

LA SIMULATION DU STOCKAGE ET DE L'ENTREPOSAGE DES DÉCHETS NUCLÉAIRES

Dans le domaine du stockage et de l'entreposage des déchets nucléaires comme ailleurs, la simulation vient en complément de l'expérimentation. Mais plus qu'ailleurs, en raison des échelles de temps concernées, elle peut aussi se substituer à elle. Son rôle ? Faciliter la recherche des paramètres déterminants dans l'évolution d'un site, des matériaux et des colis et, finalement, dans celle des doses de rayonnements qu'il s'agit de contenir aussi longtemps qu'ils pourraient avoir une influence sur l'homme.



Un géologue et un technicien infographiste travaillent sur une modélisation du laboratoire souterrain Meuse/Haute-Marne de recherche sur le stockage de déchets nucléaires, en construction sur le site de Bure.



P. Demall/Andra

Une problématique de prédiction

Les évaluations de sûreté ou de performance d'un site de stockage ou d'entreposage⁽¹⁾ de déchets nucléaires consistent essentiellement à prédire l'évolution dans le temps du comportement de ce site, de ses matériaux d'infrastructure, et enfin des colis de déchets⁽¹⁾.

Le but ultime de cette prédiction est, dans le cas du stockage, de fournir les doses⁽²⁾ de **radio-nucléides** et les temps d'arrivée associés dans la **biosphère** et, dans celui d'un entreposage, de prévoir l'état d'intégrité des matériaux d'infrastructure et des colis, en vue d'une reprise à terme de ces derniers par l'homme.

Les échelles de temps concernées, de quelques dizaines à plusieurs milliers d'années, rendent difficiles les expérimentations directes. Le rôle de la **simulation** est alors, en complément ou en substitution à l'expérimentation, d'éclairer l'espace des situations possibles, de faciliter la recherche des **paramètres**

déterminants *via*, par exemple, la réalisation d'*études de sensibilité* dans lesquelles de nombreux paramètres physiques et configurations géométriques sont évalués (encadré A, **Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?**). La simulation permet la réalisation d'outils opérationnels qui sont le reflet de la connaissance acquise et validée à un moment donné.

Les mécanismes physico-chimiques

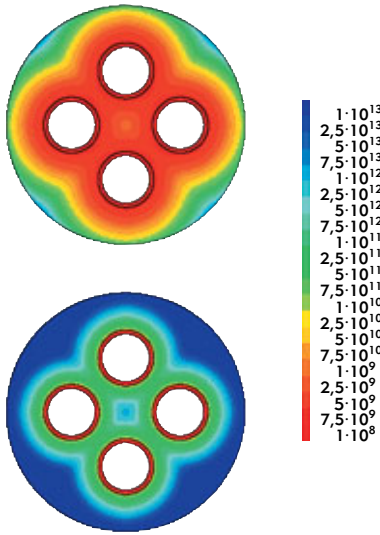
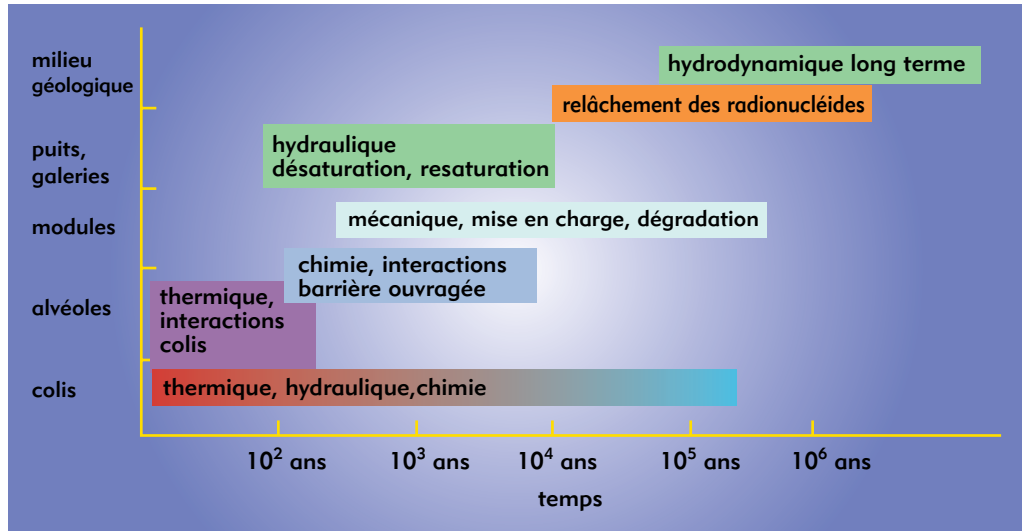
Les mécanismes physico-chimiques gouvernant le comportement d'un site de stockage ou d'entreposage sont nombreux et complexes. Plaçons-nous, par exemple, dans le cadre d'un scénario d'évolution normale d'un stockage géologique. Pendant la phase de creusement du massif, soit quelques dizaines d'années, les écoulements souterrains sont modifiés. La roche au voisinage des puits et galeries se "désature" en eau et son comportement mécanique est perturbé. Après ferme-

ture du site, la chaleur dégagée par les colis de déchets augmente la température du stockage. La roche, suivie des matériaux ouvragés et de remblayage, se resature en eau. Le comportement mécanique de l'une et des autres évolue vers un état d'équilibre. L'eau corrode les colis et se charge en radionucléides. Ensuite ceux-ci migrent, d'abord à travers les matériaux, puis à travers le massif vers sa surface. Cette migration est contrainte par les inter-

(1) Voir à ce sujet *Clefs CEA* n° 46, printemps 2002. L'*entreposage*, qui se distingue du *stockage* par son caractère provisoire (éventuellement à long terme) peut s'effectuer en *surface* ou en *subsurface* (à quelques dizaines de mètres de profondeur dans le milieu naturel). Les déchets à stocker, conditionnés sous forme de *colis*, peuvent être groupés dans des *alvéoles* éventuellement groupées en *modules* répartis dans le *milieu géologique*.

(2) Voir l'encadré de l'article *La simulation d'intervention en milieu hostile*.

Figure 1. Schéma de l'analyse phénoménologique des situations de stockage (APSS) de l'Andra mettant en évidence les phénomènes prépondérants à décrire dans l'espace et dans le temps.



CEA/DEN/DED
Figure 2. Comparaison, sous forme de cartes de concentration en nickel 59 à 1 million d'années, de deux concepts de colis de déchets compactés, sans (en haut) et avec complément de colisage (en bas).

actions chimiques des radionucléides avec les matériaux et la roche.

Ce scénario découle de l'Analyse phénoménologique des situations de stockage (APSS) que l'Andra (Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs) a menée ces dernières années. Il peut être schématisé sur un diagramme désignant pour chaque échelle spatiale du stockage (colis, alvéoles, modules, milieu géologique)⁽¹⁾ et chaque échelle temporelle les mécanismes physico-chimiques prépondérants (figure 1).

En ce qui concerne plus particulièrement l'entreposage, que celui-ci soit en surface ou en subsurface⁽¹⁾, un des problèmes majeurs concerne l'évacuation de la chaleur dégagée par les colis. Celle-ci doit être évacuée de l'installation, par convection forcée par exemple, de manière à éviter tout échauffement critique des matériaux d'infrastructure pouvant conduire à un endommagement

mécanique. L'objectif visé est de conserver l'intégrité des matériaux et des colis en vue d'une reprise future.

Trois échelles d'espace peuvent être distinguées dans la simulation d'un stockage. À l'échelle du *colis*, il s'agit de prédire la corrosion du colis par l'eau du site : corrosion du conteneur, dégradation de la matrice (verre, ciment...), puis relâchement des radionucléides (figure 2). Cette connaissance est capitalisée dans des modèles opérationnels qui seront utilisés ensuite, couplés aux modèles de comportement des alvéoles et du milieu géologique.

