essentiellement empirique à partir d'un ensemble de tokamaks, les expériences nucléaires seront réalisées avec un dispositif unique, avec un temps expérimental et un nombre d'expériences qui seront limités. Dans ITER, la gamme d'échelles spatiales et temporelles sera plus grande que dans toutes les expériences actuelles et la simulation devra aborder une physique multi-échelle plus étendue et dans des régimes encore inexplorés.

## Préparer et optimiser les expériences dans les régimes encore inexplorés

Un premier rôle des simulations sera donc la préparation et l'optimisation des expériences pour progresser dans la recherche et la performance tout en préservant ce prototype unique des panes ou de vieillissement prématuré de certains sous-systèmes. Les mesures dans ITER, pour la connaissance ou pour l'opération seront complexes, difficiles et seront in-

suffisantes pour permettre une description purement empirique. Les simulations seront donc mobilisées pour interpréter les mesures et les compléter dans le but de réaliser le gain de connaissance escomptée de chaque expérience et en conséquence orienter la stratégie expérimentale. A ce sujet, il est important de noter que la performance des plasmas de fusion est souvent le résultat d'un compromis et de l'existence d'une fenêtre opérationnelle permettant des gains de performance pour certaines propriétés du plasma sans être trop pénalisé par la dégradation d'autres propriétés. C'est un problème typique de la maîtrise des phénomènes complexes. Par ailleurs, la compétition scientifique indispensable à la dynamique de la recherche se fera dans le domaine de la théorie et de la simulation car ITER, son fonctionnement et les mesures, sont l'objet de cette collaboration internationale. Le retour d'expérience pour chaque partenaire dépendra de manière sensible de sa maîtrise des outils de simulation les plus performants. Enfin, la simulation permettra d'explorer la physique des tokamaks quand elle ne sera pas accessible à ITER, comme certains aspects de géométrie, ou des innovations dont la traduction expérimentale dépendra très certainement d'un processus de **validation** par des simulations.

## Les divers aspects de la simulation des plasmas de tokamaks

Le monde de la simulation, l'évolution de ses technologies et de ses pratiques, sont illustrés par la manière dont les différents projets de simulation s'organisent et se préparent pour répondre aux défis scientifiques à l'heure d'ITER. Par de nombreux aspects, les méthodes mises en œuvre se recouvrent. La présentation de la simulation sera distribuée sur les

différents projets, chaque projet développant une facette du métier et de la recherche, les projets se complétant pour dégager une vision globale. On retrouvera donc les physiques et les outils de simulation des numéros précédents mais abordés selon un aspect particulier de la simulation. Des encarts abordent des points plus spécifiques. Avant de rentrer dans le vif de la simulation, l'article **#2 Théorie & Simulation** rappelle les enjeux théoriques sur lesquels les outils de simulation se fondent. L'évolution des processeurs, de l'architecture des calculateurs et en conséquence l'environnement informatique sont une contrainte et un enjeu important dans un contexte de forte compétition pour accéder aux ressources de calcul. Cet enjeu est abordé dans l'article **#3 Instabilités macroscopiques en présence de particules énergétiques** avec le projet de simulations Magnéto-Hydro-Dynamique (MHD) du plasma de cœur avec le code XTOR. En se tournant vers les années qui viennent, le passage à la prochaine génération de Calculateurs de Haute Performance (HPC), appelée **exascale** ( $10^{18}$  opérations par seconde), devra s'accompagner d'une refonte des codes. La préparation en vue de cette transition est l'objet de l'article **#4 Atteindre l'exascale** avec le point de vue de l'équipe du code GYSELA dédié à la physique du transport turbulent avec une description **cinétique** globale du plasma. La confrontation avec l'expérience, notamment avec l'utilisation d'une géométrie magnétique proche des expériences, est présentée avec le projet JOREK, une approche MHD de référence pour l'étude de la stabilité et de la dynamique de la région périphérique du plasma. Les aspects cruciaux de validation et de maillage sont abordés avec ce projet dans l'article **#5 L'enjeu des maillages**.

Dans le cadre de l'interaction plasma-paroi, des aspects plus phénoménologiques sont pris en compte avec aussi une recherche de scénarios innovants intégrant le problème d'interface entre le plasma et la paroi et donc les contraintes technologiques. L'article **#6 chaîne de modèles pour l'interaction plasma-paroi** aborde les problèmes des conditions limites et du traitement des parois ainsi que de la mise en œuvre de chaînes de modèles notamment avec la famille de codes SOLEDGE3X. La mesure, sa physique, les contraintes de sa mise en œuvre fait l'objet de simulation avec des diagnostics synthétiques. Il est rapidement apparu que ces projets de simulations étaient indispensables pour la confrontation des simulations avec l'expérience,

pour avoir une maîtrise de l'information que fournit la mesure et pour développer des diagnostics plus pointus pour le contrôle des plasmas et la compréhension de la physique des plasmas. Cette problématique est l'objet de l'article **#7 Diagnostics synthétiques**. L'utilisation de nouvelles technologies désignées par Intelligence Artificielle est abordée dans l'article **#8 Modélisation des scénarios plasma**, dans le contexte de la modélisation intégrée. Celle-ci propose de faire la synthèse des connaissances théoriques et empiriques dans des outils dédiés

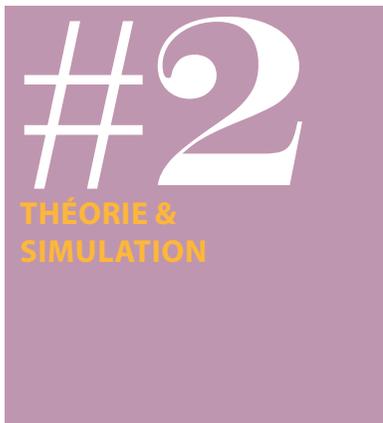
aux scénarios et au contrôle des expériences, soit l'enchaînement des opérations menant d'un gaz à la température ambiante à un plasma en conditions thermonucléaires à 100 millions de degrés. Enfin, un dernier chapitre propose une vue d'ensemble des ambitions de la simulation, les principaux verrous et les perspectives pour les métiers de la simulation. ■

# THÉORIE & SIMULATION

par Maxime Lesur & Xavier Garbet

La physique théorique joue un rôle essentiel en amont et en aval de la simulation numérique. Elle intervient à chacune des étapes majeures de développement d'un outil numérique : conceptualisation, programmation, **vérification** et **validation**. Elle guide l'élaboration des expériences numériques et des modèles réduits qui permettent d'exploiter efficacement un code de simulation. Par bien des aspects, théorie, modélisation et mesures sont indissociables. Enfin la théorie est un outil majeur de pédagogie et de diffusion des connaissances de par sa capacité à hiérarchiser et structurer les résultats de simulations complexes.

# #2



## Pas de simulation sans théorie analytique

Un article sur la théorie peut sembler incongru dans un numéro de Sciences en Fusion consacré aux simulations numériques des plasmas de **tokamak**. A priori et en principe, un résultat de simulation numérique est plus complet et plus précis qu'un résultat de théorie analytique, qui s'appuie sur des hypothèses simplificatrices supplémentaires. Cela peut sembler d'autant plus vrai qu'un plasma de fusion est un système très complexe, chaotique, qui couple non-linéairement de nombreux phénomènes physiques sur une grande gamme d'échelles.

Et pourtant, la physique théorique joue plusieurs rôles essentiels en amont et en aval de la simulation numérique. Par ailleurs, la théorie est un outil majeur de pédagogie et diffusion des connaissances.

## La théorie en amont des simulations

On pourrait résumer le développement d'un code de simulation en quelques étapes majeures : conceptualisation, programmation, vérification et validation. La théorie intervient à chacune de ces étapes.

Niveau de modélisation :

Une première mission de la théorie est d'identifier les "ingrédients" de physique nécessaires pour une

question scientifique donnée. Le but est ensuite de choisir le niveau de modélisation adapté au problème. Le choix se fait parmi une hiérarchie de modèles plus ou moins complets, et de dimensionnalités plus ou moins élevées. Dans le cas des plasmas magnétisés de fusion, un système d'équations décrivant la dynamique de particules chargées couplées aux équations de Maxwell semble suffire à toutes les exigences. Cette démarche s'avère toutefois trop ambitieuse, du fait du grand nombre de particules chargées dans un plasma de tokamak (typiquement  $10^{23}$  dans le futur tokamak international ITER). Une première réduction est statistique, et mène à l'approche **cinétique**, qui vise à décrire les particules (chargées ou pas) d'une espèce donnée par une fonction de distribution en position/vitesse. Une telle fonction de distribution décrit la probabilité de trouver une particule à une position  $(x,y,z)$  et à une vitesse  $(v_x,v_y,v_z)$ , et vit donc dans un espace à 6 dimensions. Décrire la dynamique associée reste hors de portée des calculateurs actuels pour les électrons, et en balbutiement pour les espèces ioniques d'un plasma de tokamak. Pour les plasmas de fusion par confinement magnétique, on peut réduire la dimensionnalité du problème en utilisant un invariant du mouvement (à savoir le moment magnétique associé au mouvement cyclotronique), ce qui revient à négliger, ou filtrer, les fluctuations plus rapides. Cette approche de dimensionnalité 5, appelée **gyrocinétique**, s'avère être un excellent compromis lorsqu'il faut tenir compte des échanges d'énergie entre particules chargées et champ électromagnétique (ou des effets liés à la taille finie du mouvement cyclotronique).

La **figure 1** illustre l'approche gyrocinétique appliquée à l'étude de la turbulence du cœur d'un tokamak. Dans le cas contraire, on peut

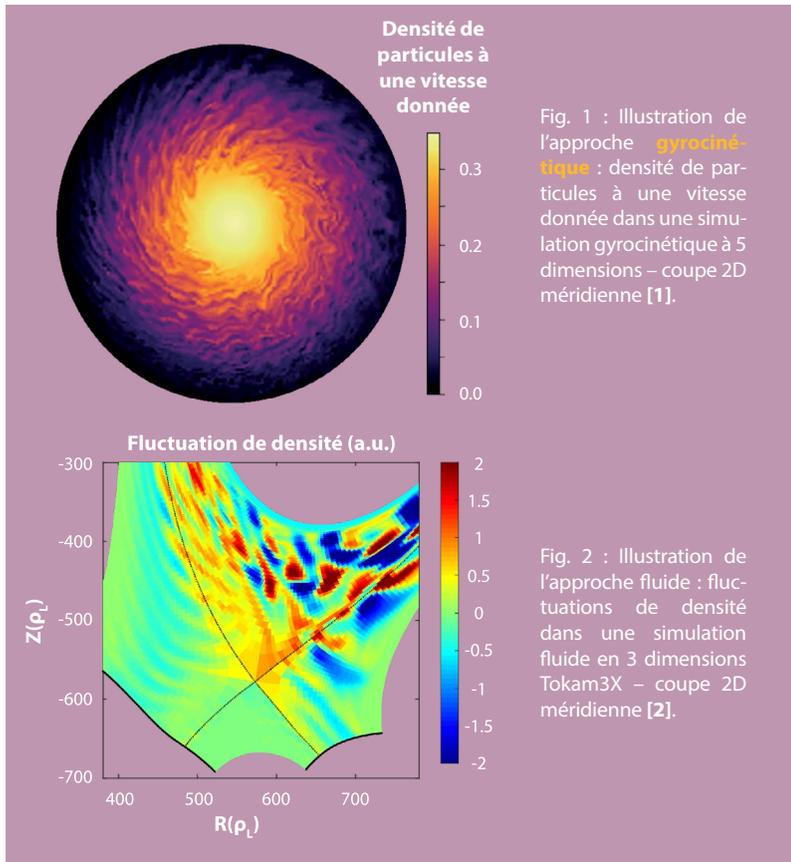
réduire encore le modèle en appliquant une approche type mécanique des fluides, plus exactement celle de la Magnéto-Hydro-Dynamique (MHD), qui tient compte des forces électromagnétiques exercées sur le fluide.

La **figure 2** illustre l'approche fluide appliquée à l'étude de la turbulence de bords d'un tokamak. Un point commun à ces approches est le caractère intrinsèquement non-linéaire des équations à résoudre.

Il est très instructif de réduire davantage le niveau de modélisation et/ou la dimensionnalité. Par exemple, des modèles unidimensionnels de transport turbulent permettent de comprendre l'impact des phénomènes physiques sur les profils radiaux de densité, température, ou vitesse. Lorsque les résonances ondes-particules jouent un rôle dans la dynamique, il faut garder l'information dans l'espace des phases position/vitesse des particules. Le modèle minimal est dans ce cas 2D (une dimension en position, une en vitesse).

La **figure 3** illustre l'étude de la dynamique dans l'espace des phases 2D d'un plasma 1D. Si on pousse la démarche jusqu'au bout, on obtient des modèles de dimension 0 : des **lois d'échelles**. Celles-ci permettent d'exprimer des quantités clefs telles que le **temps de confinement de l'énergie**, à partir, soit de paramètres ajustables dans l'expérience (ex : l'amplitude du champ magnétique), soit de grandeurs physiques sans dimension (ex : le rapport entre le rayon d'un mouvement cyclotronique et la taille du plasma).

Pour ce qui est des particules neutres, présentes majoritairement à l'interface entre plasma et paroi, la difficulté principale tient à la multiplicité des processus physico-chimiques en jeu, tels qu'ionisation et recombinaison, ainsi que les



processus d'érosion, émission de la paroi.

La théorie permet ainsi d'écrire le système d'équations qui sera implémenté dans un code numérique. Cette étape s'avère souvent indissociable de la phase de développement, et en particulier du choix des schémas numériques.

### Conditions limites

Il faut ensuite poser le cadre du système à étudier, et s'assurer que le problème est mathématiquement bien posé. Un aspect central est la nature ouverte ou fermée du système. Même si le système est fermé d'un point de vue du modèle analytique, il est souvent ouvert d'un point de vue numérique du fait d'une perte d'information aux échelles plus fines que le pas du maillage discret.

La question du forçage est liée. En général, la turbulence peut se comporter différemment selon que le

système est perturbé initialement puis laissé libre et fermé, ou laissé ouvert et perturbé continuellement par injection d'énergie. Pour l'étude du confinement magnétique, la question se décline par ailleurs en termes de forçage par le gradient (en imposant par exemple une température donnée au cœur et une autre au bord) ou forçage par le flux (en imposant une source d'énergie mais en laissant libre l'évolution de la température au cœur).

Finalement, le choix d'un schéma numérique dépend aussi de la géométrie et des conditions aux limites du système considéré. La question de l'interaction plasma-paroi est particulièrement délicate du fait de la géométrie complexe des éléments de première paroi, et des processus de physique atomique prégnants dans cette région (cf. **#5 L'enjeu des maillages**).

## Conservation et symétries

Une étape majeure après programmation est la vérification : il s'agit de s'assurer de l'adéquation entre le modèle et les équations effectivement programmées (cf. encart A). Les symétries et conservations du modèle ouvrent une voie importante de vérification. Les lois de conservation (typiquement nombre de particules, moment et énergie) s'avèrent être un outil précieux de test. Une autre méthodologie, plus subtile, fait usage des invariances par symétrie. Les équations régissant un plasma de tokamak sont en effet invariantes sous l'effet de plusieurs opérations de symétrie – les lois de conservation sont d'ailleurs un cas particulier de ces invariances (invariance de Noether). Un exemple est l'invariance de symétrie par rotation autour de l'axe vertical du tokamak (un tore). D'autres sont plus subtiles et portent sur les symétries des écoulements à grande échelle. Certains phénomènes physiques, tels que la génération turbulente d'écoulement, ne sont possibles que par brisure de symétrie, une perte d'invariance des équations traitées sous l'effet d'un écoulement cisailé. Une autre classe d'invariance est l'invariance dimensionnelle qui permet de caractériser le système par des nombres sans dimension (similaires au nombre de Reynolds en hydrodynamique), cf. **#3 Instabilités macroscopiques en présence de particules énergétiques**. Ces approches permettent de mettre au point une classe de tests rigoureux. Elles sont aussi riches en enseignement et apportent une moisson de résultats physiques, qui peuvent être testées par des expériences dédiées.

## La théorie en aval des simulations

Les simulations numériques modernes produisent une grande quantité de données, d'une dimen-

sionnalité qui peut aller jusque 7 lorsqu'il s'agit de simulations cinétiques (3 positions, 3 vitesses, 1 temps), et qui peuvent résulter de nombreux phénomènes couplés non-linéairement. Ces simulations sont très gourmandes en temps de calcul, typiquement des millions d'heures monoprocesseur, soit des jours en temps réel, même pour un code bien parallélisé. La question de la taille des simulations prend une dimension exceptionnelle avec ITER.

Les disparités des échelles spatiales et temporelles conduisent à des puissances de calcul aux limites de ce qui sera disponible au moment de l'entrée en fonctionnement d'ITER, à savoir le calcul **exascale** ( $10^{18}$  opérations par seconde). Cette évolution nécessite une adaptation des codes actuels sur les architectures des supercalculateurs les plus récents, ou à venir – un verrou décisif. Comme indiqué en introduction, cette évolution passe par un effort combiné d'experts en physique des plasmas, mathématiques appliquées, et sciences du numérique. La théorie y jouera plei-

nement son rôle, de par son caractère multi-facette (**#3 Instabilités macroscopiques en présence de particules énergétiques**). A l'instar des données issues des mesures expérimentales, se pose alors la problématique de l'exploitation des résultats. La théorie joue un rôle crucial de guide dans l'élaboration d'un nombre restreint d'expériences numériques clés, dans le choix des paramètres à explorer, ainsi que dans l'élaboration de modèles réduits pour aider à la comparaison simulations/expériences (validation). Enfin la théorie offre des opportunités uniques en matière d'enseignement et diffusion de la connaissance scientifique.

### De l'information à la compréhension

La théorie joue un rôle essentiel dans la phase d'analyse et d'interprétation des résultats. Il est souvent nécessaire d'effectuer un certain nombre d'opérations mathématiques afin d'extraire les quantités clés à partir des données brutes. On peut alors comparer leurs valeurs à celles prédites par

les théories existantes, et étudier l'origine des différences. Pour faire sens des résultats, il est parfois nécessaire de développer un nouveau modèle réduit. C'est ainsi qu'une quantité parfois faramineuse de données peut être distillée en un petit ensemble de faits marquants, impactant, et extrapolables.

### Expériences numériques dédiées

L'avantage des simulations numériques et qu'il est possible de procéder à des expériences numériques qui sont irréalisables sur un dispositif expérimental ou dans la nature. On peut par exemple désactiver ou renforcer artificiellement un terme dans une équation, un processus, ou un objet physique. On peut également étudier des cas limites afin de prendre plus de recul. De cette manière les simulations contribuent à l'amélioration des modèles théoriques, en permettant de tester précisément les hypothèses retenues, et parfois même d'amener à de nouvelles hypothèses pourtant contre-intuitives.

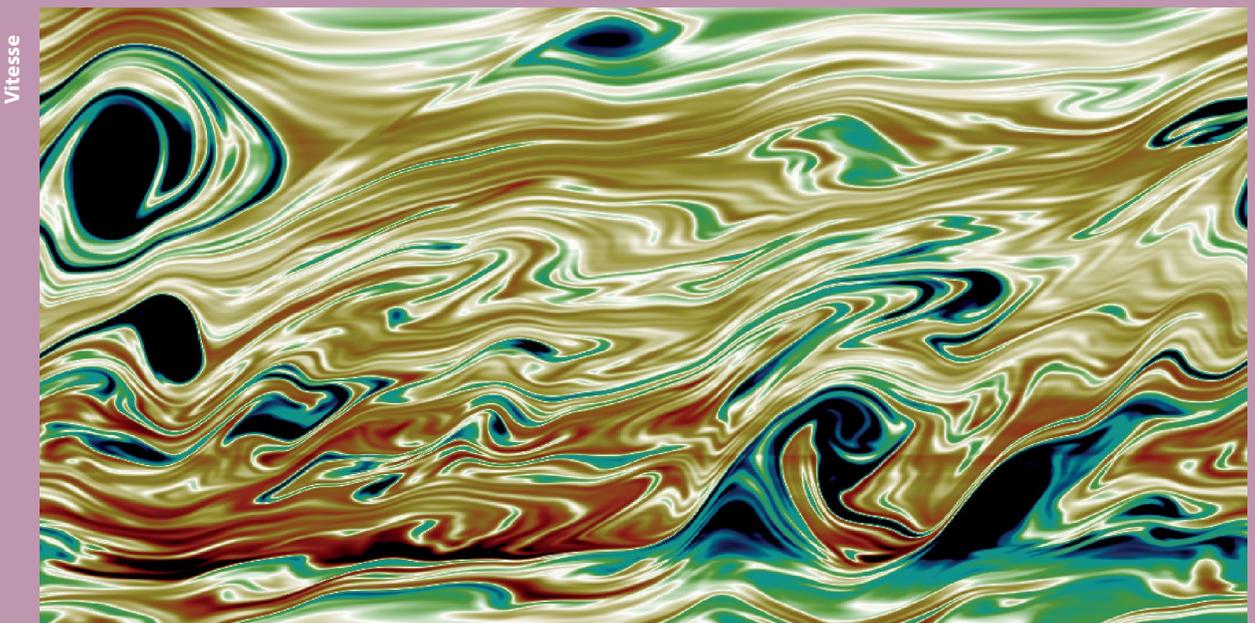


Fig. 3. Illustration de la dynamique dans l'espace des phases 2D (position/vitesse) d'un plasma 1D : fluctuations de la fonction de distribution des électrons [3].

## L'apport de la théorie à la validation

Pour valider un code, il faut comparer les résultats numériques aux observations expérimentales (cf. [#4 Atteindre l'exascale](#) et [#7 Diagnostics synthétiques](#)). Les modèles réduits permettent de simplifier la comparaison aux observations. Pour les modèles plus complets, les développements récents en intelligence artificielle offrent des perspectives prometteuses. Le nombre de paramètres plasma est en effet élevé, et peut être réduit en utilisant l'invariance dimensionnelle des équations. On peut comprendre cette réduction par analogie : le comportement aérodynamique d'un avion est souvent déduit de celui d'une maquette beaucoup plus petite placée dans une soufflerie, grâce à l'invariance dimensionnelle. Une autre technique très utilisée s'appuie sur une réduction de dimensionnalité. Dans un premier temps, la physique petite échelle est étudiée à l'aide de codes gyrocinétiques 5D, ou fluides

3D (voire 2D). Ces simulations ont montré qu'une théorie du transport essentiellement unidimensionnelle (appelée « quasi-linéaire ») donne des flux de matière, moment et chaleur en accord avec les résultats numériques, du moins sous certaines conditions. Cette procédure permet de produire un modèle de transport 1D (la coordonnée radiale dans le tore), plus rapide à utiliser que les modèles à haute dimension, au prix d'une description moins détaillée du plasma. Les résultats peuvent être directement confrontés aux mesures de densité, vitesse et température dans un tokamak. La figure 4 illustre cette approche qui permet de prédire le transport de particules dans un champ électrique donné. Cette approche multi-fidélité, riche d'enseignements, est détaillée dans l'article [#7 Diagnostics synthétiques](#) (voir aussi [Encart E](#)).

### Enseignement, formation et vulgarisation

On peut faire une expérience de pensée où l'on imagine un code de

simulation numérique "complet", qui intégrerait toute la physique en jeu et donnerait un résultat très proche de l'expérience. L'intérêt serait limité par le coût de calcul inévitablement prohibitif. Mais même si l'on ne prend pas le temps de calcul en compte, ces simulations ne pourraient pas être un outil de choix pour l'enseignement, la formation, et la vulgarisation. Cela s'apparenterait à fournir, en guise de cours de géographie, une carte de France de la taille de la France [\[4\]](#). Ce sont les modèles réduits, qui, en isolant un ou quelques processus parmi les nombreux processus couplés, permettent de construire une image mentale compréhensible. La théorie quasi-linéaire citée plus haut en est un bon exemple. Malgré ses limites, elle permet à partir de quelques équations accessibles au niveau master voire licence, de comprendre qualitativement et quantitativement la diffusion de particules à l'origine du transport turbulent ([figure 4](#)).

