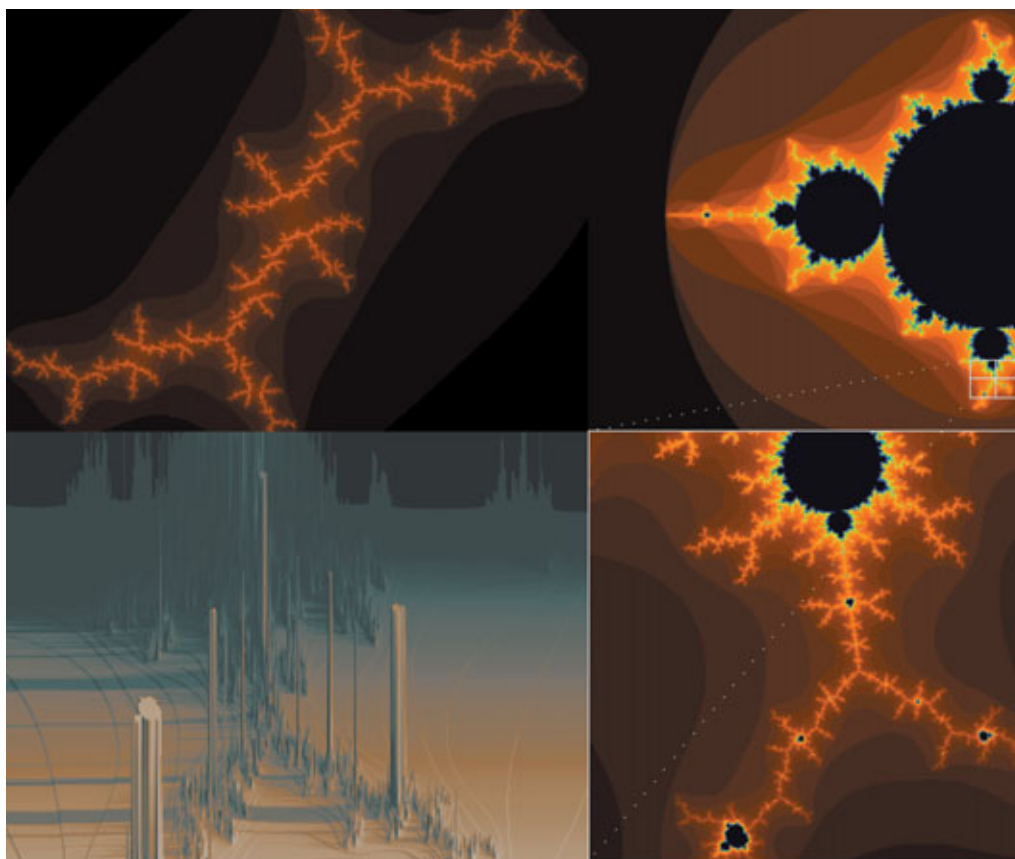


LES AVATARS DE LA THÉORIE POUR UNE PHYSIQUE PRÉDICTIVE

Qu'elle précède ou suive l'expérience, la théorie doit, dans le domaine de la physique, procéder de manière plus ou moins provisoire à certaines simplifications. C'est à ce prix qu'elle s'avère prédictive pratiquement à un moment donné. En particulier, elle doit identifier tous les paramètres importants qui permettent de décrire les phénomènes à une échelle donnée. Ce sont les avatars nouveaux de cette idée qu'illustre par exemple, en physique des particules, la théorie quantique des champs et qui conduit à la notion de théorie effective.



Jean-Francois Colonna (CMAP/Ecole polytechnique, FT R&D).

Illustration des effets du découplage des échelles. Si l'agrandissement itératif d'un segment de droite imprimé ne fait apparaître des détails supplémentaires que si les défauts de l'impression deviennent apparents, une image géométrique fractale (intitulée ici Le long de la frontière de l'ensemble de Mandelbrot), sans découplage des échelles, construite itérativement, apparaît différente à chaque grossissement, avec toujours plus de détails (reprenant en l'occurrence le même motif, comme indiqué à droite). Il y a là l'équivalent du groupe de renormalisation. L'algorithme dit comment passer d'une échelle à la suivante : à un grossissement donné, on peut parler d'image effective. L'image en bas à gauche est une vue 3D du même motif.



Au xx^e siècle, dans deux domaines distincts de la physique, la théorie des interactions fondamentales⁽¹⁾ et la mécanique statistique des transitions de phase, une des idées fondamentales de la physique a été remise en cause : le *découplage des échelles*. Prenons deux exemples pour illustrer cette idée. Une simple analyse dimensionnelle montre que la période d'un pendule varie comme la racine carrée de sa longueur. Ce résultat repose en fait sur l'hypothèse que d'autres longueurs, comme la taille des atomes qui composent le pendule ou le rayon de la Terre, n'interviennent pas, car respectivement beaucoup trop petite ou trop grande. De même pouvons-nous calculer les trajectoires des planètes, avec une très bonne approximation, en supposant que les planètes et le Soleil sont des points matériels, car leurs rayons sont beaucoup plus petits que les tailles des orbites.

Il est bien clair que si cette propriété de découplage n'était pas généralement vraie, une physique prédictive serait pratiquement impossible.

La théorie des interactions fondamentales

Dans les années trente, les premiers calculs d'électrodynamique quantique⁽¹⁾ se heurtèrent à des problèmes apparemment insurmontables : beaucoup de résultats étaient infinis et ces infinis étaient directement liés à la nature ponctuelle de l'électron. Il apparut rapidement que ces infinis avaient un caractère fondamental, paraissant une conséquence inévitable du caractère ponctuel des particules et de la conservation des probabilités.

(1) Voir à ce sujet *Clefs CEA* n° 36 p. 24.

Une solution empirique à ce problème, appelée *renormalisation*, fut cependant trouvée. Elle consistait à exprimer les quantités mesurables non pas en termes des paramètres initiaux de la théorie, comme la charge de l'électron en l'absence d'interactions, mais en termes de quantités renormalisées comme la charge de l'électron observée. Les résultats obtenus par cette méthode furent ensuite confirmés, de façon spectaculaire, par l'expérience.

A priori, cette méthode apparaît comme une application du principe habituel : utiliser des paramètres adaptés à l'échelle d'observation. Toutefois, dans ce cadre, trois bizarreries apparaissaient : la relation infinie entre paramètres initiaux et paramètres observés, la nécessité, pour que la méthode de renormalisation marche, d'introduire parfois des interactions supplémentaires non anticipées et enfin la propriété que l'intensité des interactions dépendait de l'échelle

Le pendule de Foucault au Panthéon. Pour aboutir au résultat que la période d'un pendule varie comme la racine carrée de sa longueur, il a fallu faire l'hypothèse que d'autres longueurs, comme la taille des atomes qui composent le pendule ou le rayon de la Terre, n'interviennent pas car, respectivement, beaucoup trop petite ou trop grande.



