

Résolution d'EDP par la méthode Physics Informed Neural Networks, implémentation pour HPC.

Responsables :

Ionut Danaila

ionut.danaila@univ-rouen.fr

Corentin Lothodé

corentin.lothode@univ-rouen.fr

Francky Luddens

francky.luddens@univ-rouen.fr

Laboratoire de mathématiques Raphaël Salem, CNRS et Université de Rouen Normandie

Positionnement du sujet :

L'équipe EDP-CS du LMRS commence une nouvelle activité d'IA, avec la prise en main de l'architecture Physics Informed Neural Network (PINN) [1]. Pour prendre en main cette méthodologie, des exemples éprouvés seront étudiés. Par la suite, la méthode sera adaptée à des problèmes traités au sein de l'équipe :

- les matériaux à changement de phase [2,3],
- les condensats de Bose-Einstein et la turbulence superfluide [4].

Les codes produits devront être intégrés dans un contexte de High-Performance Computing (HPC), en exploitant notamment les capacités de calcul du mésocentre régional CRIANN (<https://www.criann.fr>) : 11304 cœurs de calcul, 60 cartes de calcul GPU (dont V100).

Contexte et perspectives :

La position est proposée dans le cadre du projet régional Datalab (2021-2022). Une thèse sur la modélisation et la simulation des MCP, un post-doc sur la méthode Lattice-Boltzmann ainsi qu'un stagiaire sur le sujet des PINN adaptés au matériaux à changement de phase seront présents au LMRS. Cela permettra de multiples interactions dans l'équipe EDP-CS du LMRS. La collaboration avec des industriels est également envisagée.

Description du sujet :

Le sujet se situe à l'interface entre informatique, mathématiques appliquées et modélisation physique, sans toutefois nécessiter des connaissances approfondies en physique. Le travail va combiner le développement de méthodes numériques et la programmation (Python, Julia, Fortran, MPI, GPU suivant les connaissances).

L'objectif est de prendre en main la méthodologie PINN sur des problématiques simples, puis d'enrichir au fur et à mesure le modèle afin de simuler des configurations réalistes. Des cas simples seront d'abord analysés et simulés numériquement. L'optimisation des performances sera effectué par la suite.

Informations :

Le poste est à pourvoir dès que possible et aura une durée de 6 mois. Le salaire est $\approx 2500\text{€}$ net/mois (indicatif, suivant expérience). Pour candidater, envoyez votre CV et lettre de motivation à Corentin Lothodé (corentin.lothode@univ-rouen.fr).

Bibliographie :

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

[2] I. Danaila, R. Moglan, F. Hecht, S. Le Masson: A Newton method with adaptive finite elements for solving phase-change problems with natural convection, *Journal of Computational Physics*, **274**, p. 826-840, 2014.

[3] Sadaka, G., Rakotondrandisa, A., Tournier, P. H., Luddens, F., Lothodé, C., Danaila, I. (2020). Parallel finite-element codes for the simulation of two-dimensional and three-dimensional solid-liquid phase-change systems with natural convection. *Computer Physics Communications*, **257**, 107492.

[4] Kobayashi, M., Parnaudeau, P., Luddens, F., Lothodé, C., Danaila, L., Brachet, M., Danaila, I. (2021). Quantum turbulence simulations using the Gross-Pitaevskii equation: High-performance computing and new numerical benchmarks. *Computer Physics Communications*, **258**, 107579.