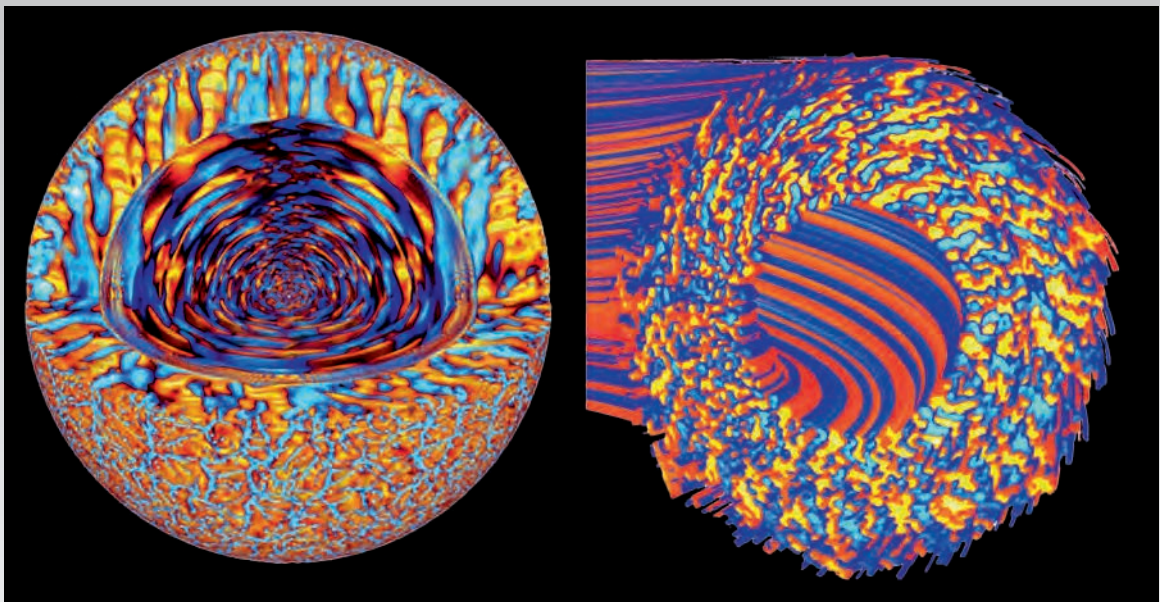


Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Une monographie du Commissariat
à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Les sciences du numérique et le calcul haute performance



Une monographie du Commissariat à l'énergie atomique
et aux énergies alternatives,
91191 Gif-sur-Yvette Cedex
Tél. : 01 64 50 10 00

Comité éditorial

Claude Lebris, Anne Nicolas, Bernard Bonin, Daniel Bouche,
Guillaume Colin de Verdière.

Ont participé à la rédaction de cette monographie :

sous la Présidence d'Yves Bréchet, Haut-Commissaire
à l'énergie atomique (2012-2018)

L'Éditeur tient à remercier M. Claude Lebris
pour sa relecture critique.

Bernard Amadon, Catherine Andrieux, Gilles Arnaud,
Monique Arnaud, François Artiguenave, Édouard Audit,
Jean-Marc Aury, Jean-Charles Barbe, Vincent Bergeaud,
Ulrich Bieder, Julien Bigot, Bernard Bonin, Daniel Bouche,
Frédéric Bournaud, Allan-Sacha Brun, Émeric Brun,
Fabien Bruneval, Anne Burbeau, Pierre Calmon,
Christophe Calvin, Patrick Carribault, Henri-Pierre Charles,
Guillaume Colin De Verdière, Laurent Colombet,
Frédéric Damian, Thierry Deutsch, Cheikh Diop, Ivan Duchemin,
Jean-François Dufreche, Marc Duranton, Denis Dutoit,
Vincent Faucher, Évelyne Foerster, Sébastien Fromang,
Frank Gabriel, Virginie Grandgirard, Pierre Guichon,
Frédéric Heitzmann, Patrick Hennebelle, Erell Jamelot,
François Jollet, Gérald Jomard, Pierre Kestener,
Jacques-Charles Lafoucrière, Pierre Le Ber, Claude Lebris,
Amandine Le Brun, Fausto Malvagi, Martial Mancip,
Christian Mariotti, Olivier Marti, Jean-Marc Martinez,
Michel Masella, Yann Meurdesoif, Jean-Pierre Meyer,
Igor Mijarevic, Anne Nicolas, Yann-Michel Niquet,
Nathalie Palanque-Delabrouille, Serge Pascal, Éric Pelletier,
Marc Perache, Gérald Samba, Claude Scarpelli, Laurent Soulard,
Antoine Strugarek, François Triozon, Daniel Verwaerde,
Nicolas Wiart, François Willaime.

Rédacteur en chef : Bernard Bonin.

Éditeur : Jean-François Parisot.

Maquette : Pierre Finot.

Correspondance : la correspondance peut être adressée
à l'Éditeur ou au Rédacteur en chef à l'adresse suivante :
bernard.bonin@cea.fr

© CEA Paris-Saclay et Groupe Moniteur (Éditions du Moniteur), Paris, 2020.

ISBN 978-2-281-14377-5
ISSN 1950-2672

La reproduction des informations contenues dans ce document
est libre de tous droits, sous réserve de l'accord de la rédaction
et de la mention d'origine.

En couverture : La carte des structures turbulentes dans l'inté-
rieur du soleil (code ASH à gauche) et des cellules de convection
du potentiel électrique dans un tokamak (code GYSELA à droite).



Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Une monographie du Commissariat
à l'énergie nucléaire et aux énergies alternatives

Les sciences du numérique et le calcul haute performance



L'énergie nucléaire du futur :
quelles recherches pour quels objectifs ?



Les réacteurs nucléaires
à caloporteur gaz



Les combustibles nucléaires



La corrosion et l'altération
des matériaux du nucléaire



La neutronique



Le conditionnement des déchets
nucléaires



Le traitement-recyclage
du combustible nucléaire usé



Les réacteurs nucléaires
à caloporteur sodium



L'instrumentation et la mesure
en milieu nucléaire



Les réacteurs nucléaires
expérimentaux



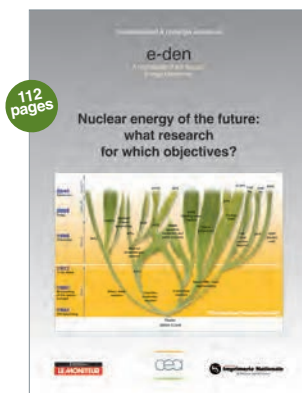
Les matériaux du nucléaire



L'assainissement-démantèlement
des installations nucléaires

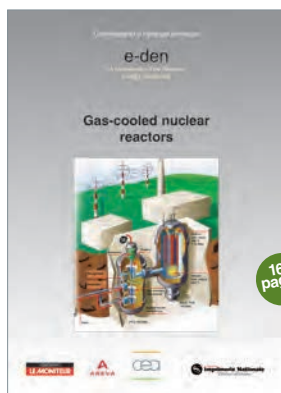
Les monographies du CEA présentent les résultats récents de la recherche dans leur contexte et avec leurs enjeux





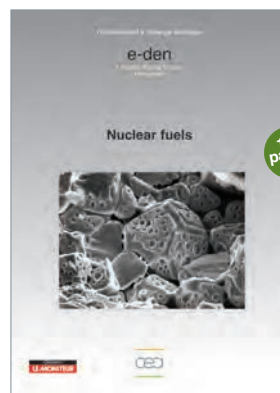
112 pages

Nuclear energy of the future: what research for which objectives?



168 pages

Gas-cooled nuclear reactors



152 pages

Nuclear fuels



162 pages

Corrosion and Alteration of Nuclear Materials



280 pages

Neutronics



152 pages

Nuclear Waste Conditioning



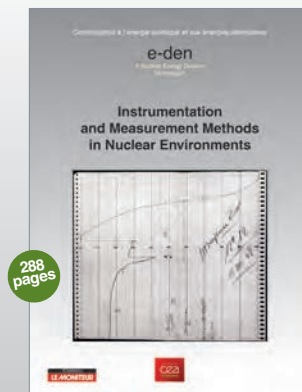
180 pages

Treatment and recycling of spent nuclear fuel



224 pages

Sodium-Cooled Nuclear Reactors



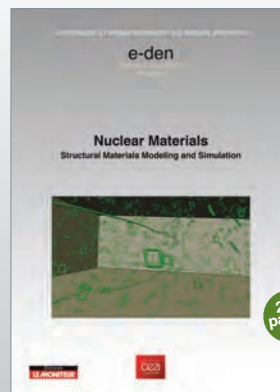
288 pages

Instrumentation and Measurement Methods in Nuclear Environments



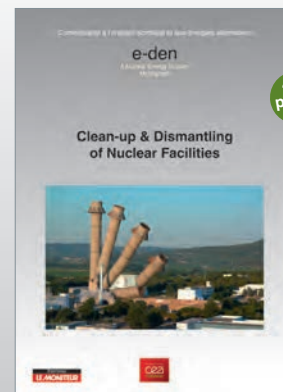
160 pages

Research Nuclear Reactors



224 pages

Nuclear Materials



208 pages

Clean-up & Dismantling of Nuclear Facilities

CEA monographs set out the recent findings from research, together with their context and the related challenges



Free download on www.editionsdumoniteur.com/CEA



Préface

La simulation numérique, outil essentiel en sciences fondamentales et appliquées, ambitionne de prédire le comportement d'objets complexes ou inaccessibles parce que trop petits, trop grands, ou trop lointains dans l'espace ou le temps. Comment appréhender le déploiement du prion, les instabilités de certaines supernovae, la formation de l'univers primordial, l'évolution du climat sans recours à la simulation ? La simulation numérique est ainsi devenue omniprésente dans la recherche en astrophysique, climatologie, biologie, pour ne citer que quelques exemples.

La simulation est également indispensable pour concevoir et optimiser des objets complexes, ou des produits interagissant avec des êtres vivants. Les expériences en vraie grandeur ou en conditions réelles sont bien souvent très coûteuses, voire impossibles. Nous pouvons penser, bien sûr, aux armes nucléaires, mais aussi aux cosmétiques dont l'absence de toxicité doit désormais être démontrée sans recours à l'expérimentation sur des animaux. La première phase de la démarche de simulation est de construire un modèle physique le plus complet possible. Il faut ensuite le traduire en équations mathématiques, souvent des équations aux dérivées partielles. Enfin, ces équations sont résolues numériquement sur ordinateur à l'aide d'algorithmes performants. La démarche de conception et d'analyse est ainsi menée en s'appuyant sur des simulations associées à des expériences élémentaires ou partielles. La simulation permet aussi de réaliser à peu de frais des études paramétriques et d'optimiser des plans d'expériences. Elle permet ainsi d'étudier l'influence de différents paramètres tant physiques que technologiques et d'en déterminer les valeurs optimales. Elle est ainsi devenue l'un des moteurs essentiels de la réactivité et de la compétitivité de notre industrie.

Le CEA est un acteur engagé à la fois dans la conception d'objets complexes, tels que les réacteurs et les armes nucléaires, et dans le développement des sciences de la matière, des sciences du vivant et de leurs applications. Depuis sa création, le CEA s'est donc naturellement appuyé sur la simulation numérique pour remplir ses missions. Comme dans d'autres organismes de recherche et dans l'industrie, la simulation a vu son rôle croître au cours du temps, notamment grâce aux progrès continus des moyens de calcul, des sciences du numérique, et de la modélisation physique.

La simulation numérique s'appuie comme évoqué plus haut sur le triptyque modélisation physique – sciences du numérique – calcul haute performance. Chacune de ces disciplines évolue et progresse selon sa propre échelle de temps. La plus récente, qui est la plus visible pour le grand public, est le calcul haute performance. L'accroissement spectaculaire de la puissance de calcul permise par la célèbre « loi de Moore » (doublement tous les dix-huit mois de la densité de transistors dans les processeurs...) a en effet radicalement modifié notre manière de vivre et de travailler. Cette avancée décisive des moyens de calcul a permis et permettra à la simulation d'aborder de nouveaux domaines de la physique et d'utiliser des modèles toujours plus fiables et plus prédictifs de la réalité. La modélisation physique, qui traduit en relations mathématiques les phénomènes physiques, est une discipline plus ancienne, dont certains des succès les plus spectaculaires, tels que les équations de Maxwell ou la théorie de la diffusion de la chaleur, remontent au XIX^e siècle. Mais elle continue sa progression en sciences des matériaux, sciences du vivant et physique des hautes énergies, pour ne citer que quelques

domaines particulièrement actifs. Enfin, les sciences du numérique, qui imaginent des algorithmes permettant de simuler de manière fiable et précise les relations mathématiques représentant des phénomènes physiques, sont la branche la moins médiatisée de notre triptyque. Elles n'en constituent pas moins le lien indispensable entre la modélisation physique et les moyens de calcul. Même si quelques travaux précurseurs ont précédé l'apparition des ordinateurs, les sciences du numérique se sont principalement développées depuis les années 40. Domaine multidisciplinaire par excellence, elles progressent grâce aux apports conjoints des mathématiciens, ingénieurs, physiciens et informaticiens.

La confiance dans la simulation repose donc sur la validité des modèles physiques, la qualité des schémas numériques, et leur résolution à un niveau de précision suffisant. Elle est formalisée par des procédures de quantification des incertitudes qui permettent d'apporter une garantie, par exemple sur le fonctionnement et les performances d'un objet. Un élément essentiel dans ce processus de garantie est de disposer d'un ensemble suffisamment large de données expérimentales contraignantes. La reproduction fidèle des résultats expérimentaux permet de valider globalement la chaîne de simulation. C'est un complément nécessaire au travail théorique de conception des modèles physiques et numériques.

Du fait de la diversité de ses missions, et du spectre très large des domaines scientifiques et techniques qu'il doit maîtriser, le CEA utilise intensivement la simulation numérique pour modéliser une large palette de phénomènes physiques, en s'appuyant sur les moyens de calcul les plus performants. Outre la modélisation physique, le CEA s'implique aussi dans le développement de méthodes numériques, dans leur adaptation à l'évolution des calculateurs, ainsi que dans l'exploitation efficace des machines de puissance, pour ses besoins propres et pour ceux de l'industrie. Ainsi, le Centre de Calcul Recherche et Technologie propose aux partenaires industriels expertise et compétences dans le domaine du calcul haute performance. Le CEA s'implique en outre dans la conception et la compréhension des dispositifs électroniques constitutifs des ordinateurs, ce qui l'a amené, notamment pour le programme Simulation des armes nucléaires, à soutenir la renaissance d'une industrie nationale capable de concevoir et de réaliser des calculateurs de puissance au meilleur niveau mondial.

Cette monographie intitulée « Les sciences du numérique et le calcul haute performance » présente un panorama des activités du CEA dans tous ces domaines. La première partie de l'ouvrage est une introduction didactique au calcul haute performance et aux sciences du numérique, avec une présentation du « hardware », des logiciels qui permettent de l'exploiter, et un survol des principales classes de méthodes numériques. Dans la seconde partie, le lecteur découvrira une vaste palette d'applications : physique des plasmas, physique des hautes énergies, astrophysique, géophysique, science des matériaux, biophysique, neutronique et dynamique des fluides, contrôle par ultrasons.

Même si cette monographie n'est que l'instantané partiel d'un domaine en rapide évolution, nous espérons qu'elle aidera le lecteur à en comprendre les enjeux et les perspectives.

Yves BRÉCHET

Haut-Commissaire à l'énergie atomique (2012-2018)

Introduction

Ce document a été rédigé essentiellement entre 2016 et 2018. Il s'agit d'un panorama de l'existant dans ce laps de temps, tant pour l'informatique que pour les méthodes numériques présentées. Or, le volet informatique est une science dont la dynamique d'évolution est extrêmement rapide. En particulier, l'informatique quantique, la prévalence des solutions accélérées pour les architectures telle qu'elle se profile, l'impact de l'intelligence artificielle ne sont pas détaillées. Le dernier paragraphe de la conclusion donne des pistes de réflexion sur ces sujets, qui sont en plein essor dans la communauté, y compris au CEA, tant sur le plan des matériels que des logiciels.

Les enjeux des sciences du numérique et du calcul haute performance

Depuis l'apparition des premiers ordinateurs à tubes, au milieu de la Seconde Guerre mondiale, les sciences du numérique et la simulation se sont développées de manière continue et extrêmement rapide. Cela à tel point que, depuis une quinzaine d'années, de nombreux scientifiques considèrent que la simulation numérique est devenue le troisième *pilier* de la science, aux côtés de l'expérimentation et de la théorie. Au-delà du domaine de la recherche scientifique, la simulation numérique est également devenue un outil indispensable pour l'industrie, l'innovation et la compétitivité des entreprises.

La simulation joue un rôle central dans de très nombreuses disciplines scientifiques. Elle permet d'étudier *in silico* des systèmes complexes hors de portée d'une approche purement analytique, parfois sans avoir recours à des expériences coûteuses et difficiles (voire impossibles) à mettre en place. La simulation permet ainsi d'examiner de très nombreux modèles, d'avoir accès aux paramètres les décrivant et, de ce fait, de prédire numériquement des comportements jamais observés. Un petit nombre d'expériences soigneusement choisies permettra de valider un ensemble de connaissances nouvelles. Cette démarche scientifique profondément renouvelée par la simulation est devenue usuelle dans de nombreux domaines scientifiques et techniques. Elle permet des gains de productivité importants dans l'industrie (conception des avions, *crash test* numériques pour les voitures, mise au point de produits cosmétiques...). Le lecteur

trouvera dans cet ouvrage des exemples dans de nombreux champs de la physique.

