

Les Savanturiers

SIMULATION NUMÉRIQUE

16

AVRIL 2016

En mission avec les scientifiques du CEA



> La simulation pas à pas

> La simulation. Comment ? Pourquoi ?

> Interviews

p. 2-3

p. 4-5

p. 6-7

Des calculs à pleine puissance

A votre avis, comment se comporte un bateau de course dans l'eau ou un avion dans l'air ? Comment prévoir son comportement lorsque l'environnement change (conditions météorologiques, obstacles...) ? Comment optimiser la forme et la structure de cet objet ? C'est le type de problèmes que doit résoudre la simulation numérique.

La simulation pas à pas

Qu'est-ce qu'une simulation numérique ?

C'est une représentation approchée sur ordinateur de phénomènes du domaine réel. Elle se construit par étapes : représentation du phénomène selon les lois de la physique – transcription du phénomène physique en équations mathématiques – résolution numérique et traduction en langage informatique – calcul numérique – comparaison avec l'expérience ou l'observation.



Pourquoi avoir recours au calcul ?

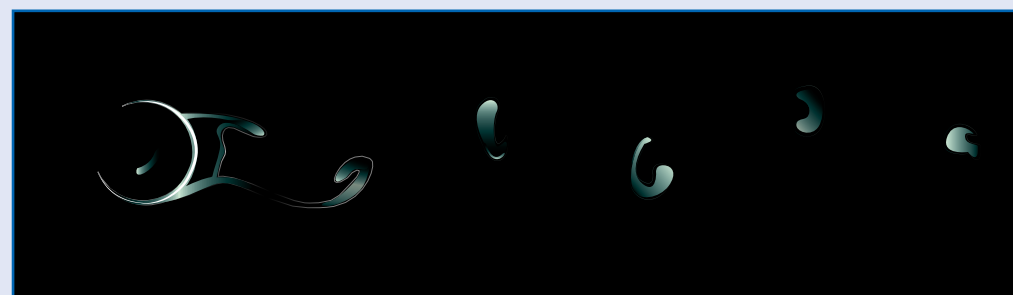
Grâce aux progrès des calculateurs, la simulation numérique s'est généralisée à toutes les disciplines au point de devenir le « troisième pilier » de la méthode scientifique, aux côtés de la théorie et de l'expérimentation. La simulation numérique permet des expériences virtuelles qui remplacent ou complètent les expérimentations lorsque celles-ci sont dangereuses (ex : accidents, crash tests), trop longues (ex : climatologie) ou trop courtes (ex : physique atomique), trop petites (ex : protéines) ou trop grandes (ex : astrophysique), interdites (ex : essais nucléaires).


Les besoins augmentent

Afin de se rapprocher de plus en plus de la réalité, les simulations numériques doivent, parfois simultanément :

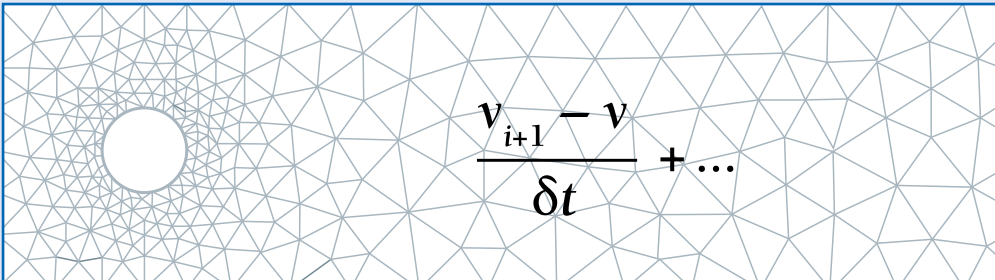
- intégrer de plus en plus de phénomènes physiques (étapes 1 et 2),
- mailler plus finement (plus on découpe, plus la résolution augmente - étape 3),
- multiplier les calculs pour quadriller l'espace des solutions et réduire les incertitudes (étapes 4 et 5).

C'est pourquoi la puissance de calcul et les capacités de stockage des centres de calcul sont en constante augmentation.