In fine, la théorie est en pratique indissociable de la simulation numérique et de l'observation. C'est la combinaison des trois qui permet l'avancée des connaissances. ■

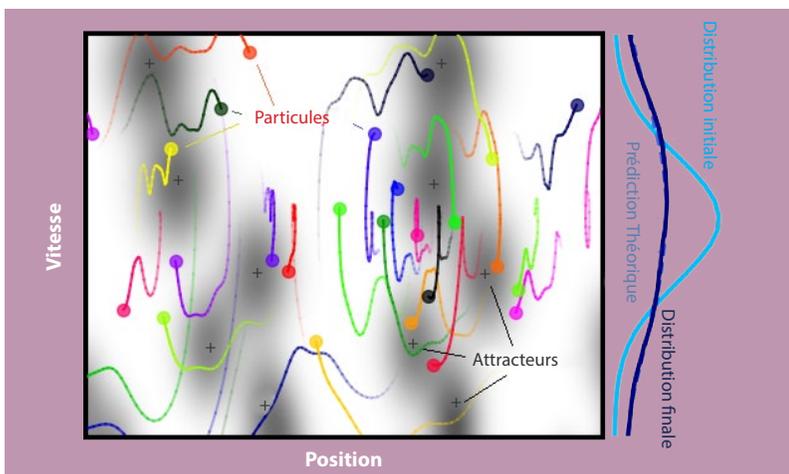


Fig. 4. Illustration de la théorie quasi-linéaire qui permet de comprendre la diffusion de particules dans un champ turbulent. Position et trajectoires dans l'espace des phases  $(x,v)$  de particules chargées, et à droite leur distribution en vitesse [\[5\]](#), qui est ici la direction du transport. La distribution finale est en accord avec la prédiction théorique.

## RÉFÉRENCES

- [1] P. Donnel, Communication privée.
- [2] D. Galassi et al., *Fluids* 2019, 4, 50.
- [3] M. Lesur, P.H. Diamond, Y. Kosuga, *Plasma Phys. Control. Fusion* **56**, 075005 (2014).
- [4] J.L. Borges, *L'auteur et autres textes*, Paris, Gallimard, 3e édition, 199 (1982)
- [5] M. Lesur, *Nonlinear features of instabilities, turbulence and transport in hot plasmas*, HDR Université de Lorraine, tel-02882428v2 (2020).

## Chaos & simulations

La sensibilité aux conditions initiales, propriété fondamentale du chaos, pose en apparence un problème redoutable aux simulations. En effet le chaos est générique dans les systèmes non-linéaires étudiés par les simulations. La propriété fondamentale d'un système chaotique, la sensibilité aux conditions initiales, implique alors qu'une simulation d'un système complexe à partir d'une condition initiale donnée ne peut pas être exacte.

### La simulation d'un système chaotique ne peut pas être exacte

Ce point est illustré par la transformation du boulanger qui consiste à étirer la pâte de taille finie d'un facteur 2 puis la plier. Mathématiquement, cela revient à multiplier par 2 la position selon  $x$  et diviser par 2 la hauteur selon  $y$ . Le pliage, étape non-linéaire de la transformation, est illustré par la figure. Nous nous concentrons sur la direction  $x$  et l'application informatique, donc à un ensemble discret de positions. Pour bénéficier au mieux de la précision numérique nous considérons que  $x$  est entier et pour un processeur de 64 bits un nombre compris entre 0 et  $N = 18\,446\,744\,073\,709\,551\,615 = 2^{64} - 1$ . (<https://www.math93.com/index.php/112-actualites-mathematiques/304-le-probleme-de-l-echiquier-de-sissa>) en binaire une suite de 64 zéros pour 0 et une suite de 64 un pour  $N$ . La transformation du boulanger du point de vue informatique consiste à décaler la série de bits d'un rang vers la gauche ce qui pose un double problème : que faire du bit devenu le bit numéro 65 (à gauche) ? et comment remplir le bit créé à droite ? Pour le bit de gauche, la transformation du boulanger donne la marche à suivre, si le bit est égal à zéro on n'a rien à faire, s'il est égal à un on procède au repliement, donc on soustrait  $2^{64}$  ce qui revient à mettre à zéro le bit numéro 65. L'application de la transformation du boulanger donne une procédure simple, dans tous les cas on tronque le bit 65 pour se ramener à 64 bits. La réponse pour le remplissage du premier bit dépend du réglage choisi pour l'ordinateur, cela peut être systématiquement zéro, systématiquement un, voire zéro ou un selon un tirage proche d'un processus aléatoire. Le plus sage est d'opter pour ce dernier choix dans le paramétrage du calculateur. Ce qu'il est important de noter c'est qu'après 64 itérations, pas mal pour un boulanger mais insignifiant pour un calculateur, la position selon  $x$  est entièrement déterminée par le calculateur selon la règle arbitraire choisie pour l'opération de remplissage du premier bit. Au pied du chiffre si l'on peut dire, cet exemple semble démontrer que toute simulation est très rapidement non significative.

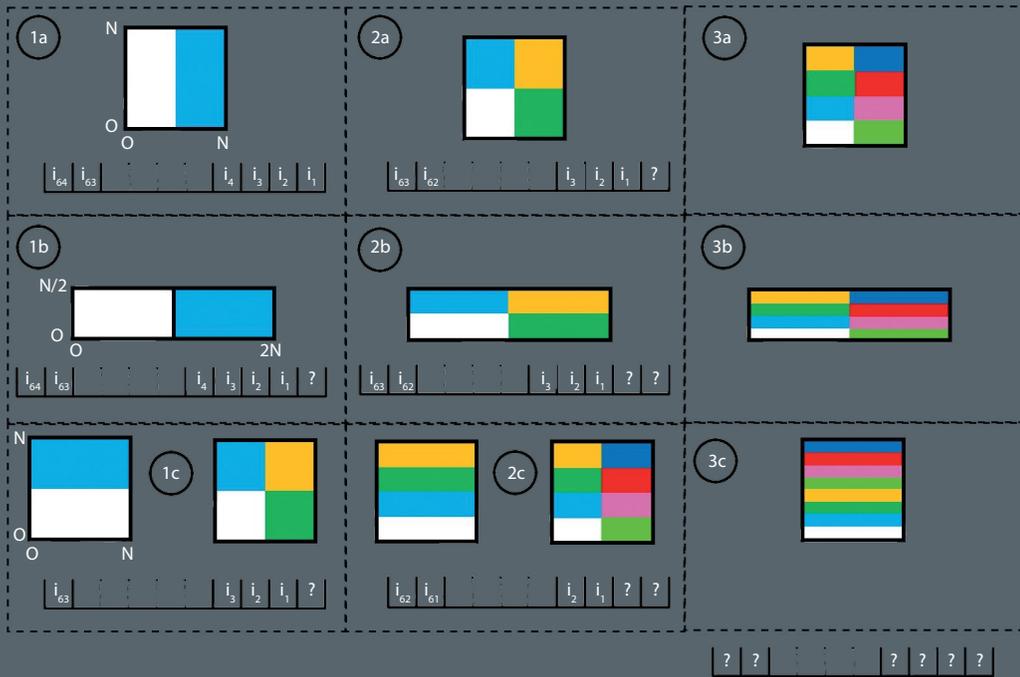
### Toute simulation est très rapidement non significative

Le chaos est une propriété générique des systèmes non-linéaires, ceux justement que l'on cherche à simuler. Des théorèmes mathématiques, Bowen 1970, Bowen 1978 [1], Moser 1987 [2] sauvent la mise dans la plupart des cas (presque toujours !). Ces derniers indiquent qu'à une distance aussi faible que l'on souhaite de la trajectoire de la simulation se trouve une trajectoire exacte du système. On comprend très bien ce résultat dans le cas de la transformation du boulanger pour le remplissage aléatoire du bit situé à droite en disant que ce processus aléatoire est équivalent à dévoiler petit à petit des « détails » d'une condition initiale. Cependant, si le choix de remplissage est de mettre systématiquement zéro, les trajectoires issues de toutes les conditions initiales convergent vers le point fixe zéro, ce qui ne correspond pas à ce que l'on attend d'une transformation du boulanger dans un système continu.

### Une trajectoire simulée infiniment proche d'une trajectoire exacte

En conclusion, une simulation non-linéaire est presque toujours inexacte mais infiniment proche d'une simulation exacte. On peut alors considérer que l'on simule une réalité dont on ne connaît pas très précisément l'état initial. Cette réserve correspond cependant bien aux systèmes décrits par un très grand nombre de degrés de liberté pour lesquels les conditions initiales pour la plupart des variables ne sont pas connues avec précision. D'où la conclusion paradoxale : la simulation d'un système chaotique pour une condition initiale donnée ne peut donc être exacte mais elle dévoile un comportement correct de la physique du système.

# Chaos et simulations (suite)



Transformation du boulanger de haut en bas : 1a étape initiale et position initiale  $x$  en écriture binaire avec 64 bits, 1b première étape étirement de la pâte, décalage de l'écriture de  $x$  d'un bit vers la gauche, 1c deuxième étape pliage de la pâte, on tronque le bit de gauche et modifie les couleurs choisies pour  $x \geq N/2$ . Deuxième colonne, 2a, 2b, 2c deuxième itération du processus de la première colonne. Troisième colonne 3a, 3b, 3c troisième itération et état de  $x$  en écriture binaire après 64 itérations.

## RÉFÉRENCES

[1] <http://www.scholarpedia.org/article/Shadowing>

[2] <https://www.taylorfrancis.com/chapters/edit/10.1201/9781003069515-7/lectures-hamiltonian-systems-jurgen-moser>

# INSTABILITÉS MACROSCOPIQUES EN PRÉSENCE DE PARTICULES RAPIDES

par **Hinrich Lutjens & Rémi Dumont**

L'augmentation de la puissance de calcul des supercalculateurs, résultat direct de l'évolution de l'architecture interne des ordinateurs, a deux conséquences pour les programmes de simulation numérique. Comme illustré ici dans le cas de l'étude des instabilités macroscopiques de la Magnéto-Hydro-Dynamique (MHD), la première conséquence est d'étendre le domaine d'application et la précision des modèles utilisés. Cela conduit à une compréhension plus fine de la physique et à des résultats comparables aux expériences, mais aussi d'aborder de nouveaux sujets de recherche potentiellement importants pour la performance des expériences dans ITER. L'envers de la médaille est la nécessité d'adapter le code en fonction des caractéristiques des nouvelles architectures. Cela va d'une adaptation nécessaire du code, travail qui peut demander plusieurs mois, jusqu'à une refonte complète incluant une modification des schémas numériques. Il s'agit alors d'années d'efforts. La synergie entre capacités de calcul, modèles physiques et algorithmes se traduit ainsi par des avancées dans notre compréhension de la physique des instabilités dans les plasmas au prix d'un travail acharné des équipes pour maintenir, adapter et régénérer en permanence l'outil de simulation.

# #3

# #3

## INSTABILITÉS MACROSCOPIQUES EN PRÉSENCE DE PARTICULES ÉNERGÉTIQUES

Les instabilités macroscopiques jouent un rôle crucial dans les expériences de fusion par confinement magnétique. En premier lieu, elles déterminent la stabilité du plasma (voir **Sciences en Fusion n°2 - Stabilité**) et leur présence est généralement associée à des effets négatifs : au mieux une dégradation des performances du plasma, au pire la fin prématurée de la décharge via le déclenchement d'une disruption.

### Modération ou dégradation du confinement par les instabilités macroscopiques

L'un des exemples d'instabilités les plus connus, identifié très tôt dans le cadre des recherches en matière de physique des **tokamaks**, est le

kink interne [1]. Sa manifestation expérimentale est le phénomène de « **dents de scie** » qui se traduit par des relaxations périodiques de la température et de la densité au cœur de la décharge (voir **Figure 1**). La conséquence de ces relaxations est de limiter la valeur maximale atteinte par la pression et donc les performances fusion du plasma. Dans certains cas, les kinks internes peuvent aussi déclencher non linéairement d'autres instabilités plus néfastes, tels que les modes de déchirement magnétique. Toutefois, dans les machines équipées d'un mur interne constitué d'éléments métalliques, comme le seront selon toute vraisemblance les futures centrales fusion, la situation est plus complexe. En effet, dans ces conditions, les plasmas contiennent des impuretés, parmi lesquelles des éléments lourds provenant de la paroi (par exemple du tungstène) et, dans le cas d'une centrale fusion, de l'hélium refroidi issu des réactions nucléaires deutérium-tritium (les particules alphas de fusion). Maîtriser le taux d'impureté est primordial car en s'accumulant au centre de la décharge, elles dégradent les performances du plasma par rayonnement d'une fraction de la puissance. En redistribuant les particules à chaque re-

laxation, les dents-de-scie ont alors un effet favorable puisqu'elles limitent l'accumulation des impuretés au cœur de la décharge.

### Inclure les effets cinétiques pour comprendre les relaxations internes du plasma

La dynamique des dents de scie est caractérisée par un comportement cyclique. Chaque cycle comprend une phase de rampe, pendant laquelle la température augmente progressivement, suivie d'une phase de saturation et une relaxation très rapide. Au cours de chacune de ces relaxations, on mesure expérimentalement la signature magnétique correspondante au kink interne (voir **figure 1**), dont la conséquence principale est la modification de la topologie du champ magnétique et l'évacuation de la pression du cœur du plasma : le kink interne engendre en déformant le plasma un pincement des **lignes de champ magnétique**. Il se forme alors une nappe de courant, dans le voisinage de laquelle les lignes de champ magnétique vont se briser et se reconnecter sur une échelle de temps intermédiaire entre un temps de propagation parallèle au champ magnétique, appelé temps d'Alfvén, et un

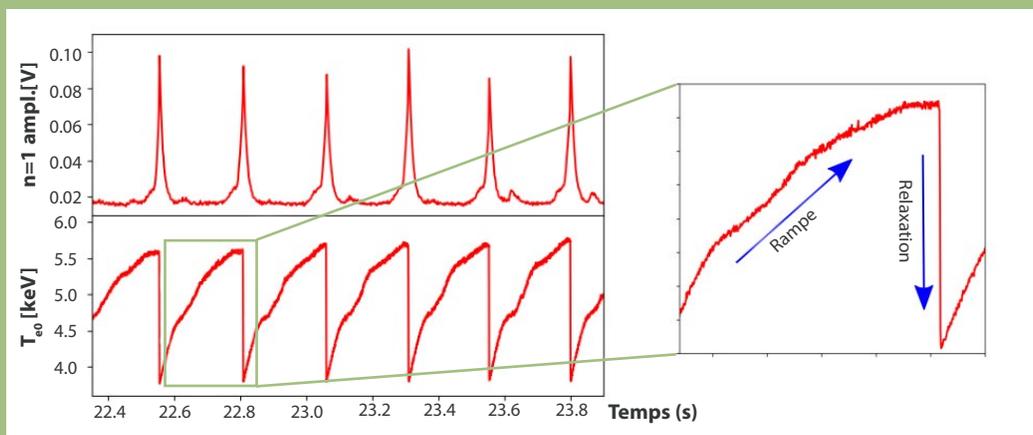


Fig. 1 :Dents de scie dans la décharge plasma 78772 réalisées sur le tokamak JET. A gauche, le panneau supérieur montre l'amplitude du mode kink  $n=1$  ; le panneau inférieur montre l'évolution temporelle de la température électronique centrale. A droite, une dent de scie, caractérisée par une phase de rampe, puis une relaxation rapide.

temps de diffusion transverse associé à la résistivité du plasma. Le modèle le plus simple permettant d'approcher par la simulation cette dynamique est la Magnéto-Hydro-Dynamique (MHD) résistive. Une compréhension fine de cette dynamique nécessite néanmoins un modèle plus détaillé, incluant effets bi-fluides et **cinétiques**. On traite alors les électrons et les ions comme deux fluides et les particules énergétiques, pour lesquelles l'information relative à la vitesse est importante, de manière cinétique.

### Des instabilités macroscopiques générées par les ions énergétiques

En présence d'ions énergétiques (i.e. des ions dont la vitesse est significativement plus élevée que la vitesse moyenne des ions de la décharge), la période des dents de scie, en d'autres termes le délai séparant deux relaxations successives, augmente. Ce phénomène est appelé stabilisation des dents de scie. Mais lorsque l'énergie totale caractérisant les ions énergétiques augmente encore davantage, une autre instabilité, appelée **fishbone**, apparaît et devient dominante. Expérimentalement ce phénomène se manifeste par bouffées successives de pertes de particules rapides, généralement observées au cours des rampes de dent-de-scie. Le nom « fishbone » provient du fait que la trace temporelle de la perturbation du champ magnétique évoque celle d'une arête de poisson. L'un de ses effets est de déplacer les ions énergétiques qui lui ont donné naissance du cœur vers l'extérieur de la décharge, avec potentiellement une baisse des performances plasma [2]. Dans les tokamaks actuels tels que WEST ou JET, l'observation des fishbones s'accompagne d'effets généralement modérés sur les performances plasma, en

partie car la pression partielle des ions énergétiques reste modérée. Mais dans un tokamak tel qu'ITER, dans lequel les particules alpha énergétiques produites par les réactions de fusion sont un élément essentiel pour le chauffage du plasma en combustion, la présence de dents-de scie ou de fishbones aura des conséquences sur l'évolution et sur les performances de la décharge. Prédire leur impact dans les machines futures nécessite donc de simuler numériquement ces instabilités aussi précisément que possible.

La simulation numérique du kink interne et du fishbone constitue ainsi une bonne illustration de l'évolution dans le temps de la compréhension de plus en plus fine de la physique en jeu par des simulations numériques, en permanence à la limite des capacités de calcul haute performance à disposition.

### Modéliser la dynamique des instabilités macroscopiques

Modéliser le kink interne et ses conséquences sur le plasma nécessite un code de simulation capable à minima de résoudre les équations (fluides) de la MHD résistive en incluant tous les effets tridimensionnels. Un élément clé dans la dynamique de ces instabilités est en effet la courbure toroïdale des lignes de champ magnétique [3]. Il existe deux grandes classes de codes pour simuler ces instabilités : les codes à valeurs propres qui identifient les instabilités potentiellement présentes dans le système via le calcul de leur fonction propre, fréquence et taux d'amortissement. Ils sont généralement assez peu demandeurs en ressources de calcul mais ne peuvent que fournir des informations sur la stabilité linéaire du système : pour un plasma donné, ils permettent d'établir le spectre linéaire et donc les fenêtres de

stabilité en utilisant généralement une **méthode variationnelle** pour déterminer la solution. Mais ils ne permettent pas de décrire l'évolution temporelle des modes, ni leurs interactions mutuelles. La seconde classe est constituée des codes à conditions initiales. Ils modélisent l'évolution conjointe de l'équilibre plasma et d'un ensemble de modes, y compris leurs interactions dans le temps. Ils permettent donc de simuler l'évolution non-linéaire du système, par exemple la dynamique de saturation des instabilités ou la déstabilisation non linéaire de modes linéairement stables (i.e. stables avec un code à valeurs propres). Par comparaison aux codes à valeurs propres, les codes à conditions initiales engendrent évidemment un coût numérique et une complexité algorithmique nettement plus élevées.

### Les premières simulations aux limites de la puissance de calcul disponible

Le développement du code XTOR a débuté dans les années 1980 avec pour but de simuler les principales caractéristiques du kink interne, à commencer par son évolution temporelle et sa saturation [4]. Ce code MHD à valeur initiale avait à l'origine pour objet de résoudre les équations de la MHD résistive, en se focalisant dès le départ sur la non-linéarité du phénomène. Toutefois, à cette époque, les capacités des calculateurs imposaient des contraintes fortes. En effet, la MHD dans les tokamaks implique naturellement des échelles temporelles très différentes, qui rendent un schéma d'avancée temporelle explicite inefficace. Le schéma d'avancée temporelle développé pour XTOR était une combinaison d'une **méthode semi-implicite** et d'un algorithme appelé « leap-frog », conçu pour amortir de manière sélective les modes rapides dits d'Alfvén compressionnels, que l'on peut ignorer sans mo

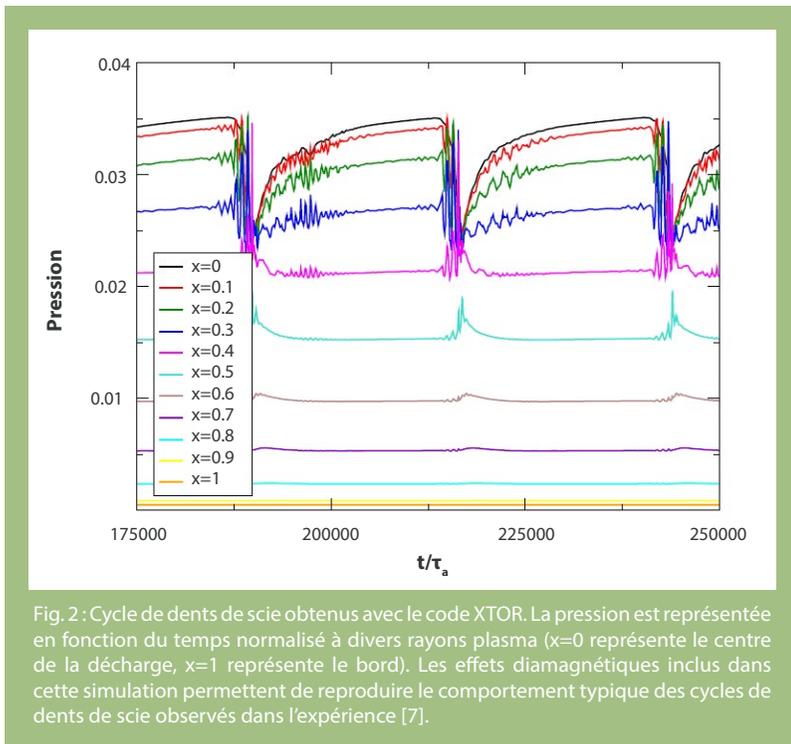


Fig. 2 : Cycle de dents de scie obtenus avec le code XTOR. La pression est représentée en fonction du temps normalisé à divers rayons plasma ( $x=0$  représente le centre de la décharge,  $x=1$  représente le bord). Les effets diamagnétiques inclus dans cette simulation permettent de reproduire le comportement typique des cycles de dents de scie observés dans l'expérience [7].

difier la dynamique des modes lents d'intérêt, les modes d'Alfvén de cisaillement, en particulier le kink interne, et les ondes sonores. Grâce à cet algorithme, les premières simulations produites avec XTOR ont permis de reproduire la dynamique non-linéaire du kink. Malheureusement, les temps caractéristiques obtenus par le code ne correspondaient pas aux observations expérimentales. Ainsi, le temps de **reconnexion magnétique** pendant la phase non linéaire du kink interne, était dix fois trop long. En outre, les simulations étaient limitées à la phase de relaxation d'une dent de scie car les besoins du code en termes de ressources numériques pour reproduire un cycle complet étaient alors hors de portée.

### Adapter le code aux impératifs de la simulation et à l'évolution des supercalculateurs

A la fin des années 1990, les progrès des machines de calcul ont permis de prendre en compte davantage d'éléments physiques dans la

description. Ainsi, les décharges réalisées dans les machines de fusion en prévision de l'opération de futurs réacteurs (dont ITER) étant caractérisées par une forme non circulaire, XTOR a inclus cette possibilité via son couplage à un code qui permet de calculer un équilibre magnétique réaliste [5], étendant également le domaine des pressions plasma accessibles. Par ailleurs, il est apparu indispensable de prendre en compte le fait que le transport de l'énergie dans le tokamak est intrinsèquement anisotrope (dans les conditions typiques d'une décharge sur un tokamak actuel, la diffusivité thermique dans la direction parallèle aux lignes de champ magnétique est de l'ordre de  $\sim 10^8$  la diffusivité perpendiculaire). Grâce à ces améliorations, ainsi qu'à l'augmentation des performances des machines de calcul d'alors (NEC-SX5 et 6), XTOR a permis de reproduire le comportement cyclique caractéristique du kink interne, sans toutefois remédier aux problèmes des différences entre temps caractéristiques observés expérimentale-

ment et simulés. Il demeurerait donc toujours impropre de qualifier le phénomène simulé avec XTOR de dents de scie.

Pendant les années 2000-2010, XTOR a été étendu en incluant quelques effets bi-fluides, en particulier les effets induits par l'existence d'un gradient de pression dans un champ magnétique appelés effets diamagnétiques ioniques et électroniques. Ces effets physiques supplémentaires étaient difficiles à traiter avec le schéma semi-implicite de XTOR [4], conçu pour la MHD résistive. L'évolution de la puissance de calcul des calculateurs a permis une évolution importante de l'algorithme du code, passant d'un schéma semi-implicite à un schéma complètement **implicite** et itératif [6]. Cet algorithme rendait également plus abordable, d'un point de vue des développements numériques, toute généralisation du modèle avec des effets dépassant la MHD.