À l'échelle de l'*alvéole* de stockage, tous les gradients (thermiques, chimiques...) sont significatifs. L'alvéole est donc le lieu de couplages importants, qu'ils soient thermo-hydro-mécaniques ou thermo-hydro-chimiques. Si certains phénomènes sont linéaires, comme le transport de radionucléides par diffusion pure, les phénomènes couplés sont généralement hautement non linéaires, par exemple le transport de radionucléides en présence de précipitation ou de dissolution. Ils nécessitent des **techniques numériques** spécifiques, toutes les équations décrivant ces processus devant être résolues simultanément. Ce couplage permet d'évaluer la performance du colis dans un environnement donné et va constituer le terme source pour le troisième compartiment : le milieu géologique (figure 3).

Dans le *milieu géologique*, les gradients deviennent faibles et le transport de radionucléides devient le seul phénomène prépondérant. Si les mécanismes de transport (par convection, diffusion, dispersion) sont simples du point de vue de la simulation, la topologie du milieu (multicouche), son extension (plusieurs kilomètres, soit pour le simulateur un million de **mailles**), ainsi que les contrastes de propriétés en son sein (alternance de couches perméables et semi-perméables) font que la simulation de la migration de radionucléides dans le milieu géologique sur plusieurs millions d'années devient un exercice non trivial (figure 4).

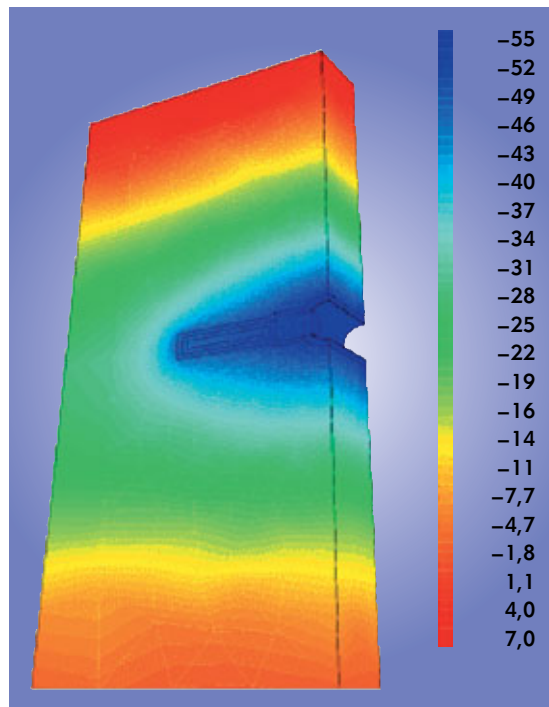


Figure 3. Étude du champ de charge hydraulique (en mètres d'eau) autour d'une alvéole de stockage de colis de déchets.

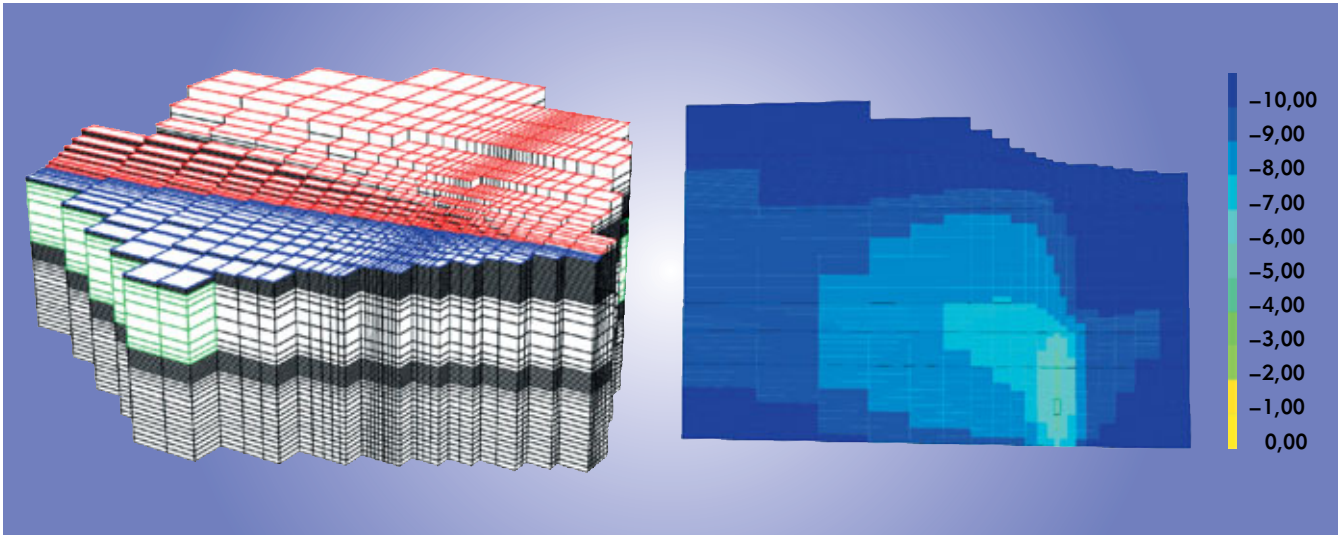


Figure 4. Maillage 3D du site expérimental de Bure (Meuse/Haute-Marne) et isovaleurs de concentration d'iode 129 (en mol/m³) selon une échelle logarithmique.



comportement des colis, les écoulements souterrains, la migration des radionucléides... tandis que l'environnement de **modélisation** inclut le modèleur géométrique 3D (ensemble de formes géométriques de base qui peuvent être assemblées pour décrire un colis, une alvéole ou un site), les outils de maillage et de visualisation, d'acquisition des données ainsi que les fonctionnalités de couplage et de distribution des composants sur plusieurs **processeurs** (encadré B, **Les moyens informatiques de la simulation numérique hautes performances**). Enfin, l'ensemble de schémas de couplage et de méthodologies de calcul est validé sur des situations de référence des stockages et des entreposages. Parallèlement au développement d'Alliances, les équipes CEA et Andra sont impliquées dans des collaborations nationales en simulation numérique, *via* le groupement de recherches Momas et en géochimie via le pôle Géochimie Transport. La forte volonté des deux organismes de faire partager la démarche de simulation Alliances au niveau européen devrait se concrétiser par la proposition d'un projet intégré pour le 6^e programme-cadre de recherche, de développement technologique et de démonstration.

Imad Toumi, Emmanuel Mouche et Alain Bengaouer
 Direction de l'énergie nucléaire
 CEA centre de Saclay

L'outil de simulation Alliances

La simulation de l'évolution d'un stockage ou d'un entreposage est, par nature, multi-physique et pluridisciplinaire. C'est pour répondre à cet objectif que le projet Alliances (Atelier Logiciel pour l'Intégration, l'ANalyse et la Conception des Entreposages et Stockages) a été lancé en juin 2001 par le CEA et l'Andra. Son but ? Permettre la réalisation des études de performances et de sûreté, faciliter les actions de recherche et développement sur les schémas numériques et les modèles physiques et capitaliser les connaissances acquises dans différents services du CEA, de l'Andra et des autres partenaires (universitaires, prestataires extérieurs...).

Les choix structurants du projet ont été de trois ordres. Le premier choix a été celui de *codéveloppement*. Une équipe mixte CEA-Andra a été mobilisée, afin de mutualiser les coûts de développement et faciliter l'association de l'ensemble des futurs utilisateurs aux spécifications et à la validation de la

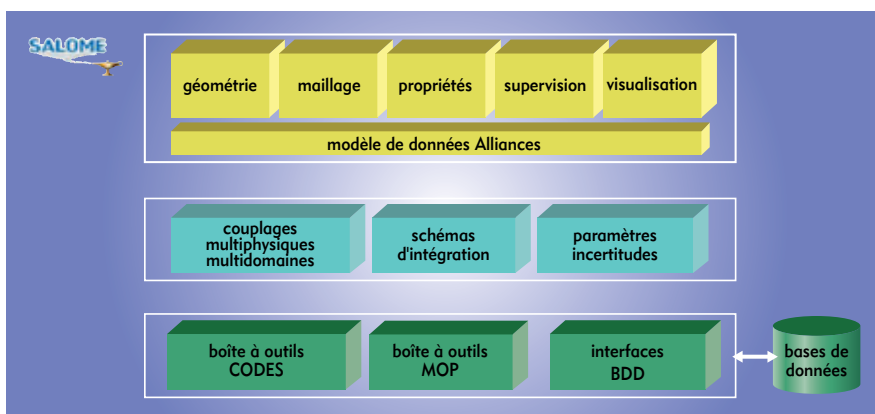
plate-forme. Le deuxième a porté sur l'*utilisation de composants numériques*. Les progrès du **génie logiciel** (encadré E, **Les progrès du génie logiciel**) et l'évolution des moyens de calculs permettent aujourd'hui d'envisager la réutilisation de composants développés indépendamment, capitalisant ainsi l'expérience du CEA dans ce domaine. Plus encore, cette réutilisation permet de choisir le composant le plus adapté à la description d'une situation donnée : c'est ainsi que le code Chess, développé entre autres par l'École des mines, a été choisi comme moteur de géochimie de la plate-forme. Enfin, l'environnement logiciel d'Alliances est dérivé de l'infrastructure Salomé (Simulation par Architecture LOGicielle à Méthodologie d'Évolution) ce qui permet à l'équipe de se focaliser sur les aspects spécifiques au projet, tels l'élaboration d'un modèle de données utilisateur et l'intégration de composants (figure 5).