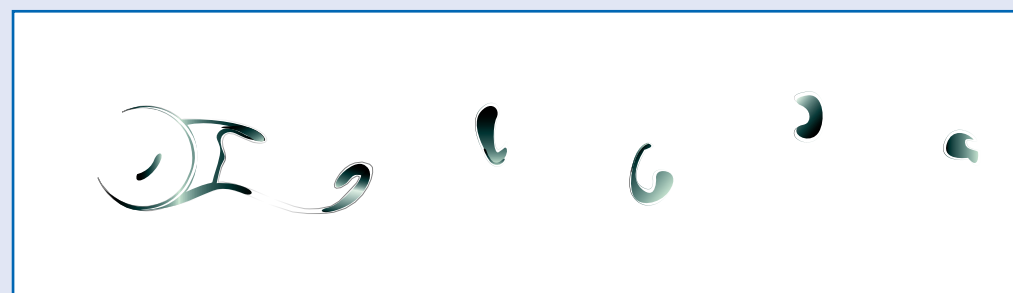




$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = - \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v}$$



$$\frac{\mathbf{v}_{i+1} - \mathbf{v}}{\delta t} + \dots$$



Etude de l'écoulement d'un fluide autour d'un cylindre.

LES ÉTAPES

1 - RÉALITÉ

Les phénomènes physiques sont souvent complexes. Pour les représenter, les physiciens prennent en compte de nombreuses lois physiques, par exemple celles qui régissent les relations entre la vitesse, la température et la pression dans un fluide.

2 - MODÉLISATION

Les lois physiques sont traduites en équations mathématiques, faisant intervenir l'ensemble des paramètres pertinents.

3 - RÉOLUTION NUMÉRIQUE ET PROGRAMMATION

Les équations mathématiques, trop complexes pour être calculées par l'homme, doivent être traitées par un ordinateur. Comme celui-ci ne peut les résoudre en tous points et de manière continue, les mathématiciens les **discrétisent** dans l'espace et le temps :

- Les objets sont découpés en petits éléments (on dit qu'ils sont maillés) ;
- Le temps est découpé en petits intervalles.

Les équations sont calculées pour chacun des points et des instants pertinents. L'enchaînement des calculs à réaliser s'appelle un algorithme. En général, en simulation numérique, il s'agit au final de nombreuses additions et multiplications traduisant l'évolution des quantités physiques. Pour que l'ordinateur puisse exécuter l'algorithme, celui-ci est converti en langage informatique par les informaticiens.

4 - EXÉCUTION DE SIMULATIONS

Grâce aux moyens de plus en plus performants mis à leur disposition par les spécialistes concevant les centres de calcul, les physiciens et ingénieurs lancent leurs simulations numériques. Puis les résultats sont conservés dans des espaces de stockage de grande capacité, conçus pour un accès performant et **pérenne**. Les utilisateurs peuvent visualiser leurs données sur leur poste de travail de façon interactive. Afin de discerner les moindres détails, ils peuvent les étudier via un « mur d'images » à la résolution augmentée.

5 - EXPÉRIMENTATIONS

Une phase d'expérimentation est nécessaire afin de valider les modèles, de mesurer les paramètres d'entrée et leur influence.

Si les expérimentations diffèrent de la réalité, de nouvelles simulations sont lancées, en faisant varier les paramètres, en intégrant ou affinant d'autres phénomènes dans la modélisation. L'enjeu est de réduire au maximum l'écart entre la réalité physique et le modèle numérique qui s'en approche, écart appelé incertitude.

RHLEXIQUETGHKBYT

Discrétiser : remplacer un domaine (espace) ou un intervalle (temps) continu par un ensemble de valeurs individuelles et non-continues qui l'approche au mieux.

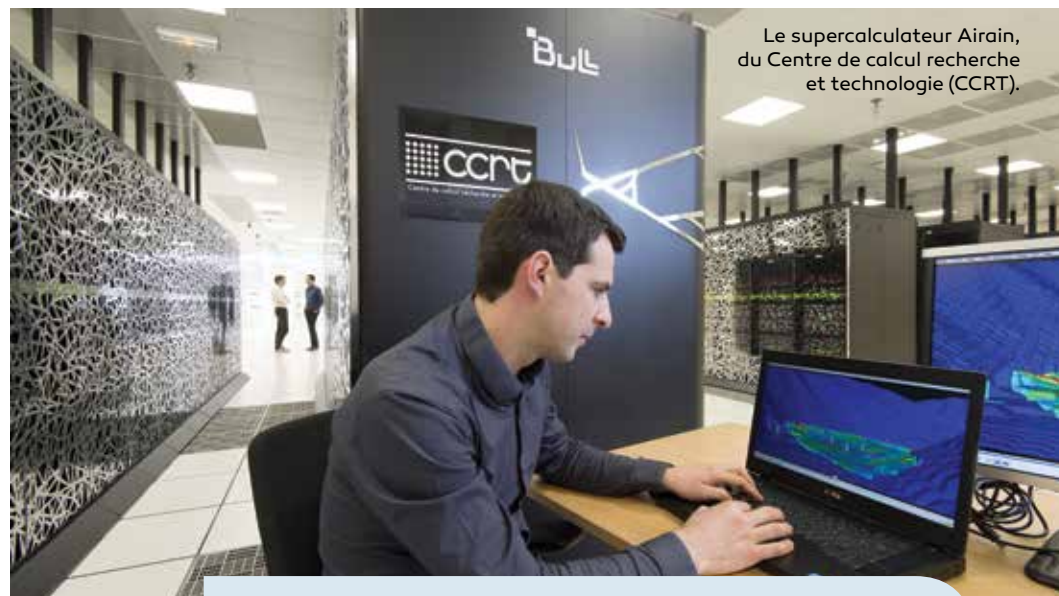
Pérenne : qui dure toujours, permanent.