### La dynamique des relaxations internes enfin retrouvée par les simulations avec XTOR

Avec l'inclusion des effets diamagnétiques aussi bien ionique qu'électroniques, le code a permis pour la première fois de reproduire des cycles de dents-de scie tels que ceux observés dans les expériences, i.e. une relaxation beaucoup plus rapide que la phase de rampe. Les premiers ont un effet stabilisant sur le kink, ce qui retarde son déclenchement et allonge la phase de rampe. Les seconds accélèrent la dynamique du crash, entre autres le processus de **reconnexion magnétique**. Ces simulations de cycles de dent de scie qualitativement réalistes constituaient une première mondiale [7] (figure 2). Les évolutions du code XTOR ont notamment permis d'étudier des phénomènes devenus cruciaux à mesure que

l'opération sur les machines à murs métalliques se généralisait. Par exemple, l'évolution de la densité d'impuretés influencée par la présence des instabilités MHD a été calculée, et a permis d'analyser en détail le comportement des impuretés en présence de dents de scie [8].

### Simulation des particules énergétiques et couplées aux instabilités macroscopiques

Enfin, comme décrit précédemment, les ions énergétiques jouent un rôle grandissant dans les expériences de fusion actuelles, et la présence des particules alpha dans une centrale fusion va encore renforcer ce rôle à l'avenir. La difficulté est que ces particules énergétiques dans un plasma de tokamak ne sont pas à l'équilibre thermique et ne peuvent donc pas être décrites par un modèle fluide comme la MHD : elles doivent donc faire l'objet d'un traitement cinétique. Un module cinétique Particle-In-Cell (PIC) a donc été développé pour XTOR à partir de 2008 pour prendre en compte les effets cinétiques de populations choisies d'ions. Le délicat couplage entre équations MHD et équations cinétiques a nécessité le développement d'un algorithme particulier. Ce travail a demandé un gros effort d'adaptation sur ordinateur **massivement parallèle**, avec des améliorations toujours en cours.

Cette nouvelle version de XTOR a fait l'objet d'une **vérification** très poussée, en comparant des résultats de simulations à ceux de modèles analytiques asymptotiques, qui prédisent la phase linéaire d'évolution des instabilités. Les simulations effectuées ont permis de retrouver les deux effets principaux attendus : la stabilisation des dents de scie en présence d'ions énergétiques, et la déstabilisation des modes fishbones à mesure que la pression partielle de ces ions augmente [9]. Ces travaux se poursuivent à l'heure actuelle. Ainsi, s'il était d'usage d'imposer une distribution initiale pour les particules énergétiques, les versions les plus récentes du code incluent une source d'ions. Comme dans l'expérience, une telle source permet d'injecter les particules énergétiques dans le système, mais nécessite l'inclusion de **collisions coulombiennes** réalistes pour décrire leur freinage par les espèces thermiques, et donc l'évolution réaliste de leur distribution au cours du temps. Par ailleurs, d'autres types d'instabilités que le kink interne sont maintenant à l'étude, étendant considérablement le champ de recherches accessible avec le code XTOR.

### Evolution, adaptation et métamorphoses des codes de calcul haute performance

Comme illustré par l'évolution du code XTOR au cours du temps, le développement d'un code de calcul est un processus non linéaire. D'abord, son adaptation à diverses machines de calcul nécessite des portages réguliers, et des révisions partielles ou complètes de la structure. Par ailleurs, afin de s'adapter aux progrès des expériences de fusion et aux modifications structurelles des réacteurs, il est nécessaire d'incorporer de nouveaux ingrédients physiques à la description, moyennant un certain coût numérique. Par conséquent, l'état d'un code à un moment donné résulte d'un aller-retour permanent entre les capacités des calculateurs d'une part et le nombre et la complexité des phénomènes physiques que l'on souhaite y inclure d'autre part. XTOR, comme tout autre code de calcul pérenne, i.e. dont la longévité excède largement celle d'une architecture de calcul donnée, désigne en réalité un objet relativement protéiforme, qui doit s'adapter aux besoins de la physique à mesure qu'elle progresse, et aux caractéristiques des calculateurs sur lesquels il est exploité. ■

## RÉFÉRENCES

- [1] S. von Goeler, W. Stodiek, and N. Sauthoff, *Phys. Rev. Lett.*, **33**, 1201 (1974)
- [2] K. Mc Guire et al., *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 891 (1983)
- [3] M.N. Bussac et al., *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1638 (1975)
- [4] K. Lerbinger, J-F. Luciani, J. Comp, *Phys.*, **97**, 444 (1990)
- [5] H. Lütjens et al., *Comp. Phys. Comm.*, **97**, 219 (1996)
- [6] H. Lütjens and J.-F. Luciani, *J. Comput, Phys.*, **229**, 8130 (2010)
- [7] F. D. Halpern et al., *Phys. Plasmas*, **18**, 102801 (2011)
- [8] T. Nicolas et al., *Phys. Plasmas*, **19**, 112305 (2012)
- [9] G. Brochard et al., *Nucl. Fusion*, **60**, 126019 (2020)

# La vérification des simulations, une nouvelle façon de faire un PoPe

## La vérification est un enjeu primordial

Vérifier que l'on résout bien les équations que l'on a retenues, s'assurer de la précision avec laquelle cette résolution est effectuée sont des étapes indispensables compte tenu des moyens alloués aux simulations de haute performance. La vérification des codes de simulation numérique est ainsi devenue un enjeu primordial mais aussi un problème qui est moins bien posé qu'il n'en a l'air. Alors que les limites d'un modèle, c'est à dire les erreurs de modélisation, sont tout à fait intégrées par les physiciens, les limites d'un code de simulation, et donc les erreurs numériques, sont souvent sous estimées car mal mesurées. Avec le développement de la simulation, la complexité croissante des méthodes mathématiques et informatiques, les codes sont de plus en plus souvent un assemblage de différentes contributions qui demandent aujourd'hui une réponse plus « formelle » et globale. Malheureusement, l'expérience montre que l'on commet beaucoup plus d'erreurs lors de la vérification que lors de l'écriture du code (Cette remarque vaut hélas pour tous les efforts de vérification.) Une « preuve » de vérification est souvent donnée en utilisant la méthode dite de solutions manufacturées (Method of Manufactured Solution ou MMS) qui introduit un opérateur souvent complexe dans le solveur afin de faire converger la simulation vers une solution cible. Cette méthode élégante pose plusieurs problèmes. La MMS demande une modification spécifique du code, et la vérification n'est donc pas celle de la version de production. La deuxième difficulté tient au choix a priori de la solution cible et au fait qu'elle sera bien représentative ou non de l'ensemble des conditions d'utilisation du code en phase de production. Ce problème est réel car chaque modification du code oblige à reprendre également la vérification par MMS.

## La méthode Pope de vérification systématique des simulations

La méthode PoPe pour « Projection on Proper elements » vise à vérifier le code de façon systématique, notamment en vérifiant chaque simulation pendant la phase de production. C'est une méthode inspirée du Big Data. Elle demande seulement des sauvegardes spécifiques des quantités calculées par le code afin de reconstruire les solutions et les équations effectivement résolues par le code. Lors de cette étape de reconstruction, le code est décomposé en parties élémentaires, plus facilement vérifiables notamment avec des solutions analytiques, en faisant appel à des schémas d'ordre plus élevé que ceux du code. Cette reconstruction de haute qualité numérique, qui n'a pas besoin d'être faite à chaque pas de la simulation, permet de comparer un pas d'intégration de haute qualité, donc de référence, à celui réalisé par le code pour un surcout de calcul de l'ordre du pourcent. Pour l'essentiel, la vérification est faite dans le code de reconstruction qui est indépendant. Le code vérifié n'est que marginalement modifié, seulement pour mettre en place les sauvegardes nécessaires à la procédure de vérification.

## Définir un critère de qualité pour chaque simulation

La vérification de chaque simulation produite ouvre la voie à la définition d'un critère estimant le degré de qualité numérique réalisé. La méthode PoPe offre d'autres possibilités d'analyse de la simulation, par exemple en identifiant les parties qui pèsent le plus fortement dans l'erreur. Elle permet aussi d'analyser l'équilibre et le rôle des différents termes du modèle, participant ainsi à l'interprétation physique de ce dernier. C'est donc un outil de vérification qui peut également guider l'amélioration des codes, déterminer les limites intrinsèques de la simulation et qui donne des éléments pour quantifier la hiérarchie des phénomènes physiques mis en œuvre aux différents temps de la simulation. La méthode PoPe a été inventée lors d'une thèse à l'IRFM.

## RÉFÉRENCES

**Thomas Cartier-Michaud**, thèse Aix-Marseille Université 2015 "Vérification de Codes et Réduction de Modèles : Application au Transport dans les Plasmas Turbulents", <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01252592>

**T. Cartier-Michaud, D. Galassi, P. Ghendrih, P. Tamain, F. Schwander, E. Serre**, "A posteriori error estimate in fluid simulations of turbulent edge plasmas for magnetic fusion in tokamak using the data mining iPoPe method", *Physics of Plasmas*, **27**, 052507 (2020)

# ATTEINDRE L'EXASCALE

par Yanick Sarazin & Virginie Grandgirard

Le confinement magnétique des plasmas de fusion est limité par la turbulence. Dans les régions les plus chaudes, le transport de chaleur induit par cette **turbulence plasma** dégrade le confinement et la performance fusion. Les hypothèses simplificatrices des simulations actuelles laissent des zones d'ombre dans notre compréhension. Les lever pour fiabiliser nos prédictions, notamment pour ITER, requiert de passer des supercalculateurs **petascale** ( $> 10^{15}$  opérations par seconde) à ceux de prochaine génération dans le domaine de l'**exascale** ( $> 10^{18}$  opérations par seconde). Cette transformation technologique s'accompagne d'un changement d'architecture radical du calculateur. Orchestrer le travail en parallèle et la communication de centaines de milliers – voire de millions – de cœurs de calcul est un art en soi où le co-développement des codes de calcul par les physiciens, numériciens et experts HPC (calcul haute performance) est indispensable. Le code GYSELA de simulation premier principe de la turbulence plasma aide à cette transition en servant notamment de code test pour qualifier les nouveaux calculateurs HPC.

# #4



## Une prédiction fiable du transport dans les plasmas de fusion

A performance fixée en termes de puissance fusion, le dimensionnement des **tokamaks** notamment le volume du et l'intensité du champ magnétique, repose sur notre estimation du **temps de confinement de l'énergie**  $\tau_E$  du plasma. Ce paramètre clé qui mesure le pouvoir isolant de la configuration magnétique résulte de processus complexes (Sciences en Fusion N°1, Turbulence). Pour ITER et son successeur **DEMO**, des **lois d'échelles** empiriques sont utilisées pour estimer ce temps.

Synthétisant nos connaissances actuelles à partir de résultats de différents tokamaks dans le monde, ces lois présentent néanmoins des incertitudes : la dispersion intrinsèque des points expérimentaux, mais aussi la possibilité de paramètres de contrôle non encore identifiés, ou encore de possibles corrélations entre des paramètres physiques supposés indépendants dans les expériences retenues.

L'utilisation de ces lois d'échelle pour une extrapolation se traduit ainsi de manière attendue par une incertitude sur le temps de vie de l'énergie, mais aussi une incertitude nettement plus grande quant à la performance sur la puissance fusion.

L'enjeu de simulations "1ers principes", qui résolvent les équations fondamentales de la physique avec un minimum de paramètres libres, vise précisément à proposer une prédiction fiable du transport à l'échelle des réacteurs par la compréhension de ses mécanismes et de son possible contrôle.

L'approche **gyrocinétique** en fait partie [Sciences en Fusion N°1, Turbulence]. Elle est l'intermédiaire pertinent entre d'une part le suivi de chaque particule du plasma via l'équation de Newton qui ne saurait être pertinente, et d'autre part la description du plasma comme un fluide ce qui présuppose un équilibre thermodynamique local. Dans une description **cinétique**, la **distribution** en vitesse des particules est prise en compte et le problème se pose alors dans un espace de 6 dimensions. La distribution de particules peut s'écarter notamment des distributions Maxwelliennes qui décrivent l'équilibre thermodynamique local. En utilisant une symétrie imposée par le champ magnétique, l'approche gyrocinétique opère dans un espace des phases à 5 dimensions (3 de position, 2 de vitesse). L'étude du temps de confinement de l'énergie dans le plasma, et de fait l'étude de la **turbulence plasma**, doit recourir au calcul haute performance (HPC), jusqu'à l'**exascale** pour des simulations de plasmas de la taille d'ITER et au-delà, comme nous le détaillerons par la suite.

## Comprendre et prédire l'auto-organisation du transport turbulent dans ITER

Pour que les réactions de fusion se produisent, le plasma doit atteindre quelque 150 millions de degrés (ou 15-20 keV si on mesure l'énergie thermique). Pour maintenir le plasma à cette température à moindre coût, il faut que les pertes d'énergie soient faibles. Elles em-

pruntent deux voies : le rayonnement – essentiellement localisé en périphérie froide du plasma à moins que des impuretés lourdes pénètrent jusqu'au cœur du tore, et le transport d'énergie – convectif ou conductif selon qu'il s'accompagne ou non de transport de matière.

Le transport de chaleur, donc sans transport de matière, est principalement dû à la turbulence qui se développe à petite échelle, échelle microscopique correspondant à quelques rayons de Larmor ioniques (quelques millimètres dans les plasmas chauds d'ITER). Cette turbulence extrait son énergie des forts gradients inhérents aux plasmas de tokamaks, systèmes ouverts intrinsèquement hors équilibre thermodynamique. Prédire le temps de confinement de l'énergie requiert dès lors de résoudre des échelles spatio-temporelles de la turbulence à celles macroscopiques du tokamak. C'est en particulier aux échelles intermédiaires que se développent l'auto-organisation de la turbulence – via les écoulements à grande échelle – et que les processus collisionnels deviennent significatifs. Les collisions entre particules ne jouent qu'un rôle marginal pour transporter la chaleur, mais leur prise en compte est néanmoins cruciale car elles contrôlent entre autres l'amortissement des écoulements à grande échelle, le poids respectif de mécanismes de micro-instabilités et le transport des impuretés.

Traduite en langage numérique, la large gamme d'échelles spatio-temporelles impose un nombre typique de points de grille du maillage 5D ainsi que le nombre d'itérations nécessaires pour que le système atteigne un état d'équilibre statistique et décrive les mécanismes en œuvre qui régulent cet équilibre.

## L'auto-organisation du transport turbulent détermine la performance énergétique de la fusion

Le gain ou facteur de qualité qui détermine la performance énergétique du réacteur croît non-linéairement avec  $\tau_E$ . Trouver des voies pour réduire la turbulence et le transport associé est dès lors l'un des enjeux des simulations. L'un des mécanismes clés pour y parvenir consiste à décorrélérer les cellules de convection turbulentes en les plongeant dans une rotation différentielle. La difficulté tient à la multiplicité des mécanismes susceptibles de générer de tels écoulements cisailés, souvent assimilés au champ électrique radial par le jeu des vitesses de dérive. La turbulence elle-même contribue à ces écoulements par un processus de type proie (turbulence) – prédateur (écoulement). La région périphérique – en contact avec les lignes de champ qui interceptent des éléments de paroi et appelée "scrape-off layer" ou SOL – est également le lieu privilégié du développement de ce champ électrique, du fait notamment de la polarisation du plasma en présence de la paroi (gaine électrostatique) ou lors de l'excursion transverse du mouvement cyclotronique. Le caractère multi-échelles de cette auto-organisation turbulence-écoulements rend caduque une description numérique purement locale du plasma seule une approche globale permet d'appréhender ces interactions multi-échelles et d'estimer leur rôle et leur poids.

Comment accéder aux régimes à confinement amélioré et les maintenir, qu'ils soient liés à une baisse locale – régimes à barrières de transport tel le mode H (un des scénarios de "High confinement" de référence pour ITER, découverte fortuite dans le tokamak ASDEX en 1984, par opposition au régime standard de "Low confinement") –

ou globale (obtenue par exemple dans les configurations avec triangularité négative) du niveau de transport turbulent ? Quels en sont les mécanismes dominants ? Peut-on les contrôler, au moins partiellement, à moindre coût énergétique ? Telles sont les principales questions qui se posent.

## Un enjeu physique et numérique : inclure la dynamique des électrons

La mise en évidence de processus multi-échelles a connu récemment des développements majeurs. D'une part en direction de la turbulence à petite échelle portée par les électrons, et d'autre part vers les structures **mésoscopiques** dessinées par les écoulements cisailés auto-générés. Par ailleurs, le bord du plasma s'est révélé être bien plus qu'une simple condition aux limites pour le confinement du plasma de cœur, mais un réservoir (source ou puits) d'énergie dont l'influence s'étend bien au-delà de la longueur de corrélation de la turbulence. Dans tous les cas, la dynamique et l'amplitude du transport turbulent sont grandement modifiées selon que ces interactions sont ou non prises en compte.

La conséquence est un accroissement considérable des besoins en ressources numériques. Les électrons ont un rayon de Larmor environ 60 fois plus petit que celui des ions deutérium (racine carrée du rapport de masse :  $(m_p/m_e)^{1/2} \sim 60$ ) et une vitesse 60 fois plus grande à température identique. Cela se traduit par une augmentation du nombre de points de grille d'un facteur  $\sim 60 \times 60$  (les 2 directions transverses) et du nombre d'itérations d'environ 60. Du cœur chaud au bord froid, la température varie de 3 à 4 ordres de grandeur, une gageure pour une grille en vitesses qui devrait s'adapter aux largeurs des fonctions de distribution va-

riant comme la racine carrée de cette température. Une alternative à l'utilisation d'une **discretisation** fine sur tout l'espace, coûteuse en mémoire et temps de calcul, consiste à décomposer le volume de l'espace des phases 5D en sous-parties ayant des maillages de résolutions différentes. La gestion des interfaces entre sous-domaines est un point délicat de cette approche, de même qu'assurer sa bonne **scalabilité**.

## Les enjeux de la simulation du transport turbulent pour ITER et DEMO

Outre le grand volume d'ITER, coûteux à discrétiser et requérant le traitement d'un jeu encore plus gros de données, ses plasmas s'ouvrent également à une physique plus riche que ceux des machines actuelles.

Dans ses décharges performantes en deutérium-tritium, deux tiers du chauffage proviendra des réactions de fusion elles-mêmes. Ce régime d'auto-chauffage, celui des plasmas en combustion, rendra d'autant plus nécessaire des simulations sur plusieurs temps de confinement, seules susceptibles de rendre compte de l'auto-organisation dynamique entre turbulence et gradients moyens. Dans cet esprit, les particules alpha devront recevoir un traitement spécifique, l'auto-chauffage passant par leur ralentissement sur les électrons et ions majoritaires du plasma. En particulier, la question de leur confinement pendant cette phase de transfert thermique est cruciale. Leur grande vitesse les rend sensibles aux instabilités électromagnétiques – prise en compte des fluctuations du champ magnétique et résolution de l'équation de Maxwell-Ampère – et demande un maillage adapté dans l'espace des vitesses.

L'alimentation en matière de ces plasmas est aussi un sujet central.

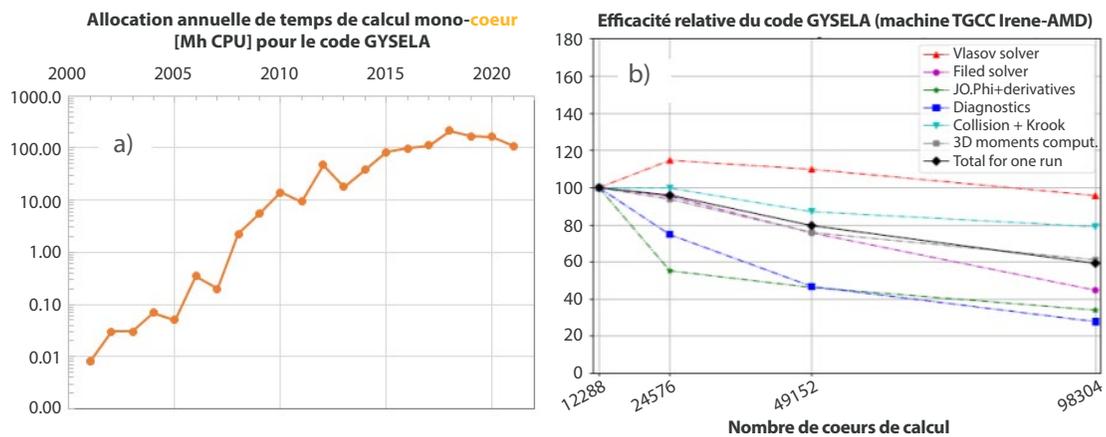


Fig. 1: (a) Nombre annuel d'heures CPU allouées au code GYSELA sur les supercalculateurs de GENCI, EUROfusion et PRACE. Une simulation tourne typiquement sur 16 à 32 mille cœurs pendant plusieurs jours (= 384 à 768 mille heures mono-cœur par jour) (b) Efficacité du code GYSELA (décomposé en ses différentes opérations) évalué en 2020 sur le supercalculateur TGCC Irene Rome.

Le piquage du profil de densité est souhaitable, bien que la source de matière provienne essentiellement de la périphérie (injection de glaçons rapides et interactions plasma-parois). Dans ce cadre, la prise en compte des sources et du transport des particules neutres en interaction avec le plasma s'avère nécessaire. Le couplage de codes dédiés au transport du plasma d'une part et à celui des neutres d'autre part, déjà en cours actuellement, recèle des difficultés numériques intrinsèques.

Un dernier point concerne la géométrie magnétique de la configuration torique, que ce soit pour les tokamaks ou les stellarators. Les machines expérimentales offrent peu de souplesse pour explorer une large gamme de paramètres, faisant de la simulation numérique l'outil privilégié. D'autant que les lois d'échelles de  $\tau_E$  montrent qu'il semble dépendre fortement de ces caractéristiques sans que les mécanismes physiques sous-jacents soient entièrement compris. Passer d'un tore à section circulaire à des géométries moins symétriques demande une adaptation des codes et des schémas, souvent au détriment de la scalabi-

lité. Elles imposent également des contraintes supplémentaires aux diagnostics et à la visualisation.

### Les verrous du passage à l'exascale

Du fait du nombre élevé de points de grille et donc d'opérations à réaliser, les codes gyrocinétiques ont inévitablement recours au calcul haute performance (HPC). Le facteur d'échelle ainsi que l'enrichissement nécessaire de la physique conduisent en outre à une augmentation significative des besoins pour simuler les plasmas d'ITER et au-delà.

Le HPC consiste à réaliser les opérations d'une simulation en parallèle sur un grand nombre de cœurs de calcul. Il permet de résoudre en quelques jours des problèmes qui nécessiteraient parfois des siècles de calcul mono-cœur (voir **figure 1a**). L'un des enjeux vise à minimiser le temps passé en communication entre cœurs de calcul. La scalabilité mesure cette performance. 100% d'efficacité correspond à une simulation dont le temps décroît comme l'inverse du nombre de cœurs utilisés. Une telle efficacité idéale est très difficile à atteindre en pratique, et dépend

en grande partie des problèmes physiques traités. Les codes gyrocinétiques se prêtent relativement bien à cet exercice. Pour autant, on est loin des 100% comme l'illustre la **figure 1b** dans le cas du code GYSELA, pourtant très bien optimisé. Ces tests de scalabilité qui utilisent un très grand nombre de cœurs – jusqu'à la totalité de ceux disponibles sur un supercalculateur donné – sont menés sur des simulations très courtes. En pratique, les simulations de production n'utilisent qu'une fraction de ce nombre de cœurs car les ressources des supercalculateurs doivent être partagées entre plusieurs utilisateurs. De fait, la saturation observée sur la **figure 1a** provient en partie de la relative saturation depuis quelques années du nombre de cœurs de calcul effectivement disponibles.

Rendre un code performant en terme de scalabilité sur plusieurs centaines de milliers de cœurs de calcul requiert une expertise spécifique en calcul HPC, un domaine de recherche distinct des mathématiques appliquées et de l'algorithme. Dans ce cadre, l'équipe GYSELA mène de longue date une collaboration fructueuse avec la

Maison de la Simulation (MdIS) du CEA, et participe activement aux projets H2020 **EoCoE** I et II. Cela demande également de disposer de calculateurs de taille intermédiaire dédiés au développement et à l'optimisation des codes, les supercalculateurs étant quant à eux dédiés à la production. Cet écosystème est vital au développement du HPC, l'obtention de temps de calcul sur les supercalculateurs reposant sur l'évaluation scientifique et technique (tests de scalabilité) des dossiers soumis. L'IRFM et la MdIS bénéficient actuellement de ressources sur le méso-centre géré par Centrale-Supélec. Cette mise en commun permet de supporter le coût croissant des méso-centres, dont la taille doit suivre l'augmentation de puissance des supercalculateurs.