Un environnement logiciel cohérent

Alliances fournira ainsi aux utilisateurs un environnement logiciel cohérent comprenant l'ensemble des outils nécessaires à l'analyse d'un concept de stockage ou d'entreposage. Les *composants numériques* décrivent le



Figure 5. Architecture générale de l'outil de simulation Alliances.



Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?

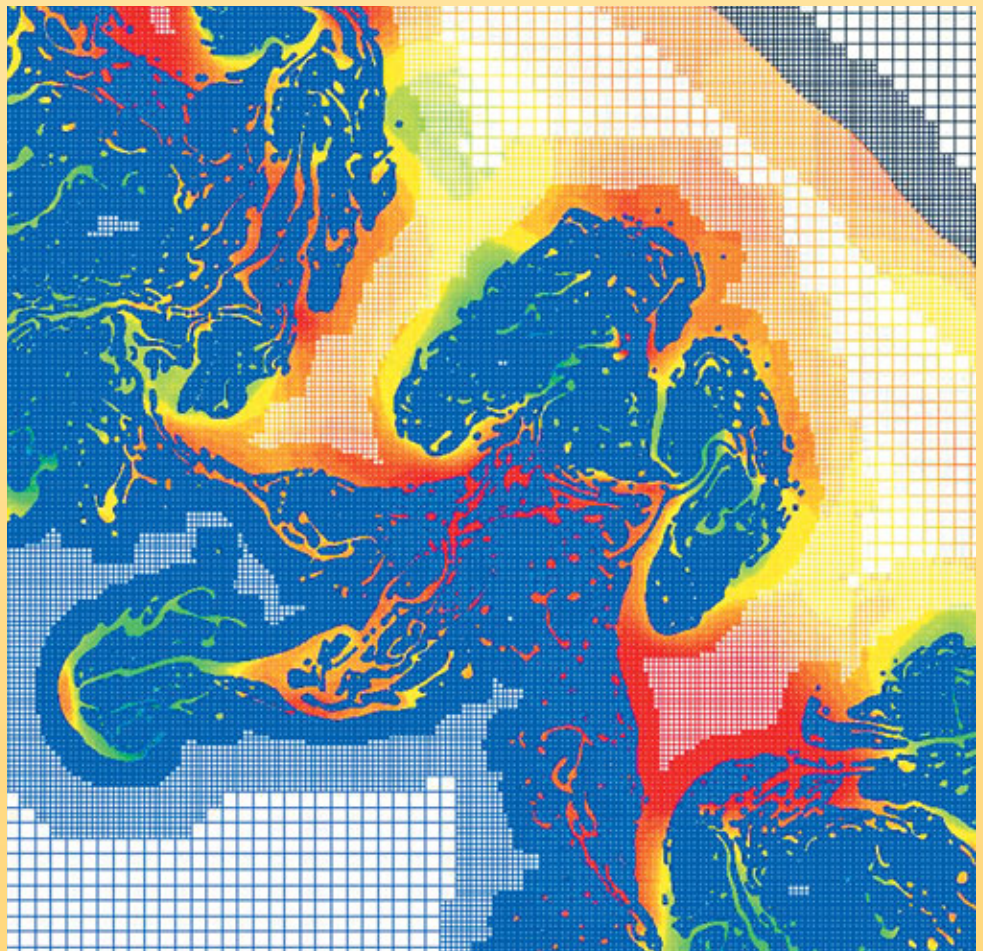
La **simulation numérique** consiste à reproduire par le calcul le fonctionnement d'un système, préalablement décrit par un ensemble de **modèles**. Elle s'appuie sur des méthodes mathématiques et informatiques spécifiques. Les principales étapes de la réalisation d'une étude par simulation numérique sont communes à de nombreux secteurs de la recherche et de l'industrie, en particulier le nucléaire, l'aérospatial ou l'automobile.

En chaque point de l'"objet" considéré, plusieurs grandeurs physiques (vitesse, température...) décrivent l'état et l'évolution du système étudié. Celles-ci ne sont pas indépendantes, mais reliées et régies par des **équations**, généralement **aux dérivées partielles**. Ces équations constituent la traduction mathématique des lois de la physique qui modélisent le comportement de l'objet. Simuler l'état de ce dernier, c'est déterminer – idéalement en tout point – les valeurs numériques de ses **paramètres**. Comme il y a un nombre infini de points, donc une infinité de valeurs à calculer, cet objectif est inaccessible (sauf dans des cas bien particuliers où l'on peut résoudre les équations de départ à l'aide de formules analytiques). Une approximation naturelle consiste donc à ne considérer qu'un nombre fini de points. Les valeurs des paramètres à calculer sont ainsi en nombre fini et les opérations nécessaires deviennent abordables grâce à l'ordinateur. Le nombre effectif de points traités dépendra bien sûr de la puissance de celui-ci : plus il sera élevé, meilleure sera finalement la description de l'objet. À la base du calcul des paramètres comme à la base de la simulation numérique, il y a donc la réduction de l'infini au fini, la **discrétisation**.

Comment opère-t-on précisément à partir des équations mathématiques du modèle ? Deux méthodes sont très souvent utilisées, respectivement représentatives des méthodes de **calcul déterministe**, qui résolvent les équations régissant les phénomènes étudiés après avoir discrétisé les variables, et des méthodes de **calcul statistique** ou **probabiliste**.

Le principe de la première, connue sous le nom de **méthode des volumes finis**, est antérieur à l'usage des ordinateurs. Chacun des points de l'objet est assimilé simplement à un petit volume élémentaire (un cube par exemple), d'où le nom de *volume fini*. Un plasma, par exemple, est ainsi vu comme un ensemble ou un réseau de volumes contigus qui, par analogie avec la trame d'un tissu, sera dénommé **maillage**. Les paramètres de l'état de l'objet sont maintenant définis dans chaque maille du maillage. Pour chacune d'elles, en reformulant les équations mathématiques du modèle par des moyennes volumiques, il sera alors possible de construire des *relations algébriques* entre les paramètres de la maille et ceux de ses voisines. Au total, il y aura autant de relations que de paramètres inconnus et ce sera à l'ordinateur de résoudre le *système* de relations obtenu. Il faudra pour cela recourir aux techniques de l'**analyse numérique** et programmer des **algorithmes** spécifiques.

L'accroissement de la puissance des ordinateurs a permis d'augmenter la finesse de discrétisation, permettant de passer de quelques dizaines de mailles dans les années soixante à plusieurs dizaines de milliers dans les années quatre-vingt, à des millions dans les années quatre-vingt-dix et jusqu'à la dizaine de milliards de mailles aujourd'hui (machine Tera de la Direction



Exemple d'image d'une simulation 2D d'instabilités réalisée avec le supercalculateur Tera du CEA. Le calcul a fait appel au maillage adaptatif, qui se fait plus fin dans les zones où les phénomènes sont les plus complexes.

des applications militaires du CEA), chiffre qui devrait décupler à la fin de la décennie.

Un raffinement du maillage, le **remaillage adaptatif**, consiste à ajuster la taille des mailles en fonction des circonstances, par exemple en les rendant plus petites et plus serrées aux interfaces entre deux milieux, là où les phénomènes physiques sont les plus complexes, ou là où les variations sont les plus importantes.