Visualisation d'une simulation numérique sur un mur d'images à haute résolution



Comment ?

La simulation numérique permet d'avancer dans tous les domaines, de manière avantageuse en termes de coûts et de souplesse d'usage. Pour cela, il faut développer en parallèle des moyens de calcul, des logiciels et des méthodologies (modélisation, simulation, validation).



Le supercalculateur Airain, du Centre de calcul recherche et technologie (CCRT).

Supercalculateurs

La vitesse de traitement des opérations de simulation numérique s'exprime en Flops (Floating Point Operations Per Second). Dans les années 1930, les calculateurs effectuaient une opération par seconde. Aujourd'hui, les unités usuelles pour les supercalculateurs sont le teraflops (un million de millions d'opérations par seconde) et le petaflops (un million de milliards par seconde) pour les plus gros ! Ces masses d'opérations ne peuvent pas être menées les unes après les autres ! Elles sont calculées en parallèle sur des « **nœuds de calcul** », reliés par un réseau interne ultrarapide. Cela permet de réaliser un calcul efficace réparti sur de nombreux processeurs communiquant entre eux. Les performances d'un supercalculateur, ce sont ses capacités à exécuter des calculs mais aussi à traiter de très grands volumes de données.

De grandes masses de données à gérer

Les simulations numériques produisent des quantités de données de plus en plus gigantesques, de même que les observations et expériences scientifiques, qu'il faut stocker et analyser. Ceci nécessite des moyens technologiques lourds (disques, bandes magnétiques...). Il faut aussi faire circuler ces données, en entrée ou en sortie des calculs, vers les utilisateurs qui les analysent et entre ceux qui travaillent sur de mêmes études. Les réseaux informatiques, haut-débit et longue distance, ont donc un rôle important. On parle de plus en plus de « Big Data » pour élargir ces questions de masses de données à toutes celles produites par les réseaux sociaux, Internet et les objets nomades.



Robot de stockage du TGCC, contenant les données générées par les calculs que les utilisateurs réalisent grâce aux supercalculateurs.

Logiciels

Une simulation numérique se construit un peu comme une expérience de physique. Dans ce cas, le dispositif expérimental est l'ensemble des programmes informatiques. Les logiciels (ou codes) de calcul sont la traduction des formules mathématiques des modèles physiques étudiés. Avant et après cette phase, des logiciels d'environnement préparent les calculs et analysent les résultats.

Les simulations traitent et engendrent de grands volumes de données, pré-existantes ou calculées (par exemple, la météo qui mixe données mesurées en temps réel et prédictions), de natures très variées. Les logiciels doivent les intégrer, les traiter et condenser les résultats pour en extraire ce qui résume et explique le phénomène étudié. Lorsque les échelles de problèmes et de moyens sont extrêmes, la simulation numérique s'appuie sur ce qu'on appelle le calcul haute performance.

Qu'est-ce qu'un centre de calcul ?

Il s'articule autour de supercalculateurs (physiquement, des dizaines d'armoires reliées entre elles). Comme ceux-ci sont de plus en plus puissants, les consommations électriques deviennent très importantes. Un centre de calcul comprend aussi de gigantesques capacités de stockage de données auxquelles les utilisateurs doivent pouvoir accéder rapidement. En fonctionnement, tout cela dégage énormément de chaleur ; il faut donc mettre en place un système de refroidissement, par exemple par circulation d'eau dans les portes des armoires ou dans les nœuds de calcul, ainsi qu'une climatisation dans la salle machine.

Pourquoi ?

La simulation numérique sert à :

- **Comprendre et faire progresser la science**, dans tous les domaines ;
- **Concevoir** : dans l'industrie, la simulation numérique permet de réduire le nombre de tests nécessaires au développement des produits, et donc le coût et la durée des étapes de **R&D** et de conception. Ainsi, elle améliore la productivité, la compétitivité et la capacité d'innovation des entreprises dans tous les secteurs : automobile, aéronautique, cosmétique, bâtiment...
- **Agir et décider** : dans le domaine de la sécurité, de la santé, de l'environnement..., la simulation numérique permet de répondre à des enjeux sociétaux.