Palais de la Découverte

d'observation. Par exemple, pour des distances plus petites que la longueur d'onde de l'électron, la théorie prédit un phénomène "d'anti-écranage". Ce phénomène a été vérifié plus tard de façon très directe à haute énergie, c'est-à-dire à courte distance : la charge de l'électron observée à une énergie de 100 GeV, qui correspond à la masse de la particule Z, est augmentée de 4 % par rapport à sa valeur "habituelle", qui est la charge coulombienne.

Phénomènes critiques et théorie gaussienne

La théorie des phénomènes critiques a comme objet la description des transitions de phase continues ou du second ordre dans les systèmes macroscopiques, comme la transition liquide-vapeur, les transitions dans les mélanges binaires, l'hélium superfluide, les systèmes magnétiques. Ces transitions sont

caractérisées par des comportements collectifs à grande échelle près de la température de transition (la température critique T_c). On s'attend alors à ce que ces comportements puissent faire l'objet d'une description macroscopique, ne faisant intervenir qu'un petit nombre de paramètres adaptés à cette échelle, sans référence explicite aux paramètres microscopiques initiaux ou à l'échelle microscopique initiale comme la taille des atomes, la maille des cristaux ou la portée des forces. Cette idée conduit à une théorie gaussienne (pour des raisons analogues au théorème de la limite centrale de la théorie des probabilités).

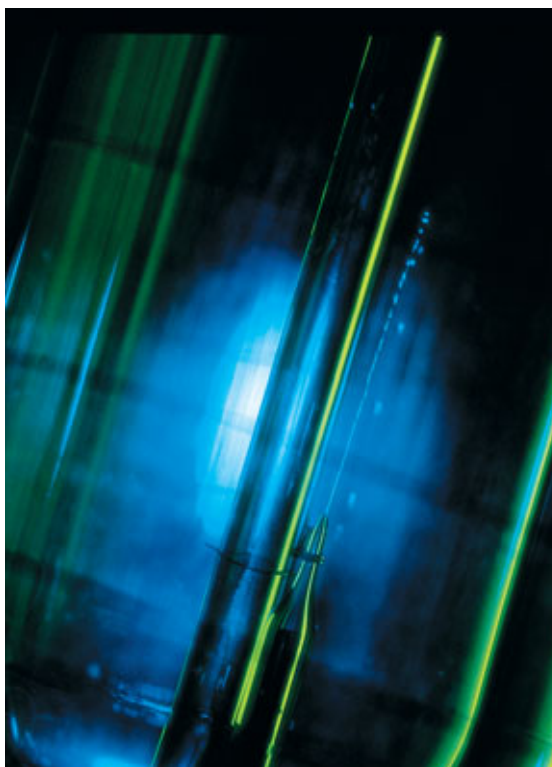
Aussi les physiciens furent-ils très surpris du désaccord de cette théorie aussi bien avec l'expérience qu'avec des calculs de modèles de mécanique statistique sur réseau. L'échec de la théorie gaussienne démontrait que les propriétés macroscopiques ne pouvaient pas être calculées en ignorant complètement l'échelle microscopique. En fait, un calcul des corrections à la théorie gaussienne fait apparaître des infinis à la température critique. Les divergences rencontrées dans la théorie des champs de la physique des particules et la théorie des phénomènes critiques ont en fait une origine commune : le non-découplage des différentes échelles de physique. Les infinis apparaissent quand on essaie d'ignorer, comme on en a l'habitude, et comme il est généralement justifié, l'existence d'une échelle de physique microscopique sous-jacente.

Universalité et groupe de renormalisation

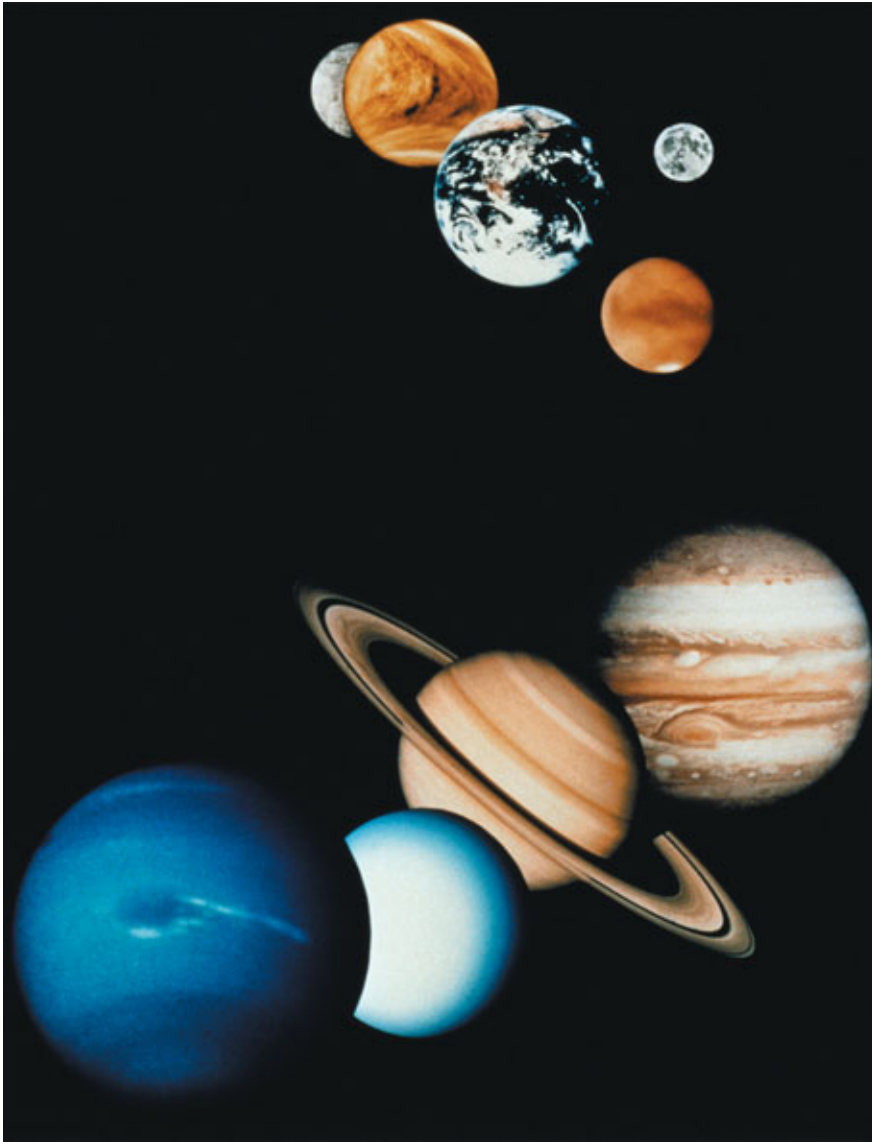
On aurait pu craindre dans ces conditions que la physique macroscopique soit sensible à toute la structure de courte distance, que les phénomènes à grande distance dépendent de la dynamique microscopique détaillée, et donc soient essentiellement imprédictibles. En fait il fut découvert empiriquement que seule l'échelle de distance associée aux interactions microscopiques et certaines de leurs caractéristiques générales étaient importantes, une propriété appelée *universalité*. La survivance d'une universalité, même réduite par rapport à la théorie gaussienne, était encore plus surprenante.