## Le calcul haute performance massivement parallèle

Du point de vue de l'utilisateur, trois caractéristiques des supercalculateurs apparaissent clés : le nombre d'opérations par seconde (ou flops) qu'ils peuvent réaliser, la mémoire disponible par cœur et nœud (ensemble de cœurs partageant une mémoire commune) de calcul, et enfin la rapidité du réseau de communication entre nœuds et sa bande passante. Ces propriétés imposent des contraintes de programmation, voire conditionnent la manière de poser le problème physique. L'exascale, en cours de développement, correspond à des supercalculateurs équipés de millions de cœurs de calcul, capables de réaliser  $10^{18}$  (un milliard de milliards) opérations par seconde.

Pour donner une idée des besoins, considérons la simulation d'un plasma d'ITER allant du cœur à la dernière surface magnétique fermée. Acceptons pour l'instant de ne résoudre que la dynamique des ions, à l'échelle de quelques rayons

de Larmor ioniques. Le maillage comprendra un nombre de points d'environ  $10^3 \times 10^3$  dans le plan transverse au champ magnétique,  $10^2$  dans la direction parallèle et dans chacune des 2 dimensions de vitesse, soit un total de  $N_{\text{grid}} \sim 10^{12}$  points de grille. Le nombre d'itérations temporelles doit permettre d'atteindre un temps de confinement  $\tau_E$  avec un pas de temps numérique adapté aux instabilités, environ  $50 \omega_{ci}^{-1}$ :

$$N_{\text{iter}} \omega_{ci} \tau_E / 50 \sim 10^7$$

A chaque itération, le code effectue des opérations sur chacun des points de grille, leur nombre compris typiquement entre :

$$N_{\text{op}} \sim N_{\text{grid}} \ln(N_{\text{grid}}) \sim 3.10^{13}$$

$$\text{et } N_{\text{op}} \sim N_{\text{grid}2} \sim 10^{24}$$

selon que le code est très ou peu performant (où  $\omega_{ci}$  est la fréquence de rotation des ions autour des lignes de force du champ magnétique).

Le nombre total d'opérations à réaliser pour une simulation est donné par  $N_{\text{iter}} \times N_{\text{op}}$ , soit entre  $3.10^{20}$  et  $10^{31}$  dans ce cas. Si nous disposons de la totalité des nœuds d'un supercalculateur **petascale** ( $10^{15}$  flops), une telle simulation demanderait 1 jour dans la version optimiste, 4 ans sinon. Dans tous les cas, résoudre la partie périphérique en interaction avec la paroi et/ou la physique des électrons rend indispensable le recours à la classe des calculateurs exascale.

## S'adapter à la cible mouvante des nouvelles architectures des supercalculateurs

Le développement des méthodes d'optimisation des codes pour minimiser leurs besoins en ressources numériques est de plus en plus technique, demandant une intrication croissante entre la gestion des variables, la résolution des équations et les inévitables étapes de lecture/écriture (Input/Output

ou I/O) d'une part et l'architecture des supercalculateurs d'autre part. A ces difficultés intrinsèques vient s'ajouter celle de la cible mouvante des architectures qui seront retenues pour les supercalculateurs exascale. Différentes pistes sont actuellement explorées par plusieurs pays. Elles recourent à des processeurs "non-conventionnels" utilisant des technologies peu consommatrices d'énergie (entre autres GPU et ARM, évoquées ci-dessus), différents de ceux qui ont prévalu jusqu'à récemment. La tendance actuelle est de privilégier les **calculs vectoriels**, qui étaient la règle à la fin du siècle dernier mais avaient été remplacés par du **calcul scalaire** depuis. Les architectures pourraient également être hybrides, mettant à disposition des processeurs aux propriétés différentes.

Avant leur mise à disposition des utilisateurs, ces supercalculateurs sont testés sur des codes HPC. De par ses capacités à tourner sur plusieurs centaines de milliers de cœurs de calcul avec une bonne scalabilité, le code GYSELA est régulièrement sollicité pour participer à ces phases de **benchmarks** et contribue ainsi à la mise en service de machines stables. ■

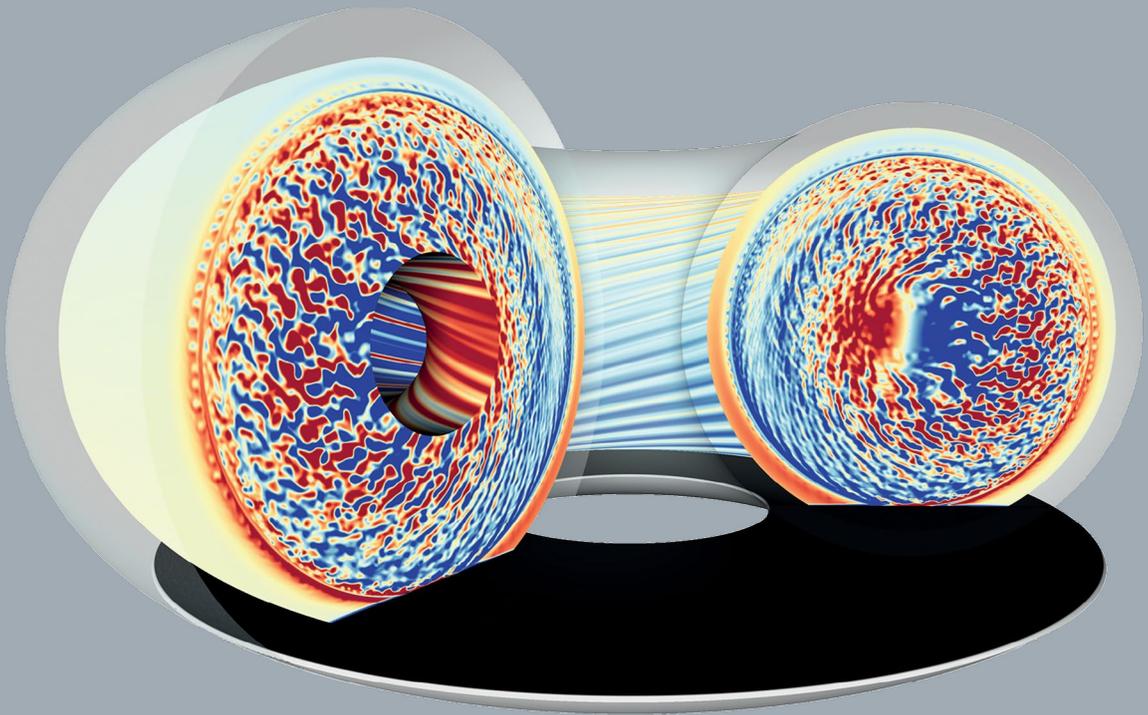


Fig. 2: Carte instantanée des fluctuations du potentiel électrique dans une simulation GYSELA, allant du cœur chaud à la périphérie jusqu'à l'interaction plasma-paroi. Cette simulation d'une turbulence ionique (utilisant  $512 \times 1024 \times 64 \times 128 \times 64 \times 2.75 \cdot 10^{11}$  points de grille 5D) a tourné sur 12 000 cœurs de calcul pendant 30 jours (soit environ 8.6 Mh CPU). 3 To de données ont été sauvegardées sur les 15 Po générées.

## RÉFÉRENCES

- [1] V. Grandgirard *et al.*, « A 5D gyrokinetic full-f global semi-Lagrangian code for flux-driven ion turbulence simulations », *Computer Physics Communications*, **207**, 35 (2016)
- [2] G. Dif-Pradalier *et al.*, « Transport barrier onset and edge turbulence shortfall in fusion plasmas », *Communication Physics* (2022) <http://doi.org/10.1038/s42005-022-01004-z>

## Choisir l'information conservée lors d'une simulation

Le problème des sorties d'un calcul numérique est un vieux serpent de mer qui devient critique avec le passage des supercalculateurs du **petascale** ( $10^{15}$  opérations par seconde) à l'**exascale** ( $10^{18}$  opérations par seconde). Dans une simulation d'un système complexe comme le **tokamak** ITER, ce n'est pas seulement un état final, mais tout le processus d'évolution qui intéresse les physiciens. Le choix des données à conserver pour analyse après la simulation est alors le résultat d'un subtil compromis. En effet, chaque octet transféré sur disque nécessite du temps et de l'espace de stockage. Or le débit des disques est plusieurs ordres de grandeurs plus lent que la mémoire du processeur et ce fossé va en s'élargissant : chaque octet sauvegardé réduit la performance numérique de la simulation. Cette contrainte se répercute aussi lors du transfert ou de l'analyse des résultats en post-traitement.

Aujourd'hui seuls quelques champs physiques sont sélectionnés pour être conservés et ils sont écrits à une fréquence nettement plus faible que celle à laquelle ils sont mis à jour dans le calcul. Par exemple dans le code Gysela sur plusieurs dizaines de **pétaoctets** ( $10^{15}$  octets) de données générées au cours de la simulation, quelques **téraoctets** ( $10^{12}$  octets) sont sauvegardés. Seule une petite fraction de la dynamique de la **turbulence plasma** est ainsi accessible en raison des choix drastiques qui s'imposent déjà.

Avec la nécessité de réduire encore ce ratio du fait de l'évolution du matériel, la stratégie de sauvegarde devient un enjeu crucial pour nos simulations et les choix décidés a priori comme actuellement peuvent être préjudiciables à nos recherches. Un objectif est donc de mettre en œuvre de nouvelles techniques d'analyse de données à la volée pour pallier ce risque. On cherche à analyser les données à mesure qu'elles sont produites, avant leur écriture sur disque, pour les filtrer et ne sélectionner que les plus pertinentes, augmentant ainsi la quantité d'information utile pour un volume fixe de données conservées.

Dans Gysela, la fonction de distribution des particules dans l'espace des phases 5D qui contient toute l'information n'est jamais écrite pour des raisons de coût en performance et en espace. À la place, des valeurs dérivées, plus compactes en 3D, sont calculées pour être conservées. Ces choix décidés a priori peuvent masquer une part importante de la physique. De nouvelles techniques d'analyse issues du monde du traitement de données (HPDA) non-spécifiques au code, telles que l'encodage de modèles réduits dans des réseaux de neurones, l'analyse en composantes principales ou d'autres outils issus du monde de l'intelligence artificielle sont maintenant disponibles. Des mises en œuvre sur des données de simulation existent, mais le passage par des fichiers pour l'interconnexion serait inenvisageable d'un point de vue performance sur les machines exascale. De nouveaux outils tels que Deisa [1] sont donc développés pour permettre une connexion directe par le réseau entre les nœuds de calcul parallèle dédiés à la simulation et un autre ensemble de nœuds de calcul parallèle utilisé pour l'analyse avant les étapes de sauvegarde. Les techniques d'apprentissage machine (réseaux de neurones, PoPe [2], etc.), peuvent ainsi être utilisées pour détecter automatiquement des événements rares intéressants pour les physiciens, voire la conduite de la simulation. L'analyse au vol de la simulation permet ainsi de guider et d'optimiser la sauvegarde notamment en la focalisant selon ce que les physiciens jugent le plus important.

L'augmentation de la complexité logicielle liée à l'utilisation de ces nouvelles techniques fait qu'elles ne sont accessibles qu'au travers de collaborations avec les experts des entrées-sorties et de l'analyse en ligne. L'utilisation de bibliothèques comme PDI [3,4] (développée à la Maison de la Simulation) qui permet d'identifier les données manipulées par le code pour déléguer leur traitement avant la sauvegarde devient aujourd'hui un prérequis à l'exploitation de la puissance de calcul disponible.

### RÉFÉRENCES

- [1] **A. Gueroudji, J. Bigot and B. Raffin**, "DEISA: Dask-Enabled In Situ Analytics," 2021 IEEE 28th International Conference on High Performance Computing, Data, and Analytics (HiPC), 2021, pp. 11-20, doi: 10.1109/HiPC53243.2021.00015.
- [2] **T. Cartier-Michaud et al** 2016 Phys. Plasmas 23 020702 [arxiv.org/pdf/1511.01743.pdf](https://arxiv.org/pdf/1511.01743.pdf)
- [3] <https://www.pdi.dev/>
- [4] **Corentin Roussel, Kai Keller, Mohamed Gaalich, Leonardo Bautista Gomez, Julien Bigot**. PDI, an approach to decouple I/O concerns from high-performance simulation codes. 2017. [ffhal-01587075f](https://arxiv.org/abs/1708.05551)

# L'ENJEU DES MAILLAGES

par Hervé Guillard, Guido Huijsmans & Boniface Nkonga

La résolution numérique des équations de la physique nécessite la **discrétisation** du problème mathématique, c'est à dire le passage d'un espace continu sur lequel sont définies les fonctions inconnues vers un espace discret caractérisé par un ensemble fini de points sur lesquels les valeurs de la solution sont recherchées au moyen d'un algorithme. Cet ensemble de points est appelé maillage. Sa définition et sa construction doivent être optimales afin de garantir les bonnes propriétés mathématiques et numérique qui assureront précision et efficacité : là est l'enjeu de la construction des maillages.

# #5

# #5

## L'ENJEU DES MAILLAGES

### Finalités et verrous numériques pour ITER

La modélisation des écoulements de plasma dans les **tokamaks** commence souvent par une collection de données ponctuelles qui caractérisent l'expérience de fusion. Ces données sont souvent incomplètes et ne représentent pas directement les variables pertinentes pour la modélisation. Néanmoins, à partir des mesures incomplètes et indirectes, il est possible de reconstruire plus en détail la topologie magnétique et le profil des variables hydrodynamiques. Cette reconstruction est basée sur un modèle d'équilibre des forces magnétiques et hydrodynamiques calculé par des codes dédiés. Cet équilibre magnétique peut être instable, et l'enjeu principal des simulations Magnéto-Hydro-Dynamiques (MHD) est de définir des équilibres stables.

Une caractéristique fondamentale des plasmas magnétisés est la forte anisotropie de la dynamique : dans la direction parallèle aux **lignes de champ magnétique**, le mouvement des ions est environ cent fois plus rapide que celui dans la direction perpendiculaire. Les instabilités ont donc tendance à s'aligner sur le champ magnétique : les longueurs d'onde parallèles au champ sont typiquement de la centaine de mètres, alors que les longueurs d'onde perpendiculaires sont de l'ordre du millimètre voire en deçà. Cette caractéristique des plasmas

magnétisés impose de considérer une résolution spatiale suffisamment fine dans la direction perpendiculaire et rend particulièrement attrayante l'utilisation de maillages adaptés aux **surfaces de flux magnétique** dans chaque plan poloidal 2D tandis que la direction toroïdale périodique peut être discrétisée avec une grande précision à l'aide d'un développement en séries de Fourier. En plus de la complexité topologique du champ magnétique, il faut également tenir compte de la complexité géométrique de l'enceinte du tokamak.

L'un des ingrédients de base de la **discrétisation** numérique est la décomposition d'un domaine de calcul en un ensemble fini d'éléments ou de volumes. Cette décomposition est optimale lorsqu'elle correspond bien à la dynamique de l'écoulement cible. Dans le contexte des **écoulements anisotropes**, la notion de maillage optimal est très étroitement liée à la compatibilité entre les anisotropies du maillage et celles de l'écoulement cible. Nous appelons alors "mailles alignées", celles qui vérifient la compatibilité avec l'anisotropie de l'écoulement. Nous réserverons le terme de "mailles adaptées" à celles qui sont raffinées dans les zones de fortes variations de variables. En pratique, il s'agit de trouver le meilleur compromis entre le maillage optimal et l'efficacité numérique en termes de temps de calcul, de complexité d'implémentation, de précision des résultats... Nous nous concentrerons ici sur la construction d'un maillage aussi satisfaisant que possible par rapport à l'équilibre du plasma et aux contraintes numériques prioritaires.

### Equilibre plasma et décomposition de domaines

La topologie du champ magnétique peut être très complexe. Construire un maillage qui s'appuie sur cette to-

pologie peut alors sembler difficile, heureusement, on dispose d'outils théoriques qui permettent de largement simplifier cette tâche (c.f. éclairage sur la "fonction de Morse").

Les propriétés mathématiques de la fonction de flux magnétique permettent de montrer que le domaine plasma peut être décomposé en un nombre fini de sous-domaines qui sont soit topologiquement des disques, soit des anneaux séparés par des iso-contours contenant un point X. La **figure 1** montre ainsi la décomposition en six sous-domaines du domaine plasma dans le tokamak KSTAR. Sur chacun de ces sous-domaines, la fonction de flux varie de façon monotone entre une valeur maximale et une valeur minimale. La construction d'un maillage peut alors être réalisée en suivant les lignes de flux. Ce qui permet d'avoir une résolution optimale à la fois dans la direction perpendiculaire et dans la direction parallèle.

### Maillages triangulaires non-structurés

La complexité de la géométrie de la chambre à vide tend à privilégier

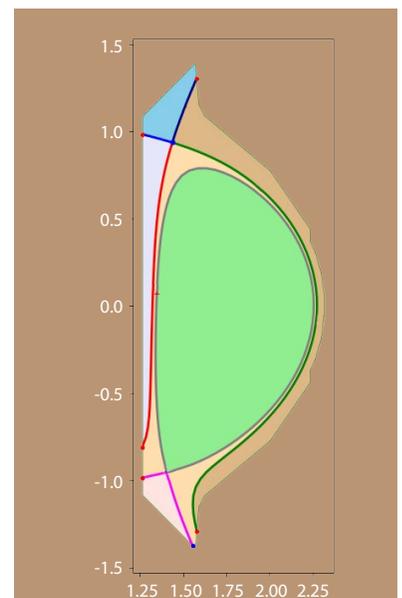


Fig.1 : Exemple de décomposition en six sous-domaines [4] d'une configuration d'équilibre dans le tokamak KSTAR

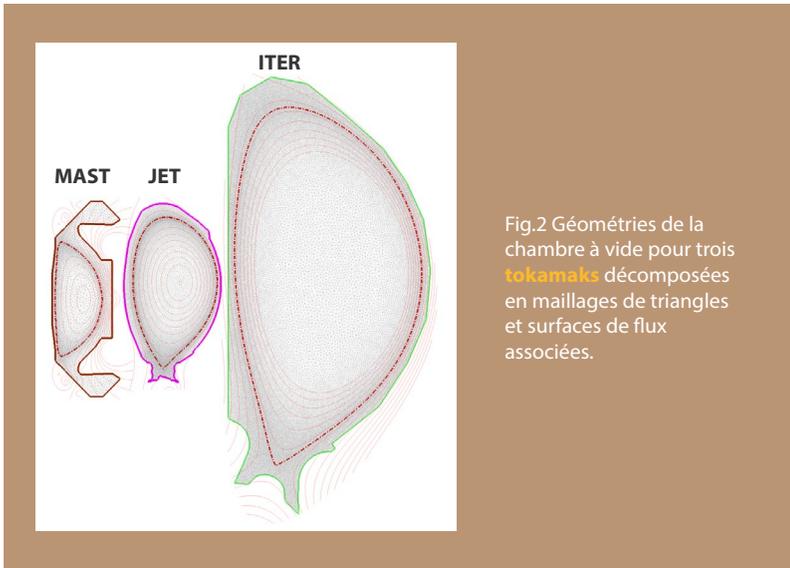


Fig.2 Géométries de la chambre à vide pour trois tokamaks décomposées en maillages de triangles et surfaces de flux associées.

l'utilisation de maillages non-structurés constitué de triangles typiques des méthodes d'éléments finis. En particulier, une description réaliste des interactions entre le plasma et l'enceinte du tokamak s'avère de plus en plus nécessaire à une évaluation correcte des flux de chaleur et de matière qui vont impacter le mur. En conséquence, l'utilisation de maillages constitués de triangles et des méthodes numériques associées est de plus en plus répandue. La figure 2 montre ainsi pour plusieurs tokamaks utilisés dans des expériences sur les plasmas de fusion que les maillages constitués de triangles permettent une représentation précise de la géométrie du tokamak. Cependant les modèles Magnéto-Hydro-Dynamiques réduits, encore majoritairement utilisés pour les études de stabilité MHD, requièrent l'utilisation de maillages très réguliers et des méthodes numériques utilisant cette régularité.

Ces méthodes ne sont pas encore actuellement d'un usage courant. Un autre inconvénient des maillages de triangles vient du fait qu'il n'est pas possible avec de tels éléments d'aligner parfaitement les éléments sur les surfaces de flux. Du fait de l'extrême anisotropie des écoulements de plasmas ma-

gnétisés, cette caractéristique des maillages triangulaires peut s'avérer préjudiciable aux performances des méthodes numériques. Par contre, dans ce contexte, il est très facile de construire des maillages adaptés en jouant sur la densité de triangles suivant les propriétés physiques locales

### Maillages quadrangulaires

Dans le domaine du plasma, la donnée de la fonction de flux magnétique définit une surface, et la construction d'un maillage consiste à représenter cette surface le plus exactement possible. Dans le contexte des plasmas de fusion, la très grande anisotropie des plasmas magnétisés nécessite de construire des maillages curvilignes alignés sur les iso-valeurs de la fonction de flux magnétique. Ces stratégies simples et relativement performantes, consistent à représenter les surfaces par un ensemble de carreaux isomorphes à un carré. Cette approche permet de construire des maillages quadrangulaires courbes alignés avec les surfaces de flux qui décrivent l'équilibre plasma. La régularité globale de la représentation dépend à la fois de la régularité de l'interpolation sur chaque carreau et de la régularité des raccorde-

ments entre les carreaux voisins. Cette stratégie, adoptée dans l'outil de simulation JOREK [1] et [2], permet de construire des représentations, polynômiales par morceaux, d'une régularité globale maximale d'ordre  $(n+1)/2$  avec « n » le degré polynômial associé à chaque patch. La régularité maximale n'est cependant pas, en général, satisfaite aux points critiques (extrema de la fonction et points X). Ces points, qui ne sont pas au bord du domaine, sont des points de raccordement reliant un nombre de patches différent de quatre [3]. Le centre du plasma et le point X sont des exemples de points critiques qui nécessitent parfois des traitements particuliers.

Bien que la représentation par des maillages quadrangulaires curvilignes soit assez attrayante, la contrainte de conformité du maillage, qui est très utile en pratique, rend difficile une représentation précise des géométries très complexes. On se contente alors de géométries approchées, définies par des surfaces de flux les plus proches possible des bords de la chambre à vide (Figure 3). Ceci étant dit, signalons aussi qu'en pratique il existe des stratégies ad-hoc pour obtenir une meilleure adéquation des mailles quadrangulaires avec les contours de la chambre à vide. Ceci se fait au prix d'une plus grande complexité dans la construction du maillage, avec souvent un traitement très spécifique pour chaque géométrie.