La méthode des volumes finis s'applique dans des contextes physiques et mathématiques très variés. Elle autorise toute forme de maille (cube, hexaèdre, tétraèdre...) et le maillage peut être modifié durant le calcul, en fonction de critères géométriques ou physiques. Enfin, elle est aisée à mettre en œuvre dans le contexte des **ordinateurs parallèles** (encadré B, **Les moyens informatiques de la simulation numérique hautes performances**), le maillage pouvant en effet faire l'objet d'un découpage pour des calculs sur ce type de machines (exemple figure B, p. 13).

Appartiennent à la même famille la **méthode des différences finies**, cas particulier de la **méthode des volumes finis** où les côtés des mailles sont orthogonaux, et la **méthode aux éléments finis**, qui peut juxtaposer divers types de mailles. La deuxième grande méthode, dite de **Monte-Carlo**, est particulièrement adaptée pour simuler le *transport de particules*, par exemple des neutrons ou des photons d'un **plasma** (voir *Les simulations en physique des particules*). Un tel transport est en fait caractérisé par une succession d'étapes lors desquelles chaque particule peut subir différents événements (diffusion, absorption, émission...) possibles *a priori*. Les probabilités élémentaires de chacun de ces événements sont connues individuellement pour chaque particule.

Il est alors naturel d'assimiler un point du plasma à une particule. Un ensemble de particules, en nombre fini, va constituer un échantillon représentatif de l'infinité de particules du plasma, comme lors d'un sondage statistique. D'étape en étape, l'évolution de l'échantillon sera déterminée grâce à des tirages au hasard (d'où le nom de la méthode). L'efficacité de cette méthode, mise en œuvre à Los Alamos dès les années 1940, dépend bien sûr de la qualité statistique des tirages au hasard.

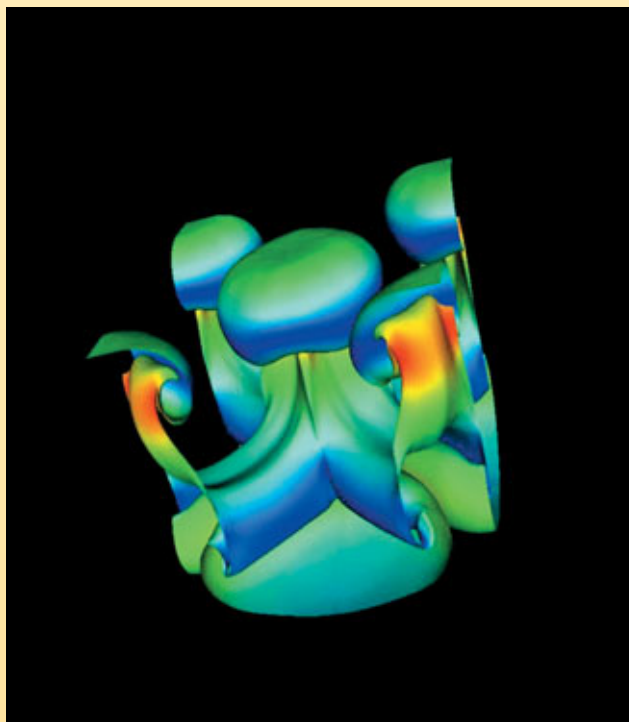
Comment se déroule une simulation numérique ?

Il est souvent question d'*expérience numérique* pour souligner l'analogie entre la pratique d'une simulation numérique et la conduite d'une expérience de physique.

Brièvement, cette dernière utilise un dispositif expérimental, configuré selon des conditions initiales (de température, de pression...) et des paramètres de contrôle (durée de l'expérience, des mesures...). Durant l'expérience, le dispositif produit des points de mesures qui sont enregistrés. Ces enregistrements sont ensuite analysés et interprétés.

Dans une simulation numérique, le dispositif expérimental consiste en un ensemble de programmes informatiques exécutés sur des ordinateurs. Les **codes** ou **logiciels de calcul** sont la traduction, à travers des algorithmes numériques, des formulations mathématiques des modèles physiques étudiés. En amont et en aval du calcul, les *logiciels d'environnement* effectuent la gestion de plusieurs opérations complexes de préparation des calculs et de leur dépouillement.

Les données initiales de la simulation comporteront d'abord la délimitation du domaine de calcul à partir d'une représentation approchée des formes géométriques (produite par le dessin et la CAO, conception assistée par ordinateur), suivie de la discrétisation de ce



CEA

Simulation 3D réalisée à l'aide du supercalculateur Tera installé fin 2001 au centre CEA/DAM Île-de-France à Bruyères-le-Châtel (Essonne).

Il existe pour cela des méthodes de nombres aléatoires, bien adaptées au traitement par un ordinateur.

Les méthodes des volumes finis et de Monte-Carlo ont suscité et suscitent de nombreuses études mathématiques. Ces études s'attachent notamment à préciser la convergence de ces méthodes, c'est-à-dire comment la précision de l'approximation varie avec le nombre de mailles ou de particules. Cette question est naturelle lors de la confrontation des résultats de la simulation numérique à ceux de l'expérience.

domaine de calcul sur un maillage, ainsi que les valeurs des paramètres physiques sur ce maillage et les paramètres de contrôle du bon déroulement des programmes... Toutes ces données (produites et gérées par les logiciels d'environnement) seront saisies et vérifiées par les codes. Les résultats des calculs proprement dits, c'est-à-dire les valeurs numériques des paramètres physiques, seront sauvegardés au fur et à mesure. En fait, un protocole spécifique structurera les informations produites par l'ordinateur afin de constituer une base de données numériques.

Un protocole complet organise l'échange informatique des informations requises (dimensions notamment) suivant des formats prédéfinis : *modeleur*⁽¹⁾, *mailleur*⁽²⁾, *découpeur de maillage*, *code*

(1) Le *modeleur* est un outil qui permet la création et la manipulation de points, courbes et surfaces en vue par exemple de la création d'un maillage.

(2) Les formes géométriques d'un maillage sont décrites par des ensembles de points reliés par des courbes et des surfaces (de Bézier par exemple) qui en représentent les frontières.

de calculs, logiciel de visualisation et d'analyse. Les études de *sensibilité* des résultats (au maillage et aux modèles) font partie des "expériences" numériques.

À l'issue des calculs (résolution numérique des équations décrivant les phénomènes physiques qui se déroulent dans chaque maille), l'analyse des résultats par des spécialistes reposera sur l'exploitation de la base de données numériques. Elle comportera plusieurs étapes : extraction sélective des données (selon le paramètre physique recherché) et visualisation, extraction et transfert des données pour calculer et visualiser des diagnostics.

Le parallèle entre la conduite d'un cas de calcul, d'une expérience numérique et la conduite d'une expérience physique ne s'arrête pas là : les résultats numériques seront comparés aux résultats expérimentaux. Cette analyse comparative, effectuée sur la base de critères quantitatifs standardisés, fera appel et à l'expérience

et à l'art de l'ingénieur, du physicien, du mathématicien. Elle débouchera sur de nouvelles améliorations des modèles physiques et des programmes informatiques de simulation.

Bruno Scheurer

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

Frédéric Ducros et Ulrich Bieder

Direction de l'énergie nucléaire
CEA centre de Grenoble

L'exemple d'un calcul de thermohydraulique

La mise en œuvre d'un protocole de simulation numérique peut être illustrée par les travaux réalisés par l'équipe de développement du logiciel de calcul **thermohydraulique** Trio U. Ces travaux se sont déroulés dans le cadre d'une étude faite en collaboration avec l'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN). L'objectif était d'obtenir des données très précises pour fournir à l'ingénieur les sollicitations en température à la paroi des composants d'un réacteur à eau sous pression dans le cas d'un accident grave impliquant une circulation naturelle turbulente de gaz chauds. Cette étude requiert la modélisation simultanée d'effets "système" à grande échelle et de phénomènes **turbulents** à petite échelle (encadré F, **Modélisation et simulation des écoulements turbulents**).