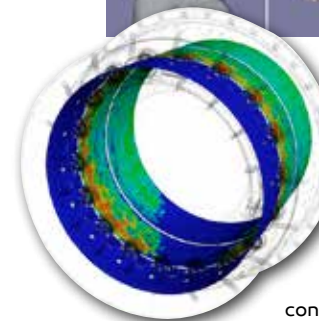
Chiffres-clés

- **5 MW** pour une machine de plusieurs petaflops avec son environnement, soit l'équivalent de la consommation d'une ville de 6 000 habitants environ !

- **Des dizaines de litres d'eau** par minute et par armoire de calcul doivent y circuler pour son refroidissement.

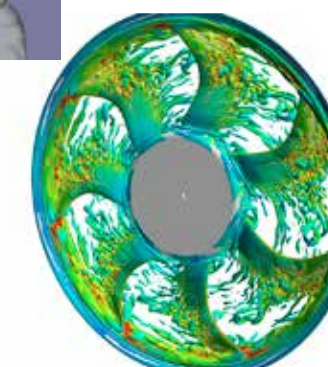


L'Oréal : stratégie d'évaluation prédictive de la performance des produits (action des produits de soin et de coiffage sur le mouvement et la fluidité d'une chevelure, aide à la conception de colorants capillaires).

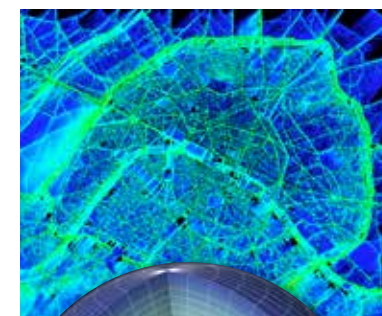


Industrie

Snecma : optimisation de la conception de turboréacteurs d'avion, prenant en compte les comportements aérodynamiques, mécaniques et thermiques, en vue de diminuer la consommation de carburant et les nuisances pour l'environnement (réduction de la consommation d'environ 15 % démontrée pour une nouvelle génération de moteurs).

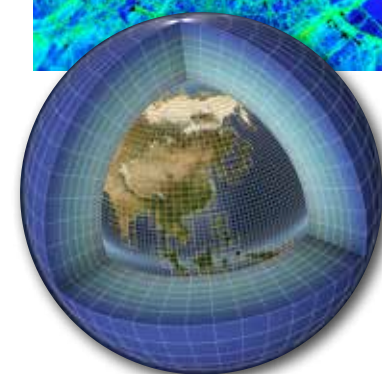


Valéo : optimisation de la conception des radiateurs, ventilateurs et systèmes de climatisation des véhicules, en vue de réduire la consommation de carburant et de préserver l'environnement.



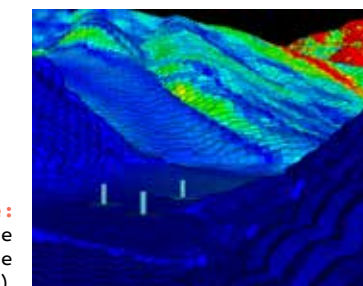
Environnement : simulation 3D de la dispersion de rejets toxiques dans l'atmosphère de la banlieue parisienne 3 fois plus rapidement qu'en temps réel.

Recherche



Climat : élaboration de modèles complets prenant en compte les archives naturelles (glaces, pollens, sédiments...) récoltées dans les océans, l'atmosphère et sur les continents.

Sciences de la Terre : propagation d'une onde sismique, depuis la faille jusqu'aux bâtiments (sismologie).



Santé : reproduction de la distribution de traceurs lors d'examen de tomographie par émission de positon en cancérologie.



YHLEXIQUE TGHKKGHKGBSVSCS

Nœud de calcul : ensemble de processeurs partageant une mémoire commune. C'est l'élément de base du supercalculateur, comparable à un « super PC » domestique.

R&D : Recherche et Développement, activité associant successivement ou conjointement études et recherches et leur mise en œuvre finalisée dans des objets et des logiciels par exemple.

En savoir +

→ Clip métier

• <http://cea.fr/go/calcul-scientifique>

→ Visite virtuelle TGCC

• <http://cea.fr/go/visite-tgcc>

→ Le programme Simulation

• <http://cea.fr/go/programme-simulation>

→ Simuler en 3D l'évolution de l'Univers

• <http://cea.fr/go/evolution-univers>

“
La simulation
ouvre une
nouvelle ère de
l’astrophysique
de laboratoire.