### Maillages hybrides

A l'heure actuelle, la construction des maillages privilégie la représentation précise soit de la complexité de la chambre à vide, soit de l'alignement aux surfaces de flux dans lesquelles évolue le plasma. Dans le premier cas, on opte pour des maillages de triangles, éventuellement courbes asso

ciées à des stratégies numériques d'ordre élevées pouvant compenser l'inconvénient du non alignement : Galerkin discontinue, éléments finis de continuité  $C1$  ... Dans le second cas, les maillages sont plutôt constitués de quadrangles courbes et les problèmes abordés sont ceux pour lesquels l'interaction précise avec les composantes de la chambre à vide ne joue pas un rôle crucial, comme par exemple dans l'étude de la dynamique à court terme des instabilités MHD. La combinaison de ces deux approches, c'est-à-dire l'utilisation de maillages hybrides triangles/quadrangles, est une voie de recherche très prometteuse. Elle permettra de tirer parti des avantages de chaque approche là où l'efficacité est optimale. La principale difficulté sera la gestion des raccordements

## Fonction de Morse

La théorie de Morse relie l'étude des points critiques d'une fonction définie sur une variété à la topologie de cet espace. Le point critique d'une fonction correspond à un point où le gradient de la fonction s'annule. Un point critique régulier est un point critique où le Hessien (la matrice des dérivées secondes de la fonction) est inversible. Une fonction de Morse est une fonction dont tous les points critiques sont réguliers. Concrètement en deux dimensions d'espace, les fonctions de Morse sont des fonctions dont les seuls points critiques sont des sommets, des puits ou des cols (dits aussi points X). Ces fonctions ont des propriétés topologiques très particulières qui peuvent être exploitée pour la construction de maillages alignés sur les lignes de flux.

entre les différents blocs de maillages, suivant que ces blocs sont conformes ou non-conformes, superposés par endroit ou pas du tout superposés. Des stratégies de raccordement existent déjà dans des contextes simplifiés. Il faudra

donc adapter ces différentes approches au contexte de la MHD, tout en préservant la précision numérique nécessaire à l'étude de la dynamique des plasmas de tokamaks. ■

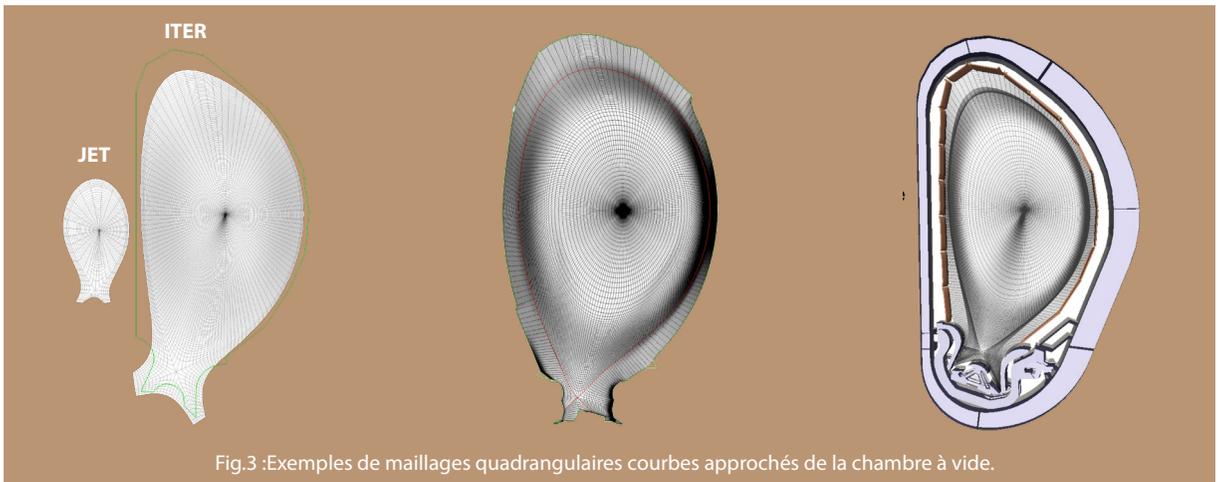


Fig.3 :Exemples de maillages quadrangulaires courbes approchés de la chambre à vide.

## RÉFÉRENCES

- [1] M Hoelzl, GTA Huijsmans, SJP Pamela, M Becoulet, E Nardon, FJ Artola, B Nkonga, et al., The JOREK non-linear extended MHD code and applications to large-scale instabilities and their control in magnetically confined fusion plasmas, *Nuclear Fusion*, **61**, 065001 (2021)
- [2] O. Czarny and G. Huysmans, Bézier surfaces and finite elements for MHD simulations, *JCP* **227**, 7423 (2008)
- [3] SJP Pamela, GTA Huijsmans, M Hoelzl and the JOREK Team, Generalized Formulation of G-continuous Bézier Elements Applied to non-linear MHD simulations (2022).
- [4] H Guillard, J Lakhilili, A Loseille, A Loyer, B Nkonga, A Ratnani, A Elarif, Tokamesh: A software for mesh generation in Tokamaks, *Rapport Inria* 9230 (2018)

# Nouveaux schémas éléments-finis d'ordre élevé

## Schémas avec fort ratio nombre d'opérations sur empreinte mémoire adaptés aux nouvelles architectures des calculateurs

Les écoulements de plasma au sein d'un tokamak posent d'importants défis à la simulation et exigent le développement de méthodes numériques avancées pour traiter des équations dominées par la convection, une forte anisotropie liée au champ magnétique, ainsi que des géométries magnétiques et de composants face au plasma de formes complexes. Ceci pousse au développement de méthodes de haute précision permettant à la fois de réduire le nombre de points de maillage pour une précision donnée, ainsi que toute erreur numérique inhérente à la **discrétisation** des équations. Ces aspects sont cruciaux pour des simulations sur les temps longs exigés pour le traitement statistique de la turbulence. Par ailleurs, ces schémas sont plus adaptés aux nouvelles architectures des calculateurs en augmentant le ratio nombre d'opérations sur empreinte mémoire.

## Nouvelle approche Hybride Discontinuous Galerkin de calcul implicite **massivement parallèle**

Avec ce cahier des charges, les méthodes d'éléments-finis d'ordre élevé offrent une voie séduisante à la fois en terme de flexibilité du maillage, de précision et de parallélisation. Dans ces nombreux schémas, les méthodes dites de Galerkin discontinu (DG) ont attiré l'attention de la communauté scientifique car elles réunissent les propriétés de stabilité et de localité des volumes-finis et les propriétés de précision et de flexibilité des éléments-finis. La solution du problème est recherchée localement par élément, (triangles, quadrilatères pour des calculs bi-dimensionnels, tétraèdres ou hexagones pour les calculs tri-dimensionnels) sur une base de polynômes, mais avec la particularité que la continuité de la solution entre les différents éléments n'est pas incluse dans l'espace des solutions possibles, mais est imposée avec des contraintes supplémentaires de forme "faible", c'est-à-dire, moyennée dans les bords des éléments. Cette localité permet d'obtenir des schémas robustes et précis bien adaptés aux équations à caractère convectif que l'on retrouve dans la physique des **tokamaks**. Afin de réduire le nombre de points de maillage, une optimisation supplémentaire est venue de l'hybridisation permettant de ne considérer que les points situés sur le bord des éléments du maillage par l'introduction d'une variable « trace » dans le problème local. L'hybridisation de la méthode Galerkin Discontinu (HDG) est particulièrement performante lorsque le schéma d'intégration temporel est implicite ce qui conduit à la résolution de systèmes linéaires potentiellement de très grande taille.

## Adapter le maillage à l'ensemble des contraintes de géométrie magnétique et composant face au plasma

En particulier, ces méthodes permettent aussi de s'affranchir éventuellement de l'alignement du maillage sur les surfaces de flux ou de la discrétisation le long des **lignes de champ magnétique** exigée par la forte anisotropie de l'écoulement lorsque l'ordre de précision de la méthode est insuffisant. C'est un gain considérable qui permet de discrétiser avec une beaucoup plus grande précision les éléments face au plasma non alignés sur le champ magnétique, de pouvoir considérer des équilibres magnétiques non-stationnaires en évitant des remaillages coûteux et enfin d'avoir à développer des stratégies de discrétisation autour des singularités comme le centre de la machine ou le point X en géométrie **divertor**.

Avec cette nouvelle génération de méthode [1,2], on a donc une estimation plus précise des flux de chaleur et de particules à la paroi, et on peut aussi simuler des phases non stationnaires de l'équilibre magnétique comme le démarrage ou l'arrêt de la machine lors de la décharge ou encore des perturbations magnétiques variant lentement dans le temps. Associée à une parallélisation efficace et à des maillages performants, la méthode HDG est une solution d'ordre élevé efficace et flexible qui répond aux exigences de performance des simulations de la turbulence dans les tokamaks.

## RÉFÉRENCES

[1] Scotto d'Abusco M., Giorgiani G., Artaud J.-F., Bufferand H., Ciraolo G., Ghendrih P., Serre E., Tamain P., Core-edge 2D fluid modeling of full tokamak discharge with varying magnetic equilibrium: from WEST start-up to ramp-down, *Nuclear Fusion*, accepté.

[2] Giorgiani G., Bufferand H., Ciraolo G., Ghendrih P., Schwander F., Serre E., Tamain P., A hybrid discontinuous Galerkin method for tokamak edge plasma simulations in global realistic geometry, *Journal of Computational Physics*, **374**, 515-532 (2018)

# CHAÎNE DE MODÈLES POUR L'INTÉRACTION PLASMA-PAROI

par **Guido Ciraolo & Yannick Marandet**

La simulation numérique des plasmas de fusion en interaction avec la paroi de la machine est aujourd'hui indispensable, aussi bien dans l'étude fondamentale de la physique que pour assurer les développements technologiques et les conditions de fonctionnement optimales. La nature multiphysique, la très large gamme d'échelles spatiales et temporelles à modéliser ainsi que le nombre élevé de variables à résoudre nécessitent ainsi le développement et l'exploitation d'une chaîne de modèles par le couplage de codes ou par l'interaction de différents niveaux de description et de précision en fonction des temps de restitution requis et des objectifs à atteindre.

# #6

# #6

## CHAÎNE DE MODÈLES POUR L'INTERACTION PLASMA-PAROÏ

### Un bilan couplé de matière et d'énergie à satisfaire

Le fonctionnement d'une centrale à fusion reposera sur des flux d'énergie et de particules complexes. L'énergie doit être transportée du plasma de cœur où les réactions de fusion se produisent, vers les parois, où cette énergie est évacuée par les circuits de refroidissement. Le carburant des réactions de fusion doit faire le chemin inverse, de son point d'injection dans le plasma de bord vers le centre du plasma. Les cendres de la réaction (noyaux d'hélium) doivent être évacuées vers les pompes alors que les impuretés présentes dans les régions périphériques ne doivent pas contaminer le plasma de cœur de manière trop importante. Le contrôle de ces flux repose en particulier sur la physique des régions périphériques du plasma lors de l'ensemble des phases de la décharge. L'efficacité du confinement magnétique, impliquant un transport bien plus rapide le long des **lignes de champ magnétiques** que dans la direction transverse, conduit à concentrer les flux de chaleur à l'intersection de la frontière du plasma confiné et de la paroi. L'expérience acquise depuis les années 1980 a montré qu'il est judicieux de modifier la configuration magnétique de telle façon à localiser cette intersection sur un composant spécifique éloigné de la frontière du plasma confiné, le

**divertor**. Néanmoins, la surface sur laquelle se dépose l'essentiel de la puissance portée par le plasma dans le divertor représente 0.1% de la surface de la paroi. Les processus permettant de répartir cette puissance sur une surface plus grande sont donc essentiels pour assurer l'intégrité de la paroi. Ces derniers permettent de rendre les flux de puissance plus isotropes en la communiquant en amont du divertor à des espèces neutres (atomes, molécules, photons) insensibles au confinement magnétique.

### Une chaîne de modèles pour décrire le plasma

Ce problème de transport couplé de particules et d'énergie dans un écoulement réactif peut être abordé dans le cadre de différents modèles de raffinement variable pour le plasma, traités dans les articles de ce numéro : du **cinétique** 6D (3D3V, 3 dimensions spatiales et 3 dimensions dans l'espace des vitesses) à des modèles analytiques 0D, en passant par les approches **gyrocinétiques** 5D et fluides à 3D ou 2D.

- Les modèles 0D dit « à deux points » vont permettre, avec des hypothèses simples, de calculer à l'aide de formules analytiques les conditions en un point de la paroi, dans le divertor, en fonction des conditions à la frontière du plasma confiné. Ce type d'approche est très utile pour interpréter les résultats de simulations plus complexes.

- Les approches fluides 2D supposent le plasma axisymétrique (homogène dans la direction toroïdale) et vont introduire les aspects géométriques de la configuration magnétique et de la paroi dans le problème. De tels codes ont été utilisés pour optimiser la géométrie du divertor d'ITER. Ils s'appuient sur une modélisation simplifiée du transport moyen in-

duit par la turbulence dans la direction perpendiculaire aux lignes de champs magnétique, à l'aide de coefficients de diffusion ad-hoc. Afin de gagner en prédictibilité, les efforts récents [1] portent sur la détermination de ces coefficients de manière auto-consistante à partir de modèles de turbulence comme ceux largement utilisés dans la mécanique des fluides neutres (RANS) (Pope) [3].

- Les codes fluides 3D comme SolEdge3X [2] permettent de calculer explicitement les fluctuations turbulentes jusqu'à des échelles égales à la taille des éléments de maillage, et donc de conscrire le rôle des modèles ou les hypothèses sur le transport radial aux très petites échelles, un progrès majeur vers des codes prédictifs. Ceci se fait naturellement au prix d'un coût numérique beaucoup plus élevé dans l'esprit de la simulation des grandes échelles pour les fluides neutres (Pope).

- Ces approches fluides sont rigoureusement basées sur l'hypothèse d'un équilibre thermodynamique local qui peut quelques fois ne pas être vérifiée, comme par exemple avec de forts gradients le long des lignes de champ, caractérisés par des longueurs de gradient petites devant les libres parcours moyens considérés, ou du piégeage des particules dans des miroirs magnétiques au bord du plasma confiné. Il y a également des situations où la température du plasma est anisotrope, avec des différences entre les températures parallèles et perpendiculaires. Le traitement de ces effets dans les zones périphériques du plasma nécessiterait une approche gyrocinétique 5D (cf. article #3) incluant la dynamique des ions et des électrons. Une telle approche réclamerait une puissance de calcul de niveau **exascale** voir au-delà ce qui la limite encore aujourd'hui à quelques simulations pionnières seulement dans la ré

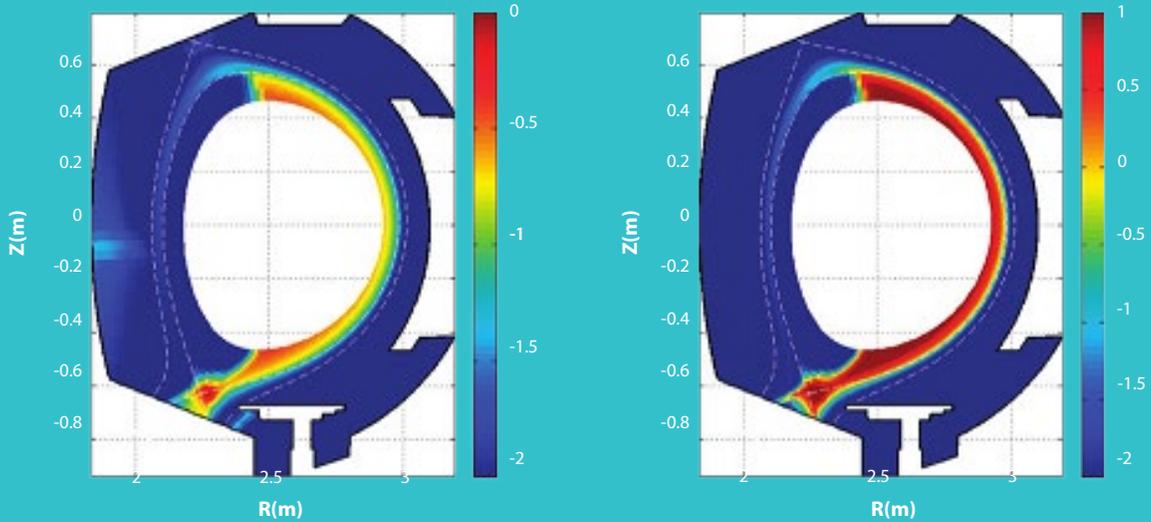


Fig. 1 Simulation 2D de transport avec le code Soledge2D-EIRENE et le modèle k-e montrant le ballonnement du transport turbulent côté faible champ attendu d'après les mesures expérimentales. Prédiction des variations de l'énergie cinétique turbulente  $k/k_{max}$  (gauche) et du coefficient de diffusion effectif perpendiculaire  $D$  (droit) dans le plan poloidal du tokamak WEST. Echelle logarithmique.

gion de bord du plasma [4].

Le choix du modèle pour une étude donnée dépend en général d'un compromis entre le niveau de fidélité de la physique requis pour une étude donnée et le coût en terme de calcul – qui peut être totalement prohibitif, même pour calculer l'état du plasma à un instant donné.

## La configuration magnétique et la paroi

La prise en compte de l'interaction avec la paroi conduit à introduire de nouveaux acteurs dans les modèles : en premier lieu, la paroi elle-même qui impose une frontière au plasma, bien entendu. Cette frontière n'est en général pas alignée sur la géométrie magnétique de la machine (les surfaces de flux). Ce non-alignement pose un problème important à cause de la très forte anisotropie liée au fort champ magnétique, qui implique une forte diffusion numérique radiale sur un maillage non aligné avec les surfaces magnétiques (cf article #5 **L'enjeu des maillages**). Une première façon de traiter ce

problème, mise en œuvre dans le code Soledge3X [2], est d'utiliser une approche de conditions limites immergées (pénalisation) sur un maillage aligné, où la paroi est décrite par un masque, le maillage s'étendant sur un domaine plus grand que le plasma. Ceci pose des problèmes de précision dans le calcul des flux à la paroi, car ceux-ci doivent être interpolés/extrapolés sur des points ne faisant pas partie du maillage. Une façon plus robuste de traiter ce problème est d'utiliser un maillage non structuré, localement désaligné par rapport à la géométrie magnétique au voisinage de la paroi et une méthode de haute précision afin de limiter les effets de la diffusion numérique (cf article #4 et encart D). Ce type d'approche a fait ses preuves dans de nombreuses applications industrielles, automobile, aéronautique et son adaptation aux problèmes considérés ici, extrêmement anisotropes, serait un progrès majeur. Les résultats obtenus jusqu'ici en géométrie 2D sont très prometteurs, et permettent en particulier de traiter

des situations où la configuration magnétique évolue dans le temps, par exemple la phase de formation de la configuration en point X, dont l'optimisation joue un rôle clé dans la minimisation du contenu en tungstène des décharges.

## Le plasma en interaction avec la paroi

Les échanges d'énergie et de quantité de mouvement avec la paroi, dont la densité est 10 ordres de grandeur supérieure à celle du plasma nécessitent une description spécifique, à l'aide d'outils numériques adaptés. Par exemple, des coefficients de réflexion peuvent être calculés par ailleurs à l'aide de codes dédiés décrivant les collisions binaires des ions dans la paroi. Cependant, ces modèles de collisions binaires perdent leur validité aux faibles énergies correspondant aux conditions rencontrées dans ITER, où des simulations de dynamique moléculaire s'appuyant sur des potentiels d'interaction pertinents doivent être réalisées. Les ions rétro-diffusés par la paroi le sont essentiellement

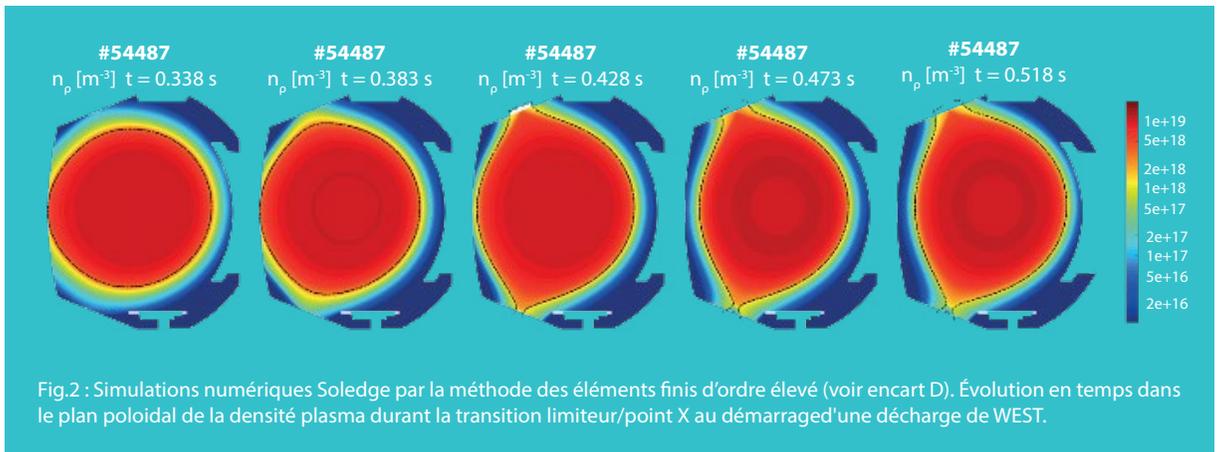


Fig.2 : Simulations numériques Soledge par la méthode des éléments finis d'ordre élevé (voir encart D). Évolution en temps dans le plan poloidal de la densité plasma durant la transition limiteur/point X au démarrage d'une décharge de WEST.

sous forme d'atomes, et les ions (isotopes d'hydrogène) implantés sont piégés dans des défauts du réseau cristallin. Ils peuvent se recombiner en molécules et être relâchés dans le plasma, en particulier si la température du mur est suffisante. Ces phénomènes sont décrits par des codes spécifiques qui peuvent être couplés aux modèles de plasma afin de décrire la réaction du mur lors de la décharge, par exemple pendant des transitoires. Les atomes et molécules résultant de cette interaction entre les ions du plasma et du mur forment un gaz neutre qui est capable d'échanger des particules, de la quantité de mouvement et de l'énergie avec le plasma. De même, les ions du plasma peuvent éroder la paroi par transfert de quantité de mouvement, et conduire ainsi à des sources d'impuretés qui vont progressivement s'ioniser en pénétrant dans des régions de plus en plus chaudes du plasma. Ces espèces non totalement ionisées, gaz neutres et impuretés, vont pouvoir convertir l'énergie des électrons en rayonnement. Transmettre ainsi l'énergie du plasma à des espèces non chargées permet de l'étaler sur une surface plus importante et de réduire le piquage des flux de puissance. Certaines impuretés sont d'ailleurs injectées volontairement dans ce but. Du point de vue de la simulation, ceci se traduit donc par l'obligation de prendre

en compte de multiples espèces chargées, ainsi que la physique de la paroi (souvent à travers des bases de données précalculées), ainsi que celle de la physique du gaz neutre et du rayonnement, qui sont insensibles au champ magnétique. Ces aspects multi-physiques sont au cœur des défis numériques autour de cette physique, et requièrent des stratégies spécifiques au niveau de la conception des outils pour les simulations.

### Une hiérarchie de modèles pour la physique du gaz neutre

Les atomes et molécules sont des espèces neutres et leur dynamique n'est donc pas contrainte de manière directe par la configuration magnétique. Tout comme pour le plasma, leur physique peut être modélisée par une hiérarchie de modèles allant du cinétique 6D aux modèles analytiques. Ce niveau de description n'est pas forcément homogène avec celui utilisé pour le plasma. Par exemple, dans le code Soledge3X-EIRENE une description 2D du transport du plasma est couplée à une description cinétique 6D Monte Carlo pour le gaz neutre, qui permet de résoudre un problème multi-espèces 6D sur une grille 3D, dans une géométrie arbitraire [2]. Cette description fine des neutres permet par exemple de capturer avec une bonne précision le trans-

port de ce gaz neutre jusqu'aux pompes. Ce type d'hybridation de modèles et de méthodes numériques a des conséquences importantes du point de vue de la convergence du code, qui s'appuie ici sur une intégration en temps. Un couplage non-linéaire à travers les échanges de particules, quantité de mouvement et d'énergie entre le plasma et le gaz neutre (à travers les processus de physique atomique) peut introduire une forte raideur dans les équations, un phénomène bien connu dans les écoulements réactifs (combustion, ...). L'hétérogénéité de modèles se prête mal à une résolution implicite, et le caractère explicite du couplage peut donc fortement contraindre le pas de temps. Ce type de couplage pose de plus le problème de l'introduction d'un bruit statistique lié au fait que le solveur Monte Carlo ne fournit pas une estimation de la solution dont l'écart à la solution exacte est très supérieur à la précision numérique dans les cas d'application pratique : le code ne converge plus vers une solution stationnaire à cause du forçage par le bruit et il devient nécessaire de définir plus précisément ce que l'on appelle la solution stationnaire du code. Décrire le gaz neutre comme un fluide, c'est à dire un milieu continu, permet d'éviter ces difficultés, en intégrant la résolution dans le solveur plasma, au prix d'approxi

mations qui peuvent fortement affecter les solutions. Une approche intermédiaire, dite « hybride », s'appuie sur le fait que cette hypothèse de continuité du milieu est plus ou moins valide dans le domaine de simulation. Dans les machines comme ITER, de taille plus grande, il peut exister des régions de validité dans le divertor qui justifient pleinement une approche fluide, alors qu'une approche cinétique reste nécessaire dans le reste de la machine. Ce type d'approches hybrides a été développé dans plusieurs domaines d'application, la rentrée atmosphérique de véhicules spatiaux, le transport de rayonnement, et fait actuellement l'objet de recherches actives dans la communauté avec des premiers résultats prometteurs.