Elle débute par la définition du modèle de calcul global (figure A), suivie de la réalisation du modèle CAO et du maillage correspondant avec des logiciels du commerce (figure B). Les maillages de plus de cinq millions de mailles exigent l'utilisation de puissantes stations graphiques. Dans cet exemple, le maillage d'un générateur de vapeur (figures C et D) a été découpé pour répartir les calculs sur huit processeurs d'un ordinateur parallèle du CEA : chaque couleur symbolise une zone affectée à un processeur particulier. Les calculs, dont les conditions aux limites sont données par un calcul "système" (Icare-Cathare), produisent des résultats qu'il appartient aux spécialistes d'interpréter. En l'occurrence, les visualisations sur des stations graphiques des valeurs instantanées des champs de vitesse montrent l'impact d'un panache chaud sur la plaque tubulaire du

générateur de vapeur (coupe dans le champ de vitesses à gauche de la figure E) et la température instantanée dans la boîte à eau (à droite).

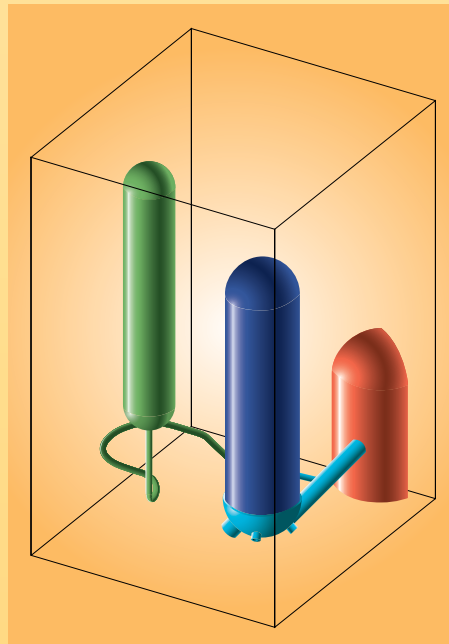


Figure A. Domaine de calcul global incluant une partie de la cuve réacteur (rouge), la conduite de sortie (branche chaude en bleu clair), le générateur de vapeur (bleu foncé) et le pressuriseur (vert).

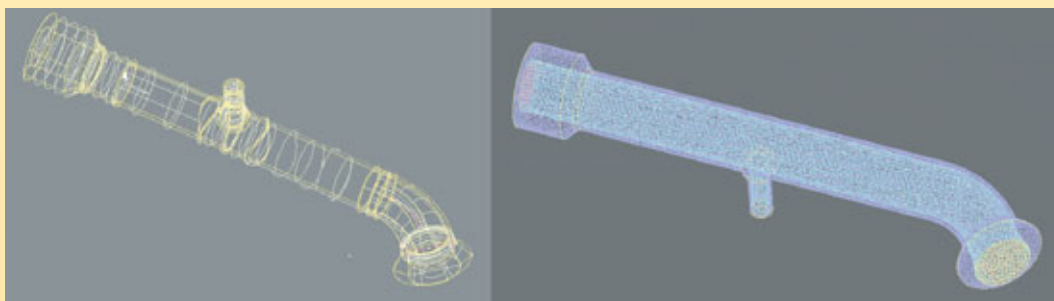
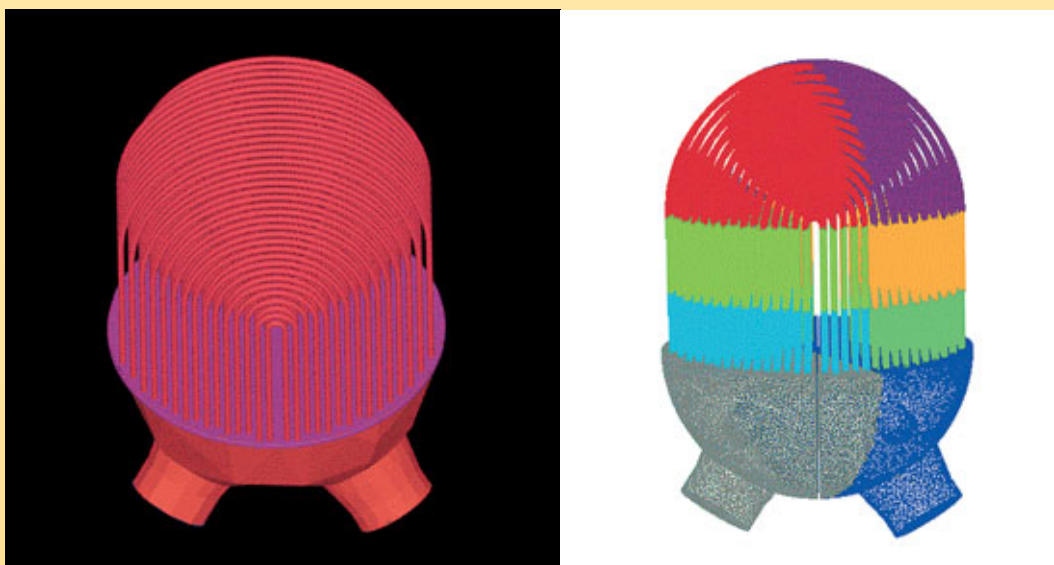


Figure B. Modèle CAO de la branche chaude en sortie de la cuve réacteur (à gauche) et son maillage non structuré (à droite).



Figures C et D.

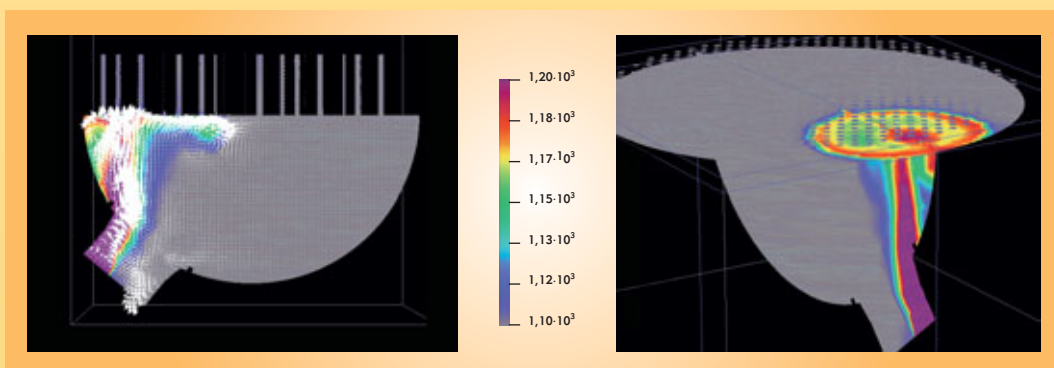


Figure E.

Les moyens informatiques de la simulation

Effectuer des **simulations numériques** plus précises impose de mettre en œuvre des **modèles** physiques et numériques eux-mêmes plus précis portant sur des descriptions plus fines des objets simulés (encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*). Tout ceci nécessite des progrès dans le domaine des logiciels de simulation mais aussi une augmentation importante de la capacité des équipements informatiques sur lesquels ces logiciels sont utilisés.

Processeurs scalaires et vectoriels

Au cœur de l'ordinateur, le processeur est l'unité de base qui, déroulant un programme, effectue les calculs. Il en existe deux grands types, les **processeurs scalaires** et les **processeurs vectoriels**. Les premiers exécutent des opérations portant sur des nombres élémentaires (scalaires), par exemple l'addition de deux nombres. Les seconds exécutent des opérations portant sur des ensembles de nombres (vecteurs), par exemple additionner deux à deux les nombres composant deux ensembles de 500 éléments. À ce titre, ils sont particulièrement adaptés à la simulation numérique : lors de l'exécution d'une opération de ce type, un processeur vectoriel peut fonctionner à une vitesse proche de sa performance maximale (crête). La même opération avec un processeur scalaire exige de nombreuses opérations indépendantes (opérations par composante des vecteurs) qui s'exécutent à une vitesse bien inférieure à sa vitesse crête. L'avantage principal des processeurs scalaires est leur prix : il s'agit de microprocesseurs généralistes dont les coûts de conception et de fabrication peuvent être amortis sur de larges marchés.