Emeric Falize
Astrophysicien

Quel sujet d’astrophysique étudiez-vous ?

J’étudie, grâce à l’« astrophysique de laboratoire », les phénomènes extrêmes qui interviennent lors de la formation et de la mort des étoiles*. Cette discipline est née il y a une vingtaine d’années, avec le développement des lasers de puissance. Nous cherchons à reproduire ces phénomènes en laboratoire et à toute petite échelle grâce à des simulations numériques. C’est vraiment passionnant !

Comment procédez-vous ?

Nous analysons les observations astronomiques venant de télescopes. Pour comprendre ce qui se passe dans les étoiles observées, nous construisons des modèles théoriques qui décrivent l’évolution de ces systèmes. Les équations sont tellement complexes qu’elles ne peuvent être résolues qu’avec des ordinateurs ultra-puissants. La première étape de mon travail consiste à construire ces équations. Celles-ci sont alors traduites en langage informatique dans un code de calcul. Je lance ensuite les simulations (la résolution des équations grâce au code) sur les supercalculateurs. Deuxième étape : construire des lois d’échelle pour savoir si nous pouvons réaliser une maquette en laboratoire du phénomène astrophysique observé.

Dites-nous en plus sur ces lois d’échelle...

Les lois d’échelle, ce sont les relations mathématiques qui permettent de passer de l’échelle astrophysique à l’échelle du laboratoire. Je dois passer par cette étape pour connaître les conditions physiques (vitesse, densité, température) à reproduire en laboratoire. Ces conditions assurent qu’il y a un lien réel entre

la matière placée au centre des lasers de puissance et l’astre que l’on cherche à reproduire. A partir des lois d’échelle, on fabrique alors la maquette : c’est la cible laser, pas plus grande que quelques millimètres, sur laquelle convergeront l’ensemble des faisceaux du laser Megajoule. Tout se passe ensuite très vite : l’expérience elle-même dure quelques milliardièmes de seconde !

Que vous apportent les supercalculateurs ?

De la précision... et la promesse de grandes découvertes ! Les télescopes sont de plus en plus puissants et les diagnostics de mesure des expériences de plus en plus précis. Ils nous fournissent des images de plus en plus fines et détaillées. Dans ces détails, se cache une physique très complexe. Les calculateurs, capables de réaliser plusieurs millions de milliards d’opérations par seconde, permettent de modéliser ces détails. Avec les supercalculateurs de demain, nous inclurons encore plus de physique dans nos codes. Nous arriverons même à de meilleurs résultats que ceux issus de l’observation et des mesures expérimentales. C’est la promesse d’une physique nouvelle !

* Découvrez l’animation sur les étoiles cataclysmiques sur le site des Savanturiers.

Formation :

- > Fac de physique, Master en Physique théorique
- > Master 2 de recherche à l’Observatoire de Paris
- > Thèse au CEA sur les lois d’échelle, la modélisation des phénomènes de hautes densités d’énergies en astrophysique et en laboratoire

Avec qui travaillez-vous ?

Nous sommes une équipe de 17 personnes et développons des codes de simulation numérique. Je travaille avec des physiciens qui ont besoin d’un outil de calcul pour faire des prévisions d’expériences, et avec des physiciens théoriciens qui créent des modèles physiques écrits sous forme d’équations. En tant que mathématiciens, nous étudions ces modèles pour proposer des solutions approchées. L’objectif est ensuite de traduire notre démarche mathématique en algorithme. Cet algorithme sera écrit dans un langage informatique qui constitue ce que l’on appelle un code de calcul. C’est l’exécution de ce code de calcul que nous appelons simulation numérique.

Comment créez-vous les codes ?

Pour chaque équation, nous étudions avec les physiciens les divers termes qui la composent. Certains peuvent être négligés. Pour les autres, nous découpons l’espace et le temps en tous petits morceaux. Plus ces morceaux (qu’on appelle mailles) sont petits, plus la solution sera bonne, mais plus il y a de morceaux et plus il faut de puissance de calcul pour pouvoir résoudre les équations. Le nombre d’opérations à réaliser est donc très élevé. Nous traitons des phénomènes hydrodynamique, radiatif, laser... ensemble, dans un même code de calcul. Un code de simulation s’articule autour de résultats que l’on peut visualiser, le chiffre seul ne suffit pas forcément. A l’écran, les paramètres physiques (densité, pression, vitesse...) et leur évolution sont visibles et colorisés. On peut directement regarder si cela ressemble à « la vraie vie ».