Un champ d'investigation bouleversé par la simulation est celui des systèmes pour lesquels une approche expérimentale globale est impossible. C'est par exemple le cas pour les sciences du climat, l'astrophysique ou même la simulation de certains accidents industriels. La simulation numérique est devenue un outil indispensable, voire constitutif de ces domaines. Par exemple, dès 1941, l'astronome Eric HOLMBERG construisit un calculateur analogique à base d'ampoules et de cellules photo-électriques pour simuler la force de gravité inversement proportionnelle au carré de la distance, et fut le premier à étudier théoriquement la collision de galaxies. Ces simulations pionnières ne comportaient que quelques dizaines d'objets mais poursuivaient le même dessein que les simulations les plus récentes qui en comptent plus de 500 milliards : modéliser des systèmes non accessibles par la seule observation. Les chapitres sur la dynamique des galaxies, le climat ou les séismes illustrent la place essentielle de la simulation numérique dans certains de ces domaines.

Un autre domaine où l'utilisation du calcul est un outil incontournable est celui du traitement des données. Qu'elle soit recueillie sur l'internet, issue des capteurs maintenant installés dans de nombreux objets dit « connectés » ou produite par de grands projets scientifiques comme le CERN¹ ou le GENOSCOPE², la masse de données est en perpétuelle augmentation. Le CERN produit aujourd'hui environ 30 pétaoctets³ de données par an ; lorsqu'il sera mis en service dans quelques années le télescope SKA⁴ en Australie occidentale produira 160 téraoctets de données par seconde ; elles devront être analysées par un supercalculateur dédié. La valorisation scientifique (ou commerciale) de ces masses de données est un enjeu majeur des années à venir. L'acquisition par Total d'un super calculateur, PANGÉA⁵, parmi les plus puissants au monde en est un des exemples récents. Cette complémentarité indispensable entre données issues des capteurs et calcul est illustrée dans cet ouvrage dans le domaine du contrôle non destructif.

1. Organisation européenne pour la recherche nucléaire, <http://home.cern.fr/about>

2. Centre national de séquençage, <http://www.genoscope.cns.fr/>

3. 1 pétaoctet = 1000 téraoctet = 10^{15} octet, 1 téraoctet ~ 200 DVDs et 1 pétaoctet ~ 200 000 DVD

4. <https://www.skatelescope.org>

5. <http://www.top500.org/system/17807> ; l'objectif de Pangéa est de gagner en temps et en précision dans la modélisation des sous-sols.

Si, comme nous venons de le voir, la simulation s'applique à des domaines extrêmement variés, il existe néanmoins une sorte de trame commune à toutes les activités de simulation. Il faut tout d'abord une étape de modélisation qui vise à construire une représentation, nécessairement approchée, du système ou du phénomène physique à étudier. Ensuite, cette représentation doit être transcrite en équations par un modèle mathématique. Il faut ensuite traduire ce dernier en un **algorithme*** interprétable par un ordinateur. Cela consiste souvent à passer d'une description continue de l'espace et du temps à une représentation discrète de l'espace et du temps. Il existe de grandes classes de méthodes numériques pour effectuer cette discrétisation et le développement de nouvelles méthodes constitue un domaine de recherche très actif en mathématiques appliquées. Le chapitre « Les méthodes numériques et algorithmiques » p. 61, donne un aperçu de ces méthodes et de leur développement. Ces méthodes numériques sont ensuite mises en œuvre dans des codes de calcul qui sont ainsi capables de « résoudre » le modèle mathématique initial. Certains aspects du développement de ces codes numériques (**software***, en anglais) sont présentés dans le chapitre sur « Le logiciel » : les entrées/sorties, le génie logiciel. Une fois le code de calcul opérationnel, il convient de passer à une étape de **vérification*** qui consiste à s'assurer que le code résout effectivement les équations initiales puis à une étape de **validation*** des résultats, au sens de la physique. Ces deux étapes sont essentielles afin de s'assurer que malgré les approximations inévitables faites dans les phases de modélisation et de discrétisation, le code permet de reproduire fidèlement le comportement du système physique étudié. Enfin, il est appliqué un processus de **qualification*** visant à maîtriser les incertitudes et à déterminer le domaine de validité du code. Les méthodes mises en œuvre pour la validation et la qualification des codes de calcul sont exposées page 48.

Les profonds bouleversements apportés par les sciences du numérique reposent en grande partie sur les progrès du **hardware*** et l'accroissement continu et exponentiel de la puissance de calcul des ordinateurs depuis plusieurs décennies. La figure 1 issue du classement des 500 ordinateurs les plus puissants au monde⁶ montre l'évolution de la puissance de calcul⁷ au cours des vingt-cinq dernières années. La puissance, mesurée en nombre d'opérations flottantes par seconde (Flop/s) est représentée en échelle logarithmique sur l'axe vertical : elle augmente de manière exponentielle et double environ tous les treize mois ! Comme illustré par la courbe rouge représentant la puissance de calcul des ordinateurs personnels, il faut seulement une quinzaine d'années pour que la puissance des supercalculateurs soit offerte au plus grand nombre par le biais des objets du quotidien, y compris les téléphones et les tablettes.

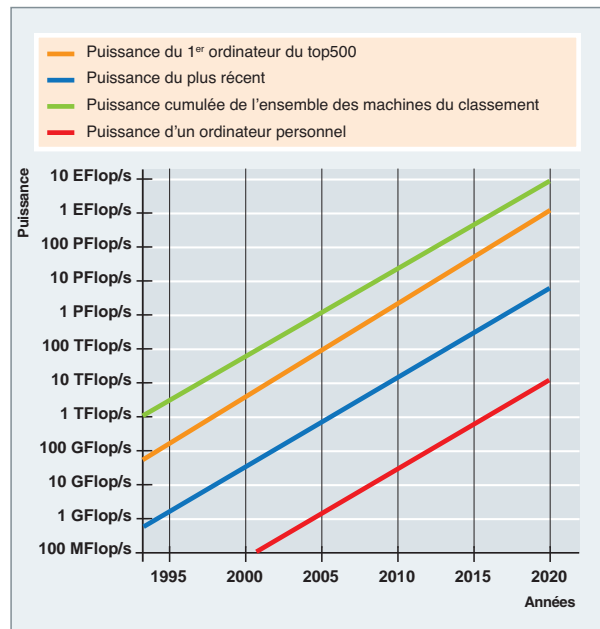


Fig. 1. Évolution de la puissance de calcul au cours de ces vingt dernières années. (source www.top500.org, voir texte pour plus de précision).

Derrière cette progression régulière se cachent plusieurs révolutions technologiques. La première a eu lieu dans les années 70 avec l'apparition des processeurs **vectoriels*** capables d'effectuer une même opération sur un grand nombre de variables en même temps. Les ordinateurs comportaient alors un seul **processeur*** ayant un seul **cœur*** de calcul. C'est l'augmentation de la puissance de calcul de ce processeur unique qui était responsable de l'augmentation des performances. Au début des années 90, la performance des processeurs a commencé à saturer, notamment en raison de la difficulté technologique à augmenter leur fréquence. Pour maintenir la croissance de la puissance de calcul des ordinateurs, ils ont donc été équipés de plusieurs processeurs. En 1993, 20 % des ordinateurs du top500 dont 10 des 50 premiers n'avaient qu'un seul processeur. Une vingtaine d'années plus tard, les ordinateurs les plus puissants ont des millions de cœurs de calcul et même les derniers ordinateurs du top 500 en ont près de dix mille. L'avènement de ce qui est appelé désormais le « **parallélisme*** » a profondément bouleversé l'architecture des codes de calcul. Aujourd'hui, l'agrégation d'un très grand nombre de processeurs « standards » pour construire un supercalculateur est en train d'atteindre ses limites, notamment en raison de la très forte consommation électrique nécessaire (une dizaine de mégawatts pour les machines les plus puissantes). Pour atteindre l'exaflop (10^{18} opérations par seconde) avec les technologies actuelles, il faudrait plu-

6. Voir www.top500.org

7. Cette puissance de calcul est estimée sur la base d'un calcul d'algèbre linéaire (test Linpack, voir <http://www.netlib.org/benchmark/hpl/index.html> pour plus de détails).

sieurs centaines de mégawatts pour assurer l'alimentation de la machine, ce qui n'est économiquement pas viable⁸. De nouvelles architectures de calcul (technologie *many-core* ou accélérateurs, par exemple) sont en cours de développement afin de surmonter cette barrière énergétique. Ces architectures très novatrices équipent d'ores et déjà de nombreuses machines, dont les deux premières du top 500. Au vu des évolutions actuelles et celles que soient les voies technologiques qui se révéleront les plus pertinentes, il est très probable que les ordinateurs à venir auront plusieurs milliers de nœuds interconnectés comportant chacun plusieurs dizaines de milliers d'unités de calcul. Faire travailler ensemble ces dizaines de millions d'éléments représente un des grands défis des années à venir.

Au-delà des unités de calcul, les ordinateurs ont besoin de nombreux autres composants : mémoires, stockage, réseaux de communication... Les performances de ces composants ont également progressé de manière spectaculaire, toutefois à un rythme un peu inférieur à celui de celles des processeurs. Cela constitue donc aujourd'hui parfois un véritable goulot d'étranglement. À titre d'exemple, accéder à un nombre stocké dans la mémoire centrale peut prendre entre 10 et 100 fois plus de temps que de réaliser une multiplication ou une addition : il peut être bien plus efficace de refaire les calculs de ce nombre plutôt que de le stocker puis d'aller le lire. Pour surmonter ce *mur de la mémoire* (*memory wall*) et alimenter de manière efficace les unités de calcul en données, une gestion complexe de la mémoire a été mise en place au prix d'une complexité d'utilisation encore accrue.

La première partie de cet ouvrage présente les différents aspects techniques et les enjeux de cette révolution technologique en cours, qui concerne l'ensemble de la conception des supercalculateurs de demain.

Ces défis technologiques et les perspectives scientifiques ouvertes par l'accroissement des moyens de calcul ne concernent pas seulement la communauté du calcul haute performance. L'économie en énergie, au cœur de la conception des ordinateurs, est également une nécessité pour tous les systèmes embarqués, entre autres les téléphones et tablettes.

Les évolutions technologiques profondes des calculateurs ont des conséquences importantes sur la programmation, l'architecture des codes de calcul et les méthodes mathématiques qui sont utilisées. La programmation sert deux objectifs : la spécification des calculs à faire et l'affectation efficace des ressources matérielles. Avec la complexité des nouvelles architectures qui auront de nombreux nœuds de calcul avec un très fort degré de parallélisme interne (plu-

sieurs dizaines milliers de cœurs) et une très forte hiérarchie mémoire, l'utilisation optimale des ressources de calcul devient un métier de spécialistes. Afin de rendre ces architectures plus accessibles et de permettre la portabilité d'un logiciel entre des machines ayant des technologies différentes, de nombreux logiciels médiateurs, ou **middleware*** et bibliothèques sont développés, conçus pour permettre une programmation des calculs faisant autant que faire se peut abstraction de l'architecture sous-jacente. Ils reposent sur un compromis entre portabilité et facilité d'utilisation d'un côté et performances de l'autre. Le Graal de la parallélisation automatique ou d'une abstraction complète de l'architecture reste un horizon difficile à atteindre.

Au-delà de la répartition optimale des ressources matérielles et de la parallélisation, une utilisation efficace des nouvelles architectures nécessite d'utiliser des algorithmes adaptés. Pour minimiser les communications entre processeurs, il faut, par exemple, développer des algorithmes d'algèbre linéaire ou des schémas numériques visant à maîtriser la localisation des données en mémoire. Nous touchons là aux méthodes numériques, qui sont donc à revisiter de manière très dépendante de l'architecture des calculateurs.

Le développement de grands codes de calcul nécessite donc des compétences multiples et un travail de longue haleine. Les bouleversements technologiques actuels rendent ce travail encore plus délicat. Le développement et l'utilisation des codes est une démarche qui s'inscrit dans le long terme, avec des outils numériques ayant des durées de vie de plusieurs dizaines d'années, alors que les évolutions de la technologie se font sur des temps bien plus courts. Cela impose des contraintes fortes sur la conception des codes qui devront s'adapter à des architectures encore inconnues tout en étant performants sur les architectures actuelles. Pour cela, les codes sont souvent organisés en plates-formes regroupant des modules de calcul communiquant entre eux, pouvant être utilisés de manière autonome.

Nous voyons donc qu'une utilisation efficace du calcul haute performance implique des équipes pluridisciplinaires réunissant des informaticiens, des mathématiciens appliqués et des spécialistes des domaines applicatifs concernés. Un dialogue approfondi et une compréhension mutuelle entre ces disciplines sont indispensables pour que les avancées majeures attendues se réalisent.

Cet élan très important des sciences du numérique et du calcul haute performance est mondial et concerne aussi bien la recherche académique que l'industrie. En France, le Grand Équipement National de Calcul Intensif (GENCI⁹) a été créé en 2007 afin de porter la stratégie nationale d'équi-

8. Alimenter une machine d'un mégawatt coûte environ un million d'euros par an.

9. Société civile détenue par le MESR, le CEA, le CNRS, la CPU et l'INRIA. <http://www.genci.fr/>

pement en moyens de calcul intensif au bénéfice de la recherche scientifique française. Il a permis d'équiper au meilleur niveau les trois centres de calcul nationaux dédiés à la recherche académique. Des initiatives, comme la Maison de la simulation dans le cadre de l'université Paris-Saclay, ont vu le jour afin d'aider les communautés scientifiques à développer les applications permettant d'exploiter efficacement ces infrastructures. De grands industriels ont également investi dans des moyens de calcul importants (Total, EDF, Airbus...) et plus d'une soixantaine d'entre eux se sont regroupés au sein de l'association TeraTec pour développer et promouvoir la simulation.

L'Europe a mis en place une politique très volontariste dans le domaine du calcul haute performance avec trois initiatives : la création de PRACE¹⁰ qui fournit aux chercheurs européens une infrastructure de calcul partagée au meilleur niveau mondial, la création de l'ETP4HPC¹¹ qui vise à développer les technologies européennes dans le domaine du calcul et enfin la mise en place de plusieurs *Centres of Excellence in computing applications* dans les domaines du climat, de l'énergie ou des matériaux... C'est dans ce cadre que la machine CURIE, installée au Très Grand Centre de calcul du CEA (TGCC), a fourni des centaines de millions d'heures de calcul à plusieurs dizaines d'équipes de recherche européennes.

Les États-Unis ont sans doute été le premier pays à s'investir très fortement dans le calcul haute performance et la simulation. Les initiatives y ont été très nombreuses et assurent au pays une prééminence depuis longtemps. Nous pouvons citer parmi d'autres le récent projet CORAL¹² qui mobilise plus de 400 millions de dollars pour développer la future génération de calculateurs exascale et le programme SciDAC, « *Scientific Discovery through Advanced Computing* », qui finance abondamment depuis plus de quinze ans des projets scientifiques dans le domaine de la simulation haute performance. Le Japon et, plus récemment (mais avec des moyens très importants), la Chine ont également des politiques très ambitieuses.

Le développement et la démocratisation du calcul haute performance et de la simulation ont permis une forte diversification des usages, aussi bien dans le monde académique qu'industriel. Citons les immenses perspectives dans le domaine des sciences de la vie (génomique, conception de médicaments, médecine personnalisée...), des sciences humaines (analyses de réseaux sociaux, étude du champ lexical de très grands corpus littéraires...) ou du traitement des images (reconnaissance digitale ou faciale, imagerie

médicale...). L'association d'une gigantesque puissance de traitement de données et de nouvelles méthodes d'analyse a contribué à un renouveau profond de l'intelligence artificielle, y compris dans sa définition. Les illustrations les plus médiatisées sont actuellement dans le domaine des jeux (jeu de Go), mais le potentiel d'applications dans le domaine de la santé, de l'aide à la décision ou même du sport (analyse du mouvement du sportif) est immense.

La spécificité des recherches du CEA dans le cadre de ses missions le conduit à développer une expertise sur les sciences du numérique et le calcul haute performance pour ses besoins propres, dans tous les cas où cette spécificité le rend nécessaire.

Cet ouvrage présente l'ensemble des facettes de la simulation et du calcul haute performance. Il se compose de deux grandes parties : dans la première, le lecteur trouvera un aperçu des outils et méthodes des sciences du numérique et du calcul haute performance, depuis l'infrastructure de calcul jusqu'au génie logiciel et aux méthodes numériques et algorithmiques. La seconde partie donne en quelques exemples un aperçu des applications au CEA dans des domaines aussi variés que la dynamique moléculaire, l'astrophysique, le contrôle non destructif ou la génomique. Sans prétendre à l'exhaustivité, nous proposons quelques points de vue remarquables sur ce paysage en évolution rapide, pour en montrer le dynamisme et la diversité des champs d'application.

Édouard AUDIT

*Direction de la recherche fondamentale
Maison de la simulation*

10. Partnership for Advanced Computing in Europe. www.prace-ri.eu

11. European Technology Platform for HPC.

12. CORAL : Collaboration Oak-Ridge, Argonne, Livermore : projet d'équipement de trois grands centres de calcul aux États-Unis, financés par le Department of Energy.

L'infrastructure et les méthodes de calcul

Pour que les ordinateurs puissent devenir ces outils si répandus et si puissants, de nombreux domaines ont dû faire des avancées significatives. L'analyse numérique s'est développée parallèlement au développement des possibilités des différentes générations d'ordinateurs, ouvrant la voie à la capacité prédictive des simulations. L'essor des langages de programmation, des systèmes d'exploitation et des outils associés a donné naissance à une nouvelle science, spécifique au monde des ordinateurs (« *Computer Science* » en anglais), qui a acquis ses lettres de noblesse depuis quelques décennies. De nombreux développements matériels ont vu le jour permettant de délivrer toujours plus de capacité de calcul avec des machines de taille raisonnable et consommant toujours moins (pour une performance donnée). Le monde de l'informatique haute performance est donc en perpétuelle évolution, associé à un recours grandissant à la simulation numérique.