Pour comprendre toutes ces observations, un nouveau cadre conceptuel fut inventé : le *groupe de renormalisation*. Il est difficile de le décrire ici précisément, mais l'idée essentielle est la suivante : on construit une équation d'évolution pour la variation des interactions en fonction de l'échelle d'observation. On se donne comme condition initiale les interactions microscopiques et on recherche les interactions *effectives* à plus grande distance. Si l'équation d'évolution a des propriétés de point fixe, c'est-à-dire que pour

Effet fontaine de l'hélium superfluide. C'est l'exemple d'un phénomène dont les propriétés à l'échelle macroscopique ne peuvent pas être calculées en ignorant complètement l'échelle microscopique.



CEA/Oasis/D. Chaslerie



PhotoDisc/StockTrek

Les planètes du système solaire regroupées. Leurs trajectoires ont été calculées en supposant qu'il s'agissait de points matériels car leurs rayons sont minuscules par rapport à la taille de leurs orbites.



toute une classe d'interactions initiales on obtient les mêmes interactions effectives à grande distance, alors la propriété d'universalité peut être expliquée.

Cette stratégie a permis alors d'expliquer toutes les propriétés des transitions de phase simples. Mais elle a établi de façon remarquable une relation entre théorie des interactions fondamentales et transitions de phase : la théorie effective qui décrit les phénomènes critiques à grande distance est une *théorie quantique des champs* du genre de celle qui décrit la physique des particules.

Il devient alors difficile de résister à la tentation d'appliquer les mêmes idées à la théorie des interactions fondamentales.

Théories quantiques des champs effectives

On peut maintenant imaginer que les interactions fondamentales sont décrites à l'échelle microscopique (bien sûr microscopique, comme la longueur de Planck⁽²⁾, par rapport aux échelles de distance actuelle-

ment expérimentalement accessibles), c'est-à-dire à très grande énergie, par une théorie finie de nature inconnue (la *théorie des cordes* ?). Pour des raisons qui restent à comprendre, elle engendre, par l'effet coopératif d'un grand nombre de degrés de liberté, une physique de grande distance avec des particules de très faible masse (par rapport à la masse de Planck⁽²⁾, 10^{19} GeV).

À des distances un peu supérieures à l'échelle microscopique, la physique est décrite par une théorie des champs très compliquée avec un nombre infini d'interactions, dont les intensités évoluent avec la distance. Conséquence de l'existence d'un point fixe de longue distance, la plupart des interactions, décroissent alors rapidement et deviennent négligeables à grande distance (une seule conduit néanmoins à des effets importants, la gravité, à cause de son caractère cumulatif et attractif). Des interactions en nombre fini

(2) Dimensions limites inférieures de la Nature selon la physique quantique.

évoluent lentement (de façon logarithmique) et survivent à longue distance. Elles conduisent au *modèle standard* qui décrit presque toute la physique des particules accessible⁽¹⁾. Enfin, certains paramètres peuvent croître avec la distance. Par exemple, on s'attendrait dans le modèle standard à ce que la masse de la particule de Higgs⁽¹⁾ soit voisine de la masse de Planck, une masse incompatible avec la physique observée. Il s'agit là d'un problème non résolu appelé problème de l'*ajustage fin*⁽¹⁾. Une hypothétique supersymétrie⁽¹⁾ est une des solutions proposées. Ce point de vue moderne, profondément basé sur le groupe de renormalisation et la notion d'interactions dépendant de l'échelle d'observation, non seulement procure une image plus cohérente de la théorie quantique des champs, mais donne également un cadre dans lequel de nouveaux phénomènes peuvent être discutés.