## Les challenges spécifiques à ITER

Le traitement de la question de l'évacuation de l'énergie et du contrôle des particules sur une machine de la taille d'ITER pose des problèmes spécifiques, liés plus ou moins subtilement à la taille de la machine (on raisonne ici à champ magnétique constant), qui augmente mécaniquement le nombre de points de maillage nécessaire, les échelles des phénomènes physiques à résoudre restant identiques à celles des machines actuelles. Il est utile de rappeler que cette augmentation de la taille a pour but d'augmenter le **temps de confinement de l'énergie**. De manière plus générale, les échelles de temps associées aux décharges augmentent avec la taille et cette augmentation se retrouve naturellement au niveau des simulations, qui soit reposent sur une relaxation en temps vers une solution stationnaire (ou du moins avec des champs moyens stationnaires) soit cherchent à décrire des phases de décharges. De fait, le problème est particulièrement sévère pour le temps de relaxation

du bilan de particules, c'est à dire le temps d'équilibrage entre le flux de particules injectées et le flux de particules extraites par pompage. En effet, une analyse 0D simple de ce bilan de particules montre que le temps caractéristique varie comme  $1/(1-R)$  où  $R$  est le coefficient de recyclage effectif (c'est à dire la proportion d'ions recyclés à la paroi et réionisés dans le domaine de simulation). Ce dernier devient très proche de l'unité dans des plasmas fortement opaques aux neutres, ce qui conduit à un allongement substantiel du temps physique nécessaire à atteindre un état stationnaire, et ainsi du temps de simulation.

Ce dernier peut être réduit en augmentant le pas de temps (schéma numériques, schéma de couplage) ou en réduisant le temps CPU nécessaire à calculer un pas de temps (optimisation et parallélisation). Une autre façon de formuler ce problème est de dire que la convergence du coefficient  $R$  vers 1 traduit une forte augmentation du couplage non linéaire entre le plasma et le gaz neutre, qui ralentit la convergence du système. Diverses approches peuvent être mises en œuvre pour accélérer cette convergence, comme des méthodes multi-grilles s'appuyant sur des grilles de résolutions plus grossières pour approcher plus rapidement la solution stationnaire sur la grille cible. Travailler sur des grilles plus grossières permet bien évidemment de réduire le nombre de degrés de libertés, mais aussi et surtout de relâcher les contraintes sur les pas de temps imposés par le traitement explicite de certains termes (condition de Courant-Friedrich-Lévy).

Cependant, l'accélération de la convergence de telles simulations s'appuie encore largement sur les compétences de pilotage de code de l'utilisateur. Il est important de noter également que dans les

scénarios d'ITER le rayonnement des impuretés est essentiel pour contribuer à rendre plus isotrope le flux de puissance dans le divertor, et ainsi réduire les contraintes sur les matériaux. Donc bien que les concentrations d'impuretés " légères " (N, Ar, ... par opposition au tungstène) attendues soient de l'ordre de quelques %, celles -ci jouent un rôle clé du point de vue du bilan de l'énergie. Des simulations réalistes d'un plasma d'ITER sont donc nécessairement multi-espèces, avec typiquement une quinzaine d'espèces ioniques impliquées (D+, T+, He+, He2+, Ne+, ..., Ne10+), ceci supposant que le tungstène influe peu sur les conditions de plasma de bord et puisse donc être traité à posteriori dans une approximation de type " impureté trace ".

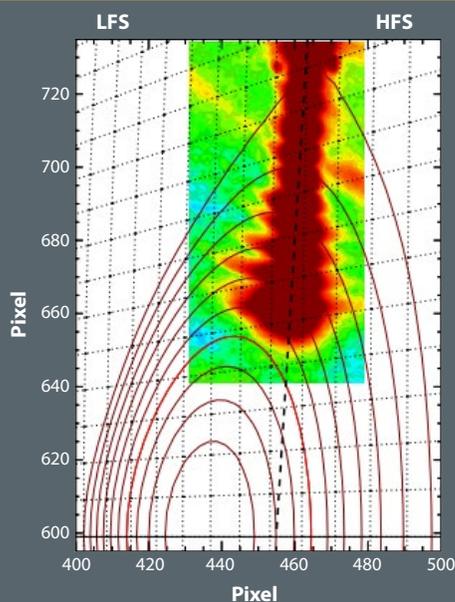
## Application de la hiérarchie à l'évaluation des erreurs de modèle

L'interprétation des résultats des codes numériques ainsi que leur comparaison à l'expérience nécessitent la connaissance des sources d'erreurs affectant la solution numérique. Celles-ci dépendent à la fois du modèle physique et de sa méthode de résolution : erreurs de **discrétisation** liées à la taille de la maille, erreur de convergence vers la solution pour un problème stationnaire, biais liés aux linéarisations dans les méthodes implicites, ... Des procédures bien établies existent pour déterminer ces erreurs (cf. Encart B). Une autre grande catégorie d'erreur est liée à la propagation des incertitudes sur les paramètres d'entrée des simulations (imprécisions sur la reconstruction magnétique, sur les taux de réactions ...). Enfin, les erreurs de modèle, résultant des approximations du modèle résolu, peuvent quant à elles être estimées en comparant les résultats obtenus pour un modèle donné avec ceux d'un modèle plus raffiné.

En pratique cela suppose qu'une implémentation de ce modèle raffiné existe et puisse bien être résolue pour le problème posé, ce qui n'est pas toujours le cas. A ce jour, des simulations fluides 3D turbulentes pour une machine de la taille d'ITER incluant la physique des neutres sont par exemple encore hors de portée.

## Conclusion

Le développement d'une chaîne de codes robustes applicable à l'échelle d'ITER et capable de calculer des barres d'erreurs sur les résultats à travers la mise en œuvre des techniques de quantification des incertitudes est l'un des enjeux clés de la décennie à venir, pour l'optimisation des scénarios d'ITER et ensuite l'interprétation des mesures. ■



A gauche : Image composite d'un glaçon injecté dans un plasma du tokamak MAST (Royaume-Uni), montrant une pénétration jusqu'à mi-rayon. La modulation du bord de l'image est liée à la reconstruction, non à une oscillation des nuages. L'axe principal de la machine se trouve du côté high Field Side (HFS), le plan équatorial à l'ordonnée "pixel"=598.

A droite : Vue depuis un queusot en haut de la chambre à vide de la lumière émise par un glaçon injecté dans le tokamak Tore Supra. Celui-ci pénètre jusqu'au-delà de la mi rayon dans la décharge. Les stries lumineuses sont alignées sur le champ magnétique.

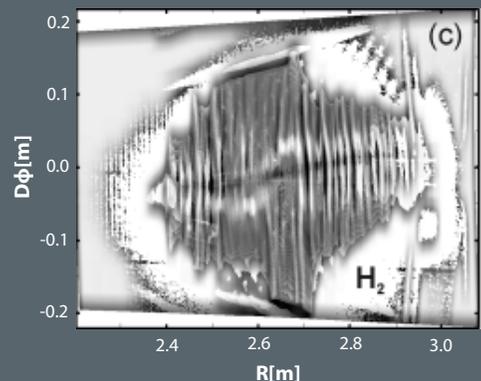


Fig. encart E

## RÉFÉRENCES

- [1] S. Baschetti, H. Bufferand, G. Ciraolo, Ph Ghendrih, E. Serre, et al., Self-consistent cross-field transport model for core and edge plasma transport. *Nuclear Fusion*, IOP Publishing, **61** (10), pp.106020. (2021)
- [2] H. Bufferand, J. Bucalossi, G. Ciraolo, G. Falchetto, A. Gallo, et al., Progress in edge plasma turbulence modelling hierarchy of models from 2D transport application to 3D fluid simulations in realistic tokamak geometry. *Nuclear Fusion*, IOP Publishing, **61** (11), pp.116052 (2021)
- [3] Pope S.B. 2000 Turbulent Flows (Cambridge: Cambridge University Press)
- [4] C. S. Chang, S. Ku, G. R. Tynan, R. Hager, R. M. Churchill, I. Cziegler, M. Greenwald, A. Hubbard, J. Hughes, Fast Low-to-High Confinement Mode Bifurcation Dynamics in a Tokamak Edge Plasma Gyrokinetic Simulation, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 175001 (2017)

## La simulation phénoménologique : un entre-deux

La modélisation phénoménologique vise à décrire de façon aussi simple que possible l'essentiel de la physique du phénomène auquel elle s'intéresse. Elle ne vise pas à une description exhaustive, mais à une précision de prédiction suffisante au regard de son utilisation ou de la variabilité intrinsèque du phénomène considéré.

### Rendre compte le plus simplement possible d'un ensemble de phénomènes expérimentaux

Elle part d'un corpus de résultats expérimentaux dont il convient de rendre compte par un ensemble de phénomènes physiques connus, modélisés avec un niveau de raffinement aussi homogène que possible. Elle laisse de ce fait une place significative à l'intuition. Le modèle validé, son principal avantage réside dans des temps de calcul relativement courts qui lui permettent de s'insérer dans les chaînes de modèles décrivant l'ensemble d'un scénario plasma.

Un bon exemple en est l'alimentation en combustible des plasmas par injection de glaçons. Il s'agit de billes millimétriques de glace d'hydrogène injectées de quelques centaines de mètres à un kilomètre par seconde dans la décharge. Le nuage de vapeur résultant de la vaporisation du glaçon par le plasma protège celui-ci et lui permet de pénétrer bien plus profondément que le ferait un simple nuage de gaz (Fig. encart E).

### Modéliser le transfert de matière d'un glaçon de deutérium au plasma

La description de ce phénomène et de la manière dont la matière résultant de la vaporisation du glaçon se répartit dans le plasma fait appel à un grand nombre de phénomènes physiques et implique des échelles spatiales et temporelles différant de plusieurs ordres de grandeur. On peut citer les transitions de phase à l'interface glaçon-nuage, la physique moléculaire et atomique qui gouverne la dynamique de l'ionisation de la vapeur ainsi que la puissance émise par rayonnement, le transfert de rayonnement au sein du nuage froid et dense qui détermine la puissance émise et influe sur l'expansion hydrodynamique du nuage, le profil de potentiel à l'interface nuage-plasma, enfin la Magnéto-Hydro-Dynamique (MHD) qui joue un rôle prépondérant dans la manière dont la matière du glaçon, une fois ionisée, se répartit dans la décharge. Les échelles temporelle et spatiale varient quant à elles de la microseconde et du millimètre pour décrire le nuage à proximité immédiate du glaçon (un centimètre sépare typiquement le glaçon à quelques 10 Kelvin du plasma à quelques  $10^7$  Kelvin) à la milliseconde et à la dizaine ou centaine de mètres pour rendre compte de l'homogénéisation dans le plasma de la matière déposée localement.

### Un modèle multi-physique pour décrire l'ablation des glaçons de deutérium

A défaut de décrire de façon détaillée tous les phénomènes impliqués, une solution satisfaisante peut être trouvée dans une description simplifiée des différentes phases : en supposant l'Equilibre Thermodynamique Local dans tout le nuage de vapeur (alors que ce n'est strictement vérifié que dans son cœur), en utilisant une valeur moyenne - indépendante des caractéristiques du nuage - pour les pertes par rayonnement, en condensant les subtilités de la distribution de potentiel dans la partie externe du nuage dans une simple gaine électrostatique ou en remplaçant la description MHD des déplacements de la matière une fois ionisée par un ensemble de courants circulant le long des lignes de champ. La construction d'un tel modèle repose sur une série d'allers-retours entre l'expérience et la simulation. La démarche étant en partie inductive : identifier les phénomènes capturant l'essentiel de la physique et les mettre en équation de la façon la plus simple possible, ce n'est pas le cadre théorique initial qui valide le résultat des simulations, mais la capacité de celles-ci à reproduire un ensemble de situations expérimentales le plus large possible. De fait, le modèle d'alimentation en combustible des plasmas par injection de glaçons évoqué ici a été validé sur un grand nombre d'expériences, effectuées sur des **tokamaks** et des stellarators (ce dernier point étant d'importance car le dépôt final de matière dépend des spécificités de la configuration magnétique). Associant une description suffisamment fiable de la physique à un temps de calcul restant raisonnable, ce modèle est régulièrement utilisé dans les définitions de scénarios pour les prochaines machines (JT-60SA, ITER, **DEMO**).

# DIAGNOSTICS SYNTHÉTIQUES

par **Didier Vézinet, Guilhem Dif-Pradalier  
& Anna Medvedeva**

La confrontation simulations-expériences est aujourd'hui au cœur de la **validation** indispensable des codes de simulation. Le plasma magnétisé au sein d'un **tokamak** est pourtant un milieu extrême qui ne se prête pas à une mesure aisée et directe des grandeurs d'intérêts pour ces codes. Il faut donc modéliser numériquement les processus supposément à l'œuvre lors de la mesure par le diagnostic expérimental, c'est le travail du diagnostic synthétique.





Dans la communauté de recherche sur la fusion, le terme diagnostic désigne un système de mesure, un moyen de « diagnostiquer » expérimentalement ce qu'il se passe dans le plasma. Il peut s'agir d'une mesure passive comme un système d'observation optique dans différentes longueurs d'onde, ou d'une mesure active (perturbative, à des degrés divers) comme la réception d'une onde préalablement émise vers le plasma pour en caractériser la réflexion sur une couche spécifique du plasma (couche de coupure).

### La mesure expérimentale

Le tokamak WEST, opéré par l'IRFM (CEA), dispose d'une quarantaine de diagnostics. Il en est de même sur ITER. Ces chiffres sont le compromis de difficiles arbitrages entre la nécessité de mesurer et de multiples contraintes comme l'encombrement.

Les plasmas magnétisés, chauds, raréfiés et intrinsèquement dynamiques ne se prêtent souvent pas à une mesure aisée. Les diagnostics sont donc généralement des systèmes complexes, qui permettent de n'accéder à la grandeur d'intérêt que par des chemins détournés ou dans le cadre d'hypothèses plus ou moins restrictives. Il est donc nécessaire de bien connaître et comprendre les limites et le cadre de validité d'une mesure. D'autre part il est généralement recommandé d'assurer la

redondance de certaines mesures par plusieurs systèmes fonctionnant sur des principes différents, pour élargir le domaine de mesure, les cas d'usages, ou encore réduire les incertitudes.

Une fois l'ensemble des diagnostics conçus, installés, alignés, testés, calibrés, il est possible de distinguer plusieurs usages des mesures produites par tous ces systèmes.

Il y a d'abord les mesures qui sont indispensables à l'opération du tokamak. Il s'agit de mesures généralement faites par des systèmes robustes et rapides qui donnent, en temps réel, une idée de l'état global du plasma et de la machine qui le génère. Certaines de ces mesures peuvent être associées à des mécanismes d'alerte qui assurent l'intégrité de la machine.

Viennent ensuite les mesures nécessaires pour quantifier l'écart à la cible du programme expérimental. Il s'agit là de savoir si un plasma a rempli les conditions requises pour répondre aux questions spécifiques pour lesquelles il a été conçu. En effet, des scénarios (de chauffage, de configuration magnétique...) sont mis au point pour essayer de créer un plasma spécifique pour atteindre un objectif donné (exploration d'un domaine opérationnel, étude d'instabilités...).

Ces mesures sont typiquement analysées pendant les quelques dizaines de minutes qui séparent deux plasmas consécutifs. Ce temps sert à comprendre ce qui a marché, ou pas, et à ajuster le paramétrage de la machine pour s'approcher de l'objectif expérimental.

Enfin, une campagne expérimentale ne se résume pas aux quelques mois pendant lesquels le tokamak est en fonction. La grande quantité de données produites lors d'une seule campagne est ensuite scrutée pendant de longs mois

d'analyse détaillée. Il s'agit de comprendre les choses en profondeur, de tester des modèles et des hypothèses. Certaines mesures sont alors retraitées, ou invalidées ; des erreurs systématiques peuvent être découvertes, des tendances physiques mises à jour à la lumière d'analyses statistiques. C'est pendant cette troisième phase qu'intervient généralement l'usage des diagnostics synthétiques tels que nous allons les discuter ici.

En effet, c'est pour permettre la validation de modèles de physique du plasma que sont principalement conçus les diagnostics synthétiques.

Un diagnostic synthétique est une re-création numérique des processus supposément à l'œuvre lors de la mesure expérimentale. Sa fonction est de reconstruire dans le cadre de modèles physiques explicites, via la simulation numérique, des données ou mesures « synthétiques », telles que pensées mesurées et ensuite confrontées aux mesures véritables (expérimentales). Un diagnostic synthétique requiert donc a minima tant la modélisation du phénomène physique que la prise en compte de la réponse de l'appareil de mesure (la « fonction d'instrument »). Il vient en fin de chaîne de simulation, et vise à calculer les données que le diagnostic aurait produit sur un plasma tel qu'issu de la simulation. L'écart avec les mesures expérimentales quantifie alors les limites du modèle, ou celles de notre compréhension de la fonction d'instrument, ou les deux.

### Lieu de convergence théorie-expérience-simulation

La validation d'une théorie passant par sa comparaison avec l'expérience, la question des procédures à mettre en place pour une comparaison discriminante vis-à-vis des

hypothèses qu'on cherche à tester devient centrale. Les diagnostics synthétiques, conçus comme lieu privilégié de cette comparaison, doivent être pensés afin que cette comparaison soit la plus pertinente possible.

A la question « sur quels observables physiques doit-on raisonner pour avoir une comparaison discriminante ? » s'ensuivent immédiatement d'autres questions :

- Quel lien ces observables entretiennent-elles avec la réalité expérimentale ? Par quelles étapes doit-on passer (via la mesure et via le calcul) pour les générer ?
- Les observables sont-elles robustes vis-à-vis des étapes de la mesure ? Leur obtention suppose-t-elle l'introduction d'hypothèses fortes ?
- Simulés, ces observables sont-elles fortement sensibles à l'implémentation du modèle physique ou du modèle de la fonction d'instrument ?

Prenons par exemple le cas de la mesure, indirecte, de la température des électrons. Sur WEST, comme sur beaucoup de toka-

maks, celle-ci provient d'une mesure de la puissance, dans différentes bandes de fréquence, du rayonnement cyclotronique électronique (ECE). Cette puissance est reliée à la température des électrons, mais sous certaines conditions seulement [1].

Celles-ci incluent que le plasma soit d'une densité suffisante pour se comporter comme un corps noir dans les bandes de fréquence en question, ce qui est faux au bord du plasma par exemple.

Ces contraintes réduisent l'espace des paramètres dans lequel la comparaison théorie-expérience est faisable, et, bien conçu, le diagnostic synthétique doit alerter sur le dépassement de ses conditions de validité.

Une autre source d'incertitude réside dans la fonction d'instrument par laquelle transite le signal au sein du diagnostic. Elle peut être caractérisée empiriquement par une calibration. Mais celle-ci ne reproduit pas nécessairement les conditions de mesure sur plasma (vibrations, niveaux de puissance, température ambiante, etc) et des

extrapolations peuvent être nécessaires sur le comportement de certains composants, qui, de surcroît, peuvent vieillir. Estimer la fonction d'instrument en conditions réelles n'est donc pas immédiat.

Cette seconde limite pose la question du bon choix des grandeurs à comparer. Est-il plus pertinent de comparer directement des grandeurs d'intérêt (i.e. les températures mesurée et reconstruite), ou plus robuste de comparer des signaux intermédiaires (une tension, un nombre de coups par seconde) avec leurs équivalents reconstruits par diagnostic synthétique ?

La seconde option n'est pas une solution simple : pour réduire l'incertitude due à la sensibilité de la fonction d'instrument aux conditions opérationnelles, le diagnostic synthétique devra produire des données internes au fonctionnement du diagnostic (et ainsi, devenir plus complexe) et nécessitera donc paradoxalement une connaissance fine de la fonction instrumentale, l'objet même de la difficulté...

Toute la subtilité consistera à estimer le « bon » niveau de com

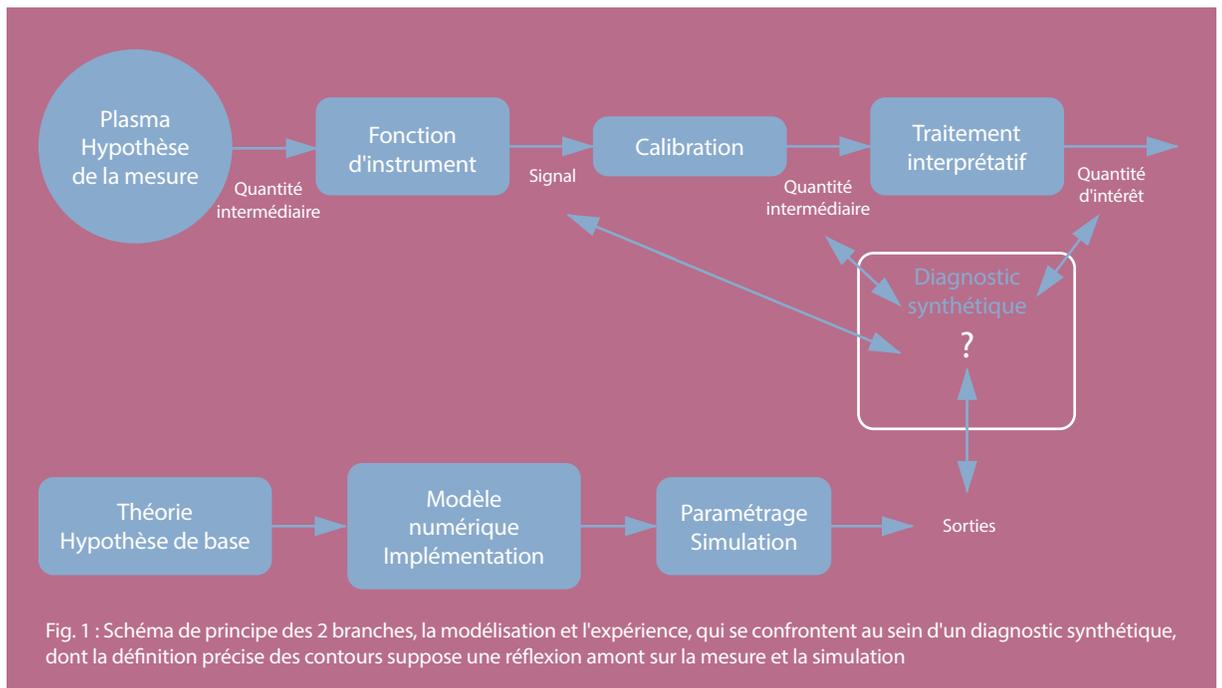


Fig. 1 : Schéma de principe des 2 branches, la modélisation et l'expérience, qui se confrontent au sein d'un diagnostic synthétique, dont la définition précise des contours suppose une réflexion amont sur la mesure et la simulation

promis entre robustesse, degré de précision, complexité et pertinence physique et ainsi établir une hiérarchie des observables accessibles à la mesure. C'est ce questionnement sur le niveau auquel doit se faire la comparaison qui est illustré sur la **Figure 1**.

Prenons pour autre exemple celui du diagnostic synthétique de réflectométrie qui peut aider à identifier les écoulements turbulents dans le plasma du tokamak. La réflectométrie à micro-ondes dans un tokamak est une technique de type radar, basée sur la dépendance de l'indice de réfraction du plasma vis-à-vis de la densité électronique. Agissant comme une sonde, une onde se propage dans un plasma inhomogène jusqu'à une couche du plasma où elle se réfléchit comme on peut le voir sur la **Figure 2**.

Comme la position de la couche dépend de la fréquence des ondes, la densité du plasma peut être mesurée à différentes surfaces magnétiques du plasma. Les mesures de réflectométrie (amplitude et phase de l'onde) sont liées aux fluctuations turbulentes par des fonctions non-linéaires dites de transfert dont la détermination est l'un des objets du diagnostic synthétique.