Si nous regardons les acquis de pratiquement soixante-dix ans d'utilisation des ordinateurs les plus puissants (on parle dans ce cas de calcul intensif, ou HPC pour « *High Performance Computing* »), on se rend compte qu'il faut désormais parler d'infrastructure de calcul et non plus simplement d'ordinateur. Cette notion décrit mieux les capacités d'une organisation (industrielle ou de recherche) à conduire des simulations numériques avancées car elle englobe non seulement la machine (l'ordinateur) mais aussi tous les éléments indispensables pour mener à bien l'expérience numé-

rique. L'infrastructure de calcul repose sur un centre de calcul (bâtiments, servitudes diverses, etc.), des réseaux (internes et externes ouvrant l'accès au monde extérieur), des moyens de stockage des résultats produits, naturellement des ordinateurs de puissance mais aussi sur les équipes en charge d'assurer le bon fonctionnement de l'ensemble et de développer les composants logiciels indispensables tant à la machine qu'aux utilisateurs. Avec l'émergence du « big data », le point de vue se déplace d'une vision centrée sur l'ordinateur¹³ vers celle des flots de données et leurs traitements.

Ce chapitre vise à définir précisément cette infrastructure de calcul et donc les éléments mis en jeu dans les applications décrites au chapitre qui suit. Il s'agit de mettre l'accent sur sa complexité toujours croissante, inhérente au calcul haute performance et de montrer les défis à venir (limiter la consommation électrique, prendre en compte les limitations imposées par la physique, la manipulation des données...) et la nécessaire R&D pour apporter les meilleures solutions informatiques aux utilisateurs.

Ces éléments peuvent être vus comme trois niveaux de « poupées russes » (fig. 2), chacun ayant un impact direct sur le développement des applications.

13. Les ordinateurs sont les descendants des premiers calculateurs. Dans ce document, nous utiliserons donc indifféremment « calculateur » ou « ordinateur » pour désigner une machine électronique capable d'être programmée pour réaliser des algorithmes.

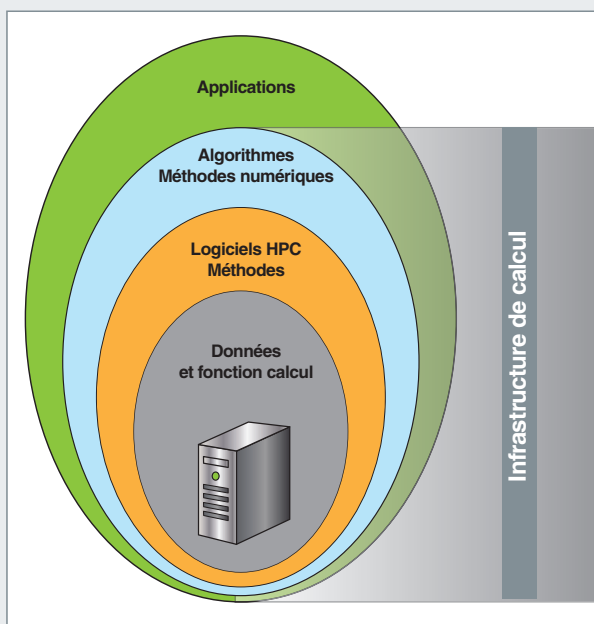


Fig. 2. Les applications s'appuient sur une hiérarchie de domaines imbriqués les uns dans les autres comme des poupées russes.

Au centre du schéma se placent les éléments matériels et logiciels indispensables pour assurer la fonction calcul et la prise en compte des flots de données. Nous y décrirons les éléments technologiques nécessaires à la constitution d'un centre de calcul en partant des composants les plus élémentaires. Seront abordés les aspects matériels présents et à venir (CPU, GPU, nœuds de calcul, clusters...), mais aussi logiciels de bas niveau (système d'exploitation, langages de programmation...).

Puis se trouve la couche représentant les logiciels indispensables aux simulations et les méthodes de développement mises en œuvre pour la réussite des grands projets logiciels. Il s'agit ici de mettre en perspective les divers outils utiles au monde du calcul haute performance. Cela couvrira la problématique du développement de codes, la gestion des flux de données et du stockage des résultats, ainsi que l'exploitation de ces derniers.

Enfin, dans la couche extérieure se trouvent les méthodes numériques et algorithmiques. Cette section expliquera les processus utilisés pour passer des équations de la physique au monde des programmes sur ordinateurs.

Nous allons donc maintenant explorer les éléments réalisant la fonction calcul.

L'infrastructure de calcul

Ce chapitre, à forte coloration technologique, détaille les éléments principaux nécessaires pour réaliser un superordinateur et son environnement. L'approche retenue ici est de passer en revue les composants les plus petits et de progressivement décrire leur juxtaposition pour en faire une machine opérationnelle capable de réaliser les simulations les plus ambitieuses. Nous allons donc suivre le chemin inverse des loupes successives de la figure 3 en partant de l'élément le plus petit, le transistor, qui servira à fabriquer un **processeur*** et sa mémoire. Nous verrons ensuite ce que sont les **nœuds*** de calcul, qui reliés ensemble, deviendront un **cluster*** qui sera installé dans un centre de calcul. Nous concluons cette section par les logiciels nécessaires pour assurer le bon fonctionnement et le bon usage des ordinateurs.

Nous donnons maintenant un éclairage sur les technologies nécessaires pour construire les divers composants présents au cœur des ordinateurs.

Les technologies des composants

La technologie et la course à la densité de calcul : améliorer la finesse de gravure ou empiler verticalement les motifs ?

Si les premiers ordinateurs fonctionnaient avec des lampes, aujourd'hui l'électronique (pour le grand public tout comme pour les ordinateurs de puissance) repose uniquement sur l'utilisation de **transistors***, dont l'industrialisation a débuté en 1950. La maîtrise de la technologie des transistors est

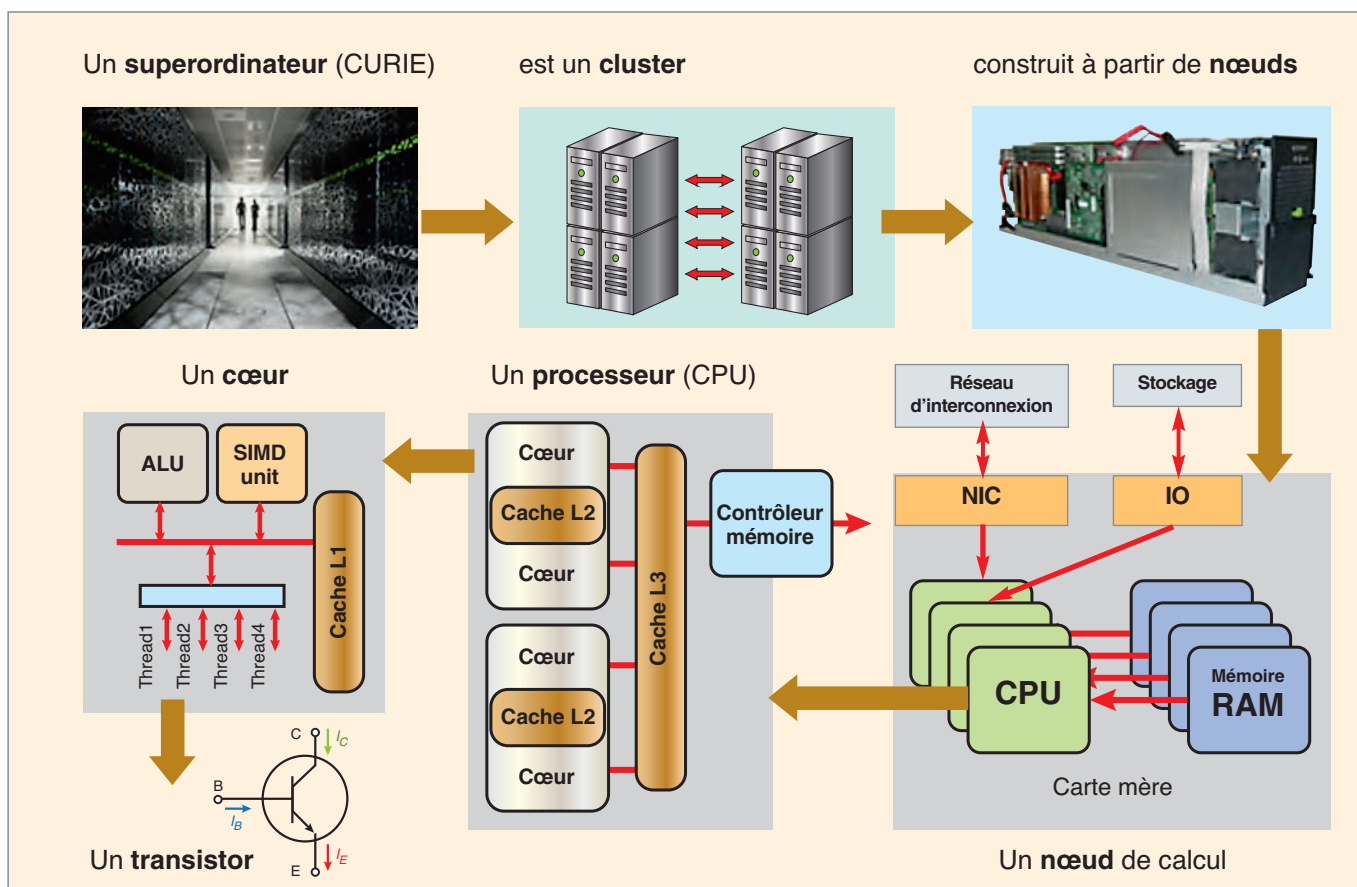


Fig. 3. Cette suite de loupes explique l'empilement des technologies constituant un superordinateur. Les échelles varient de quelques dizaines de nm pour un transistor (14nm en 2016) à plusieurs dizaines de mètres pour un superordinateur.

donc un enjeu majeur pour l'industrie de l'électronique comme pour le consommateur. Les fonctions de calcul, réalisées par un processeur, ou de mémorisation de l'information (dans un registre du processeur comme détaillé *infra*,

p. 23) sont toutes mises en œuvre par un assemblage astucieux de transistors. Une rapide explication du fonctionnement d'un transistor et de son utilisation pour réaliser des portes logiques est donnée dans l'encadré ci-dessous.

Le transistor MOS

La technologie **CMOS*** (pour « *Complementary Metal Oxide Semiconductor* ») est devenue la technologie dominante pour les circuits intégrés. Elle utilise le transistor MOS, un dispositif semi-conducteur à trois électrodes appelées source, drain et grille, qui permet de contrôler un courant entre la source et le drain en fonction de la tension appliquée sur sa grille.

Le transistor MOS de type N (nMOS représenté figure 4), se compose d'un barreau de semi-conducteur dopé P appelé corps (ou « *body* », « *well* », « *bulk* ») dans lequel sont incrustées des bandes de silicium dopées N constituant les électrodes source et drain. L'espace entre la source et le drain est surmonté d'une bande très fine d'oxyde de silicium qui sépare le corps à l'électrode appelée grille. Le dopage sous la source et le drain, effectué par l'introduction d'impuretés (dopants), va permettre de changer les propriétés électriques du semi-conducteur sous le contrôle de la grille. Un dopage de type N provoque un excès d'électrons alors qu'un dopage de type P provoque un déficit d'électrons. On introduit de cette façon des porteurs de type électrons et trous respectivement. Le dopage du corps permet d'isoler le transistor d'avec ses voisins.

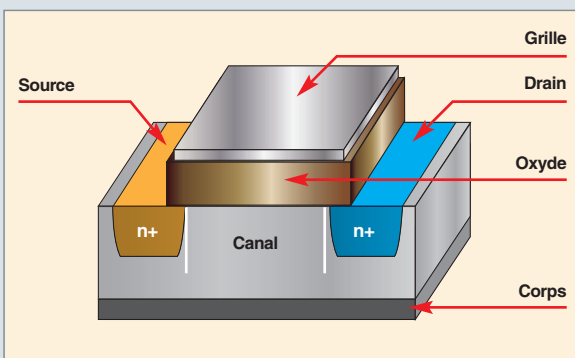


Fig. 4. Vue en coupe d'un transistor nMOS.

Ce transistor nMOS se comporte comme un interrupteur commandé. Sans aucune tension (ou différence de potentiel) entre la grille et la source, aucun courant ne circule entre source et drain, le transistor est bloqué et se comporte alors comme un interrupteur ouvert (fig. 5). Lorsqu'une tension est appliquée entre la grille et la source, les électrons en excès dans le sili-

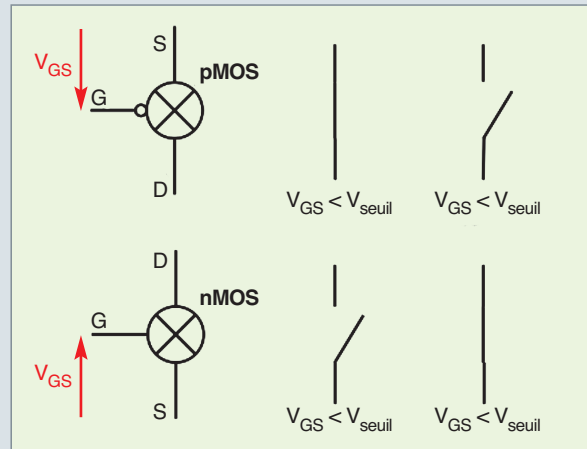


Fig. 5. Modèle interrupteur des transistors MOS.

cium dopé N se propagent puis s'accumulent sous la grille jusqu'à former un canal N. Lorsque la tension appliquée est supérieure à la tension dite de « seuil », le canal devient conducteur par déplacement d'électrons. Un courant électrique circule alors entre la source et le drain, le transistor est passant et se comporte comme un interrupteur fermé (fig. 5). La technologie CMOS (« *Complementary Metal Oxide Semiconductor* ») utilise une combinaison complémentaire de transistors de type N avec des transistors de type P dont la composition est duale de celle du nMOS (dopants de type N dans le corps et de type P sous la source et le drain), et qui se comporte d'une façon symétrique : quand la tension diminue entre la grille et la source, les porteurs en excès (trous) dans le silicium dopé P sous la source se propagent puis s'accumulent sous la grille jusqu'à former un canal P qui devient conducteur par déplacement de trous, lorsque la tension devient inférieure à la tension de seuil (fig. 5) ; le transistor pMOS est alors passant.

Les portes logiques CMOS

En disposant de manière symétrique des couples de transistor nMOS et pMOS qui ont un fonctionnement dual, un transistor est passant alors que l'autre est bloquant, on forme des portes logiques qui répondent à des fonctions combinatoires élémentaires (NON, ET, OU...).

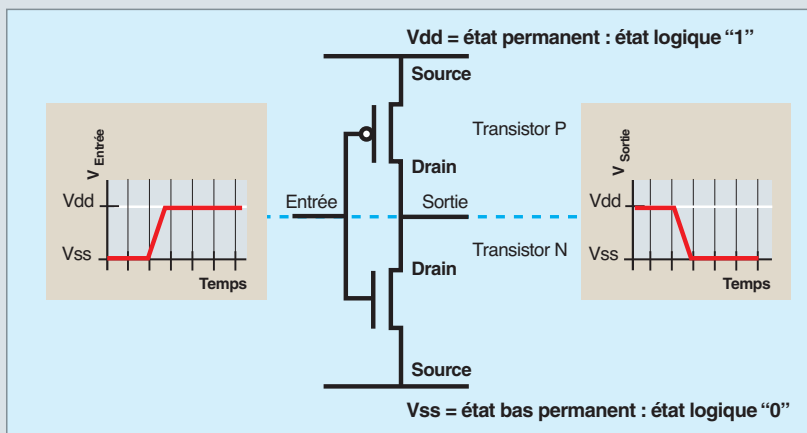


Fig. 6. Schéma électrique de l'inverseur CMOS.

L'assemblage le plus simple est celui de l'inverseur (fig. 6) composé de deux transistors, un nMOS et un pMOS disposés en série. Les deux états logiques correspondent respectivement à l'état haut (tension la plus élevée V_{dd}) et l'état bas (tension la plus basse, soit $V_{ss} = 0$).

Si on applique à l'entrée une tension V_{dd} , le transistor N est passant et le P est bloqué. On place ainsi la sortie à V_{ss} . Inversement, quand on met l'entrée à V_{ss} , le transistor P est passant et le N est bloqué. La sortie est donc à V_{dd} . On a donc bien réalisé une fonction inversion.

En régime dynamique, lors du passage de V_{ss} à V_{dd} et inversement, les deux transistors sont simultanément conducteurs pendant un court laps de temps, ce qui entraîne une consommation électrique. En régime statique, il n'y a théoriquement aucun chemin entre V_{dd} et V_{ss} , puisque l'un des deux transistors est ouvert. La consommation électrique est donc nulle. Dans la pratique, les transistors MOS présentent des capacités parasites entre les électrodes qui se

chargent et se déchargent provoquant ainsi des courants de fuite même en régime statique.

La mise en série ou en parallèle des transistors nMOS et pMOS permet la réalisation de portes logiques plus complexe (fig. 7) où l'état bas en sortie est obtenu par un réseau série ou parallèle de transistors nMOS passants et l'état haut obtenu par le réseau dual de transistors pMOS passants.

L'assemblage de ces portes logiques permet de construire des fonctions plus complexes comme un additionneur 1 bit et le chaînage de ces fonctions réalise les opérations de base du calcul : addition, multiplication, etc.