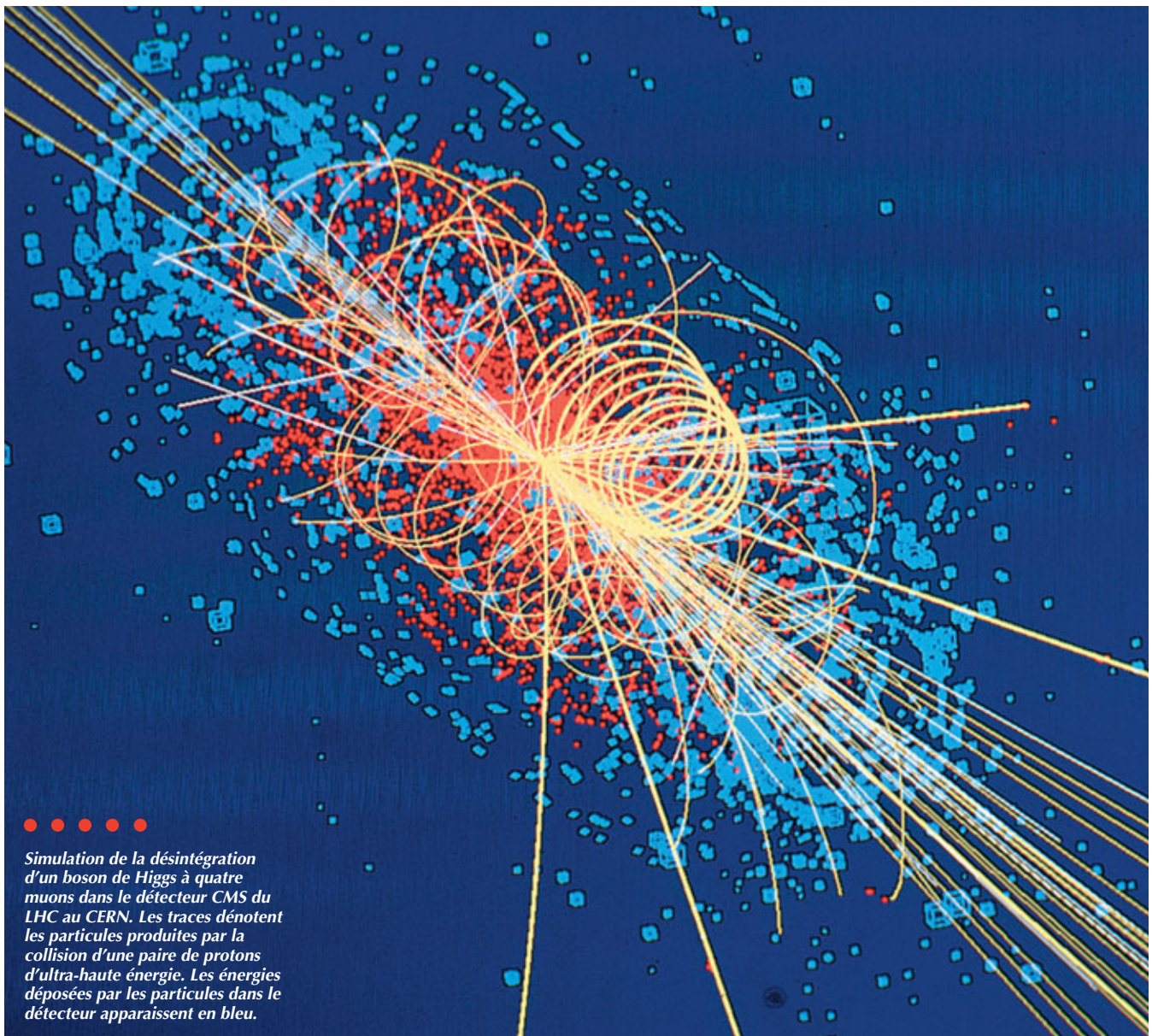
Il implique aussi que la théorie quantique des champs est une description temporaire, qui n'est pas nécessairement cohérente à toutes les échelles, et destinée à être finalement remplacée par une théorie plus fondamentale de nature radicalement différente. Il faut néanmoins souligner que la théorie quantique des champs reste, pour l'instant, le cadre le plus fécond pour l'étude de beaucoup de problèmes en physique où un nombre très grand de degrés de liberté interagissent fortement. ●

Jean Zinn-Justin

Direction des sciences de la matière
CEA centre de Saclay

LES SIMULATIONS EN PHYSIQUE DES PARTICULES

Dans les simulations qui accompagnent les expérimentations en physique des particules, la description aussi détaillée que possible des processus physiques, à côté de l'élaboration de détecteurs de plus en plus sensibles, joue un rôle essentiel. Mais le hasard n'en est pas absent. Parce qu'il est le meilleur moyen de ne pas introduire de biais dans le choix des données à injecter dans la modélisation de phénomènes complexes et que la physique quantique est intrinsèquement probabiliste. Ces simulations produisent des données virtuelles très proches de ce que serait la réalité.



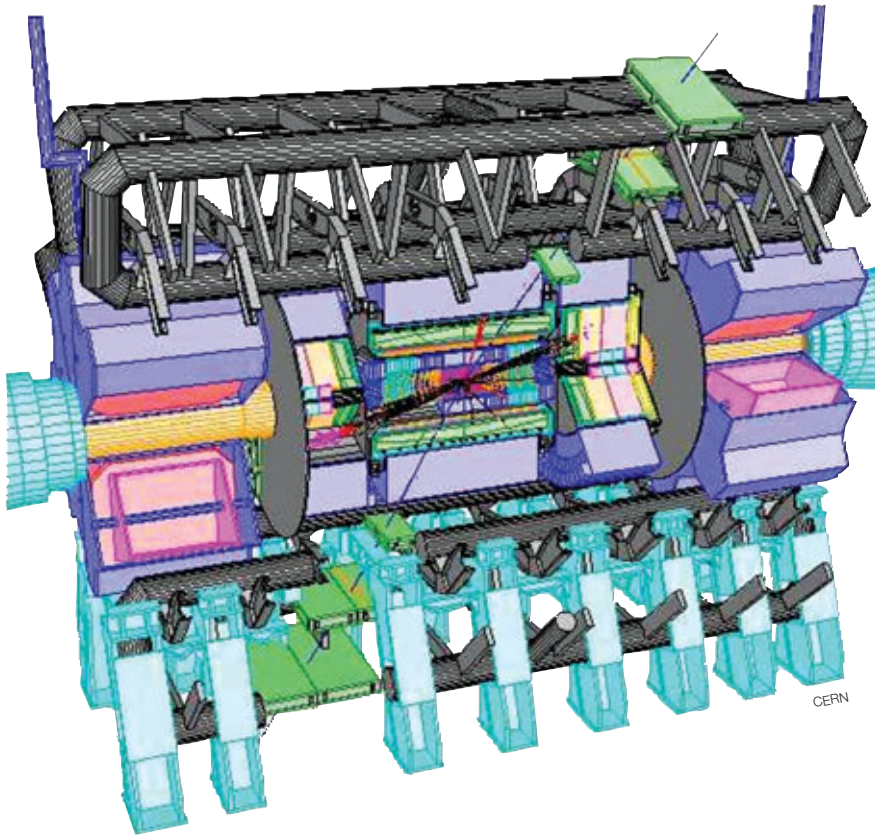
● ● ● ● ●
 Simulation de la désintégration d'un boson de Higgs à quatre muons dans le détecteur CMS du LHC au CERN. Les traces dénotent les particules produites par la collision d'une paire de protons d'ultra-haute énergie. Les énergies déposées par les particules dans le détecteur apparaissent en bleu.

CERN

En écoutant les conversations de travail des physiciens des particules, vous seriez sans doute étonnés d'entendre aussi fréquemment le mot "Monte-Carlo". Il ne s'agit pas du prochain site d'implantation d'un accélérateur, ni d'un lieu de conférence. "Le" Monte-Carlo, c'est le programme de simulation que possède toute expérience, l'outil indispen-

sable pour la conception du détecteur, la mise au point des algorithmes d'analyse des données, le calcul des efficacités de détection et du rejet du bruit de fond. Le terme provient bien du nom de la capitale européenne des jeux de hasard (les Américains parlent également de Monte-Carlo et non pas de "Las Vegas" !).