Racontez-nous l’une de vos expériences...

Une des études menées dans le laboratoire est le projet d’un « tube à choc ». Il s’agit d’un cylindre dans lequel une membrane sépare deux fluides à des conditions particulières et différentes. Le cylindre est traversé par une onde de choc. Il a fallu prédire à quelle vitesse l’onde partant d’un fluide se propage dans l’autre, une fois la membrane retirée. Nous avons travaillé sur les équations d’hydrodynamique d’Euler pour proposer un schéma numérique. Nous avons introduit dans le calculateur les conditions initiales de l’expérience et avons confronté les résultats numériques et expérimentaux... et l’accord était positif.

Pourquoi avez-vous choisi la voie des mathématiques ?

Si je me replonge dans mes études, les mathématiques étaient parfois ingrates et compliquées, mais toujours un jeu pour moi. Petit à petit, j’ai vu leurs applications : les mathématiques, c’est la brique élémentaire de tout. En assemblant des nombres et en leur faisant subir des opérations, on arrive à reproduire le monde physique en donnant toujours plus de précisions, c’est assez excitant !

Formation :

- > Bac S
- > DEUG (Licence)
- > Magistère Mathématiques et mécanique des fluides (Master 2)
- > Thèse en Mathématiques appliquées (Paris VI et Onera)

“
Les mathématiques, c’est la
brique élémentaire
de tout.



Lydie Gropellier
Chef de laboratoire

En quoi consiste votre travail ?

Je coordonne l’ensemble des équipes qui travaillent dans le centre de calcul et assurent son fonctionnement quotidien. Elles sont responsables du stockage des données, des supercalculateurs, des réseaux. Je suis aussi en lien avec les utilisateurs qui réalisent des simulations numériques et avec les maîtres d’ouvrage qui financent le centre. La seconde partie de mon travail est liée au développement système. Les supercalculateurs parallèles sont des « formule 1 ». Ils repoussent nos limites en termes de puissance de calcul, de gestion des ressources, de logiciel, de communication entre chaque opération. L’informatique de ces supercalculateurs est très spécifique. C’est une thématique qui se découvre et s’apprend sur le terrain. Je travaille particulièrement sur des systèmes de fichiers et de gestion des flux de données.

Comment allouez-vous les temps de calcul ?

Au CEA DAM Île-de-France, nous hébergeons deux centres de calcul : l’un dédié aux applications classifiées et l’autre ouvert à la communauté, au Très grand centre de calcul (TGCC). Dans ce dernier, nous avons plusieurs systèmes d’allocations d’heures de calcul. Nous hébergeons une machine pour la recherche académique, sur laquelle les chercheurs obtiennent les calculs sur critères scientifiques. Nous hébergeons également le Centre de calcul recherche et technologie (CCRT) ouvert à plus d’une dizaine de partenaires industriels. Ceux-ci obtiennent des heures de calcul au prorata de leur financement.

Comment préparez-vous les futures générations de supercalculateurs ?

Les machines actuelles du CCRT sont petaflopiques : elles effectuent un million de milliards d’opérations par seconde, soit l’équivalent de plusieurs dizaines

de milliers d’ordinateurs de bureau en parallèle. Elles génèrent plusieurs dizaines de téraoctets par jour, soit des pétaoctets de données qu’il faut stocker. Tandis que nous exploitons un supercalculateur, nous concevons en même temps la génération suivante. Elle sera exaflopique, c’est-à-dire 1 000 fois plus puissante. C’est un travail de R&D que le CEA mène en commun avec les équipes d’intégrateurs (Bull-Atos). Les cycles de vie des supercalculateurs sont rapides : en 3 à 5 ans, on gagne un facteur 10 à 100 sur la puissance de calcul.

Cela a-t-il une incidence pour les utilisateurs ?

Ecrire un code de calcul demande beaucoup de temps et d’investissement. En général, il est exploité pendant une dizaine d’années au minimum. Nous devons éviter que les changements de matériel (tous les 3 à 5 ans) impactent le fonctionnement des codes. Il faut donc trouver un compromis entre puissance de calcul supplémentaire et programmation. Néanmoins, il y a eu des ruptures technologiques très importantes, qui ont impacté les applications et ont obligé les chercheurs à réécrire une partie de leurs codes.