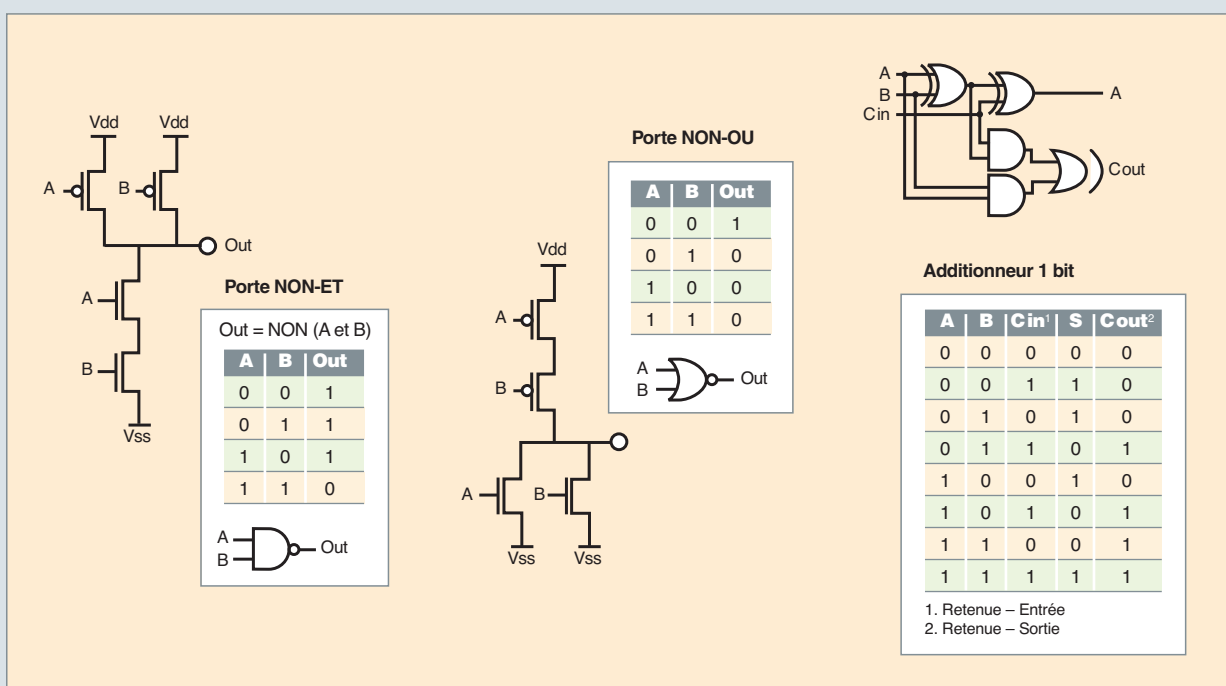


Fig. 7. Portes logiques élémentaires : NON-ET, NON-OU, additionneur 1 bit.

L'évolution très rapide des performances des calculateurs est décrite par ce que l'on appelle la « loi de Moore », en d'autres termes, le doublement tous les deux ans du nombre de transistors qui peuvent être intégrés dans une puce, et par voie de conséquence, la réduction de coût des composants électroniques semi-conducteurs. Mais la gravure de plus en plus fine des composants amène des effets parasites qui demandent de nouvelles innovations allant vers l'intégration verticale des structures élémentaires comme les transistors de type **FinFET*** développés entre autres par Intel, ou encore comme l'empilement de transistors au travers de la technologie CoolCube™ développée par le CEA.

La gravure de plus en plus fine avec les nouveaux transistors FinFET et FD-SOI*

Avec la réduction des dimensions du transistor en technologie planaire, le canal sous la grille devient de plus en plus profond avec une zone trop éloignée pour être contrôlée correctement. Cela conduit à des phénomènes parasites tels que la variabilité ou encore des courants de fuite importants dans une zone très fine et donc une consommation électrique bien trop élevée à l'échelle de la puce. La solution trouvée par les spécialistes de la technologie silicium consiste à faire un canal plus fin au niveau de la grille. Dans le transistor FinFET, le canal devient vertical et la grille l'entoure comme l'indique la figure 8. Pour le FD-SOI, le canal reste horizontal, mais il est isolé par une couche d'oxyde comme le montre la figure 9. Les deux solutions ont leur propre complexité de fabrication, la croissance verticale du canal pour le FinFET, l'uniformité de la couche de silicium au-dessus de l'isolant pour le FD-SOI. Néanmoins, la fabrication de puces FinFET reste plus onéreuse qu'avec le FD-SOI, mais ce dernier ne pourra pas indéfiniment être réduit en taille. La course à la densité ne s'arrêtera pas avec ces

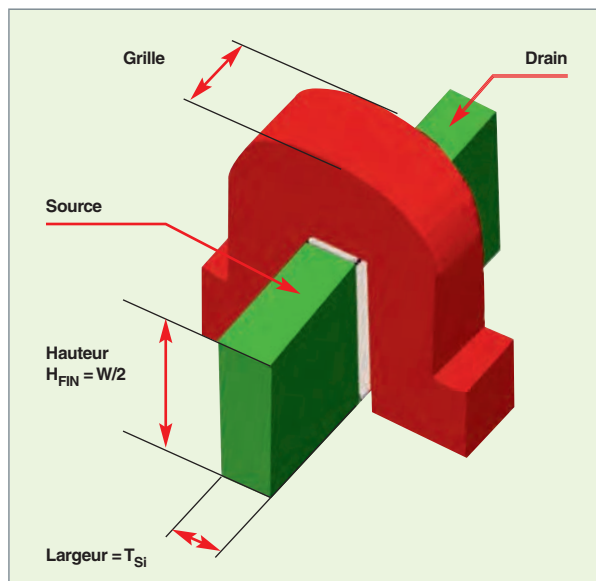


Fig. 8. Transistor FinFET.

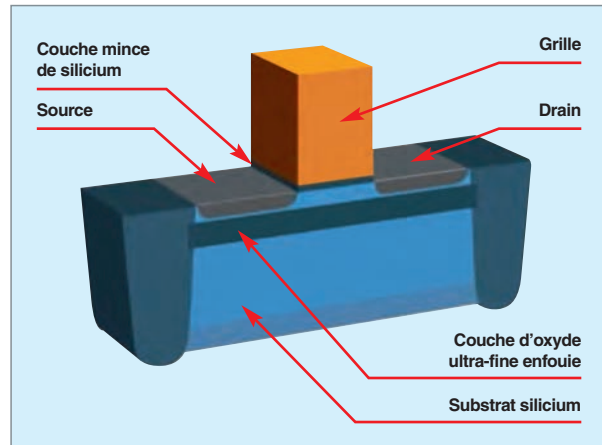


Fig. 9. Transistor FD-SOI.

innovations. Les technologues étudient déjà d'autres solutions de transistors verticaux à base d'un canal de type nanotube entouré par sa grille.

L'intégration verticale, la nouvelle dimension pour augmenter la densité.

Une autre solution pour gagner en densité consiste à empiler les couches de dispositifs à la verticale. Cela est d'autant plus intéressant pour des composants à motif régulier comme les mémoires. Aujourd'hui, Samsung développe de nouvelles structures à 32 couches pour les mémoires **FLASH*** (V-NAND 3D). Toujours dans ce domaine des mémoires, Intel et Micron développent en commun un nouveau dispositif de point mémoire non volatile et sans transistor appelé « **3D XPoint** ». L'architecture consiste en un damier en trois dimensions, où les points mémoire se situent à l'intersection des lignes de mots et de bits, permettant aux cellules d'être adressées individuellement. Ce motif a été développé pour être facilement extensible en vertical et ainsi augmenter la capacité mémoire en gardant les processus de photolithographie classiques. Ces nouvelles mémoires qui apparaissent sur le marché pour remplacer les disques durs magnétiques par des **SSD*** (Solid-State-Drive) vont également à terme remplacer les mémoires dynamiques **DRAM*** trop consommatrices en énergie électrique. Cette mutation modifiera toute la hiérarchie mémoire des processeurs, mais n'interviendra qu'avec l'amélioration de l'endurance des mémoires non volatiles et la conception de contrôleurs mémoires intelligents.

En ce qui concerne l'empilement de structures non régulières comme des portes logiques, le CEA innove en proposant deux techniques :

- L'intégration 3D haute densité pour laquelle les couches de portes logiques sont tout d'abord fabriquées en parallèle puis collées ensemble pour produire un circuit en trois dimensions (fig. 10) ;

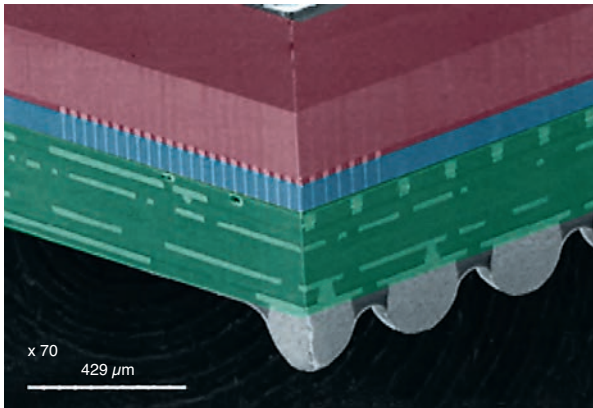


Fig. 10. Intégration 3D haute densité.

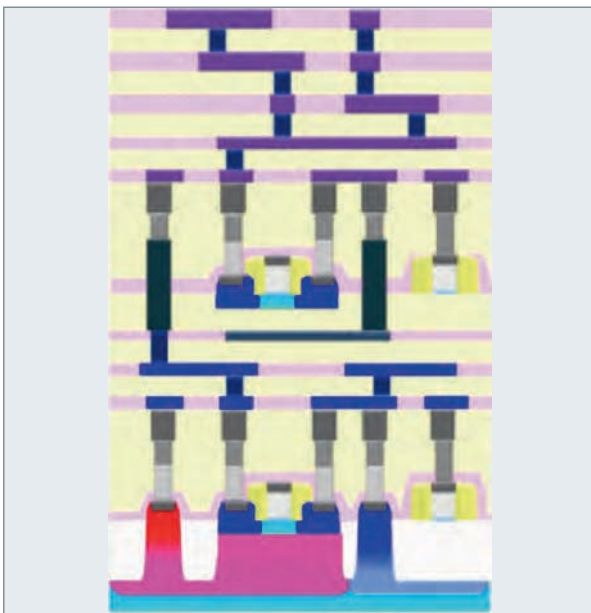


Fig. 11. Technologie CoolCube™.

- l'intégration monolithique ou 3D-VLSI pour laquelle les différentes couches de portes logiques sont fabriquées les unes après les autres sur le même support silicium (fig. 11).

Un exemple d'intégration haute densité est le démonstrateur de l'IRT nanoelec « 3D-NOC » où deux puces identiques sont assemblées pour doubler la densité de calcul sans recourir à une nouvelle technologie planaire plus fine. La liaison électrique entre les circuits est assurée par des « *Through-Silicon-Via* » (TSV), c'est-à-dire des connexions (« *vias* » en anglais) traversant le silicium ainsi que des microbilles qui assurent également le collage entre les puces. Ces connexions, d'un pas bidimensionnel de 20 μm, assurent une densité de signaux bien plus élevée qu'une ligne de plots d'un circuit intégré 2D standard. De plus, la taille de ces connexions ne représente que 1 % de la superficie totale du circuit.

Pour aller vers des densités d'interconnexion verticales encore plus élevées, la technologie CoolCube™ consiste à empiler les transistors par une intégration séquentielle où les couches logiques sont fabriquées séquentiellement l'une après l'autre sur le même substrat silicium. Dans ce cas, une fois la première couche terminée, la couche supérieure est fabriquée « à froid », pour ne pas détruire les dispositifs inférieurs, et en intégrant les VIA de connexion. Ces **VIA* 3D** sont obtenus en utilisant un procédé de photolithographie classique qui bénéficie d'une extrême précision de l'ordre de la dimension des transistors. Dans le cas de l'intégration séquentielle, la densité de connexion est jusqu'à 1000 fois supérieure à l'intégration 3D.

Nous voyons donc que des solutions technologiques existent et sont en développement pour prolonger la loi de Moore, mais un autre défi attend les technologues, c'est celui de l'efficacité énergétique.

La technologie et la course à l'efficacité énergétique

La loi de Moore fut longtemps accompagnée de la loi de Dennard, c'est-à-dire le doublement de la fréquence de fonctionnement des processeurs à chaque génération s'accompagnant aussi d'une réduction de la tension d'alimentation résultant ainsi en une densité d'énergie constante. Les architectes de circuits intégrés ont donc vécu quelques dizaines d'années d'« *happy scaling* » où la performance était automatiquement améliorée avec l'augmentation de la fréquence sans impacter la consommation électrique. Dans les années 2000, la fréquence s'est stabilisée et les architectures multi-cœurs se sont développées conformément à la loi de Moore. Mais la tension d'alimentation reste maintenant pratiquement constante au travers des générations technologiques, ce qui accroît par conséquent la densité d'énergie en mode actif. De plus, la finesse des transistors augmente drastiquement les courants de fuites qui deviennent prédominants. Aujourd'hui, nous avons atteint les limites de l'évacuation de l'énergie sur du silicium. C'est pourquoi le principal défi est de réduire la consommation électrique dans les circuits intégrés, ce qui aura aussi pour effet de stabiliser le coût d'exploitation des centres de « calcul » au sens large (coût de l'électricité).

La course à l'efficacité énergétique

Plusieurs axes de recherches sont en cours pour gagner en efficacité énergétique dans les systèmes électroniques, comme :

- Les techniques de conception à basse tension avec le FD-SOI ;
- la photonique ;
- les mémoires non volatiles.

Par construction, le transistor FD-SOI possède des caractéristiques électrostatiques bien meilleures qu'un transistor conventionnel. La couche d'oxyde enterrée diminue les capacités parasites et apporte ainsi un fonctionnement plus rapide, même à basse tension d'alimentation. De plus, la technologie de FD-SOI permet un contrôle supplémentaire du comportement du transistor en polarisant le substrat par dessous. Lorsque la polarisation du substrat est positive – « *Forward Body Bias* » ou FBB – le transistor fonctionnera plus rapidement. Lorsque la polarisation du substrat est négative – « *Reverse Body Bias* » ou RBB – les courants de fuite du transistor sont réduits. Ces techniques de conception permettent d'adapter les caractéristiques du transistor en fonctionnement, apportant ainsi une grande souplesse avec plus de rapidité au cours des pics de calcul ou plus d'économie d'énergie lorsque l'exécution du calcul n'est pas aussi critique, ce qui conduit finalement à une plus grande efficacité énergétique. Des mesures réalisées sur un circuit FD-SOI de type DSP ont montré des performances bien plus élevées en basse tension avec le FD-SOI qu'avec les technologies équivalentes conventionnelles, et cela avec une efficacité énergétique à 62 pJ/opération à 0,53 V. Ces performances ne sont obtenues qu'avec l'adjonction de techniques de conception comme le FBB, mais aussi comme les bascules à impulsion ou comme le contrôle des chemins critiques.

Une autre technologie prometteuse pour gagner en efficacité énergétique, surtout pour des transferts de données volumineux, est la photonique sur silicium où les liens électriques sont remplacés par des liens optiques qui permettent une bande passante bien plus élevée avec une énergie par bit transmis inférieure à 1 pJ. S'appuyant sur des développements photoniques précédents pour les communications à haute vitesse, le CEA, à travers le projet Carnot Hubeo+, développe un démonstrateur d'un réseau optique sur silicium pour interconnecter des processeurs entre eux ou avec leur mémoire de travail. Le développement d'un tel dispositif photonique nécessite l'utilisation de plates-formes technologiques avancées qui combinent les étapes de fabrication **CMOS*** avec des étapes dédiées aux composants optiques, sans oublier l'intégration finale souvent réalisée avec les techniques d'assemblage 3D.

L'amélioration de l'efficacité énergétique des composants passe également par le développement de nouveaux matériaux pour les mémoires non volatiles, c'est-à-dire qui ont la capacité de conserver les données lorsque l'alimentation est coupée. Cela permet l'annulation des courants de fuites en mode veille, ce qui est essentiel pour les applications portables et offre la possibilité de couper l'alimentation du cœur des processeurs à la demande, ouvrant la voie à « *instant-on/normally-off computing* ». Des travaux de recherches sont en cours sur les mémoires de type OxRAM ou CBRAM depuis les techniques de déposition en fabrication jusqu'à la conception de structures innovantes et le développement de

modèles de conception. Enfin, ces nouvelles structures de mémoire qui s'intègrent dans un processus de fabrication standard CMOS sont une opportunité technologique pour réaliser le « calcul proche de la mémoire » où mémorisation et calcul se retrouvent rapprochés pour diminuer drastiquement la consommation électrique lors du transfert des données.

L'interposeur, une réponse à l'accroissement des coûts de conception, à l'hétérogénéité, à la spécialisation ?

Un autre défi au niveau de la technologie des composants est le coût grandissant du développement des processeurs et plus généralement des nouveaux circuits dans les nœuds technologiques avancés. Ce phénomène conduit à une limitation des acteurs de la nanoélectronique capable de concevoir et de fabriquer des puces et également à une diminution du nombre des acteurs de la diversité des circuits. Cela a pour effet de limiter les sources d'approvisionnement des processeurs avancés, indispensables pour répondre aux besoins des futurs calculateurs. De plus, la finesse de la technologie s'accompagne d'un coût de fabrication des circuits de plus en plus élevé, puisque les nouveaux processus de fabrication très complexes n'assurent plus un rendement correct pour les puces de grandes tailles (de 5 à 8 cm²) que sont, en général, les processeurs. La technologie d'intégration sur interposeur (appelée également « 2.5D ») développée par le CEA propose une réponse à ce problème de coût de développement et de fabrication. Le principe (fig. 12) consiste à remplacer une grande puce monolithique par plusieurs puces de petites tailles (jusqu'à 2 cm²) assemblées sur un interposeur.

Le gain en coût de fabrication provient du gain en rendement de ces petites puces et le gain en coût de développement provient de la réutilisation aisée de ces puces génériques tout comme de l'utilisation d'ordinateurs moins puissants pour faire tourner les outils de conception assistés par ordinateur (voir encadré page ci-contre, sur la conception de circuits). Plusieurs options technologiques d'intégration sur interposeurs s'offrent aux architectes :

1. L'interposeur actif CMOS avec des liaisons point à point bufférisées pour assurer l'intégrité du signal ;
2. l'interposeur actif CMOS avec un réseau sur puce (NOC) dans l'interposeur qui assure le routage et la transmission des transactions entre les processeurs ;
3. l'interposeur passif avec des transmissions rapides entre les puces, on parle aussi de « *System-in-Package* » (SiP) ;
4. l'interposeur optique où les transmissions électriques sont remplacées par des transmissions optiques.