L'origine du nom est la "méthode d'intégration par Monte-Carlo" (voir aussi encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*). De quoi est-il question ? Supposons que vous souhaitiez aménager votre salle à manger : en particulier, vous désirez que l'éclairage au centre de la table ait une intensité donnée. Pour commencer simple-



Simulation d'un événement dans l'expérience Atlas auprès du Grand collisionneur de hadrons (Large Hadron Collider-LHC), actuellement en construction au CERN. Pour faciliter la vue à l'intérieur, seule une partie des détecteurs est représentée.



ment, vous pensez à une seule source de lumière, une suspension au-dessus de la table. Connaissant le flux lumineux de la lampe, le calcul est facile. Mais vous disposez aussi d'un lampadaire placé dans le coin de la pièce, dont une partie de la lumière atteint la table, diffusée par le plafond et les murs. Les choses se corsent. Rien que pour la géométrie, il vous faut maintenant effectuer plusieurs intégrales du flux lumineux et tenir un compte fastidieux des catégories de trajets possibles (lampe → table, lampadaire → table, lampadaire → plafond → table, lampadaire → plafond → mur → table...). Après de longs calculs, vous réalisez que le plafond et les murs ne sont ni réfléchissants comme des miroirs, ni de parfaits diffuseurs. Il vous faut des "modèles" de mur et, pour chacun de ces modèles, toutes les intégrales sont à refaire ! (Encadré A, *Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?*)

La solution numérique s'impose. Vous écrivez un programme qui **simule** la génération par les lampes de rayons lumineux, puis suit le trajet de chacun et calcule son devenir en fonction des obstacles rencontrés. Il ne reste plus qu'à compter le nombre de rayons qui arrivent sur la table.

Dans cet exemple, il n'est pas nécessaire de faire appel au hasard pour la génération des rayons lumineux. Il est facile de générer des rayons régulièrement espacés sur une grille en angles, à condition qu'ils soient assez nombreux pour être sûr qu'aucun trajet "intéressant" ne tombe dans un trou de la grille. Mais tirer au hasard la position des rayons de départ possède l'avantage de ne pas induire (du

moins en principe !) de régularité aux conséquences mal contrôlées. D'où la méthode d'intégration par Monte-Carlo : le physicien demande à l'ordinateur des nombres "au hasard" pour fixer la direction du rayon initial. Le hasard peut également intervenir dans le modèle de mur. Supposons que ce mur soit moitié réfléchissant, moitié diffuseur. Pour chaque rayon incident, il produit plusieurs rayons émergents : un réfléchi, les autres diffusés (chacun affublé d'une fraction de l'intensité du rayon incident). À nouveau le problème du maintien des comptes va se poser. Pour garder la simplicité du programme, il suffit de conserver un seul rayon et de tirer au sort son devenir, réfléchi ou diffusé (et pour ce dernier la direction de diffusion).

Dans les simulations de physique des particules, le hasard intervient aussi spécifiquement pour une autre raison. Les particules étant des objets **quantiques**, leurs réactions ne peuvent être décrites que par des probabilités. Ce serait d'ailleurs le cas si un modèle quantique du mur était adopté. Le rayon lumineux serait alors un photon unique et sa réaction avec le mur serait décrite en termes de probabilités (50 % réflexion, 50 % diffusion), mais ici de façon fondamentale.

Indispensable pour l'analyse...

Dès les années soixante-dix, avec la complexification des expériences, le programme de simulation Monte-Carlo est devenu indispensable pour l'analyse des données. Au départ, il s'agissait de calculs assez simples, comme l'efficacité du détecteur pour une particule de

telle direction et telle impulsion. Mais pour prendre en compte les corrélations entre particules d'un même événement, le physicien en est vite arrivé à simuler un événement entier, avec le comportement de chaque particule dans le détecteur, de façon de plus en plus détaillée. Les années quatre-vingt ont vu apparaître des logiciels spécialisés dans un domaine de simulation, et susceptibles d'être employés par toutes les expériences, comme les "générateurs d'événements". L'utilisateur donne au programme les conditions de l'expérience, par exemple une collision entre un électron et un positon (électron positif) à une énergie de 200 gigaélectronvolts, et le programme produit des événements simulés, avec toutes les particules de l'état final, leur type, leur direction, leur impulsion. Le physicien peut bien sûr contrôler tous les paramètres, activer ou désactiver chaque réaction possible, permettre ou interdire les désintégrations...

Avec le temps, théoriciens et expérimentateurs ont incorporé dans ces programmes la totalité de la physique connue et la plupart des possibilités théoriques. Il existe sur le "marché"⁽¹⁾ une poignée de tels générateurs dont les auteurs se livrent des luttes acharnées pour apporter de subtils raffinements ou transcrire très vite en code les prédictions de la dernière théorie à la mode.

Un autre programme succède à ces générateurs. Il prend un événement "clefs en mains"

(1) À noter cependant que ces programmes sont gratuits, comme toute publication scientifique.

Montage du détecteur CMS
auprès du futur LHC. La virole
externe de l'aimant a été insérée
dans l'axe du détecteur.



CERN

et simule le comportement des particules dans le détecteur. Le logiciel⁽²⁾ apporte le cadre et le système de propagation des particules ainsi que l'essentiel de la physique de l'interaction particules-détecteur : courbure dans le champ magnétique, ionisation, rayonnement de freinage, création de paires, interaction avec les noyaux... La description de l'expérience est écrite par l'utilisateur de même que de nombreux cas particuliers de réponse de détecteurs où le modèle disponible dans le logiciel est insuffisant. Cette partie représente un effort très important, de l'ordre du million de lignes de code pour une grosse expérience, autant que les programmes de reconstruction.

... et pour la traque d'une nouvelle physique

Avec de tels outils, il est possible de générer des événements simulés dans le format des vraies données et de les passer ensuite dans la même chaîne de reconstruction. Le physicien est ainsi capable d'évaluer précisément la performance de l'appareillage et des algorithmes d'analyse. Par exemple, des événements que produirait une physique encore inconnue sont susceptibles d'être mêlés à des événements similaires, créés par des processus connus, qui constitueraient un bruit de fond. Il s'agit alors

de vérifier que l'analyse identifie correctement les événements intéressants.

Au stade de la conception de l'expérience, le physicien peut modifier le type ou le dessin des détecteurs pour favoriser la sensibilité à telle ou telle possibilité théorique. Ensuite, les simulations permettent de raffiner les algorithmes d'analyse et d'en maîtriser l'efficacité. Enfin, elles donnent le moyen de prouver qu'un signal vu par l'expérience provient bien d'une nouvelle physique, ou inversement que cette éventuelle nouvelle physique n'existe pas si aucun signal n'a été vu.