Forces et contraintes du parallélisme

Les processeurs récents permettent de hautes performances, d'une part en utilisant une fréquence de fonctionnement plus élevée, d'autre part en cherchant à exécuter en même temps

plusieurs opérations : c'est un premier niveau de **parallélisme**. L'accélération de la fréquence est limitée par l'évolution de la technologie micro-électronique, tandis que les dépendances entre instructions à exécuter par le processeur limitent le parallélisme possible. La mise en œuvre simultanée de plusieurs processeurs constitue un second niveau de parallélisme, qui permet d'obtenir des performances accrues à condition de disposer de programmes capables d'en tirer parti. Alors que le parallélisme au niveau des processeurs est automatique, celui *entre processeurs* dans un ordinateur parallèle est à la charge du programmeur, qui doit découper son programme en morceaux indépendants et prévoir entre eux les communications nécessaires. On procède souvent par un découpage du domaine sur lequel porte le calcul, chaque processeur étant chargé de simuler le comportement d'un domaine, et par l'établissement de communications régulières entre processeurs afin de garantir la cohérence d'ensemble du calcul. Pour obtenir un programme parallèle efficace, il faut s'assurer de l'équilibrage de charge entre processeurs et chercher à limiter le coût des communications.

Les différentes architectures

Les équipements informatiques ont différentes fonctions. À partir de son ordinateur de travail sur lequel il prépare ses calculs et en analyse les résultats, l'utilisateur accède à des moyens de calcul, de stockage, et de visualisation partagés, mais beaucoup plus puissants que les siens propres. L'ensemble de ces équipements sont reliés par des réseaux informatiques permettant de faire circuler les informations entre eux avec des débits compatibles avec le volume de données produites, pouvant atteindre 1 **téraoctet** (1 To = 10^{12} octets) de données pour une seule simulation.

Les grands équipements de calcul sont généralement appelés **supercalculateurs**. Ils atteignent aujourd'hui des puissances qui se chiffrent en **téraflops** (1 Tflops = 10^{12} opérations de calcul par seconde).

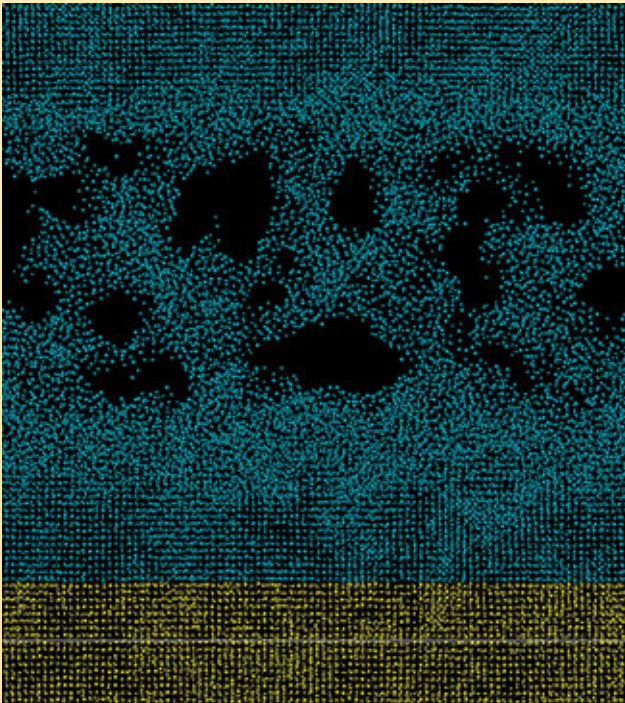
Il existe aujourd'hui trois grands types de supercalculateurs : les supercalculateurs vectoriels, les grappes de mini-ordinateurs à mémoire partagée et les grappes de PC (l'ordinateur que chacun possède chez soi). Le choix entre ces architectures dépend largement des applications et de l'utilisation visées. Les supercalculateurs vectoriels disposent de processeurs très performants mais dont il est difficile d'augmenter la puissance en ajoutant des processeurs. Les grappes de PC sont peu coûteuses mais mal adaptées à des environnements où de nombreux utilisateurs font beaucoup de calculs très gourmands en puissance machine, en mémoire et en entrées-sorties.

Ce sont ces considérations qui ont en particulier conduit la Direction des applications militaires (DAM) du CEA à choisir pour son programme simulation (voir *Le programme Simulation : la garantie des armes sans essais nucléaires*) les architectures de type grappe de mini-ordinateurs à mémoire partagée, encore appelées **clusters de SMP** (Symmetric Multi-Processor). Un tel système utilise comme brique de base un mini-ordinateur com-



CEA

Installée en décembre 2001 au CEA (centre DAM-Ile de France) et conçue par Compaq (devenue depuis HP), la machine Tera a pour élément de base un mini-ordinateur à 4 processeurs Alpha à 1 GHz partageant une mémoire de 4 Go et fournissant une puissance totale de 8 Gflops. Ces éléments de base sont interconnectés par un réseau rapide conçu par la société Quadrics. Une opération de synchronisation sur l'ensemble des 2 560 processeurs s'effectue en moins de 25 microsecondes. Le système de fichiers global offre un espace de stockage de 50 téraoctets pour les entrées-sorties avec une bande passante agrégée de 7,5 Go/s.



CEA

Les calculateurs parallèles sont adaptés aux méthodes numériques basées sur des maillages (encadré A, **Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?**) mais aussi au traitement de calculs ab initio comme cette simulation par dynamique moléculaire de l'endommagement par choc de deux plaques de cuivre à 1 km/s (voir La simulation des matériaux). Le système considéré est constitué de 100 000 atomes de cuivre représentant un parallélépipède de section carrée (0,02 µm de côté) à densité normale. Les atomes interagissent suivant un potentiel EAM (embedded atom potential) pendant 4,6 picosecondes. Le calcul, effectué sur 18 processeurs du supercalculateur Tera de Bruyères-le-Châtel à l'aide du logiciel Stamp développé au CEA, a représenté une dizaine de minutes de temps "utilisateur" (calcul réalisé par B. Magne). Des tests impliquant jusqu'à 64 millions d'atomes ont été réalisés, mobilisant 256 processeurs pendant une centaine d'heures.

portant plusieurs microprocesseurs qui partagent une mémoire commune (figure). Ces mini-ordinateurs étant largement diffusés dans des domaines variés allant de la banque au serveur web

en passant par les bureaux d'études, ils offrent un excellent rapport performance/prix. Ces "briques" de base (encore appelées *nœuds*) sont reliées entre elles par un réseau d'interconnexion hautes performances : la puissance cumulée de plusieurs centaines de ces "briques" peut atteindre plusieurs téraflops. On parle alors d'**ordinateur massivement parallèle**.

Cette puissance peut être disponible pour une seule application parallèle utilisant toutes les ressources du supercalculateur mais aussi pour de multiples applications indépendantes, parallèles ou non, utilisant chacune une partie des ressources.

Si la caractéristique mise en avant pour décrire un supercalculateur est en général sa puissance de calcul, il ne faut pas négliger l'aspect entrées-sorties. Ces machines capables d'effectuer des simulations de grande taille doivent disposer de systèmes de disques avec des capacités et des performances adaptées. Dans les *clusters* de SMP, chaque mini-ordinateur dispose d'un espace disque local. Il n'est néanmoins pas judicieux d'utiliser celui-ci pour les fichiers utilisateurs, ce qui obligerait l'utilisateur à explicitement déplacer ses données entre les différentes phases de ses calculs. Pour cette raison, il est important de disposer d'un espace disque accessible par l'ensemble des mini-ordinateurs du supercalculateur. Cet espace est en général constitué de batteries de disques reliées à des nœuds dont la fonction principale est de les gérer. Comme pour le calcul, c'est le parallélisme pour les entrées-sorties qui permet d'offrir des performances élevées. Il faut, pour ce faire, disposer de systèmes de fichiers globaux parallèles permettant un accès rapide et sans contraintes à l'espace disque partagé.

Offrant des puissances de calcul considérables, les *clusters* de SMP posent néanmoins plusieurs défis. Parmi les plus importants, outre la programmation de logiciels de simulation capables de tirer parti du grand nombre de processeurs, il faut mettre au point des systèmes d'exploitation et les logiciels associés compatibles avec de telles configurations et tolérants vis-à-vis des pannes.