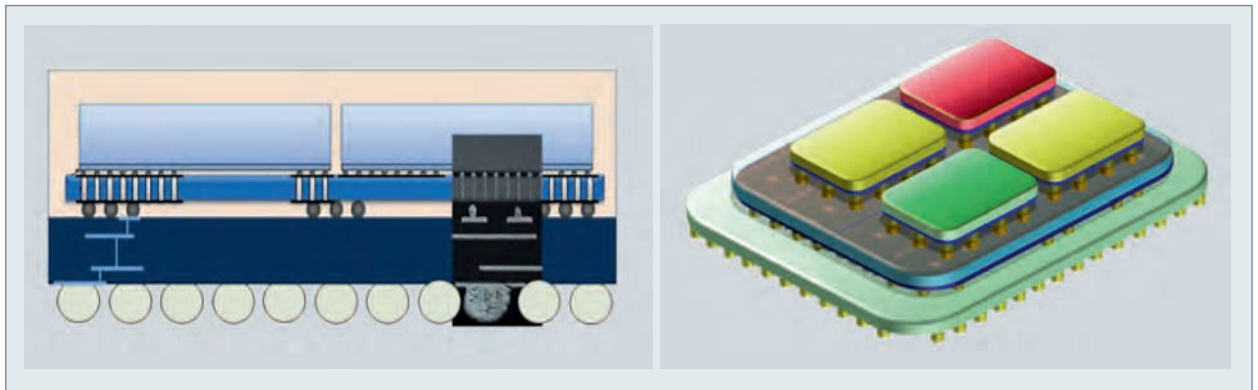


Fig. 12. Intégration 2.5D (à gauche, vue en coupe, à droite, vue en perspective).

L'intégration sur interposeur apporte d'autres avantages comme :

- L'intégration de puces différentes (**CPU***, **GPU***, **FPGA***) pour répondre aux nouveaux besoins d'hétérogénéité du calcul haute performance ;

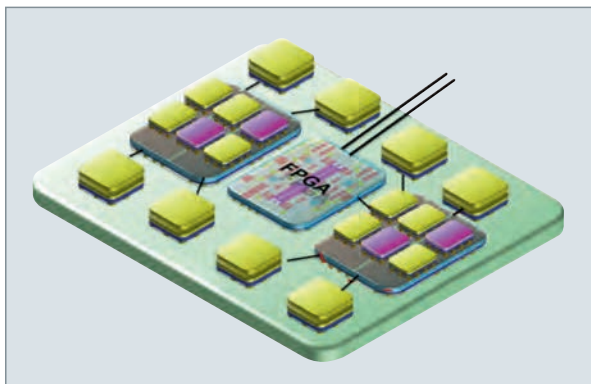


Fig.13. Nœud de calcul ExaNoDe.

- la spécialisation de l'application par un interposeur spécifique et des puces génériques, ce qui diminue grandement le coût à l'accès aux composants complexes, notamment pour les petites et moyennes entreprises ;
- la sécurisation dans l'interposeur d'une solution de calcul propriétaire pour le calcul souverain ;
- l'intégration dans l'interposeur des mécanismes de génération et de contrôle de l'alimentation des circuits pour permettre une meilleure finesse et donc une meilleure efficacité énergétique.

Le projet européen H2020 ExaNoDe développe un nœud de calcul (fig. 13) hautement intégré qui répondra aux exigences du passage à l'échelle et de performance nécessaire pour le calcul exaflopique.

Les éléments de base et leurs difficultés technologiques étant décrits, nous pouvons maintenant expliquer le fonctionnement des composants présents au cœur des ordinateurs.

La conception de circuits

La conception d'un circuit est un processus complexe, qui met en œuvre de nombreux outils logiciels et matériels. Nous pouvons distinguer les grandes phases suivantes :

- Définition de l'architecture du circuit. Par analogie avec l'architecture d'un bâtiment, il faut définir les différents sous-ensembles et comment ils communiquent entre eux et avec le monde extérieur. Cette phase nécessite de dimensionner la complexité calculatoire, les débits d'accès aux mémoires, les niveaux de parallélisme, etc. Il faut également intégrer des contraintes extra-fonctionnelles comme la testabilité du circuit en sortie de fabrication, ou la mise au point du logiciel. Il faut rechercher les meilleurs compromis coût/complexité/performance, tout en garantissant la cohérence entre les sous-systèmes. Les logiciels de prototypage virtuel facilitent l'exploration de l'espace des solutions ;

- développement « *Front-end* », de la description algorithmique d'un composant à sa représentation sous forme de portes logiques. Un concepteur *Front-end* crée un code « synthétisable », c'est-à-dire assimilable par un outil de CAO pour produire une représentation équivalente sous forme de portes logiques. Ce code synthétisable doit garantir la fonctionnalité de chaque composant, mais également respecter les contraintes de l'architecture (interfaces et performances). En pratique, les langages utilisés permettent d'exprimer un parallélisme élevé, au prix d'une difficulté croissante en termes de vérification fonctionnelle et d'intégration. La valeur ajoutée des outils de CAO se situe au niveau de la simulation fonctionnelle, de la vérification formelle, et de la synthèse logique ;

- développement « *Back-end* » : prise en compte des contraintes physiques et technologiques. À partir d'un ensemble de portes logiques, il faut ajouter les alimentations, les horloges, et veiller à respecter les règles de conception imposées par la technologie. Il faut également tenir compte des interfaces physiques avec le boîtier qui va contenir le circuit. Toutes ces étapes requièrent des calculs énormes pour assurer le routage des signaux, le respect des contraintes temporelles...

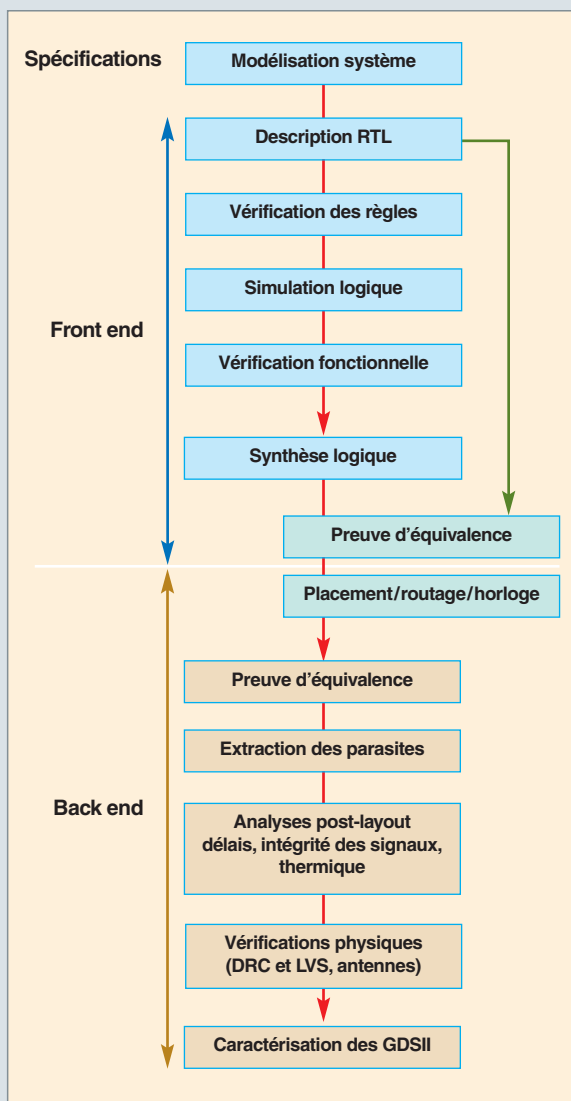


Fig. 14. Les différentes étapes de la conception d'un circuit électronique.

Nous voyons que les outils de CAO interviennent à toutes les étapes du processus de conception. Les différents algorithmes mis en œuvre par ces outils doivent :

- Passer à l'échelle sur des circuits de grande complexité ;
- proposer des optimisations guidées multicritères (surface, consommation, thermique, vitesse, technologie...) ;
- garantir qu'ils ne dégradent pas le résultat des étapes précédentes.

L'utilisation de nouvelles technologies (nœud silicium plus fin, architecture 3D, réseaux sur puce...) va de pair avec le développement d'outils de CAO pour les mettre en œuvre.

Le CEA a noué des partenariats avec différents éditeurs d'outils de CAO. Ces collaborations permettent de mettre en commun les efforts : les dernières versions d'outils de CAO rendent possibles le développement de circuits innovants, et en retour les outils de CAO bénéficient des remontées de problème « du terrain ».

Quelques ordres de grandeur, tirés d'un circuit multicœurs développé par le CEA en 2015 :

- La description Frontend occupe plusieurs millions de lignes de code ;
- la vérification fonctionnelle nécessite des simulations d'une semaine pour passer tous les tests de non régression. En utilisant un émulateur – machine dédiée à la simulation de codes RTL – on arrive à démarrer (« *booter* ») un système d'exploitation à une fréquence de 100 kHz (à comparer aux 2-3 GHz d'un processeur) ;
- dans la phase de *back-end*, la synthèse du circuit global prend 24 h, pour intégrer jusqu'à 100 horloges différentes. Les contraintes de synchronisation des horloges (timing) représentent plus de 100 000 lignes de code ;
- chaque itération de placement-routage du circuit complet prend 1 semaine de calcul ;
- une simulation post-backend nécessite une machine avec plus de 100 Go de mémoires, prend 1 h rien que pour charger la base de données, et simule à une fréquence d'à peine 1 kHz.

Les composants au cœur du HPC

Les éléments de base

Les principes de base des ordinateurs ont moins de 70 ans, sans remonter aux machines mécaniques. Beaucoup considèrent que l'architecture type d'un ordinateur numérique moderne a été vulgarisée par la note « *First draft of a Report on the EDVAC* » écrite en 1945 par le mathématicien John VON NEUMANN (fig. 15).

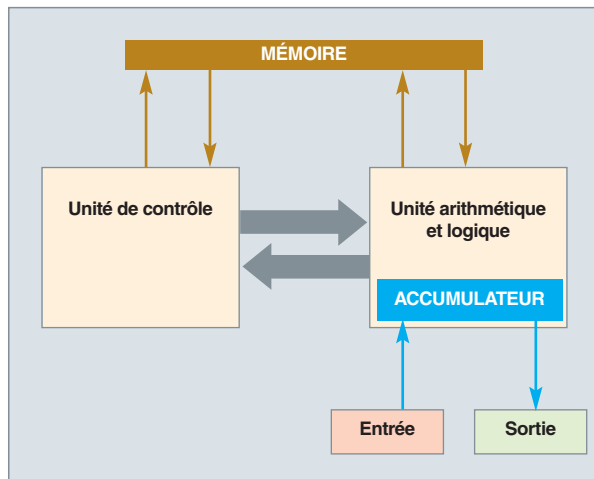


Fig. 15. Schématisation de l'architecture de von Neumann. (d'après https://fr.wikipedia.org/wiki/Architecture_de_von_Neumann).

Il considère qu'un ordinateur est composé de quatre parties :

- Une unité de calcul comprenant une unité arithmétique et logique et des registres de mémorisation ;
- une unité de contrôle, qui gère la séquence des instructions et qui comporte un compteur ordinal (*Program Counter* en anglais ou PC) qui indique la séquence (l'ordre) des instructions à effectuer ;
- la mémoire, qui stocke à la fois les données (traitées ou à traiter) et la séquence des instructions ou programme. Le fait que les instructions et les données soient dans une même mémoire (ou dans un même espace mémoire) est caractéristique de l'architecture dite « de von Neumann » (voir la figure 10) ;
- les **entrées-sorties*** qui permettent d'échanger des données avec le monde extérieur.

Cette organisation se retrouve dans les ordinateurs actuels, avec souvent l'unité de calcul et l'unité de contrôle regroupées dans le « processeur », la mémoire composée de différents types de mémoires (la « hiérarchie mémoire ») et les

liens de communication. La suite de cette partie va donc être organisée suivant la structure processeur, hiérarchie mémoire et communication.

Processeur

Le processeur ou **CPU*** en anglais (*Central Processing Unit*) est la partie où les instructions sont exécutées. Son évolution est fortement liée à l'évolution de la technologie. Les premiers ordinateurs étaient réalisés en composants discrets (tubes à vide, ensuite transistors, enfin circuits intégrés). Les microprocesseurs ont finalement prévalu dans les supercalculateurs, mais il a fallu du temps pour que la technologie permette d'intégrer assez de fonctions pour qu'ils puissent avoir des fonctionnalités utilisables dans les grands ordinateurs. Le premier microprocesseur (circuit intégré comportant toutes les parties d'un processeur dans un seul circuit intégré) a été produit par Intel en 1971. Le processeur Intel 4004, originellement conçu pour être le cœur d'une calculatrice, s'est montré bien plus universel et se trouve à l'origine du succès de la société Intel sur ce marché. Il comportait 2 300 transistors et travaillait sur des données de 4 **bits*** à une fréquence d'horloge¹⁴ d'environ 740 kHz. Il a été suivi par le 8008 qui, avec 3 500 transistors pouvait travailler sur des mots de 8 bits puis, en 1974, le 8080, le premier système à bus d'adresse¹⁵ et de donnée séparé. L'évolution de la technologie des semi-conducteurs, illustrés par la loi de Moore, a permis une rapide amélioration des performances. Le nombre de transistors pouvant être économiquement intégrés dans une puce croissant, les unités de calculs se sont complexifiées pour traiter des mots de plus en plus larges (16 bits, puis 32 et 64 bits). Cette taille des mots a aussi un effet sur l'**espace d'adressage*** : les microprocesseurs 8 bits ont dès le début un espace d'adressage sur 16 bits soit 65 536 positions (64 K¹⁶ mots), donc les opérations sur les adresses mémoire sont soit simplifiées (opérations relatives à un registre d'adresse de base), soit réalisées en plusieurs opérations élémentaires. Les processeurs 16 bits sont plus « orthogonaux » dans ce sens, mais on s'est vite rendu compte que 64 K mots était une limitation pour accéder à la fois aux données et aux instructions dans les programmes. D'où l'idée de différentes « pages » de 64 K pouvant être changées en modifiant des données dans un registre. Cela s'est reflété dans les différents modèles mémoire des premiers ordinateurs du type PC fondés sur l'architecture Intel 8086 (en fait, les premiers PCs étaient équipés du circuit Intel 8088, qui avait un bus externe 8 bits pour réduire le nombre de broches d'entrées-sorties, et donc le coût du circuit). Le passage en mots de 32 bits a vraiment

14. La fréquence d'horloge est la fréquence du signal qui séquence toutes les opérations dans le microprocesseur. Plus elle est élevée, plus le microprocesseur est rapide et performant.

15. Les informations stockées dans la mémoire sont accédées par une adresse unique à l'instar de l'adresse d'une maison dans une rue.

16. En informatique, K représente 1024, donc 64 K = 65 536.

permis d'utiliser les microprocesseurs pour le calcul scientifique, à la fois grâce au large espace d'adressage (2^{32} soit 4 294 967 295 positions mémoire) et au fait qu'un mot de 32 bits permet de mémoriser directement une représentation d'un nombre flottant en simple précision (type « float » en C, souvent suivant la norme IEEE 754). Le coût décroissant des mémoires a engendré, dès les années 90, des besoins d'adressage en mémoire virtuelle approchant les 4 Go, ce qui poussa le développement d'architectures de microprocesseurs 64 bits (MIPS R4000 en 1991, DEC Alpha en 1992, jeu d'instruction X86-64 en 1999, etc.). En fait, dès les années 60, certaines machines utilisaient des mots de 64 bits (comme l'IBM 7030), les microprocesseurs 64 bits ne sont arrivés que près de quinze ans après leur utilisation par Cray Research dans le Cray-1.

Les microprocesseurs actuels haut de gamme ont une architecture interne en 64 bits et ont donc un espace d'adressage théorique de 16 exbiotcet (Eio) = 2^{64} octets = 18 446 744 073 709 551 616 octets. Le problème de l'espace d'adressage limité par rapport à la mémoire physique pouvant être rattaché à la machine a été totalement résolu par les architectures 32 et surtout 64 bits. Les solutions d'adressage plus ou moins indirectes des données (comme les systèmes de fichiers) peuvent donc être remises en question par ces machines à large espace d'adressage qui peuvent adresser directement un nombre gigantesque d'objets.

Un besoin pour le calcul scientifique est d'être capable de représenter des entités réelles qui ne sont pas simplement des entiers en puissance de deux. L'Institut IEEE a standardisé la représentation machine (binaire) des nombres flottants dans son standard IEEE 754. Contrairement au calcul en entiers, le calcul en flottants produit des approximations (tout réel ne peut être représenté par un nombre en virgule flottante) qui peuvent faire diverger des calculs itératifs (voir la section sur les calculs numériques, *infra*, p. 61). La représentation IEEE 754 comporte certaines valeurs particulières, comme le zéro signé, la représentation des infinis, et les « NaN » (*Not a Number*). La représentation simple précision est représentée sur 32 bits, la double précision sur 64 bits et la quadruple précision sur 128 bits (et la précision étendue des architectures x86 sur 80 bits, 16 bits pour l'exposant et 64 bits pour la mantisse). Le tableau 1 détaille les précisions possibles de chacune des représentations.

L'arithmétique en flottants n'est donc pas exactement la même qu'en réels, et les approximations font que l'ordre des

opérations n'est pas sans importance : les opérations ne sont pas associatives. Les problèmes liés à cette approximation par la représentation en nombres flottants et les instabilités numériques qu'elle provoque sont évoqués *infra*, p. 61.