Dans certaines collaborations, une équipe se charge de générer un lot d'événements simulés qui contient un ou plusieurs signaux de nouvelle physique. Ce lot est transmis aux équipes chargées de l'analyse sans leur dévoiler la nature des signaux introduits. En règle générale tout fonctionne bien, mais il arrive parfois des surprises : un signal injecté est ignoré, mais sachant qu'ils doivent trouver quelque chose, les physiciens en découvrent... là où il n'y en a pas !

En conclusion, toutes les expériences de physique des particules utilisent les simulations, souvent avec des millions d'événements. L'accroissement des performances et la diminution des prix des ordinateurs favorisent d'ailleurs cette tendance. Il s'agit d'un investissement très important en hommes et en matériel. Les décisions sur le type de programme employé, l'architecture du logiciel, les bases de données... ont des conséquences pour toute la durée de l'expérience, une dizaine d'années ou plus. La communauté doit donc renouveler les efforts pour standardiser et mettre en commun logiciels et méthodes. ●

(2) Il n'existe qu'un seul progiciel (ensemble complet de programmes) général de ce type ouvert à tous : Geant, employé par la plupart des collaborations (d'autres ont écrit entièrement leur propre programme). Développé à l'origine par le Laboratoire européen pour la physique des particules (CERN) comme utilitaire, Geant est, dans sa dernière version (IV), un projet "ouvert", aux nombreux contributeurs. Ce mode d'écriture original doit encore faire ses preuves...

Bruno Mansoulié

Direction des sciences de la matière
CEA centre de Saclay

Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?

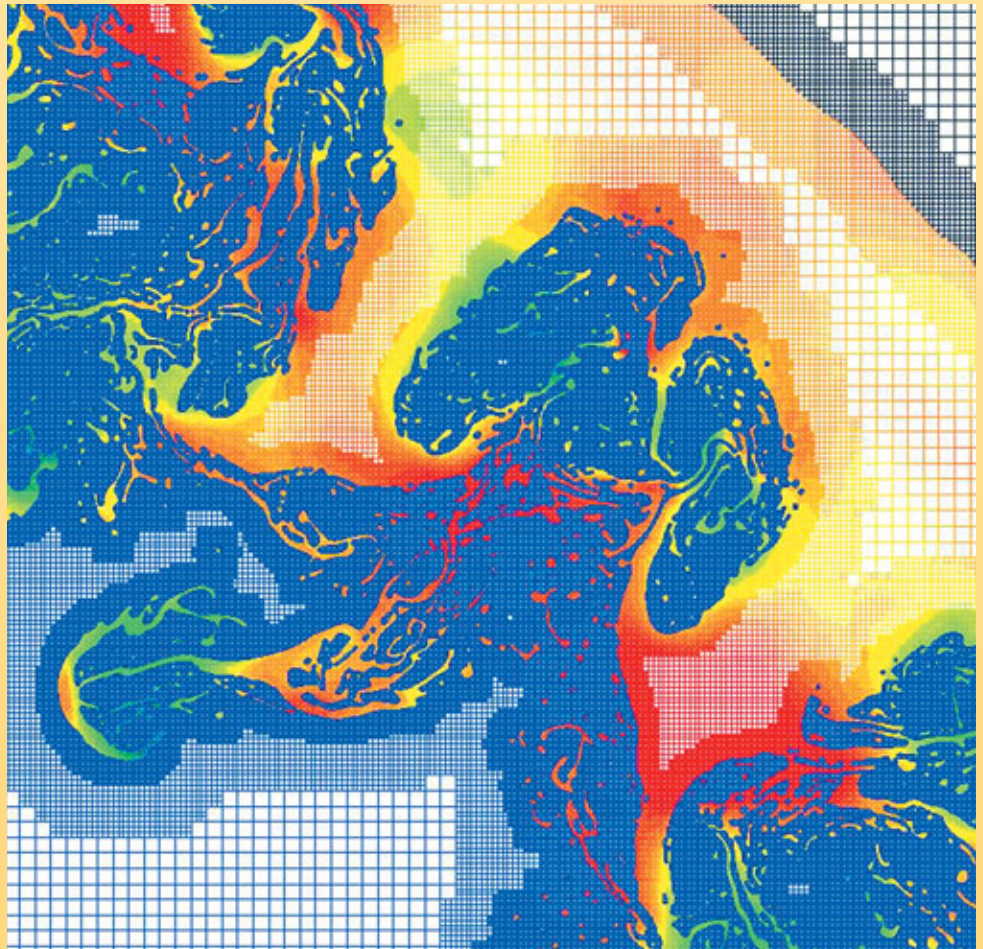
La **simulation numérique** consiste à reproduire par le calcul le fonctionnement d'un système, préalablement décrit par un ensemble de **modèles**. Elle s'appuie sur des méthodes mathématiques et informatiques spécifiques. Les principales étapes de la réalisation d'une étude par simulation numérique 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. Chaque point 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 voisins. 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 décroître 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.

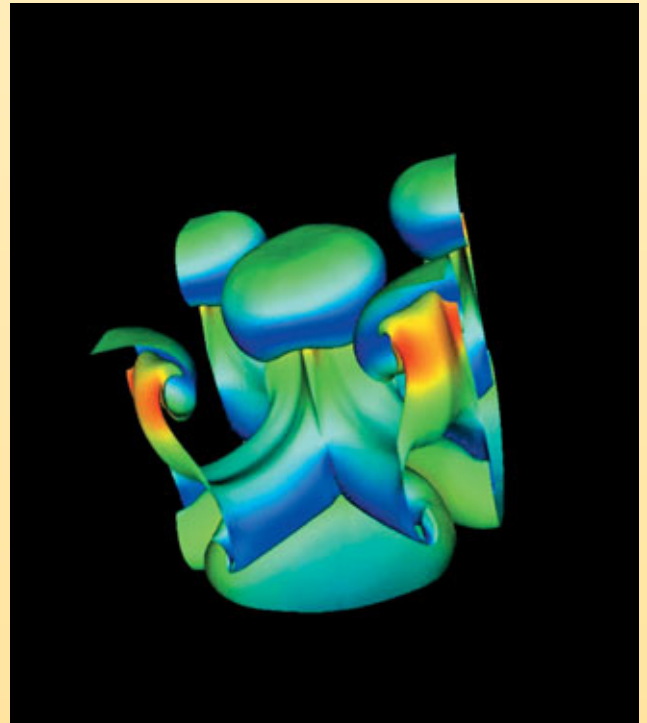
Comment se déroule une simulation numérique ?

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



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).