Celui-ci comprend trois parties : tout d'abord la turbulence est modélisée numériquement, ensuite la propagation des micro-ondes dans ce plasma synthétique est simulée, et finalement un équivalent du signal expérimental du réflectomètre (la phase et sa variation) est reconstruit en appliquant une partie de sa fonction d'instrument. Les choix possibles sont alors par exemple :

- Un modèle de turbulence homogène est-il suffisant ?
- L'équation de propagation des ondes doit-elle être 2D pour tenir compte des effets de courbure ou

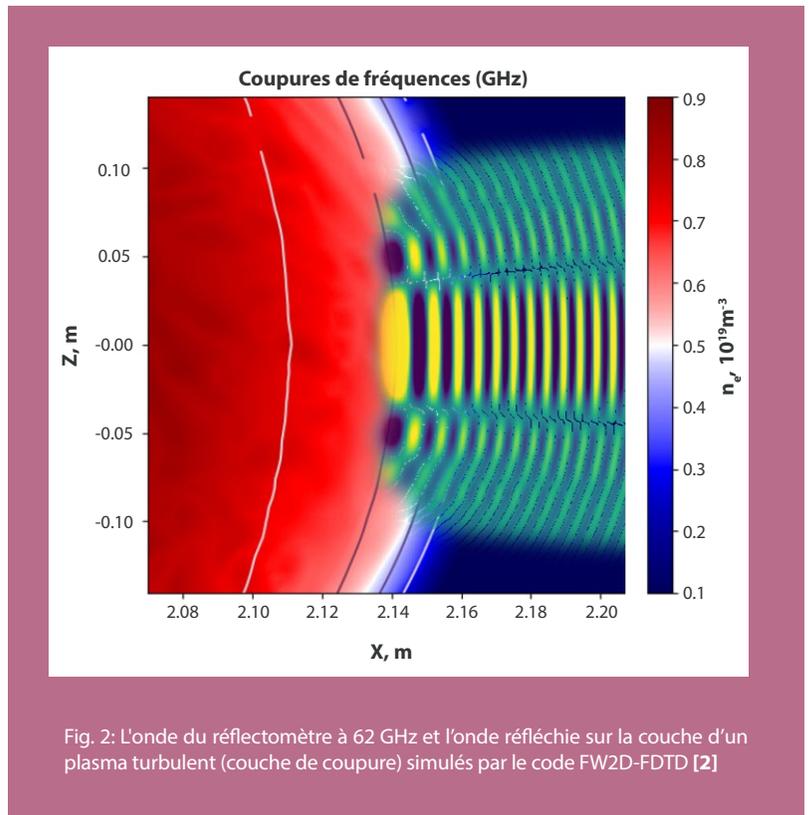


Fig. 2: L'onde du réflectomètre à 62 GHz et l'onde réfléchie sur la couche d'un plasma turbulent (couche de coupure) simulés par le code FW2D-FDTD [2]

une version 1d est-elle suffisante pour extraire la phase d'onde ?

- A quel point la fonction d'instrument peut-elle être simplifiée ? Le diagramme de réception de l'antenne est-il suffisant ?

Chaque étape du diagnostic synthétique induit des incertitudes d'estimation de la fonction de transfert et in fine du niveau de turbulence. Ces incertitudes sont de l'ordre de 50% pour le choix du modèle turbulent, puisque l'instrument est très sensible aux propriétés spectrales de la turbulence et aux effets non-linéaires pour un fort niveau de turbulence [3]. Ensuite, un code 1D ne peut pas rendre compte de la déformation 2D de la couche de coupure qui peut provoquer une déflexion du faisceau réfléchi. Enfin, chaque composant de la ligne de transmission peut induire une perte de rapport signal/bruit, entraînant de possibles erreurs d'interprétation [4].

Avec l'augmentation de la puissance informatique, les hypothèses simplificatrices ayant trait aux caractéristiques de la turbulence dans laquelle l'onde sonde se propage peuvent être relaxées. Il devient possible de considérer le résultat de simulations de turbulence de plus en plus élaborées, de les coupler avec un code de propagation d'ondes 2D et ainsi de produire des fonctions de transfert (d'appareil) multidimensionnelles.

On voit poindre une difficulté : nous ne disposons que d'un seul outil pour évaluer au minimum deux inconnues : la qualité du modèle et la qualité de la modélisation de la fonction d'instrument.

Cette indétermination peut être partiellement levée par exemple par une bonne modélisation des mesures obtenues pendant une calibration, lorsque la source est connue, ou par la multiplication des conditions plasmas dans lesquelles sont effectuées les mesures. Cela, permet dans certains

cas, et au moins asymptotiquement et de manière incrémentale, de vérifier que l'on modélise correctement la fonction d'instrument de se rapprocher du but premier d'une « validation » de notre cadre de compréhension.

Le diagnostic synthétique aide donc à questionner l'aller-retour conceptuel entre la réalité et le modèle, par exemple en fournissant une quantification de ce qui relève d'une tendance robuste et de ce qui relève du bruit, numérique ou autre. Du point de vue de la simulation, un tel travail nécessite au préalable une démarche (souvent dite de « vérification ») de certains aspects du calcul, visant à s'assurer que le modèle est correctement implémenté, et à estimer des sensibilités (par exemple aux conditions initiales), des incertitudes ou des propagations d'erreurs. Comme pour la mesure, cette réflexion conduit à établir une hiérarchie d'observables en fonction de leur robustesse et la sophistication du traitement nécessaire à leur production par la modélisation.

C'est la rencontre de ces hiérarchies d'observables expérimentales et numériques qui permet d'éclairer notre compréhension des mécanismes physiques intimes, difficilement accessibles sans le truchement d'un diagnostic synthétique.

## Des verrous numériques qui font leur apparition

Il est à noter qu'avec la complexité croissante des appareils de mesure, comme par exemple l'utilisation de guides d'ondes longs et sophistiqués jusqu'aux détecteurs comme ce sera le cas pour ITER, une bonne détermination de la fonction d'instrument devient importante. Cela revient à modéliser une part croissante de la machine interne du diagnostic lui-même et de son fonctionnement.

C'est une tendance qui accompagne la percolation des outils numériques dans toutes les communautés scientifiques et à laquelle fait écho la notion de « jumeau numérique », paraphrasant Feynman, « on ne comprend bien que ce que l'on peut créer ». Le revers de cette tendance est une complexification (au moins temporaire) de la modélisation, qui au modèle du plasma doit ajouter un modèle du diagnostic (partiel ou complet).

Un tel effort peut se révéler important. L'augmentation de la précision du diagnostic synthétique requiert l'adjonction d'effets de plus en plus fins, ce qui peut demander des ressources informatiques significatives. De même, le diagnostic synthétique peut être amené à être intégré à la chaîne de calcul et à en constituer un module à part entière, nécessitant par exemple ses propres stratégies d'optimisation ou de parallélisation. De ce point de vue la complexification des diagnostics synthétique force une convergence des problématiques et donc des communautés (expérimentales, théoriques, numériques) pour bien penser ce lieu privilégié de la confrontation au réel. ■

## RÉFÉRENCES

- [1] J-L. Segui et al., *Review of Scientific Instruments*, **76** (2005)
- [2] A. Medvedeva et al., *Development of the synthetic diagnostic for the ultra-fast swept reflectometer. 14th International reflectometry workshop* (2019)
- [3] L. Vermare et al., *Nucl. Fusion* **46**, S743 (2006)
- [4] C.M. Muscatello et al., *Nucl. Fusion*, **60** 066005 (2020)

# LA MODÉLISATION DES SCÉNARIOS PLASMA

par **Clarisse Bourdelle & Gerardo Giruzzi**

La simulation des différents phénomènes physiques qui interviennent dans les plasmas de fusion, malgré les formidables progrès accomplis dans les dernières années, n'est pas suffisante pour prédire le comportement du plasma dans les machines à confinement magnétique, comme les tokamaks. Pour cela, il est nécessaire de simuler la décharge plasma complète, dans toute sa complexité, autrement dit le scénario plasma. A ce jour, ceci ne peut pas se faire en utilisant, pour chaque phénomène, le modèle le plus avancé et donc coûteux en temps de calcul. Un effort important a donc été engagé pour développer des modèles réalistes mais suffisamment simples pour être intégrés dans une simulation globale. C'est le défi de la modélisation intégrée des scénarios plasma, un élément important dans les recherches actuelles et qui sera essentiel pour les futures centrales à fusion, et déjà pour ITER.

# #8

# #8

## LA MODÉLISATION DES SCÉNARIOS PLASMA

### Modélisation globale d'une décharge plasma

Le plasma d'un tokamak est un système complexe sous plusieurs points de vue. D'une part, à cause de la complexité intrinsèque des phénomènes physiques qui déterminent son évolution : dynamique couplée des électrons, des ions et des ondes que le plasma même génère, dans un espace des phases multidimensionnel, interaction avec les systèmes de chauffage, avec les champs magnétiques de contrôle, avec les parois qui l'entoure, rayonnement dans plusieurs gammes de longueur d'onde, instabilités magnétohydrodynamiques (MHD), turbulence électromagnétique, etc. D'autre part, à cause de l'interaction non-linéaire entre tous ces phénomènes au cours de l'évolution temporelle, interaction qui sera d'autant plus développée que le régime de combustion thermonucléaire sera atteint. À cause de cette double complexité, depuis plusieurs années le besoin a été ressenti d'un compromis entre simulation très détaillée de chaque phénomène et simulation globale de la décharge plasma, dans le but de prédire, guider et interpréter les expériences. Dans une machine comme ITER, la préparation d'une décharge par ce genre de simulation aura pour objectif de maximiser la performance, mais constituera aussi un premier élément d'optimisation de la

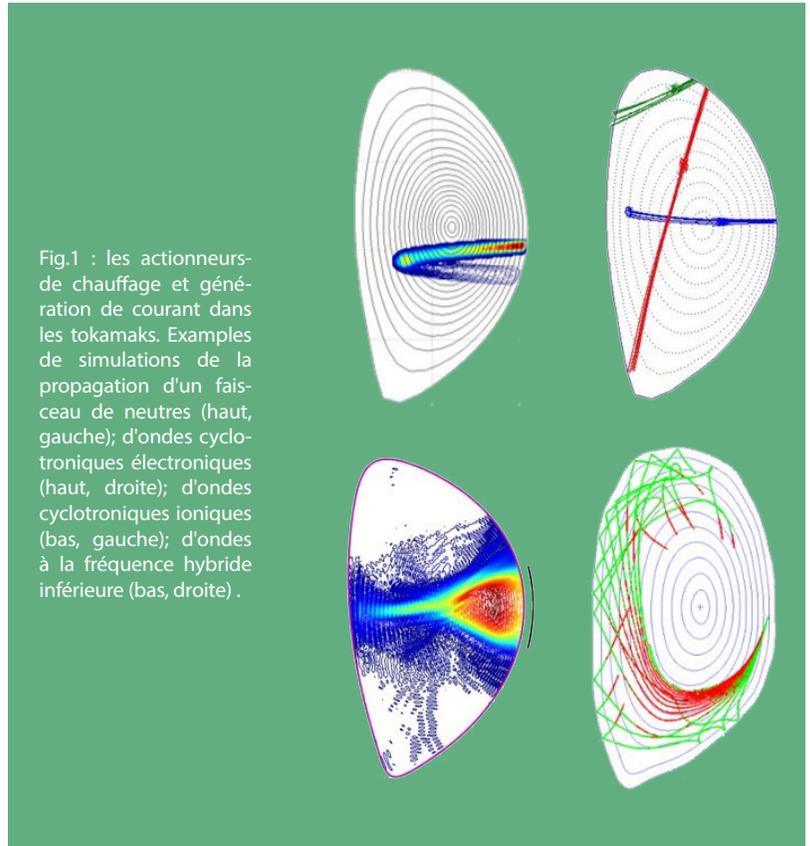


Fig.1 : les actionneurs de chauffage et génération de courant dans les tokamaks. Exemples de simulations de la propagation d'un faisceau de neutres (haut, gauche); d'ondes cyclotroniques électroniques (haut, droite); d'ondes cyclotroniques ioniques (bas, gauche); d'ondes à la fréquence hybride inférieure (bas, droite) .

stratégie d'exploitation de la machine. Il est donc primordial que les outils de simulation soient suffisamment précis et validés par comparaison avec d'autres expériences.

### Le scénario plasma

Cela passe par l'intégration de modules de physique permettant de reproduire ce que l'on appelle un scénario plasma. Un scénario plasma décrit, pour un objectif de performances (contenu énergétique, durée, stabilité, compatibilité avec la paroi), les consignes à appliquer aux actionneurs disponibles pour la conduite des expériences, les principaux étant: le courant dans les bobines de champ magnétique, la quantité de gaz injecté, la puissance additionnelle injectée pour le chauffage du plasma. Un scénario est d'autant plus significatif qu'il conduit à un ensemble cohérent de propriétés du plasma

(ou régime), reproductible sur plusieurs machines à fusion du même genre. Par exemple, pour les tokamaks: régime de type mode H, régime hybride, régime à barrière interne de transport, régime à courant non-inductif. Le scénario doit décrire toutes les phases de la décharge : amorçage de la décharge plasma, formation d'une structure particulière du champ magnétique grâce aux bobines et au courant induit dans le plasma, chauffage et génération non-inductive de courant par ondes ou par faisceaux de particules neutres (**Figure 1**), chauffage du plasma par les réactions de fusion elles-mêmes, transport turbulent des grandeurs conservées (énergie, particules et moment angulaire), pureté du mélange Deutérium et Tritium au cœur du plasma, stabilité globale MHD, flux de chaleur en interaction avec le divertor, pertes d'énergie par rayonnement et, enfin, descente du courant et fin de la décharge.

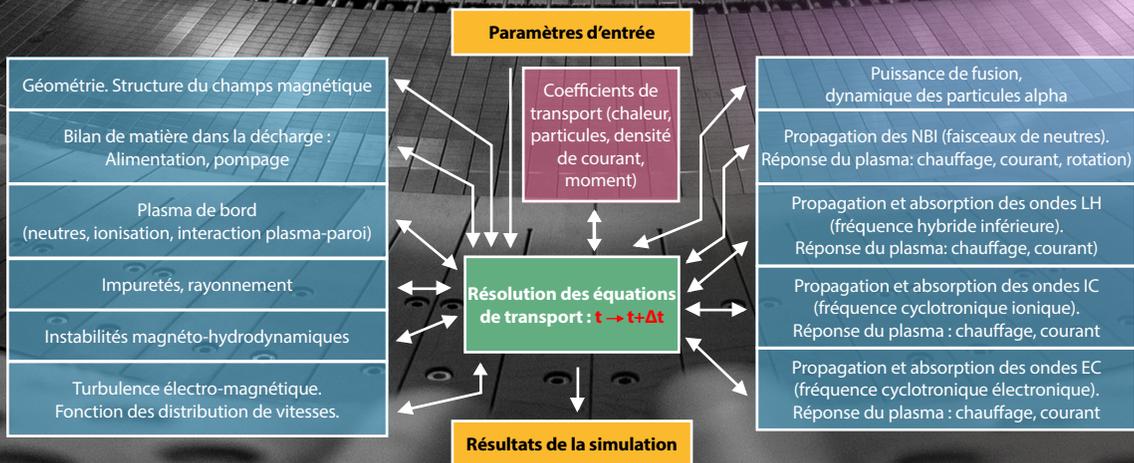


Fig.2 : Schéma de principe de la simulation intégrée permettant de reproduire et prédire l'évolution temporelle du plasma de tokamak.

La modélisation d'un scénario plasma implique le calcul auto-cohérent et dépendant du temps de quatre types de quantités (Figure 2):

1) l'équilibre magnétique, c'est-à-dire la structure tridimensionnelle du champ magnétique d'équilibre qui permet, à chaque temps, le confinement du plasma

2) l'évolution d'un certain nombre de quantités globales, c'est-à-dire intégrées spatialement ou indépendantes de l'espace. Par exemple: le courant total circulant dans le plasma, les densités électronique et ionique moyennes, la puissance totale injectée, le volume du plasma, etc.

3) les profils des quantités dépendantes de l'espace, la plupart d'entre elles à une dimension (les symétries de la configuration magnétique et des trajectoires des particules étant exploitées pour appliquer des moyennes appropriées), mais aussi, pour certaines, en deux ou même trois dimensions. Par exemple: les profils des températures et des densités électronique et ionique, le profil de la puissance de chauffage déposée sur les électrons ou sur les ions, le profil de la densité de courant, l'intensité du rayonnement émis dans

une certaine gamme de fréquence à un certain point du plasma, etc.

4) les quantités qui peuvent être comparées directement aux mesures expérimentales, en tenant compte des caractéristiques des instruments de mesures. C'est les diagnostics synthétiques (présentés dans l'article #7 **Diagnostics synthétiques**). Par exemple: l'amplitude et la phase d'une onde réfléchie par le plasma et injectée en balayant la fréquence, afin de mesurer la densité du plasma avec ses fluctuations dues à la turbulence. Comme montré en Figure 2, le noyau de ces calculs est la résolution numérique, par pas temporels successifs, des équations de transport des quantités fondamentales du plasma: densités et températures des électrons et des ions, densité de courant, vitesse de rotation du plasma.

Un exemple de certaines de ces quantités, obtenues par la simulation prédictive d'un scénario de référence d'ITER en utilisant le code CRONOS [1], développé par le CEA, est montré en Figure 3.

### Le défi des couplages nonlinéaires pour un plasma en état de combustion thermonucléaire

Au cours d'un scénario plasma de nombreuses non-linéarités existent. Par exemple : le courant induit est aussi une source de chauffage du plasma par effet Joule : en modifiant la température de ce dernier, sa conductivité augmente et le chauffage ohmique devient de moins en moins efficace. Ces non-linéarités sont particulièrement développées pour un plasma en état de combustion thermonucléaire.

Dans ITER, le plasma lui-même sera la source principale de chaleur grâce aux réactions Deutérium-Tritium. Dans ce régime il faudra donc maximiser la température ionique au centre, tout-évacuant les cendres des réactions de fusion (particules alpha, c'est-à-dire, noyaux de He4) du cœur du plasma. En plus, pour les scénarios les plus avancés, la majorité du courant plasma sera auto-générée par le plasma lui-même (effet bootstrap). La présence des particules alpha très énergétiques cause un ensemble d'instabilités MHD spécifiques (#3 **Instabilités macroscopiques en présence de particules énergétiques**) qui

vont influencer de manière importante les performances du scénario.

Afin de préparer l'opération d'ITER, ces couplages non-linéaires doivent être dès maintenant validés à grande échelle sur des scénarios plasmas réalisés sur les tokamaks actuellement en opération, comme WEST, ASDEX Upgrade, JET etc. Il est aussi impératif de tester la réponse du plasma aux actionneurs qui est identifiée grâce à ces modélisations et de simuler l'effet des boucles de contre-réaction (éléments essentiels de l'opération d'un tokamak). Par exemple, la modélisation intégrée a permis de comprendre, à partir des expériences de JET et d'ASDEX Upgrade, que l'augmen-

tation du rayonnement d'une impureté lourde comme le tungstène au centre de certaines décharges pouvait être limitée en minimisant la source de particules dans la partie centrale du plasma. Celle-ci est contrôlée par l'intermédiaire des énergies et des angles d'injection des faisceaux de neutres qui chauffent le plasma.

Pour préparer les scénarios plasmas d'ITER, l'effort de validation des simulations intégrées en cours doit être poursuivi en augmentant le nombre de décharges modélisées et validées. Cela passe par :

- Des modules de physique plus rapides tout en restant physiquement complets pour le niveau de précision désiré. Ceci implique le développement d'une hiérarchie

de modèles qui requiert la mise en commun de l'expertise acquise par l'ensemble des théoriciens et des modélisateurs travaillant sur les approches «1ers principes », afin de proposer une réduction grâce à des approximations valides dans une large gamme de paramètres.

- L'emploi d'outils de «Machine Learning» pour faire des ajustements multidimensionnels intelligents des données issues de codes complets, afin de compléter la recherche de rapidité de calcul tout en maintenant la fiabilité. Par exemple: on produit un grand nombre de simulations de la turbulence du plasma, en variant de manière systématique les paramètres d'entrée, chaque simulation nécessitant plusieurs heures,

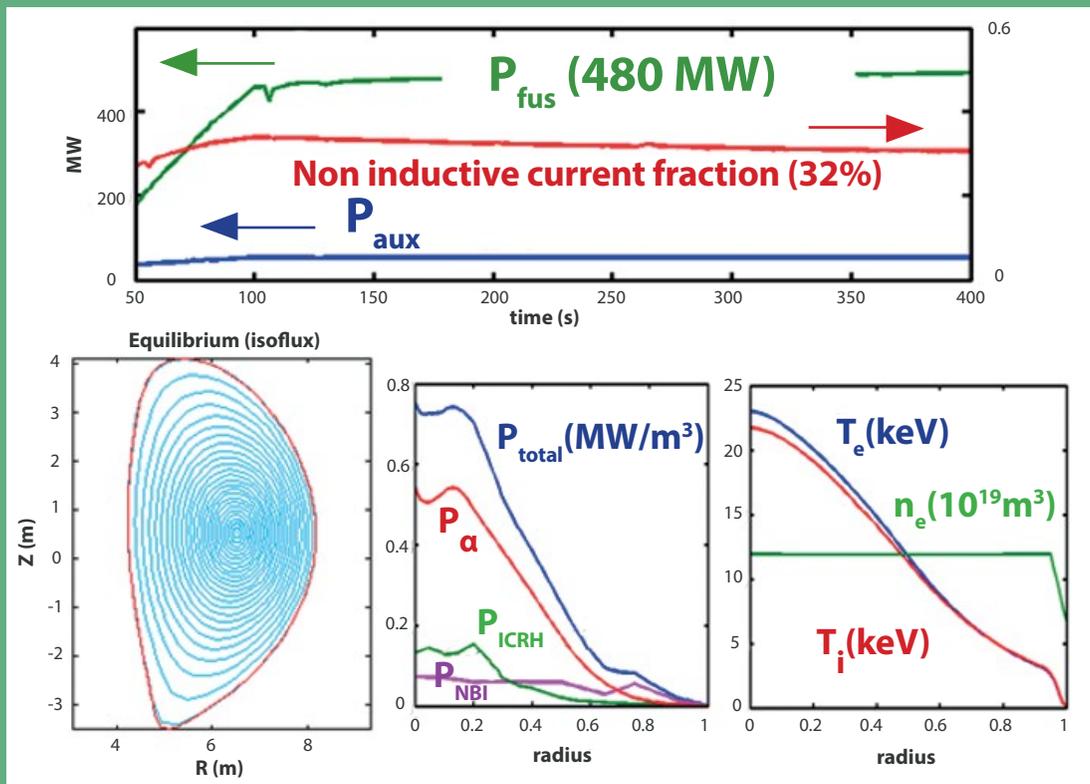


Fig.3 : exemple de simulation prédictive d'un scénario de référence d'ITER par le code CRONOS. En haut: quantités dépendantes du temps. En bas: équilibre magnétique (gauche) et profils radiaux de quantités dépendantes de l'espace: puissances de chauffage (milieu), densité et températures (droite).

voire jours de calculs sur un grand nombre de processeurs. Ensuite on utilise cette base de données de simulation pour faire apprendre à un algorithme d'intelligence artificielle la dépendance des caractéristiques de la turbulence par rapport aux paramètres physique d'entrée. L'apprentissage permet finalement d'élaborer un modèle réduit à insérer dans les codes de modélisation intégrée, avec un gain énorme en vitesse de calcul. C'est ce qui a été fait pour les modules de transport turbulent qui étaient parmi les plus lents des boucles de simulation intégrée [2].

- L'intégration de plusieurs modules (jusqu'à quelques dizaines) de nature, vitesse, complexité, performances numériques différentes et souvent écrits en des langages informatiques différents. Celle-ci est une tâche d'une grande difficulté, chaque module étant développé et testé pour fonctionner

de manière optimale dans un domaine de paramètres donné, pas forcément celui de la simulation globale.

- Une validation automatisée à grande échelle avec mise en place de méthodes statistiques permettant de comparer des données expérimentales 0D (énergie, consommation de flux magnétique), 1D (profils de températures, densités, rotation) ou 2D (rayonnement, mesures intégrées le long d'une ligne de visée). À noter que le même format pour les données expérimentales et de modélisation est maintenant utilisé, afin de faciliter cette comparaison multi-machines et multi-codes à grande échelle. Il s'agit de la «ITER Integrated Modelling and Analysis Suite (IMAS)» [3].

Si les progrès en puissance de calcul réalisés dans les dernières années sont indéniables, ils sont essentiellement fondés sur l'uti-

lisation du calcul massivement parallèle et les performances sont maximisées pour la solution de problèmes mathématiques particuliers (inversion de grandes matrices, par exemple). Or, comme discuté auparavant, la modélisation des scénarios plasma nécessite l'orchestration d'un grand nombre de modules de nature différente. Il est essentiel d'accélérer l'exécution de chacun de ces modules, en particuliers des plus lents, soit en recourant au calcul parallèle, soit en utilisant des versions accélérées grâce aux techniques de «Machine Learning». Ces techniques ouvrent des perspectives prometteuses pour optimiser les boucles temporelles pour différents modules de physique évoluant sur différentes échelles de temps afin d'accélérer la convergence des simulations des scénarios plasma. ■

## RÉFÉRENCES

[1] J.F. Artaud et al., *Nucl. Fusion*, **50**, 043001 (2010)

[2] K.L. van de Plassche et al., *Physics of Plasmas*, **27**, 022310 (2020)

[3] F. Imbeaux et al., *Nucl. Fusion* **55**, 123006 (2015)

# EN GUISE DE CONCLUSION

par Eric Serre & Philippe Ghendrih

C onclusion

#9



Les présentations de ce numéro de Sciences en Fusion sont organisées en fonction de leur proximité à l'expérience, de la théorie, la mise en œuvre de celle-ci dans des expériences numériques, puis progressivement l'étude des scénarios expérimentaux d'interaction plasma-paroi et des performances du plasma central. Cette diversité traduit deux directions de recherche, l'ambition de simuler la physique complète des plasmas d'ITER à partir d'équations fondamentales, et par ailleurs la nécessité de simuler l'opération du **tokamak** pour optimiser la recherche de performance et minimiser les risques ; deux visions et deux rêves du tokamak numérique.