L'augmentation du nombre de transistors par circuit (et son corollaire sur la diminution du coût total des circuits) a permis d'intégrer de plus en plus de fonctions dans le microprocesseur. Par exemple, les calculs en flottants étaient réalisés par un circuit séparé, un co-processeur (le 8087) dans les premiers ordinateurs du type PC. Avant l'ajout de coprocesseurs, par exemple sur les machines 8 bits, des programmes simulaient le fonctionnement en virgule flottante par des opérations entières, natives de l'architecture. À cause du nombre considérable d'instructions élémentaires nécessaires pour simuler les opérations flottantes, ces solutions n'étaient que des appoints et ne permettaient pas de construire de vraies machines dédiées pour le calcul scientifique. De nombreux travaux algorithmiques ont permis de mettre au point des algorithmes plus rapides ; nous pouvons citer, par exemple, le CORDIC (pour *COordinate Rotation Dlgital Computer*), qui permet de calculer de façon simple et efficace les fonctions trigonométriques et hyperboliques.

L'utilisation de co-processeurs externes permet de rajouter des fonctions non nativement supportées par le micro-processeur et son jeu d'instruction, mais au prix d'une certaine inefficacité : transfert des données vers le co-processeur, activation de celui-ci et lecture des résultats. Avec l'avancement de la technologie, le co-processeur se fond dans le processeur et devient partie intégrante du jeu d'instructions. En plus des fonctions de calcul en flottants, les microprocesseurs modernes intègrent des fonctions de calcul cryptologique et de calcul vectoriel. En effet, un mot de 32 bits peut être considéré comme un vecteur de 4 éléments de 8 bits et un mot de 64 bits comme un vecteur de 8 mots de 8 bits, ou 4 mots de 16 bits. Les opérations de produit vectoriel, de somme des éléments peuvent ainsi être ajoutées et réalisées très efficacement. Ce codage est utile pour certaines applications, comme pour le traitement d'image, où un élément de l'image, ou pixel, est souvent codé comme un ensemble de composantes sur 8 bits. Ces opérations vectorielles, ou **SIMD*** (*Single Instruction, Multiple Data*, où une opération est réalisée simultanément sur plusieurs données différentes) ont été popularisées par Intel dans son extension de jeu d'instruction MMX introduit en 1997 sur le Pentium P5 et par AltiVec pour l'architecture PowerPC. Il est à noter que les registres MMX étaient en fait ceux de l'unité

Tableau 1.

Précision de la représentation IEEE754 (d'après https://fr.wikipedia.org/wiki/Virgule_flottante)							
Précision	Encodage	Signe	Exposant	Mantisse	Valeur d'un nombre	Précision	Chiffres significatifs
Simple précision	32 bits	1 bit	8 bits	23 bits	$(-1)^S \times M \times 2^{(E-127)}$	24 bits	environ 7
Double précision	64 bits	1 bit	11 bits	52 bits	$(-1)^S \times M \times 2^{(E-1023)}$	53 bits	environ 16

flottante, limitant l'utilisation des deux unités simultanément. De nombreuses évolutions ont eu lieu dans ce domaine, par exemple les ajouts des instructions spécifiques comme SSE (*Streaming SIMD Extensions*), **AVX*** (*Advanced Vector Extensions*), AVX2 (extension aux entiers 256 bits), AVX-512 (extension de AVX à 512 bits, et introduit par Intel en 2013) **FMA*** (extension des instructions SSE – *Streaming SIMD Extensions* – 128 et 256 bits dans l'architecture x86 pour réaliser des opérations de « *Fused Multiply-Add* », etc.

Nous pouvons considérer que les **GPU*** (*Graphics Processing Units*) sont une autre sorte d'accélérateurs SIMD (ou pseudo-SIMD) et ils seront décrits plus en détail dans la section *infra*, p. 26.

L'intérêt des instructions de style SIMD réside en ce qu'elles permettent d'effectuer plus d'opérations en réduisant le problème fondamental de l'architecture de von Neumann : les accès mémoire. En effet, dans cette architecture, l'unité de contrôle et l'unité de calcul partagent l'accès à la mémoire où sont stockées les données et la séquence des instructions. Les instructions SIMD permettent d'effectuer un nombre d'opérations en parallèle, similaires mais avec seulement une seule instruction à chercher en mémoire.

Pour augmenter les performances, les architectures ont non seulement évolué pour utiliser plus de parallélisme dans les

données, mais aussi celui des instructions et du traitement des instructions : en effet, une instruction doit d'abord être cherchée en mémoire, décodée, puis ses opérandes préparés ; enfin, la fonction de l'instruction est effectuée et le résultat mémorisé. Cela prend plusieurs cycles machine (au moins un par phase), et comme les instructions souvent se suivent, il est tentant de les traiter en séquence avec recouvrement temporel des phases des différentes instructions provoquant un effet de tuilage (« pipeline »), comme illustré par la figure 16.

Ce mécanisme est efficace si les instructions sont effectuées en séquence ; toute rupture, par exemple causée par un branchement, demande de vider le pipeline et de recommencer la nouvelle séquence depuis le début. Des mécanismes de prédiction (de branchement, par exemple) ont été introduits dans les microprocesseurs récents pour diminuer ces risques.

Une autre approche pour augmenter les performances consiste à effectuer plusieurs instructions simultanément, par exemple une opération flottante, une opération entière et un accès mémoire. Ce parallélisme d'instruction est explicite dans les architectures dites « VLIW » (*Very Long Instruction Word*). Une optimisation supplémentaire propose d'exécuter les instructions non pas suivant leur ordre d'apparition dans le code (architecture dites « *in order* »), mais suivant la disponibilité des données : un ensemble d'instructions sont décodées, et exécutées suivant leur dépendance et la disponibilité des données (architectures dites « *out of order* »). Il faut donc bien être conscient que les outils de compilation, et maintenant le matériel, font que les instructions ne sont pas forcément exécutées dans l'ordre dans lesquelles elles ont été initialement écrites. Tous ces méca-

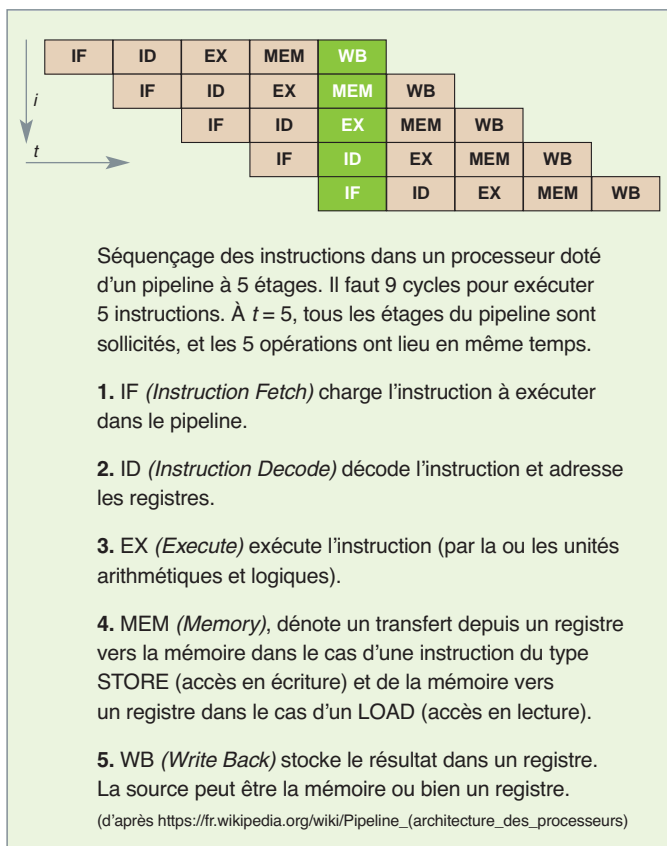


Fig. 16. Illustration du fonctionnement en pipeline.

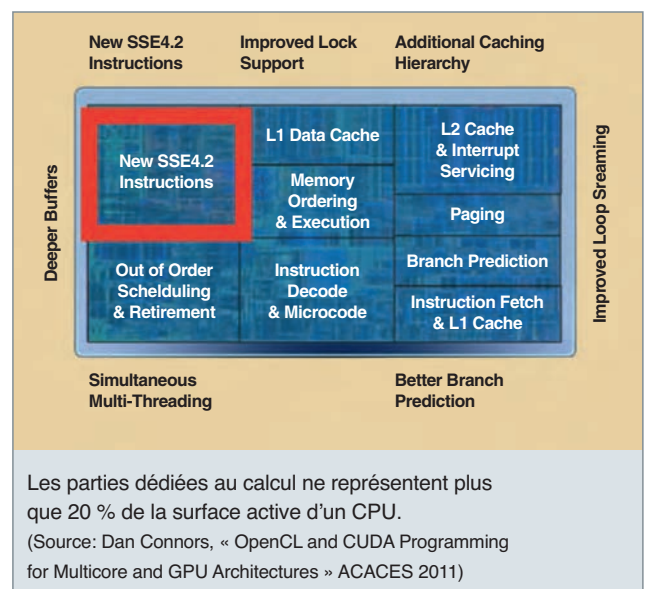


Fig. 17. Surfaces relatives des fonctions internes d'un CPU.

nismes qui permettent d'améliorer les performances moyennes rajoutent de la surface dans la puce (près de 80 % comme illustré sur la figure 17) et nuisent à la prédictibilité temporelle des résultats tout en permettant d'augmenter en moyenne les performances.

Le temps de calcul devenant faible par rapport au temps nécessaire pour amener les données de la mémoire vers le processeur où elles sont traitées, il est tentant de faire faire aux unités de calcul autre chose pendant qu'elles attendent les données : une des solutions est le « *multithreading* », c'est-à-dire qu'un processeur unique est virtuellement vu comme plusieurs cœurs de calcul qui travaillent en pseudo-parallélisme : lorsqu'une tâche est en attente (par exemple, de données), le processeur commute automatiquement sur une autre tâche qui, elle, est prête à être exécutée. Cela permet de conserver une activité maximale pour le processeur.

Dans tous les développements précédemment expliqués, le « moteur » de croissance a été l'amélioration des technologies du silicium, l'accroissement du nombre de transistors par puce et la réduction de leur coût élémentaire, doublé par une augmentation similaire des performances par watt consommé. Mais la physique n'est plus aussi bienveillante pour les nœuds technologiques¹⁷ avancés et leurs gains en efficacité ne sont plus vérifiés après les années 2000-2005 : la fréquence maximale de processeurs ne croît plus (elle reste aux alentours de quelques GHz), et la densité énergétique se met à croître. Un nouveau nœud technologique permet toujours d'avoir plus de transistors par puce, mais cela ne signifie pas forcément un accroissement en fréquence du processeur. La solution pour avoir plus de performances est de multiplier le nombre de cœurs de calcul par puce : nous entrons alors dans l'ère des multicœurs. Ce phénomène est très visible sur la figure 18. Cela a de forts impacts sur les modèles de programmation : nous n'avons plus une machine de von Neumann avec mémoire unique, mais un ensemble de processeurs dont il faut gérer le parallélisme. Comme la majorité des langages de programmation repose sur ce modèle de von Neumann, qui propose un espace mémoire unique, il faut en fait souvent réaliser un modèle de mémoire partagée entre les cœurs. C'est-à-dire que les cœurs de calcul « voient » tous un même espace mémoire, même si, physiquement, il peut être distribué, avec tous les problèmes de la cohérence entre ces mémoires et la copie des données d'une partition mémoire physique à une autre.

17. Un nœud technologique caractérise une finesse de gravure de transistor (en nm) accessible pour une technologie donnée. En 2016, le gros de la production des fondeurs de silicium est en train de basculer du 28 nm au 16 ou 14 nm.

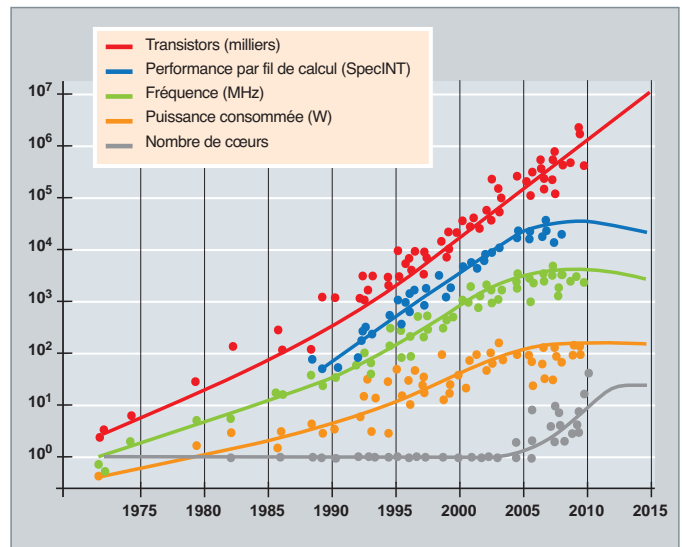


Fig. 18. Évolution des caractéristiques des CPU au cours du temps. Source from C. Moore, « Data Processing in ExaScale-Class Computer Systems », Salishan, April 2011.

Les GPU

GPU* est l'acronyme anglo-saxon de « *Graphics Processing Units* », il désigne les coprocesseurs apparus au milieu des années 90 afin de soulager les processeurs des PC (CPU) des tâches graphiques devenues de plus en plus gourmandes en ressources calcul. Sous l'influence du marché du jeu vidéo, ces architectures ont évolué à un rythme sans précédent entre 1995 et 2007, date de l'introduction de l'architecture **CUDA*** par la société Nvidia, au point où les GPU deviennent concurrentiels avec les architectures classiques pour le calcul haute performance.

• La naissance de l'industrie du jeu vidéo et l'apparition du standard OpenGL

L'industrie du jeu vidéo explose au début des années 80, avec les premières consoles de jeu grand public (ATARI, Mattel/Intellivision, par exemple), soit au même moment que l'arrivée des ordinateurs personnels (PC). À cette époque, d'un point de vue matériel, les jeux vidéo sont distribués sur un support physique : cartouche (circuit imprimé dans une coque plastique), une disquette ou une cassette à bande magnétique. À la fin des années 80, un adolescent peut jouer et s'initier à la programmation en langage BASIC sur des ordinateurs de type ZX 81, Commodore 64, Amstrad CPC 464 ou Thomson TO7. Les capacités de rendu graphique sont très limitées, les images matricielles (*raster*) de faibles résolutions et d'un point de vue matériel les contrôleurs vidéo ne sont pas encore des véritables processeurs (avec leur propre mémoire RAM, notamment).

Au début des années 90, nous devons noter l'apparition du standard OpenGL (*Open Graphics Language*). Ce standard, lancé par la société américaine SGI (Silicon Graphics, éga-

lement connue pour avoir conçu le processeur de la console Nintendo 64), fonde véritablement le concept de *pipeline* graphique en décrivant l'ensemble des opérations permises pour calculer une image matricielle (pixélisée) d'une scène graphique 2D ou 3D. Le standard OpenGL définit une interface de programmation (**API*** en anglais) qui permet ainsi de développer des programmes **portables d'une plate-forme à une autre**.

Il est important de rappeler que le standard OpenGL ne fournit pas de recommandations sur la réalisation; en revanche, le standard peut être implanté au niveau logiciel sous forme de bibliothèque (Mesa, par exemple) comme au niveau matériel dans les GPU sous forme très optimisée; on parle alors d'accélération graphique matérielle (au milieu des années 90).

• *L'évolution des standards graphiques et l'introduction d'architectures de GPU programmables*

L'année 1995 est caractéristique de bien des évolutions des ressources de calcul dédiées aux tâches graphiques : c'est véritablement le début du cinéma d'animation. Ce qui deviendra le studio Pixar produit le film *Toy Story* entièrement réalisé en images de synthèse en utilisant une ferme de calcul constituée de 117 stations SUN Sparc, nécessitant plus de 800 000 heures de calcul pour le rendu graphique. La même année, la société Microsoft publie le système d'exploitation Windows 95, ainsi qu'un standard graphique concurrent d'OpenGL, nommé DirectX pour l'implantation des primitives graphiques des jeux vidéo ; à cela s'ajoute l'apparition de nouveaux standards matériels pour les bus de communication entre CPU et GPU, offrant une bien meilleure bande passante mémoire (AGP, par exemple).

Rappelons enfin que d'un point de vue matériel, l'architecture des GPU est conçue pour optimiser le traitement de tâches graphiques, dont la spécificité est de répéter les opérations pour un grand nombre de pixels; on utilise parfois le terme anglo-saxon de « *stream processor* » pour renforcer le lien fort avec l'implantation du « *pipeline graphique* » dans lequel les données s'écoulent comme dans une canalisation dans un seul sens (des données brutes vers le tableau matriciel de pixels).

À la fin des années 90, les GPU prennent en charge une partie de plus en plus grande des fonctionnalités du pipeline graphique ; cependant, les différentes normes (OpenGL / DirectX) ayant évolué, les algorithmes de rendu graphique sont devenus de plus en plus complexes et leur mise en œuvre devient difficile à porter d'une architecture à une autre, voire d'une famille à une autre pour un même vendeur. Ainsi, au début des années 2000, apparaissent les premiers GPU programmables. L'avantage majeur de la programmabilité des GPU est évidemment le gain en souplesse d'implantation des nouveaux algorithmes complexes, et cela en logiciel plutôt que matériel. En revanche, cette première génération de

GPU doit être programmée à l'aide de langages de type assembleur, très proches du matériel, dont la portabilité est encore très limitée.

• *L'architecture CUDA : des GPU pour le calcul scientifique*

La programmabilité des GPU a évolué à un rythme effréné au début des années 2000 : les constructeurs ont rapidement proposé de nouveaux outils de conception de programme reposant sur des langages dérivés du langage C, ayant un niveau d'abstraction plus élevé que l'assembleur, et donc facilitant l'adoption de ces outils. Nous pouvons citer deux langages permettant d'écrire des programmes *shaders*¹⁸ (exécutés par le GPU) : Cg (*C for graphics* porté par la société Nvidia) et HLSL (*High Level Shading Language* porté par Microsoft et son standard DirectX). Notons que dans cette première moitié des années 2000, les GPU ne sont capables de faire des calculs que sur des entiers ou des nombres flottants 16 bits.