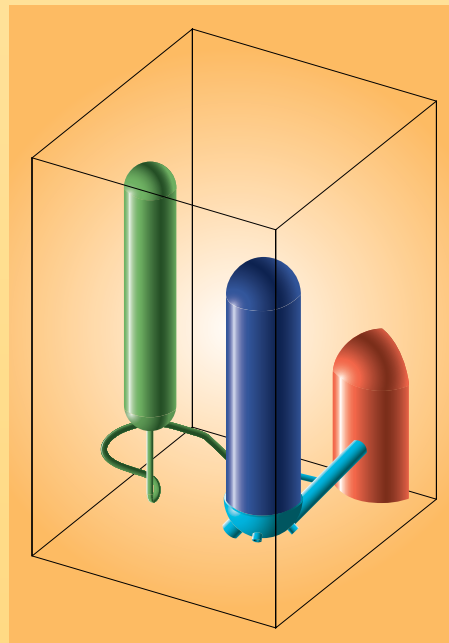


Figure A. Domaine de calcul global incluant une partie de la cuve réacteur (rouge), la conduite de sortie (branche chaude en bleu clair), le générateur de vapeur (bleu foncé) et le pressuriseur (vert).

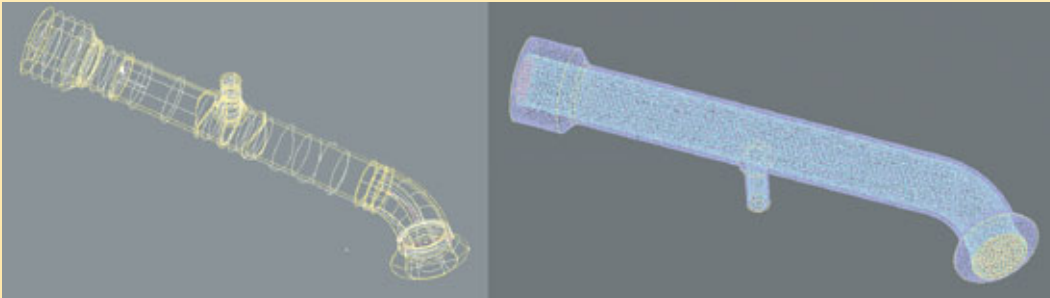
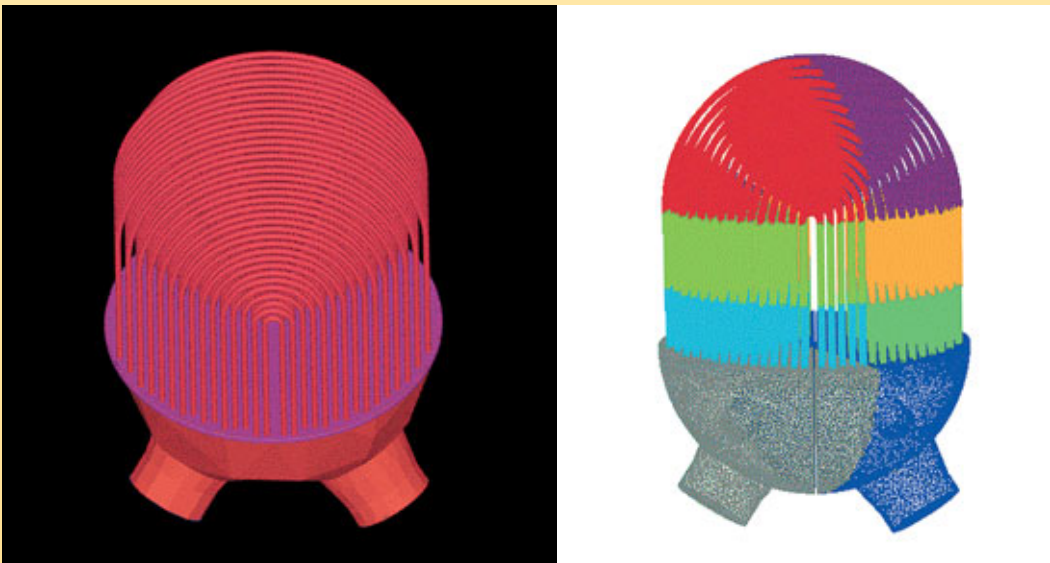


Figure B. Modèle CAO de la branche chaude en sortie de la cuve réacteur (à gauche) et son maillage non structuré (à droite).



Figures C et D.

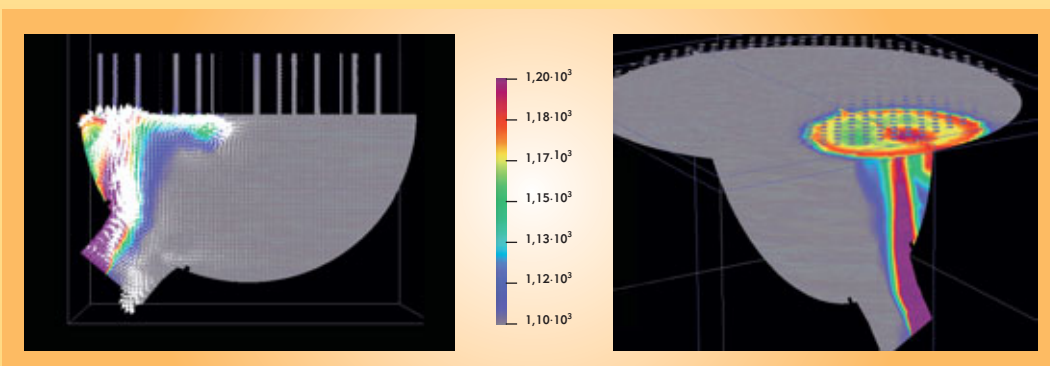


Figure E.

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 composant 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** ($1 \text{ To} = 10^{12}$ 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** ($1 \text{ Tflops} = 10^{12}$ opérations de calcul par seconde).