Formation :

- > Bac S
- > Classe prépa
- > Ecole d’ingénieur, spécialité Systèmes informatiques
- > DEA Informatique parallèle
- > Enseignant à l’UEVE : Université Evry Val d’Essonne (composante de l’UPS : Université Paris Saclay) :
 - master CILS : Conception et Intelligence des Logiciels et Systèmes
 - master ASR : Architecture des Systèmes et Réseaux

“
Je coordonne
l’ensemble des
équipes qui tra-
vaillent dans le
centre de calcul.



Patrice Lucas
Responsable opérationnel
TGCC



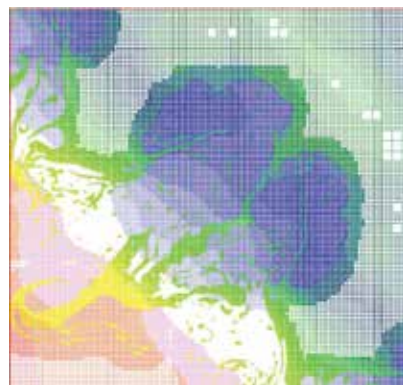
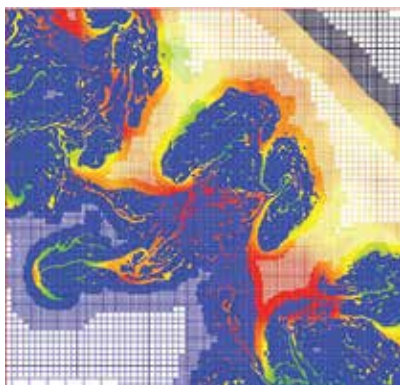
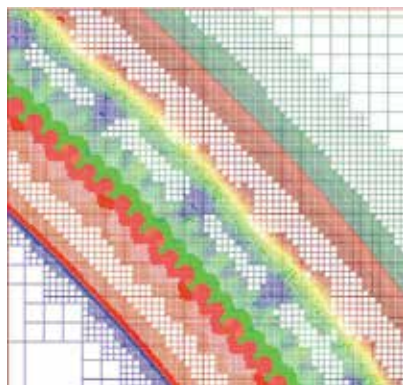
Les supercalculateurs du TGCC (Très grand centre de calcul du CEA)

- **Curie** : Mis à disposition pour Genci, Curie est dédié à la recherche académique française et européenne.
Sa puissance : 2 millions de milliards d’opérations par seconde (2 petaflops).
- **CCRT (Centre de calcul recherche et technologie)** : ouvert aux chercheurs du CEA et à plus d’une dizaine de partenaires industriels.
Sa puissance : 1,4 petaflops en 2016.
- Capacité de stockage au TGCC** : 20 pétaoctets, soit l’équivalent de plus de 25 milliards de livres.

Le supercalculateur Tera

Dédié au programme Simulation de la Direction des applications militaires du CEA, il permet de calculer le fonctionnement des armes nucléaires.
Puissance : 2,5 petaflops en 2016, environ 25 petaflops en 2017.
Stockage : plus de 20 pétaoctets.