François Robin

Direction des applications militaires
CEA centre DAM-Ile de France

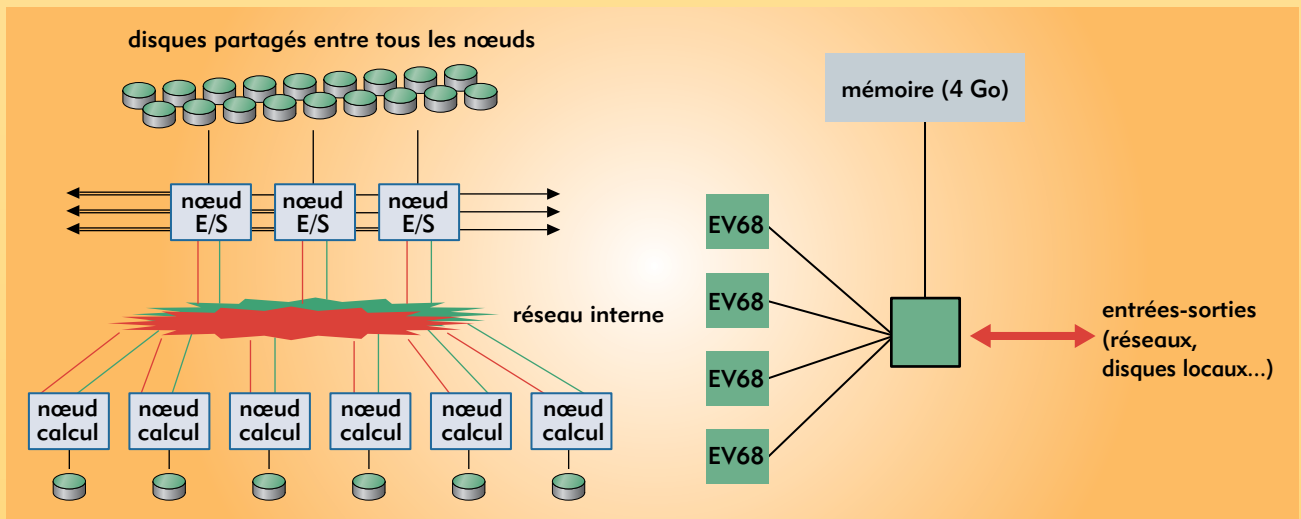


Figure. Architecture d'une machine du type "cluster de SMP". À gauche, l'architecture générale (E/S = entrée/sortie), à droite celle d'un nœud avec quatre processeurs Alpha EV68 cadencés à 1 GHz.

Dans les débuts du calcul scientifique (années 1950-1970), le physicien “faisait tout” : **modélisation** physique et mathématique, **analyse numérique**, programmation, utilisation de l’outil développé, analyse des résultats (encadré A, *Qu’est-ce qu’une simulation numérique ?*).

Puis la complexité des problèmes abordés, la nécessité de maîtriser la précision des résultats et la stabilité des **méthodes numériques**, la recherche de l’optimisation du temps de calcul (jusqu’au *temps réel* aujourd’hui), ont conduit les “numériciens” à venir épauler les physiciens dans la conception des **codes de calcul**. Cette évolution a naturellement soulevé quelques difficultés passagères : l’activité devenait multidisciplinaire et les physiciens perdaient une partie de leur autonomie au profit de la synergie entre deux métiers pointus.

Les problèmes traités se sont ensuite encore enrichis : on calcule aujourd’hui des cœurs de réacteurs nucléaires en décrivant chacun des 40 000 crayons **combustibles** de composition différente et, simultanément, l’écoulement eau-vapeur **turbulent** qui les entoure ! (Encadré F, *Modélisation et simulation des écoulements turbulents*.) Et il a fallu aborder des questions d’ergonomie, de souplesse d’utilisation, d’enchaînements, de couplages et d’adaptation à des ordinateurs aux architectures en évolution accélérée (encadré B, *Les moyens informatiques de la simulation numérique hautes performances*). À son tour, l’intégration de ce troisième métier, le génie logiciel, au profit de calculs plus précis ou plus pertinents, a amené sa part de difficultés d’organisation.

Naturellement, ces trois métiers (physique, analyse numérique et génie logiciel) sont étroitement imbriqués et “l’art” de chacun a des impacts directs sur les autres. Il est devenu indispensable de former des ingénieurs et des chercheurs qui

maîtrisent au moins deux de ces métiers tout en ayant une connaissance non élémentaire du troisième.

Dans le cadre du codéveloppement CEA-EDF des nouvelles plates-formes de calcul et de modélisation pour l’électronucléaire (**neutronique**, **thermohydraulique**, combustible), l’architecture logicielle est tout aussi importante que les modèles physiques, les méthodes numériques ou la qualification. Cette question a été instruite projet par projet et globalement entre les projets durant deux ans pour finalement aboutir à une architecture commune à cinq niveaux qui permettra de prendre en compte les besoins d’ergonomie de l’utilisateur, tout en permettant aux physiciens et aux numériciens d’exprimer leur art de manière optimale.

Ces cinq couches logicielles établissent les transitions entre les “objets du monde réel” (un assemblage combustible, une tuyauterie vapeur, etc.) et les objets de calcul (**maillages**, matrices, solveurs, champs, etc.).

Le chemin parcouru est immense depuis les premiers calculs des années 50, effectués à la règle à calcul et basés majoritairement sur des règles de trois, et les codes de calculs d’aujourd’hui résolvant des systèmes non linéaires d’**équations aux dérivées partielles** sur des **supercalculateurs**. L’art du physicien et de l’ingénieur reste cependant intact : c’est la validation expérimentale, “intuitive” ou déductive, des modélisations mathématiques et physiques imaginées et intégrées dans ces codes de calcul. Le vrai physicien conserve la capacité de prévoir et de vérifier les ordres de grandeur des résultats fournis par ces codes... avec des règles de trois !

Modélisation et simulation des écoulements turbulents

La **turbulence**, ou l'agitation de l'écoulement dit turbulent, se développe dans la plupart des écoulements qui conditionnent notre environnement immédiat (rivières, océan, atmosphère). Elle se révèle être aussi un, sinon le, paramètre dimensionnant dans un bon nombre d'écoulements industriels (liés à la production ou la conversion d'énergie, à l'aérodynamique...). Il n'est donc pas étonnant que soient entrepris des efforts visant sa prédiction – fût-elle encore imprécise – surtout lorsqu'elle se trouve combinée à des phénomènes qui la compliquent : stratification, combustion, présence de plusieurs phases... C'est que, paradoxalement, même s'il est possible d'anticiper la nature turbulente d'un écoulement et même, d'un point de vue théorique, de dégager certaines caractéristiques communes et apparemment universelles aux écoulements turbulents⁽¹⁾, leur prédiction dans

des cas précis reste délicate. Celle-ci doit en effet prendre en compte l'importante gamme d'échelles spatiales et temporelles⁽²⁾ impliquées dans tout écoulement de ce type.

Les chercheurs ne sont pourtant pas démunis, aujourd'hui, pour aborder ce problème. En premier lieu, les équations qui régissent l'évolution spatio-temporelle des écoulements turbulents (équations de Navier-Stokes⁽³⁾) sont connues. Leur résolution complète, dans des cas très favorables, a conduit à des descriptions prédictives. Mais l'emploi systématique de cette méthode de résolution se heurte à deux difficultés rédhibitoires : d'une part, il nécessiterait la connaissance complète et simultanée de toutes les variables attachées à l'écoulement et des forçages s'exerçant sur lui⁽⁴⁾ et, d'autre part, il mobiliserait des moyens de calculs irréalistes pour encore des décennies.