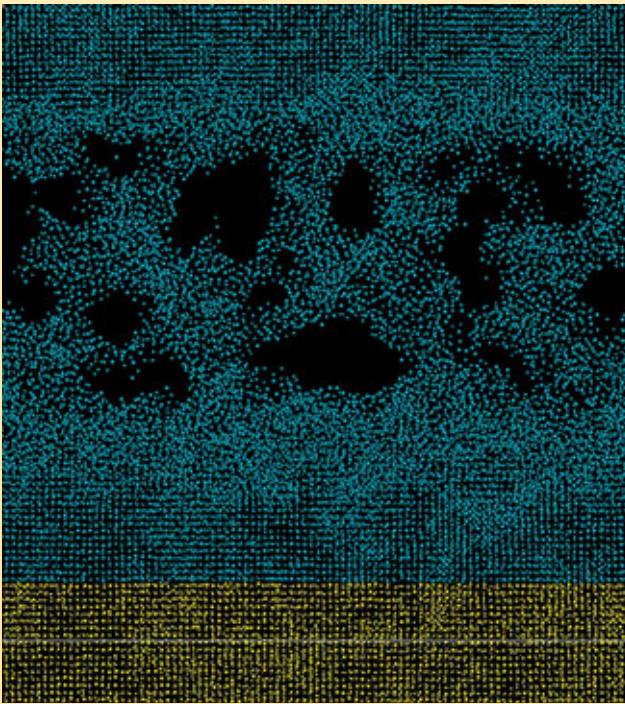
Il existe aujourd'hui trois grands types de supercalculateurs : les supercalculateurs vectoriels, les grappes de mini-ordinateurs à mémoire partagée et les grappes de PC (l'ordinateur que chacun possède chez soi). Le choix entre ces architectures dépend largement des applications et de l'utilisation 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

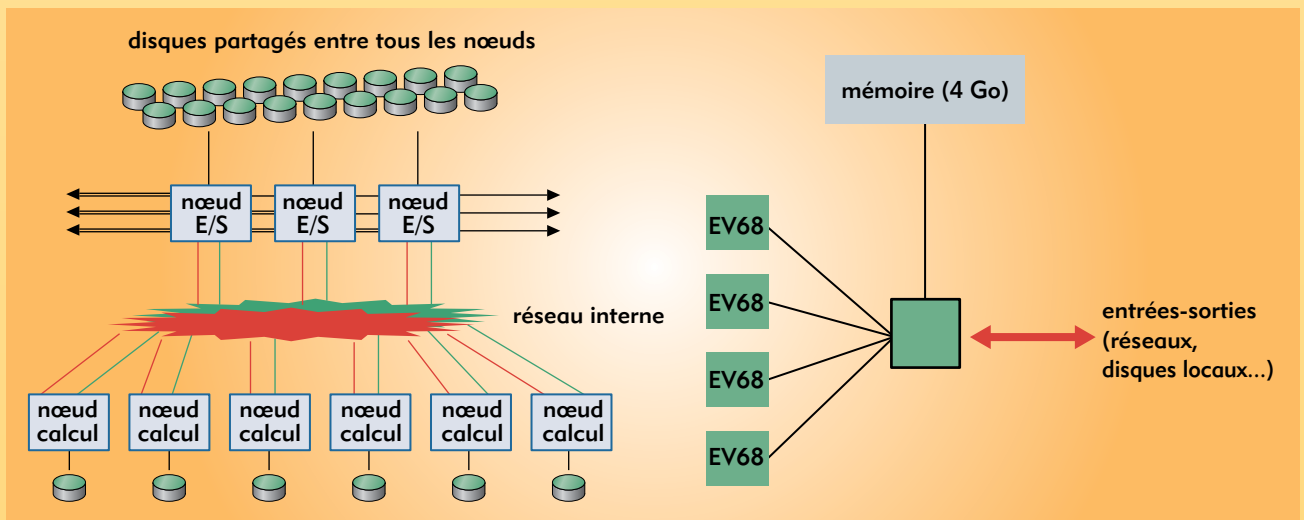


Figure. Architecture d'une machine du type "cluster de SMP". À gauche, l'architecture générale (E/S = entrée/sortie), à droite celle d'un nœud avec quatre processeurs Alpha EV68 cadencés à 1 GHz.

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.

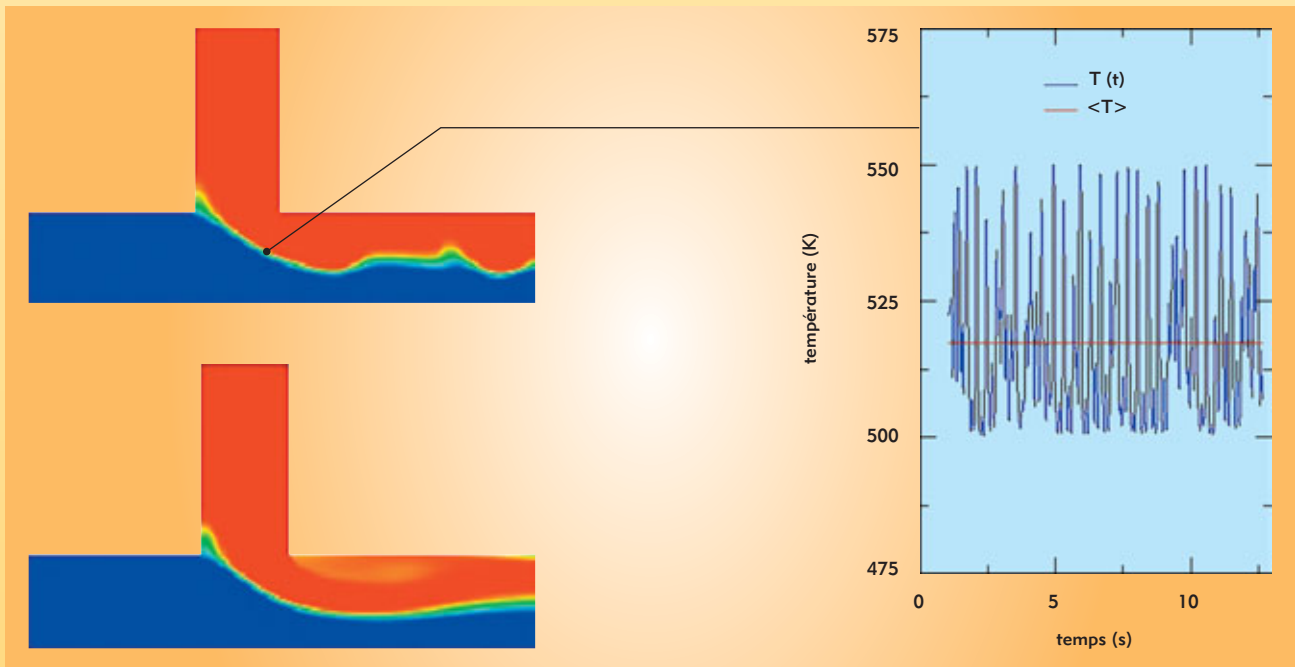


Figure. Champ de température instantané (haut) et moyenné (bas) dans une situation de mélange. La courbe donne l'historique de la température en un point : valeur instantanée fluctuante en bleu et moyenne en rouge (d'après la thèse d'Alexandre Chatelain [DEN/DTP/SMTH/LDTA]).

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.