Rappelons encore que par conception les GPU sont constitués d'une collection d'unités matérielles de calcul, appelés « *shaders processors* » de deux types : les vertex processors (architecture **MIMD***) et les « *fragment processors* » (architecture **SIMD***) fonctionnant en parallèle. Au milieu des années 2000, on réalise rapidement que ces architectures peuvent offrir une puissance de calcul plus importante que les CPU et ainsi ouvrir une nouvelle voie au calcul haute performance.

Annoncée à la fin de l'année 2006, l'architecture CUDA (*Compute Unified Device Architecture*), développée par la société Nvidia, marque une véritable rupture technologique (matérielle et logicielle), et le véritable début de l'utilisation des GPU pour le calcul scientifique. En effet, sur le plan matériel plusieurs contraintes sont levées dont la plus importante est sans doute la possibilité d'utiliser la mémoire graphique externe en lecture/écriture à tout moment dans l'exécution d'une application. Il n'y a plus qu'un seul type de processeur *shader* dont l'architecture SIMD est profondément revue pour faire du calcul en flottant 32 bits ; d'un point de vue conceptuel apparaît le modèle d'exécution massivement *multithread* que nous allons présenter. Associé à cette évolution matérielle majeure, Nvidia propose un langage de programmation baptisé CUDA/C, englobant un très large sous-ensemble des langages C et C++ et enrichi de quelques mots clés pour décrire le parallélisme *multithread* à la base de ce modèle.

18. Un « *shader* » est un fragment de programme qui réalise les ombres des primitives graphiques dans une scène 3D.

• La description simplifiée de l'architecture matérielle CUDA et son modèle de programmation associée

La figure 19 représente un schéma simplifié de l'architecture matérielle CUDA.

Ce qui signe ou caractérise fondamentalement l'architecture matérielle d'un processeur, c'est l'association entre une microarchitecture (par exemple x86 pour les CPU les plus courants) et une façon d'accéder à la mémoire **RAM*** externe. On utilise régulièrement aujourd'hui le qualificatif anglo-saxon « *latency optimized* » (optimisé en latence) pour désigner au sens large les architectures de CPU. En effet, leur conception matérielle (reposant sur les concepts déjà évoqués de pipeline d'instruction / pipeline de données) est dirigée par le besoin d'acheminer les données à traiter depuis la mémoire RAM externe de la carte mère vers les cœurs de processeur en un temps le plus court possible (typiquement quelques cycles d'horloge). La solution technique affinée ces trente dernières années par les différents constructeurs de processeur (Intel, AMD, IBM...) repose sur l'utilisation de mémoire cache. Plus précisément, une grande partie des transistors constituant le CPU est réservée pour implanter cette zone mémoire, très rapide d'accès, permettant de remplir les pipelines d'instructions et de données à une vitesse proche de la vitesse d'horloge, en vue d'atteindre la performance crête de l'architecture. Associées à l'utilisation des mémoires cache, les microarchitectures de cœur de processeur ont grandement évolué et sont devenues très complexes (parallélisme d'instructions, prédiction de branches, etc.). Ces optimisations de microarchitectures trouvent aujourd'hui leur limite ; les gains de performance obtenus ne sont plus à la hauteur des efforts de conception mis en œuvre. En corollaire, nous pouvons dire qu'un CPU

multicœur fonctionne nominalelement lorsque le nombre de tâches (processus ou **thread***) est égal au nombre de cœurs physiques.

Avec l'architecture CUDA, on fait tomber la contrainte de minimisation des temps d'accès à la mémoire, de façon à récupérer une grande partie des transistors de la puce pour implanter des cœurs de calcul. Comment alors peut-on obtenir une architecture performante lorsque l'accès à la mémoire externe est lent (jusqu'à plusieurs centaines de cycles d'horloge) puisque les caches mémoires ont fondu ? Le modèle d'exécution des GPU repose sur le fait que le programme logiciel doit être constitué d'un nombre de **threads** (fils d'exécution) beaucoup plus grand que le nombre de cœurs de calcul physique, et ainsi on maintient un taux élevé d'occupation des unités de calcul. Les GPU sont ainsi qualifiés d'architecture « *throughput optimized* » (par opposition à « *latency optimized* ») ; on cherche ainsi à maximiser la concurrence pour faire en sorte que les cœurs de calcul soient occupés pendant que les données sont transférées de/vers la mémoire externe. Nous trouvons là l'origine de l'appellation d'*architecture massivement multithread* associée aux GPU modernes.

Notons encore que ce que l'on appelle « cœur de calcul » pour un GPU n'a pas la même signification que pour un CPU : en effet, là où les cœurs d'un CPU peuvent travailler de manière complètement indépendante les uns des autres, les cœurs d'un GPU sont groupés, comme le montre la figure 20, sous forme de blocs matériels dénommés parfois « *Streaming Multi-processors* » (SM). Tous les cœurs d'un bloc SM exécutent matériellement la même instruction en parallèle et en même temps. Précisons encore que les cœurs de calcul d'un GPU ont une architecture simplifiée afin d'en avoir un grand nombre par puce (plus de 2500 cœurs par puce pour les dernières générations) et aussi pour faciliter la gestion au niveau matériel du séquençement d'un grand nombre de threads GPU.

Lors de l'introduction de l'architecture CUDA en 2007, les GPU sont encore des coprocesseurs à qui le CPU délègue une tâche de calcul, que l'utilisateur doit écrire en langage CUDA/C et appelé « noyau CUDA » afin d'exprimer explicitement le parallélisme de l'application. Pour simplifier, disons que le langage CUDA permet de transformer (ou déplier) une boucle de calcul en distribuant les éléments de calcul sous forme de **threads** qui seront exécutés de manière concurrente et parallèle sur les unités de calcul du GPU.

L'apprentissage du langage de programmation CUDA représente un investissement, un effort véritablement non négligeable. Les implémentations logicielles des algorithmes des codes de simulation doivent être sinon réécrites, du moins dans une large partie reformulées pour exprimer explicitement le parallélisme de **threads** SIMT (*Single Instruction Multi Thread*).



Fig. 19. Schéma bloc de l'architecture GPU CUDA de Nvidia (génération Fermi, 2010). Sur cet exemple, le GPU est constitué de 16 Streaming multi-processors contenant chacun 32 cœurs.

Notons que d'autres constructeurs, principalement AMD qui est le seul concurrent direct de Nvidia sur le marché des GPU hautes performances, ont développé une solution GPU visant des applications en calcul scientifique haute performance. Cependant, nous pouvons dire que huit ans après l'introduction de CUDA, seule cette dernière architecture bénéficie d'une base d'utilisateurs, de bibliothèques de calcul et surtout de documents pédagogiques d'une qualité suffisante pour maintenir viable la solution du calcul haute performance sur GPU.

Pour terminer sur cette brève présentation des GPU pour le calcul scientifique, mentionnons le fait que la performance des architectures de calcul est actuellement mesurée à l'aide de plusieurs métriques effectives : le nombre de calcul flottants (**FLOP***) par secondes, ou par unité de puissance électrique (W), cette dernière relevant un caractère de plus en plus fondamental dans la perspective de trouver des solutions techniques performantes en termes de puissance calcul, tout en maintenant raisonnables les coûts de fonctionnement. En effet, aujourd'hui les GPU offrent une efficacité énergétique en FLOP/W plusieurs fois supérieure à celle de CPU multicœurs.

• Des GPU dans les supercalculateurs

En France, en 2010, le calculateur TITANE du CCRT a été le premier à intégrer une partition de taille significative utilisant la première génération de l'architecture NVIDIA/TESLA S1070. À cette époque, le calcul distribué sur plusieurs GPU était encore très marginal. Les calculateurs TERA 100 du CEA, et TGCC/CURIE possèdent chacun une tranche GPU de 3^e génération (de l'ordre de 300 GPU de type Kepler) sur lesquelles a été déployée une solution logicielle de déport d'affichage graphique (l'outil VisuPortal de la société OVH disponible au TGCC), ce qui fournit un outil à la fois de calcul et de visualisation scientifique distante de très haute performance.

Depuis l'introduction de l'architecture CUDA, le constructeur Nvidia propose et enrichit l'écosystème logiciel en bibliothèques de calcul optimisées pour ses GPU : cuFFT (transformées de Fourier rapides), cuBLAS (primitive d'algèbre linéaire pleine), cuSparse (primitives d'algèbre linéaire creuse), etc. À cela s'ajoute un nombre grandissant d'outils annexes qui permet de traiter l'aspect calcul distribué (en utilisant le modèle MPI par passage de message). Citons par exemple l'environnement d'exécution StarPU (principalement développé à l'INRIA) qui permet de reformuler sous une forme asynchrone des algorithmes complexes comme ceux que l'on trouve en algèbre linéaire distribuée, et surtout en fournissant une couche d'abstraction permettant d'utiliser toutes les ressources de calcul disponibles (CPU et/ou GPU) à la fois.

Plusieurs groupes de recherche du CEA ont acquis une réputation internationale pour l'adoption réussie des technologies GPU dans leur code de calcul ; citons notamment l'équipe de Thierry DEUTSCH (CEA/DRF/INAC) pour le code BigDFT de simulation de structures électroniques.

La Maison de la simulation a été reconnue comme « *CUDA Research and Training Center* » par NVIDIA en 2012 et organise depuis lors des formations sur la programmation des GPU dans le cadre européen du PATC (*PRACE Advanced Training Center*). Elle porte également le développement du code RamsesGPU, pour la simulation d'écoulement fluide en astrophysique sur grille régulière.

La hiérarchie mémoire

La limitation d'accès à la mémoire est souvent appelée le « goulot de von Neumann », et diverses solutions ont été développées pour y remédier. L'importance de ce problème s'est accrue car les unités de calculs sont devenues de plus en plus rapides et nombreuses, sans que les temps d'accès de la mémoire se réduisent dans la même proportion. En fait, la majorité des architectures actuelles suivent plutôt le modèle d'architecture dit « de Harvard modifié » : le processeur accède simultanément à deux (ou plus) interfaces avec la mémoire, par exemple une interface pour récupérer les instructions et une autre pour les échanges de données avec la mémoire centrale (et, par exemple, encore une autre pour les entrées-sorties). Ces interfaces sont connectées à de petites mémoires, appelées « **caches*** » (d'instruction, de donnée) qui obéissent cependant à un modèle mémoire commun. Ces mémoires doivent être très rapides car elles servent de tampon avec la mémoire centrale de plus grande taille mais plus lente. Les mémoires rapides ont le désavantage d'être grosses en taille physique (et donc coûteuses) car elles utilisent plus de transistors par unité de mémorisation que la mémoire centrale et consomment plus d'énergie. Ces mémoires caches jouent sur la localisation des données (et des instructions) : si une donnée est utilisée, il y a de grandes chances que des données à des adresses voisines le soient aussi. Donc ces mémoires chargent automatiquement non pas une donnée unique, mais un bloc de données contigües à la donnée demandée. Ce processus de chargement s'effectue en parallèle avec le fonctionnement du processeur. Le processeur de son côté utilise les données voisines en les lisant dans ce cache, qui a un temps d'accès plus rapide que la grande mémoire centrale. Si la donnée demandée par le processeur n'est pas dans ce cache, alors il doit attendre que la donnée désirée (et son environnement) soient rapatriés dans le cache. Nous voyons donc que ce mécanisme est efficace s'il y a une forte localité dans les données, ce qui a des implications dans les algorithmes et la programmation. Une architecture moderne peut avoir jusqu'à trois niveaux de caches de plus en plus gros au fur et à mesure que l'on « s'éloigne » du processeur. Pour diminuer les coûts de communication, ces caches sont sur la même puce que le processeur.

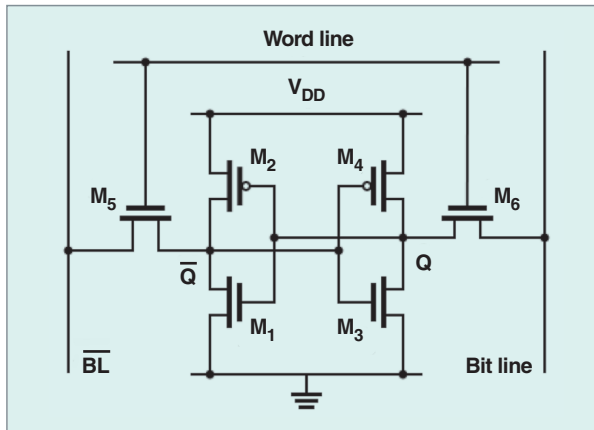


Fig. 20. Une cellule de mémoire statique (SRAM : *Static Random Access Memory*) stockant un bit. Il faut noter la complexité du circuit expliquant pourquoi ce type de mémoire est toujours de faible capacité.

Les mémoires rapides statiques (mémoires **SRAM***, voir la figure 20, quelques nanosecondes par opération) demandent environ six transistors. Ces mémoires conservent les données écrites tant qu'elles sont alimentées. Leur consommation doit être la plus faible possible en dehors des phases de lecture ou d'écriture. Elles sont utilisées dans les registres internes des processeurs, et dans les mémoires cache à cause de leur rapidité.

Les mémoires dynamiques (fig. 21) sont plus denses que les mémoires statiques (un transistor en moyenne par point mémoire), mais perdent leur contenu au bout de quelque temps : en effet, la mémorisation se fait à partir d'une charge électrique stockée dans un condensateur. À cause des courants de fuite, ce condensateur se décharge progressivement et l'information se perd petit à petit. Pour éviter cela, il faut les rafraîchir (c'est-à-dire lire et réécrire le contenu) de façon régulière, typiquement toutes les 64 ms. La bande passante des mémoires a fortement augmenté au cours du temps : les DDR SDRAM (*Double Data Rate Synchronous Dynamic RAM*) utilisent la fréquence d'horloge du système de communication, mais doublent leur bande passante de communication en transférant des données sur les deux

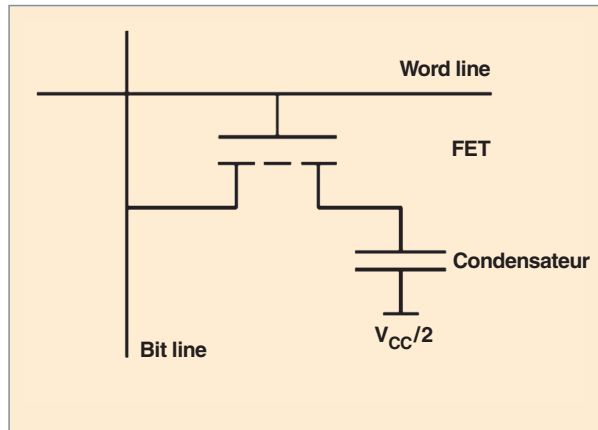


Fig. 21. Une cellule de mémoire dynamique (DRAM : *Dynamic Random Access Memory*) stockant un bit. L'aspect dynamique est dû au condensateur qu'il faut rafraîchir régulièrement. La simplicité de ce circuit permet d'envisager de très grandes capacités de stockage.

fronts (montée et descente) de l'horloge du système. Les **DDR*** lisent ou écrivent 64 bits (8 octets) à la fois. Une mémoire DDR transmet donc 16 octets à chaque cycle d'horloge, et ainsi une mémoire DDR fonctionnant à 300 MHz possède une bande passante par canal de 4,8 Go/s. Les mémoires DDR ont été suivies par les DDR2, DDR3, DDR4 qui chacune double la bande passante par rapport à la génération précédente. Les mémoires DDR4 fonctionnent à une tension de 1,2 V avec une fréquence 800 et 1 600 MHz pour une capacité allant jusqu'à 512 Go en module (DIMMs). D'autres types de mémoires, utilisant un empilement 3D et un protocole série commencent à s'imposer dans des solutions haut de gamme, comme les mémoires HMC (*Hybrid Memory Cube*) ou HBM (*High Bandwidth Memory*). La bande passante typique brute d'une mémoire HMC avec 16 canaux de liens à 10 Gbit/s est de 40 Go/s (20 Go/s en transmission et 20 Go/s en réception). Le tableau 2 donne un aperçu des ressources matérielles nécessaires pour offrir une bande passante de 60 Gb/s .

D'autres types de mémoires sont annoncés, alliant des caractéristiques de non-volatilité (l'information reste lorsqu'on coupe l'alimentation) avec des vitesses compatibles avec les mémoires dynamiques. Par exemple, Micron et Intel ont développé les mémoires 3D Xpoint, qui présentent des latences comparables aux mémoires DRAM, tout en étant plus denses et non volatiles. Ce type de mémoire pourrait remplacer les mémoires flash, qui servent actuellement essentiellement dans les **SSD*** (*Solid-State Disks*), les disques à mémoire semi-conducteur.

Les unités de stockage permanent

Pour la mémorisation à long terme des données, on utilise soit des méthodes de mémorisation magnétique (disques durs, bandes magnétiques) ou de la mémoire **flash***. Ces dispositifs ont l'avantage de ne pas perdre leurs informations

Tableau 2.

Ressources matérielles utilisées par le sous-système mémoire			
	DDR3	DDR4	HMC
Pin Counts (Power and ground not included)	715	592	70
Board Area	8,250 mm ²	6,600 mm ²	378 mm ²
Power	64 pJ/bit	51 pJ/bit	16 pJ/bit
Bandwidth	18 MB/pin	29 MB/pin	857 MB/pin

(Source : Micron)

Tableau 3.