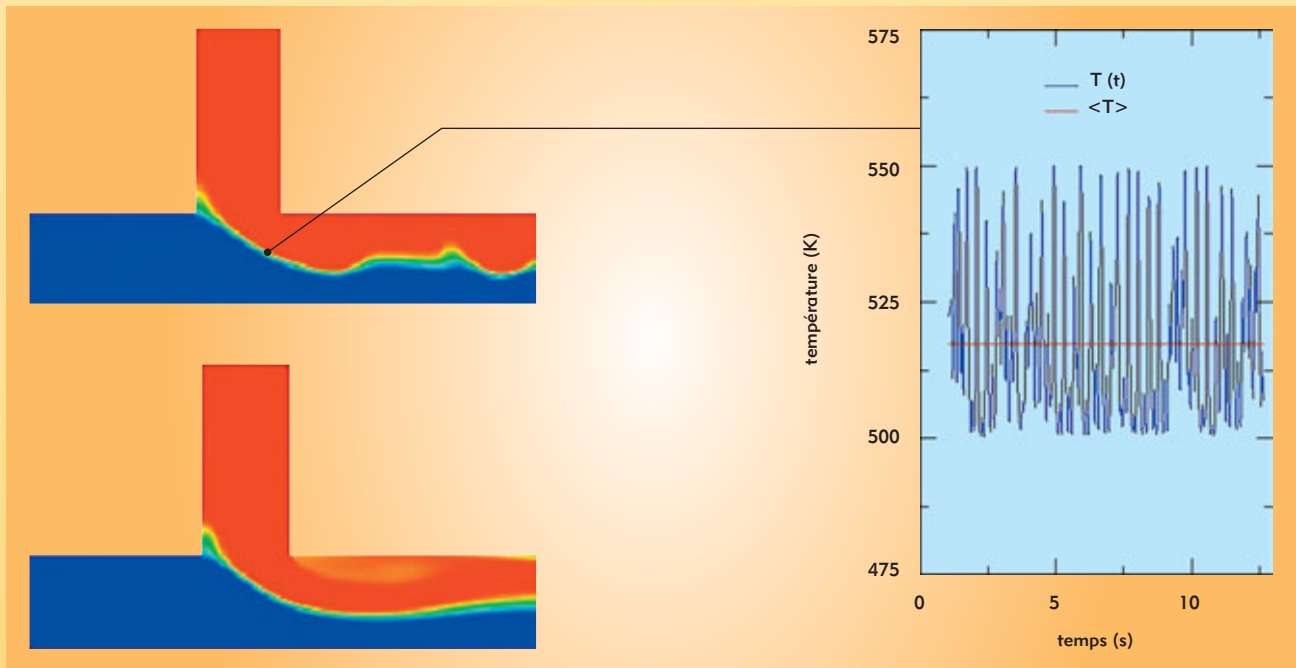


Figure. Champ de température instantané (haut) et moyenné (bas) dans une situation de mélange. La courbe donne l'historique de la température en un point : valeur instantanée fluctuante en bleu et moyenne en rouge (d'après la thèse d'Alexandre Chatelain [DEN/DTP/SMTH/LDTA]).

Il faut donc se résoudre, en s'appuyant sur le caractère fluctuant dû à l'agitation turbulente, à définir et utiliser des moyennes. Une des approches les plus répandues consiste à aborder le problème sous un angle statistique. Les moyennes d'ensemble de vitesse, de pression, de température... dont la distribution caractérise l'écoulement turbulent sont définies comme les variables principales de l'écoulement qu'on cherche à qualifier par rapport à ces moyennes. Ceci conduit à une décomposition du mouvement (dite de Reynolds) en champs moyen et fluctuant, ce dernier mesurant l'écart instantané et local entre chaque grandeur réelle et sa moyenne (figure). Ces fluctuations représentent la turbulence et couvrent une partie importante du spectre de Kolmogorov⁽¹⁾.

Cette opération réduit considérablement le nombre de degrés de liberté du problème et le rend « manipulable » informatiquement. Elle comporte aussi de nombreuses difficultés : il faut tout d'abord constater que, précisément en raison des non-linéarités des équations du mouvement, toute moyenne fait surgir des termes nouveaux et inconnus qu'il faut estimer. En fermant la porte à la description complète et déterministe du phénomène, on ouvre celle de la modélisation, c'est-à-dire à la représentation des effets de la turbulence sur les variables moyennes.

Beaucoup de progrès ont été accomplis depuis les premiers modèles (Prandtl, 1925). Les modélisations n'ont cessé d'évoluer vers plus de complexité, se basant sur le fait généralement vérifié que toute nouvelle extension permet de conserver les propriétés antérieurement acquises. Il faut aussi constater que, même

si de nombreux développements remettent en avant la nécessité de traiter les écoulements en respectant leur caractère *instationnaire*, les modélisations les plus populaires ont été développées dans le cadre des écoulements *stationnaires*, pour lesquels on n'accède donc qu'à une représentation de la moyenne temporelle de l'écoulement : dans le modèle mathématique final, les effets de la turbulence proviennent ainsi intégralement de la modélisation.

Il est également remarquable que, malgré de nombreux travaux, aucune modélisation n'est aujourd'hui capable de rendre compte de l'intégralité des phénomènes qui influencent la turbulence ou sont influencés par elle (transition, instationnarité, stratification, compression, etc.). Ce qui semble pour l'instant empêcher les modélisations statistiques de nourrir une ambition d'universalité.

Malgré ces limitations, la plupart des modélisations statistiques courantes sont maintenant disponibles dans les codes commerciaux et les outils des industriels. Il n'est pas possible de prétendre qu'elles permettent des calculs prédictifs dans toute situation. Leur précision est variable, offrant des résultats utiles pour l'ingénieur dans des situations maîtrisées et favorables (prédiction de la traînée avec une précision de 5 % à 10 % d'erreur [parfois mieux] sur certains profils), mais parfois faux dans des situations qui se révèlent, après coup, en dehors du champ de validité du modèle. Tout emploi maîtrisé d'une modélisation repose donc sur une qualification particulière au type d'écoulement à traiter. Des modélisations alternatives, répondant au besoin d'une plus grande précision sur des gammes d'échelles spatiales et temporelles plus étendues et donc basées sur un opérateur de "moyenne" d'une nature différente, sont actuellement en développement et représentent des voies nouvelles.

Le paysage des modélisations de la turbulence est aujourd'hui très complexe et l'unification des points de vue et des divers concepts de modélisation est une gageure. La tentation de l'universalité des modélisations reste donc hors de propos. Leur mise en œuvre réelle relève la plupart du temps de compromis généralement guidés par le savoir-faire de l'ingénieur.

(1) On peut faire référence à la répartition spectrale de l'énergie cinétique turbulente, connue comme le "spectre de Kolmogorov", qui illustre de manière très simple la hiérarchie des échelles, des grandes échelles porteuses d'énergie aux échelles de plus en plus petites et de moins en moins énergétiques.

(2) Cette étendue est le résultat des non-linéarités des équations du mouvement qui donne naissance à une gamme étendue d'échelles spatiales et temporelles. Cette gamme est une fonction croissante du nombre de Reynolds, Re , mesurant le rapport entre force d'inertie et force visqueuse.

(3) L'hypothèse selon laquelle la résolution complète des équations de Navier-Stokes permet la simulation de la turbulence est généralement admise, tout du moins dans la gamme des écoulements sans choc.

(4) Il s'agit d'un problème régi par des conditions initiales et aux limites.

Doses et débits de dose

Dans un milieu hostile, des sources de **radioactivité** émettent des rayonnements (X, γ) et/ou des particules (α, β , neutrons), qui se déplacent et interagissent avec les éléments qu'ils rencontrent. Ces interactions respectent des lois de probabilité, fonctions de la nature de la matière cible (composition atomique) et des propriétés de la particule ou du rayonnement (direction de propagation et niveau d'énergie). Les interactions avec un matériel ou un opérateur produisent de l'énergie, dont une partie reste *in situ*. Cette dernière s'exprime en **dose**, et traduit la quantité d'énergie communiquée à la matière par unité de masse. Ses unités sont le **gray** (unité légale) et le rad (ancienne unité) : $1 \text{ Gy} = 100 \text{ rad} = 1 \text{ J/kg}$. Pour un opérateur humain, l'effet biologique est variable selon les rayonnements et la nature du tissu. On utilise alors l'**équivalent de dose**, qui s'exprime en **sieverts** (unité légale) ou en rem (ancienne unité) : $1 \text{ Sv} = 100 \text{ rem}$. Le **débit de dose** (exprimé légalement en Gy/s, souvent en Gy/h ou en rad/h), pour l'effet sur un matériel, ou le **débit d'équivalent de dose** (en Sv/h ou en rem/h), pour l'effet sur une personne, traduisent respectivement la dose reçue et l'équivalent de dose reçue, par unité de temps.