Dans le cas de la fusion par confinement magnétique ces deux visions sont étroitement liées et complémentaires car la performance et le fonctionnement de la machine sont très étroitement liés à la physique mise en œuvre. Si la perspective du tokamak numérique est le but ultime, l'approche suivie par les équipes est avant tout pragmatique. Chaque équipe dispose d'un outil performant dans un domaine de la physique du tokamak, par exemple l'étude de la **turbulence plasma** ou celle de la Magnéto-Hydro-Dynamique. Graduellement le domaine d'application et de validité des outils est étendu et les premiers recouvrements sont en cours notamment dans le domaine des scénarios plasmas. En effet,

les nouveaux schémas HDG pour l'étude des scénarios d'interaction plasma-paroi permettent l'étude du plasma de cœur, offrant la possibilité de synergie avec l'étude des scénarios du plasma central.

Le lien avec l'expérience reste un fil rouge de la simulation des plasmas de fusion. La communauté fusion a cependant développé une vision particulière de la notion de **validation**. A priori, dans une version d'ingénierie, la validation est une confrontation des résultats des simulations avec un ensemble de réalisations expérimentales permettant une interpolation par la simulation. Dans le domaine de la fusion, la validation consiste en un accord entre simulation et des mesures issues de l'expérience. La modélisation phénoménologique constitue ainsi une validation au sens retenu par la communauté fusion. La multiplicité des conditions de validation dans cette acceptation du terme crée un flou autour de cet objectif. Cette situation se justifie par la difficulté des mesures dans les plasmas de tokamak, ne donnant qu'une vision parcellaire de la physique en œuvre. Le rôle de la simulation est souvent celui de compléter l'expérience en utilisant l'information expérimentale disponible pour dévoiler, extrapoler, l'information n'est pas mesurée mais qui est nécessaire à la compréhension. Cette simulation a un rapport très étroit avec l'expérience. Les problèmes liés à cette approche de la validation sont alors la réduction du nombre de paramètres libres, de leur variabilité d'une simulation à une autre, l'identification des contraintes imposées par les données reprises de l'expérience et enfin l'estimation d'une distance entre le rendu des simulations et les mesures qui ne sont pas déjà incorporées dans le modèle numérique. S'ajoute, sans doute, les conditions pour extrapoler les résultats aux conditions des plasmas d'ITER. Pour

les simulations numériques reposant sur les équations fondamentales, l'enjeu est analogue à celui de la théorie, donc plutôt celle d'une confrontation à l'expérience. Il s'agit alors d'une interrogation mutuelle simulation-expérience permettant d'identifier les mécanismes à l'œuvre ou de déterminer les limites du modèle voire de la mesure. Dans les deux cas, la confrontation participe de la connaissance du système complexe que constitue les plasmas de tokamaks. La confrontation et la comparaison aux expériences sont donc un enjeu très important pour l'effort de simulation et pour l'avancement des expériences. Il est regrettable que le terme de validation souvent mis en avant ne rende pas compte de cette synergie.

Dans ce numéro, les chapitres abordent à la fois un aspect des métiers de la simulation et l'effort d'une équipe de simulation développant un ou plusieurs outils avec l'objectif de simuler les plasmas d'ITER. La théorie, le passage à l'**exascale**, l'adaptation des codes aux nouveaux calculateurs, portage ou refonte du code, les maillages, les chaînes de modèles, l'utilisation des bases de données et de l'intelligence artificielle, l'utilisation des diagnostics synthétiques se retrouvent dans tous les efforts de simulation. La diversité des sujets abordés par les simulations, leur complémentarité, s'accompagnent ainsi d'une communauté des compétences et savoir-faire. Pour la Fédération de Recherche sur la Fusion par Confinement Magnétique il s'agit d'une vraie richesse et l'occasion d'échanges, de confrontations, de débats scientifiques qui sont une nécessité pour aborder les besoins et les défis des simulations pour ITER. ■

# GLOSSAIRE

**Benchmarks** : méthode visant à comparer les résultats des diverses simulations traitant de la même problématique.

**Calcul scalaire** : calcul sur des nombres entiers ou des nombres réels.

**Calcul vectoriel** : calcul opérant sur des vecteurs et généralement mis en œuvre par des opérations sur des matrices.

**Coeur** (de calcul) : unité de calcul miniaturisée. Elle est capable d'effectuer des opérations arithmétiques et logiques.

**Cinétique** (modèle, paramètre) : description de l'évolution d'un système physique en fonction des vitesses de réalisation de processus (diffusion, réaction, transformation...) ou bien en fonction de la vitesse des particules.

**Collisions coulombiennes** : interactions entre particules chargées électriquement.

**DEMO** : centrale de fusion de démonstration, habituellement considérée comme l'étape entre ITER et une centrale de production commerciale.

**Divertor** : élément de paroi d'une machine de fusion destinée à recevoir l'énergie sortant du plasma en suivant les lignes du champ magnétique.

**Discrétisation** : représentation d'une variable continue (typiquement une quantité physique comme la densité ou la température du plasma) sur les points d'un maillage « discret » afin de résoudre numériquement une équation la concernant.

**EoCoE** : consortium est composé d'équipes d'experts en science informatique de l'énergie dans quatre domaines stratégiques de l'énergie à faible émission de carbone : la météorologie, les matériaux, l'hydrologie et la fusion.

**Exascale** : désigne le domaine des supercalculateurs exaflopiques fonctionnant selon une architecture massivement parallèle et dont la puissance de calcul dépasse  $10^{18}$  flops.

**Fishbone** : nom donné à une forme particulière de l'instabilité idéale Magnéto-Hydro-Dynamique (MHD) où les fluctuations du champ magnétique puisent leur énergie libre de la résonance avec des particules énergétiques, ions ou électrons. Elle doit son nom à la forme en arêtes de poisson du signal mesuré.

**Gyrocinétique (description)** : description cinétique d'un plasma s'intéressant à l'évolution de la fonction de distribution des particules chargées, dans un espace à six dimensions (trois de position, trois de vitesse) pour laquelle le mouvement cyclotronique des particules autour des lignes de champ est extrait ; on passe ainsi du cinétique au gyrocinétique, pour lequel la dimensionnalité du problème est réduite.

**Lignes de champ magnétique** : courbe tangente au champ magnétique en tout point.

**Lois d'échelles** : en fusion, il s'agit principalement de la loi d'échelle sur le temps de confinement de l'énergie, qui permet son interpolation ou extrapolation à partir des résultats des dispositifs actuels en fonction d'un certain nombre de paramètres significatif (champ magnétique, densité, etc...).

# GLOSSAIRE

**Massivement parallèle** : désigne l'utilisation d'un très grand nombre de processeurs (ou d'ordinateurs distincts) pour effectuer un ensemble de calculs coordonnés en parallèle (c'est-à-dire simultanément).

**Mésoscopiques** : échelle de temps ou d'espace intermédiaire entre la taille du système et les plus petites échelles pertinentes qui caractérisent les processus à l'œuvre dans le problème. Pour une description turbulente d'un plasma de fusion, les échelles mésoscopiques sont typiquement du centi- au décimètre en espace et de la milliseconde à la déciseconde en temps.

**Méthode semi-implicite** : méthode numérique utilisée pour résoudre des équations aux dérivées partielles qui comportent une dérivée temporelle. Elle consiste à calculer un certain nombre de termes en prenant leur moyenne aux instants  $t$  et  $t+\Delta t$ , où  $\Delta t$  est le pas de temps de la résolution numérique. Les variables aux instants  $t+\Delta t$  sont inconnues, d'où le nom de la méthode.

**Méthode variationnelle** : méthode de recherche des solutions d'un problème physique grâce à la minimisation ou la maximisation d'une "fonctionnelle", autrement dit d'une application reliant un espace de fonctions à une grandeur scalaire.

**Petascale** : désigne l'utilisation d'un très grand nombre de processeurs (ou d'ordinateurs distincts) pour effectuer un ensemble de calculs coordonnés en parallèle (c'est-à-dire simultanément).

**Reconnexion magnétique** : processus par lequel deux lignes de champ magnétique, « transportées » par le plasma, se rapprochent en un point où elles se coupent et donc se reconnectent d'une manière différente.

**Scalabilité** : capacité d'un code de simulation numérique à avoir une dépendance du temps de calcul avec le nombre de processeurs utilisés qui se rapproche de celui idéal, caractérisé par un temps de simulation sur  $N$  cœurs de calcul qui décroît comme  $1/N$ .

**Simulation globale** : se dit d'une simulation qui modélise l'ensemble du volume du système. Elle prend notamment en compte la question d'un traitement numérique des conditions aux limites physiques, c'est-à-dire l'interaction du système avec le milieu extérieur

**Surfaces de flux magnétique** : surface sur laquelle s'enroule une ligne de champ magnétique, selon une trajectoire hélicoïdale, dans un tokamak ou un stellarator. Les surfaces magnétiques sont des tores qui s'embroient autour d'un axe magnétique

**Temps de confinement de l'énergie** : Variable égale au quotient du contenu énergétique du plasma à la puissance pour le chauffer, en régime stationnaire. Utilisé comme indicateurs de performance des dispositifs de fusion.

**Tokamak** : enceinte de forme torique dans laquelle un plasma est confiné par un fort champ magnétique. Ce champ a une composante principale dans la direction toroïdale, obtenue avec des aimants externes à l'enceinte et une composante poloïdale obtenue en faisant circuler un courant dans le plasma.

**Turbulence plasma** : se caractérise par l'interaction entre tourbillons comme en turbulence fluide et/ou d'un large spectre d'ondes. La turbulence plasma est sensible aux champs électrique et magnétique et implique des transferts d'énergie entre le champ électromagnétique et les particules. implique des transferts d'énergie entre le champ électromagnétique et les particules.

# CONTRIBUTEURS

## ARTICLES ET ENCARTS

#1 Encart A  
#9 Encart B



**Philippe Ghendrih**  
CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#1  
#9



**Eric Serre**  
CNRS, M2P2  
F-13000 MARSEILLE, FRANCE



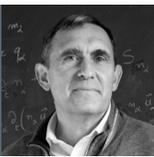
#2



**Maxime Lesur**  
UNIVERSITÉ DE LORRAINE, IJL  
F-54000 NANCY, FRANCE



#2



**Xavier Garbet**  
CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#3



**Rémi Dumont**  
CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#3



**Hinrich Lutjens**  
CNRS, CPHT  
F-91120 PALAISEAU, FRANCE



#4  
Encart C



**Virginie Grandgirard**  
CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#4



**Yanick Sarazin**  
CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#5



**Hervé Guillard**  
INRIA, LJAD  
F-06108 NICE, FRANCE



#5



**Guido Huijsmans**  
CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



# CONTRIBUTEURS

## ARTICLES ET ENCARTS (suite)

#5



**Boniface Nkonga**

INRIA, LJAD  
F-06108 NICE, FRANCE

*Inria*

#6



**Guido Ciralo**

CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#6



**Yannick Marandet**

CNRS, PIIM  
F-13451 MARSEILLE, FRANCE



#7



**Guilhem Dif-Pradalier**

CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#7



**Anna Medvedeva**

CNRS, M2P2  
F-13000 MARSEILLE, FRANCE



#7



**Didier Vézinet**

CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#8



**Clarisse Bourdelle**

CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



#8



**Gerardo Giruzzi**

CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE, FRANCE



Encart  
**A**



**Marco Pettinni**

AIX MARSEILLE UNIVERSITÉ, CPT  
F-13000 MARSEILLE, FRANCE



Encart  
**D**



**Giorgio Giorgiani**

CNRS, M2P2  
F-13000 MARSEILLE, FRANCE



Encart  
**B**



**Thomas Cartier Michaud**

CNRS, M2P2  
F-13000 MARSEILLE, FRANCE



Encart  
**D**



**Philippe Helluy**

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG, IRMA  
F-67084 STRASBOURG, FRANCE



Encart  
**C**



**Julien Bigot**

CEA, MAISON DE LA SIMULATION  
F-91191 SACLAY



Encart  
**E**



**Bernard Pégourié**

CEA, IRFM  
F-13108 SAINT-PAUL-LEZ-DURANCE,  
FRANCE



CONTRIBUTEURS ENCARTS

# SCIENCES en FUSION

## AVANCÉES SCIENTIFIQUES DES RECHERCHES EN FUSION PAR CONFINEMENT MAGNÉTIQUE

# SCIENCES EN FUSION

## Numéros précédents

### 2018 - Sciences en fusion #1



#### SOMMAIRE

**81**  
INITIATION À LA TURBULENCE DANS LES PLASMAS MAGNÉTISÉS  
Guillaume Lavallois, Roger D'Angelo  
page 81

**92**  
MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLE DU TRANSPORT TURBULENT  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 92

**97**  
CARACTÉRISATION EXPÉRIMENTALE D'UNE TURBULENCE PLASMA  
Lionel Hecquet, Michel Beaudoin  
page 97

**106**  
LE CALCUL HAUTE PERFORMANCE POUR MODÉLISER LA TURBULENCE  
Guillaume Lavallois, Roger D'Angelo  
page 106

**115**  
TURBULENCE D'INTERFACE - QUAND LE SOLEIL RENCONTRE LA BÔTE  
Patrick Tournier, Eric Leroy  
page 115

**116**  
QUAND LA TURBULENCE S'AUTO-ORGANISE  
Guillaume Delcroix, Philippe Chaneille  
page 116

**127**  
UNE PHYSIQUE PLURIDISCIPLINAIRE  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 127

**NOTES DE LECTURE ET FUSION, PLASMAS ET TOKAMAKS**  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 131

**NOTES DE LECTURE ET INSTABILITÉS ET TURBULENCE DANS LES PLASMAS DE TOKAMAKS**  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 14

**GLOSSAIRE**  
Diffinition des mots en page 14 dans la partie des articles  
page 14

ISSN: 1362-3193

### 2019 - Sciences en fusion #2



#### SOMMAIRE

**81**  
STABILITÉ MAGNÉTO-HYDRO-DYNAMIQUE  
Patrick Tournier, Roger D'Angelo  
page 81

**92**  
RECONNECTION MAGNÉTIQUE  
Mikaela Hecquet, Roger D'Angelo  
page 92

**97**  
ÎLOTS MAGNÉTIQUES  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 97

**106**  
ÎLOTS ET TURBULENCE  
Mikaela Hecquet, Roger D'Angelo  
page 106

**115**  
DENTS-DE-SCIE AU CŒUR DU PLASMA  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 115

**116**  
STABILITÉ DES PLASMAS EN COMBUSTION  
David Jouanolu, Roger D'Angelo  
page 116

**127**  
RELAXATIONS AU BORD DU PLASMA  
Mikaela Hecquet, Roger D'Angelo  
page 127

**131**  
AUX FRONTIÈRES DU DOMAINE OPÉRATIONNEL  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 131

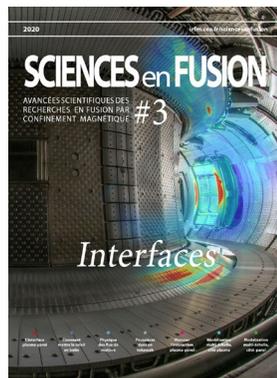
**14**  
DÉTECTER L'INVISIBLE  
Robert Sabot, Philippe Chaneille, Roger D'Angelo  
page 14

**NOTES DE LECTURE ET CONFINER UN PLASMA PAR UN CHAMP MAGNÉTIQUE**  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 14

**GLOSSAIRE**  
Diffinition des mots en page 14 dans la partie des articles  
page 14

ISSN: 1362-3193

### 2020 - Sciences en fusion #2



#### SOMMAIRE

**EDITORIAL**  
Pierre Burgun, Roger D'Angelo  
page 7

**L'INTERFACE PLASMA-PARI**  
Mikaela Hecquet, Roger D'Angelo  
page 8

**COMMENT METTRE LE SOLEIL EN BÔTE ?**  
Philippe Chaneille  
page 9

**PHYSIQUE DES FLUX DE MATIÈRE**  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 11

**POUSSIÈRES DANS UN TOKAMAK**  
Cédric Lhuillier  
page 13

**BRIEFER L'INTERACTION PLASMA-PARI**  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo, Michel Beaudoin & Jean-Louis Lavallois  
page 14

**MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLE CÔTÉ PLASMA**  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 15

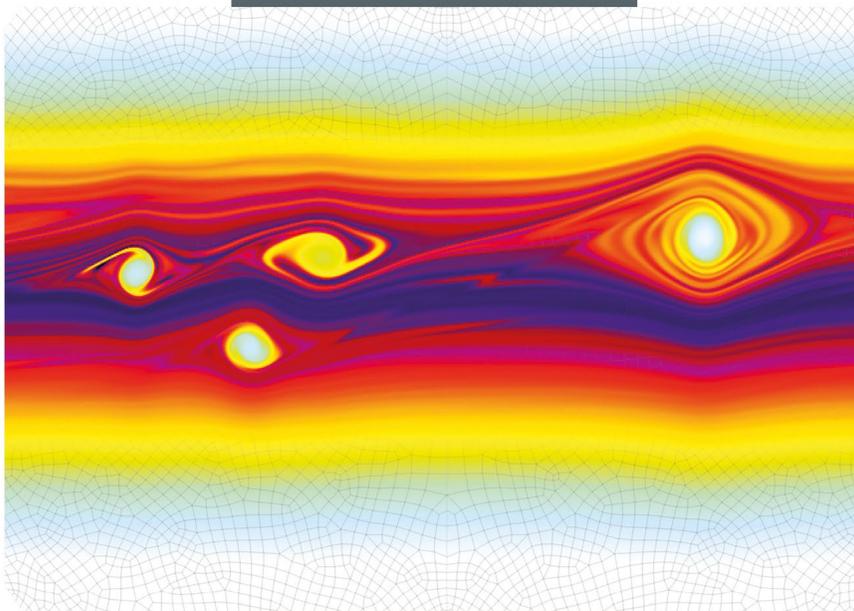
**MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLE CÔTÉ PARI**  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 16

**TOPOLOGIE DE L'INTERACTION PLASMA-PARI**  
Sébastien Garcia, Roger D'Angelo  
page 17

**NOTES DE LECTURE ET PHYSIQUE DE LA GARE**  
Philippe Chaneille  
page 18

**GLOSSAIRE**  
Diffinition des mots en page 18 dans la partie des articles  
page 18

ISSN: 1362-3193



**Image de couverture :**

Simulation de la distribution dans l'espace des phases position/vitesse d'électrons dans un plasma chaud.

Crédit :

**Alejandro Guillevic & Maxime Lesure**

INSTITUT JEAN LAMOUR  
UNIVERSITÉ DE LORRAINE  
NANCY - FRANCE

Maillage ITER en surimpression noire.  
(Crédit ITER org).



RETROUVEZ LA  
VERSION AUGMENTÉE  
SUR LE SITE

[irfm.cea.fr/sciencesenfusion](http://irfm.cea.fr/sciencesenfusion)

**Éditeur :** Institut de Recherche sur la Fusion par confinement Magnétique  
CEA-Cadarache, bâtiment 513 - 13108 St Paul lez Durance Cedex - FR

**Directeur de la publication :** Jérôme Bucalossi

**Coordinateur scientifique :** Philippe Ghendrih, Eric Serre

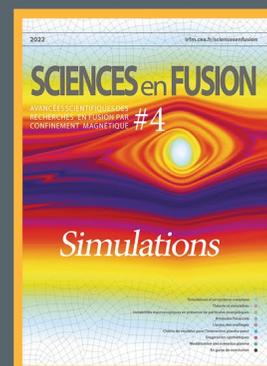
**Comité éditorial :** Ludovic Allegretti, Jérôme Bucalossi, Michel Chatelier, Xavier Garbet, Sylvie Gibert Gerardo Giruzzi, André Grosman, Frédéric Imbeaux, Philippe Magaud, Yannick Marandet

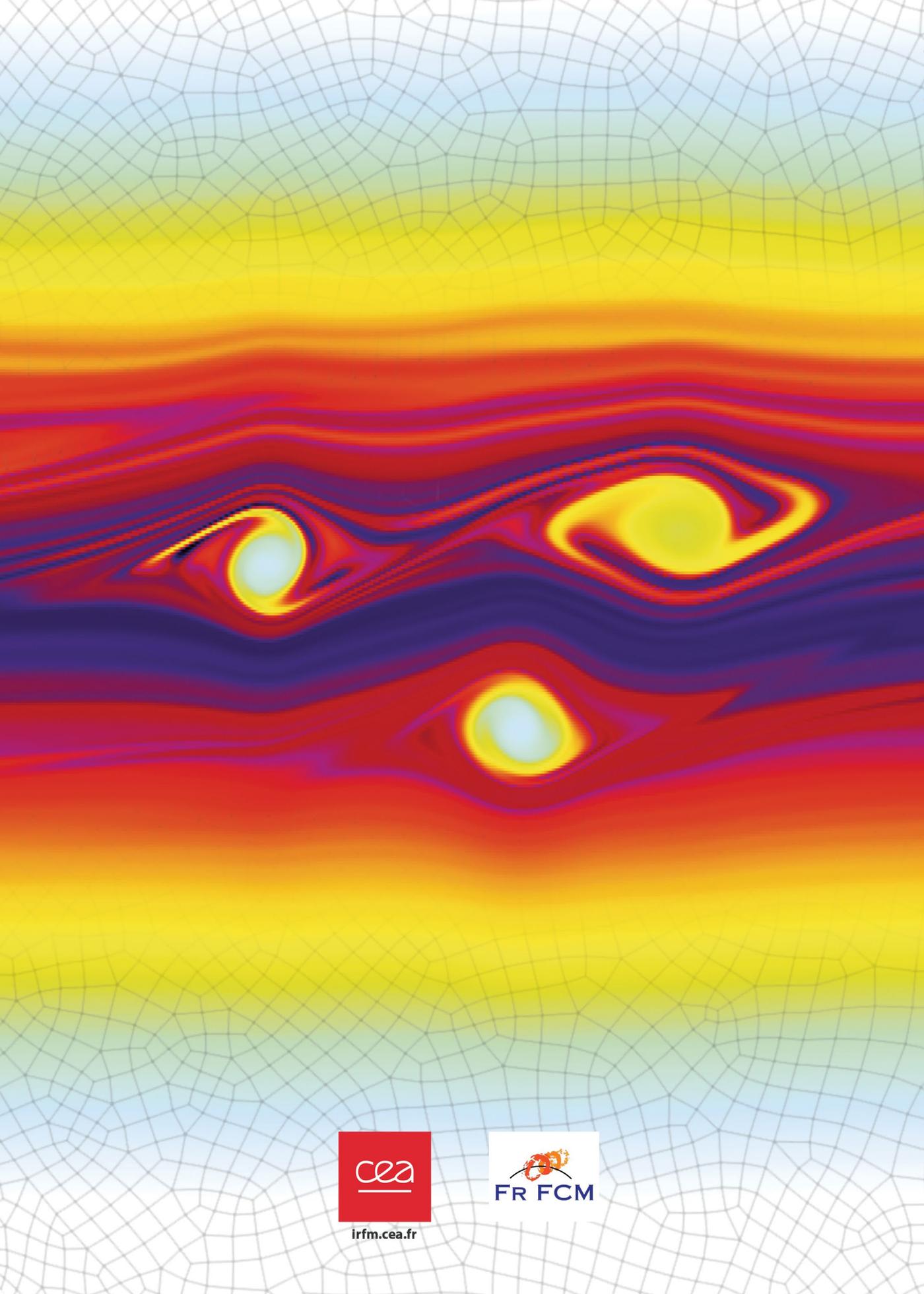
**Diffusion :** Véronique Poli - Abonnement gratuit sur simple demande à [sciencesenfusion@cea.fr](mailto:sciencesenfusion@cea.fr)

**Réalisation :** Christophe Roux

**ISSN :** 1776-9671

**Impression :** Owl Design - Peyrolles en Provence - France





[irfm.cea.fr](http://irfm.cea.fr)