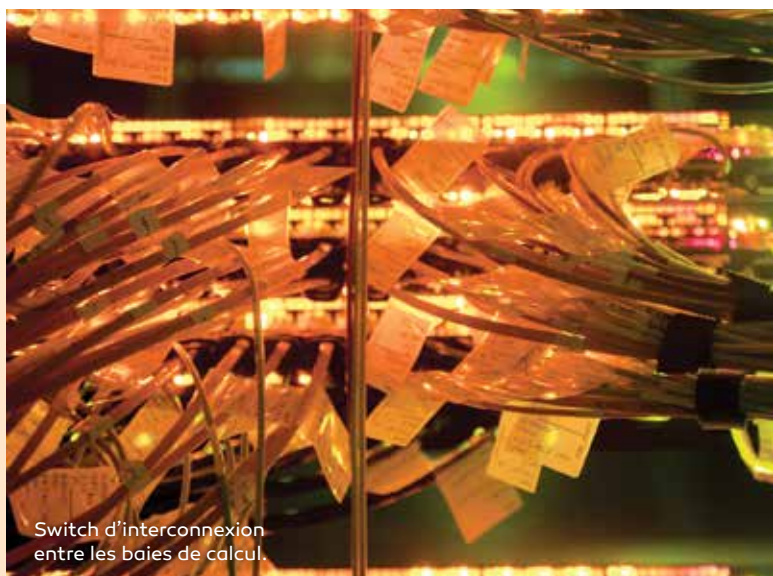
Un maillage adaptatif



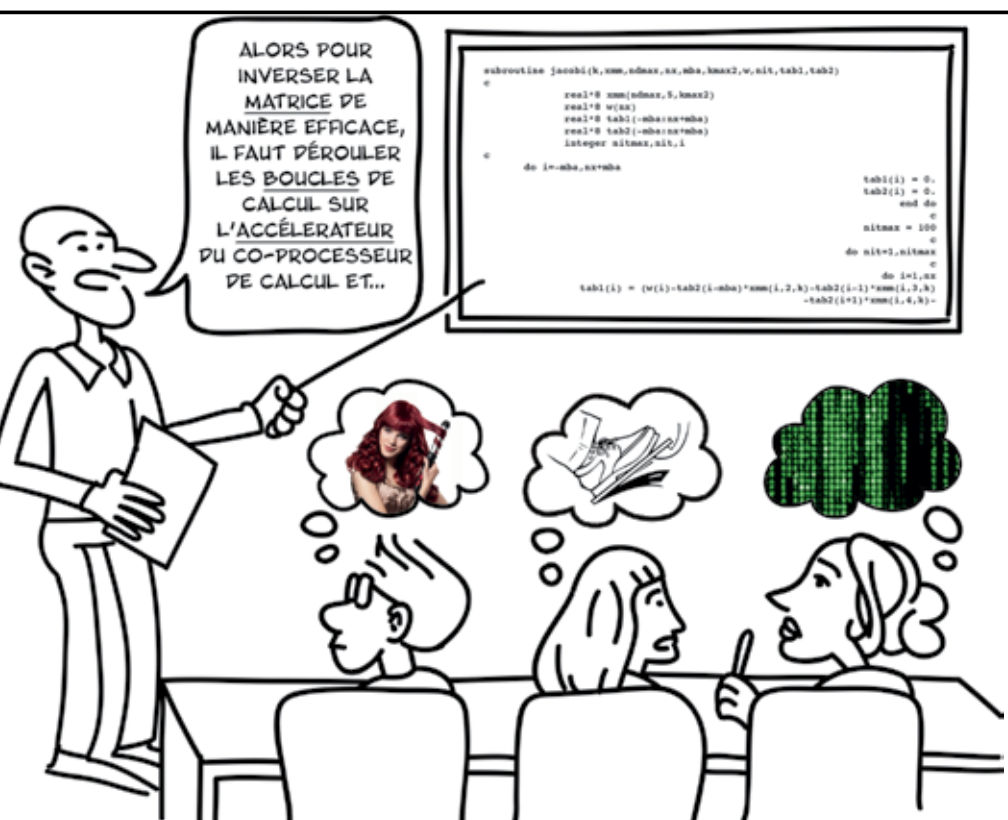
Exemple de simulations 2D dans lesquelles le maillage est adapté au plus près du phénomène physique, de manière à diminuer le nombre total de calculs (les plus petites mailles suivent les fronts des phénomènes physiques).

Toujours plus vite !

Le premier supercalculateur de classe exaflopique (1 exaflops = 1 milliard de milliards d'opérations par seconde), conçu par Bull/Atos pour la Direction des applications militaires du CEA, est attendu à l'horizon 2020. Des verrous technologiques restent à lever pour maîtriser sa consommation électrique et la gestion du volume considérable de données à traiter et à stocker. La première tranche de ce nouveau supercalculateur, Tera 1000, est déjà 10 fois plus efficace que son prédécesseur Tera 100 : une puissance doublée (2,5 petaflops) pour une consommation électrique 5 fois moins grande (1 MW). En 15 ans, la capacité de calcul a été multipliée par 5 000 !



Switch d'interconnexion entre les baies de calcul.



Sites

- CEA : www.cea.fr
- CEA jeunes : www.cea.fr/jeunes
- Retrouvez les Savanturiers en version web et les vidéos des interviews : <http://cea.fr/go/savanturiers>



Éditeur : Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives, RCS Paris B 775 685 019

Directeur de la publication : Xavier Clément
 Conseiller scientifique : Jean-Philippe Nominé
 Ont participé à ce numéro : Emeric Falize, Lydie Gropellier, Florence Klotz, Lucia Le Clech, Patrice Lucas, Françoise Poggi, Sylvie Rivière
 Crédits photos : CEA - p.5 - P.8 - H. Raguet / Science&Avenir/CEA - p.3 - P. Stroppa/CEA : couverture - p.2 - p.4 - p.5 - p.7 - p.8 - Valéo : p.5 - L'Oréal : p.5 - Snecma : p.5 - Cadam : p.7 - Portraits pages 6-7 : M. Klotz

Création, réalisation et impression : FILcom
www.filcom.fr - Avril 2016 - ISSN 2271-6262

Nous remercions Fabienne Chauvière d'avoir accepté que nous empruntions le titre de son émission.



Ne peut être vendu