Quelques exemples de configuration RAID utilisables. Le RAID 5 est le plus utilisés dans les grands centres de calcul		
Niveau de RAID	Nombre de disques	Fonction
0	$N \geq 2$	Augmente le débit par entrelacement des données sur les disques.
1	$N \geq 2$	Disques en miroir : les données sont écrites sur les N disques en même temps permettant de sécuriser les données en cas de perte de l'un des disques.
5	$N \geq 2$ N vaut classiquement 10	Utilise l'entrelacement du RAID 1 en répartissant une information de parité sur les N disques offrant de ce fait sécurité et performance.

lorsque l'alimentation est coupée, mais offrent des temps d'accès très longs (de l'ordre de la *ms* pour le stockage magnétique, la vitesse effective étant surtout une fonction du type d'interface utilisée) par rapport aux mémoires même dynamiques. Ces divers supports sont qualifiés de mémoire de masse car ils offrent des capacités de stockage souvent très supérieures aux tailles des mémoires vives. Un centre de calcul récent offrira des capacités de stockage supérieures de 1 à 100 Po voire de l'exaoctet.

Les supports les plus anciens sont les bandes magnétiques et les disques durs « rotatifs¹⁹ ».

- Les dernières technologies de bandes permettent de stocker de l'ordre de 16 To. Ce sont maintenant des robots qui manipulent automatiquement les bandes (qui se présentent sous forme de cartouches) ;
- les disques durs de dernière génération permettent de conserver environ 14 To. Une nouvelle offre s'implante doucement dans les centres de calculs : l'utilisation des SSD qui offrent des performances énergétiques et d'entrées-sorties supérieures aux disques durs classiques pour un prix plus élevé et avec des capacités de stockage moindres. À terme, les disques durs haut de gamme devraient disparaître au profit des **SSD*** dont les capacités et les performances croissent d'année en année.

Les solutions de stockage permanent sont relativement fragiles, notamment à cause des éléments mécaniques que contiennent ces dispositifs. Des solutions de fiabilisations (voir l'encadré sur la tolérance aux pannes, *infra*, p. 35) et/ou d'amélioration des performances sont mises en œuvre en utilisant la multiplication d'unités de stockage. On parle de **RAID*** pour les disques ou de **RAIT** pour les bandes. Le tableau 3 donne un aperçu des diverses configurations RAID possibles.

19. Un disque « rotatif » est un disque composé d'un ou plusieurs plateaux sur lesquels sont déposés un substrat magnétique qui conservera l'information. Ces plateaux tournent à des vitesses allant de 5 400 tr/mn à 10 000 tr/mn, d'où leur nom. La mécanique nécessaire à la rotation du disque est un point de faiblesse reconnu de ce système de stockage.

Notons que l'accroissement des volumes des disques impacte fortement les temps de reconstructions des solutions RAID du tableau précédant, en cas de perte d'un ou plusieurs disques. Des généralisations des architectures RAID se développent pour contourner ce problème. Il s'agit notamment de « l'*erasure coding* »²⁰ qui à n disques associe p disques de parités permettant la perte de p disques sur l'ensemble $n+p$. Une solution $n=8, p=2$ est d'ores et déjà en production sur la machine Tera 100 du CEA/DAM.

Les diverses solutions de stockage existantes permettent d'offrir aux utilisateurs plusieurs espaces d'écriture des données répondant à des besoins différents. Classiquement ces niveaux s'enchaînent sous forme hiérarchique :

- **Le stockage rapide** : C'est souvent l'espace de travail privilégié pour manipuler efficacement des données temporaires (premier niveau) dites « vivantes ». La vitesse est le facteur primordial. Ce sera le domaine privilégié des SSD. Pour conserver des données entre deux calculs, il faudra utiliser le niveau suivant ;
- **Le stockage capacitif** : dans ce niveau de stockage, le volume est souvent privilégié par rapport à la performance. Là, les utilisateurs pourront stocker des volumes importants qui resteront quand même accessibles dans des temps raisonnables. C'est un stockage de proximité qui restera le domaine des disques durs. Néanmoins, cet espace n'étant pas infini, il est nécessaire de mettre en place des solutions de gestion de débordement vers le dernier niveau comme cela sera développé dans la section relative au cycle de vie de la donnée (*infra*, p. 51) ;
- **Le stockage à long terme** : à ce dernier niveau (le plus souvent mis en œuvre par des bandes) sont archivés les résultats dont l'utilisateur n'a pas besoin immédiatement (dites « archives froides ») et pour lesquels il accepte un temps de récupération plus important. Les données peuvent

20. En théorie de l'information, un code d'effacement (*erasure code*) est un code de correction d'erreur (*forward error correction* ou FEC) qui transforme un message de k symboles en un message plus long à n symboles, de telle manière qu'en cas de corruption le message original puisse être récupéré à partir d'un sous-ensemble du message reçu.

être dormantes pendant des mois, voire des années sur les bandes.

Les disques sont le plus souvent séparés des supercalculateurs. On parle alors d'un serveur de stockage réseau (« NAS » en anglais) qui est lié au calculateur par un/son réseau d'interconnexion rapide. Dans une telle situation, les débits d'entrées-sorties utilisables sont très supérieurs à ce qu'une unité disque classique peut offrir car reposant sur le parallélisme des liens de communication.

Les nœuds de calcul

La brique de base composant un supercalculateur est appelée un nœud de calcul. Ce nœud rassemble les éléments décrits plus haut au sein d'une tour de type station de travail ou lame (« *blade* » en anglais) pour une intégration plus compacte pour les machines de très grande taille (fig. 22). Les divers composants (processeurs, mémoire...) sont assemblés sur une carte mère qui sert à la fois au support des composants et à la transmission des signaux électriques entre les composants (un **PCB***). La qualité de conception d'une carte mère impacte les performances de la machine (durée de vie, vitesse de calcul²¹, capacité de suivi de fonctionnement [« monitoring »]...). La carte mère peut héberger un ou plusieurs processeurs. L'usage est de compter en « socket »²². Une carte mère pour le HPC est souvent de type bi-socket (deux processeurs) ou quadri-socket comme illustré sur la figure 23. Sur un nœud

21. Sur une lame de Tera1000, l'équipe système du CEA a mesuré que la carte mère conçue par BULL était 13 % plus rapide qu'une carte équivalente du commerce, démontrant l'importance de ce savoir-faire de conception de circuit.

22. Un socket est un support matériel permettant d'enficher un processeur sur une carte mère.

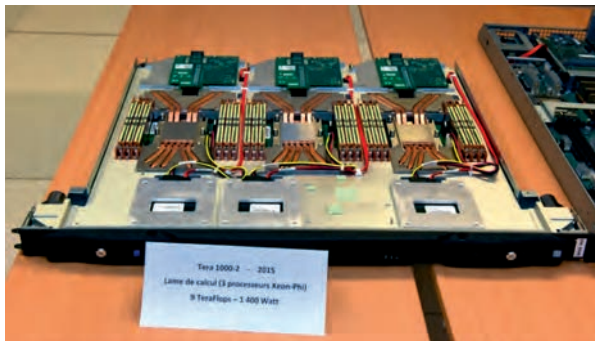


Fig. 22. Une lame de calcul de Tera1000. La dénomination « lame » est due à la forme en lame de hachoir de l'ensemble des éléments de structuration du nœud.

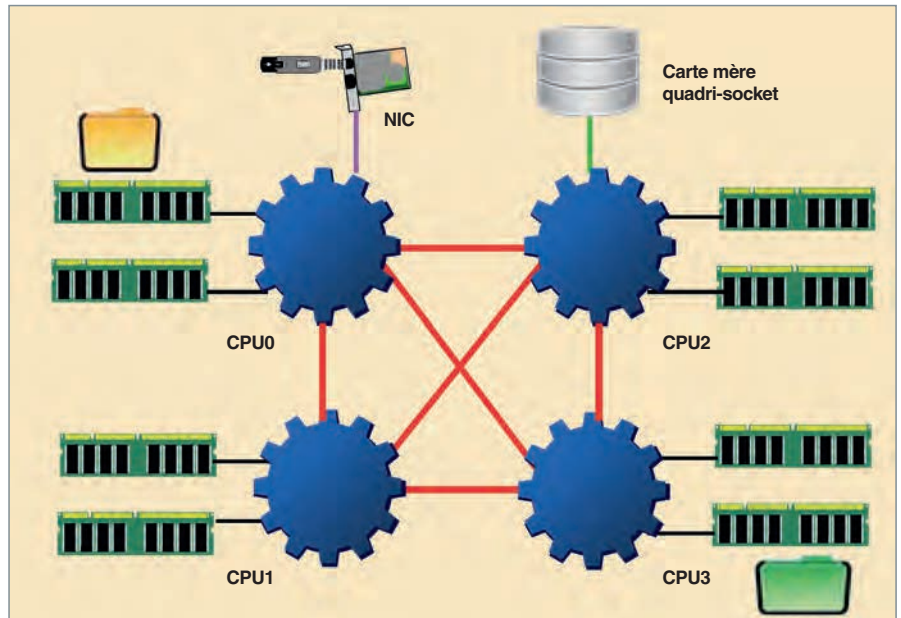


Fig. 23. Schéma de principe d'une carte mère quadri-socket. Les liens rouges sont des connexions ultra rapides entre les processeurs, les liens noirs les connexions des processeurs à leurs mémoires (de type DDR4). Les liens verts et violets représentent les liens de la machine vers le monde extérieur : en violet vers un autre nœud de calcul, en vert vers les unités de stockage.

s'exécute une instance du système d'exploitation (Linux dans le monde HPC).

Le cas des quadri-sockets (et dans une moindre mesure des bi-sockets) est intéressant car il fait apparaître la notion de nœud **NUMA*** ayant un impact certain sur la performance des codes. Cette architecture de nœud fait apparaître des temps d'accès non uniformes à la mémoire. En utilisant les éléments de la figure 23 on voit que le CPU0 accèdera plus rapidement aux données symbolisées par le dossier jaune qu'à celles du dossier vert. En effet, le CPU0 devra propager sa requête mémoire au travers du CPU3, introduisant de ce fait une latence supplémentaire (facteur 2, en moyenne) pour accéder à l'information. Les codes sensibles à la latence mémoire seront fortement pénalisés s'ils ne font pas attention à la localisation physique de leurs données allouées en mémoire.

La communication avec l'extérieur du couple processeur-mémoire est aussi importante pour l'échange des données. La communication entre le processeur et la mémoire est assurée par un ensemble appelé « pont nord » (*northbridge*), alors que la communication avec les périphériques est faite par le pont sud (*southbridge*, lui-même relié au *northbridge*). Les cartes d'interface (réseau, disques) étaient connectées par un bus d'interface PCI (*Peripheral Component Interconnect*) qui a évolué en **PCI*** Express (qui est souvent relié au *nothbridge* du système). Le PCI Express utilise une

interface à base de lignes bidirectionnelles pouvant atteindre un débit directionnel à 500 Mo/s (génération 2.0) ou 1 Go/s (génération 3.0) avec une fréquence de 8 GHz.

Dans un superordinateur, les interconnexions peuvent aussi être faites en optique, principalement entre les cartes de calculs et atteindre des débits de plusieurs Gb/s. Les lames peuvent aussi être connectées par des interfaces Ethernet, qui peuvent atteindre aussi des vitesses de plusieurs Gb/s. Des liens de communication rapides comme l'*Infiniband*, qui utilisent de la commutation de circuit, sont aussi utilisés pour les interconnexions des super-ordinateurs. Les cartes interface réseau (« **NIC*** » en anglais) sont des composants de plus en plus importants dans les nouvelles générations de supercalculateurs, car ils sont un élément différenciant entre constructeurs (débit réel, latence constatée, types d'opération de communication supportés par le matériel...) voire stratégique d'indépendance nationale face à une source externe non maîtrisée. La tendance de fond est de voir ces interfaces réseau se fondre dans les processeurs : on parlera alors de « *System-On-Chip* » (SOC²³).

La majorité des nœuds d'une machine sont conçus pour le calcul. Néanmoins, il est souvent intéressant d'avoir des configurations de nœuds qui soient adaptées à d'autres fonctions particulières. Par exemple, des nœuds peuvent être spécialisés pour la visualisation des résultats. Dans ce cas, on ajoutera une ou plusieurs cartes graphiques pour accélérer les opérations de rendu et on augmentera significativement la taille mémoire pour permettre de traiter les données intermédiaires nécessaires aux bibliothèques graphiques. D'autres nœuds seront spécialisés pour les sessions interactives ou pour toute autre tâche spécifique. Dans le cas de (très) grands systèmes, on s'attachera à minimiser la variété des types de nœuds pour faciliter l'administration de la machine.

Les systèmes de calcul

Si l'on n'utilise qu'un seul nœud de calcul, il est aisé de voir que la puissance de cette (petite) machine n'est pas à la hauteur des attentes des utilisateurs (un bi-socket Haswell fera dans les 600 GFlops). Pour accéder à de plus grandes puissances de calcul, la solution retenue depuis près de deux décennies est de réaliser des grappes denses (« *clusters* » en anglais) de machines (fig. 24) reliées entre elles par des réseaux performants (dans le cas du HPC de l'*Infiniband* par exemple). Pour une utilisation de type Grille (voir encadré *La grille de calcul*, p. 37), Nuage (« *Cloud* ») ou analyse de grosse masse de données (big data) des réseaux moins performants (Gigabit Ethernet) suffisent en général. Pour gagner de la place, les supercalculateurs ne sont pas un empilement de stations de travail (on parle, dans

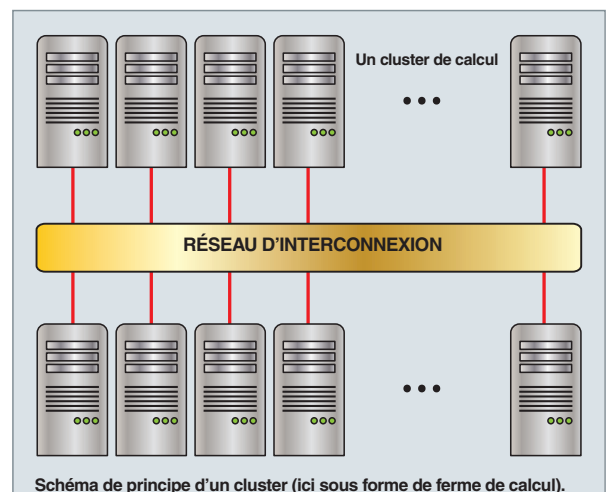


Schéma de principe d'un cluster (ici sous forme de ferme de calcul).



Photographie d'une baie d'un supercalculateur. On y discerne clairement les différentes lames (ici, au nombre de 18).

Fig. 24. Un cluster de calcul est une agrégation de machines (nœuds) reliées entre elles par un réseau rapide. La performance de la machine ainsi créée est fonction du nombre de nœuds agrégés, de la performance unitaire de chacun, mais aussi des performances et de la topologie du réseau d'interconnexion.

ce cas, de « ferme de calcul ») mais plutôt un ensemble de baies (« *racks* » en anglais) contenant plusieurs dizaines de nœuds de calcul. La densité de la machine introduit de nombreuses complexités qu'il faut prendre en compte dès la phase de conception : emplacement et nature des alimentations, type de refroidissement, nombre de périphériques possibles, moyens de surveillance du matériel, nature des connexions entre les nœuds d'une baie, position des **switchs***, etc.

La figure 25 illustre deux topologies possibles pour le réseau. Chaque trait reliant une bulle numérotée est un câble physique qui peut être soit en cuivre (pas cher, mais utilisable seulement sur de courtes distances [1,5 m maximum à 100 Gbit/s]) soit être une fibre optique (chère, mais ouvrant l'accès à de longues distances). Il est possible de

23. SOC : système complètement intégré sur la puce.

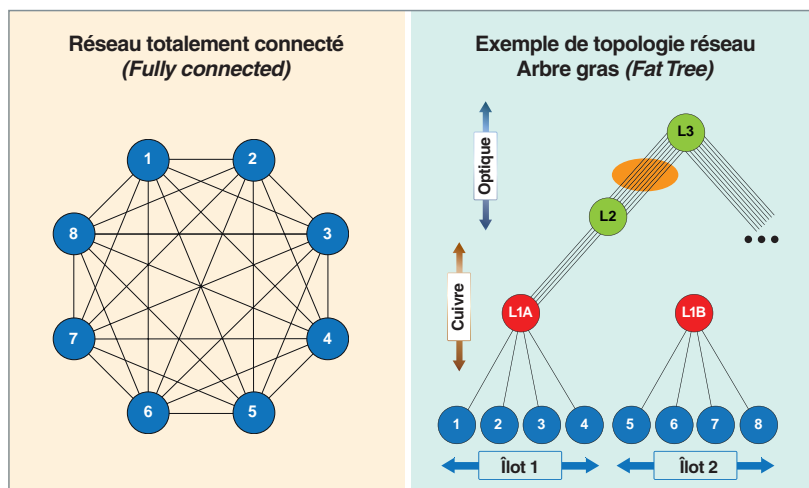


Fig. 25. Différentes topologies réseau. Les bulles bleues sont des nœuds de calcul. Les bulles rouges et vertes sont des commutateurs réseau (« switch* ») permettant de relier les différents nœuds entre eux. Le cercle orange indique où peut se faire un élagage pour économiser sur le nombre de câbles, au détriment de la performance.

réduire les coûts en modifiant la topologie pour réduire le nombre de câbles : au lieu d'un « arbre gras » complet tel que dessiné, on peut l'élaguer (« *pruned fat tree* ») en divisant par N le nombre de câbles présents dans le cercle rouge en pointillé. Pour la machine Tera 100 du CEA/DAM, N vaut 6. Cette réduction du nombre de liens impacte les

débits constatés entre îlots éloignés (passage par les switches de niveau 3). Le gestionnaire d'allocation des ressources pour un calcul prendra souvent en compte cette contrainte pour faire en sorte qu'une simulation de taille moyenne soit affectée à des îlots proches.

Les grands clusters de calcul produisent des masses de données : le système de calcul s'accompagne donc d'un système de stockage dont le dimensionnement est une étape cruciale dans la conception d'une architecture de calcul. Le système de stockage est relié au cluster de calcul par un réseau rapide afin d'évacuer les données le plus rapidement possible (fig. 26). À l'instar de ce qu'il se passe à l'intérieur d'un nœud, une hiérarchie de moyens de stockage est mise en œuvre, telle que décrite *supra*, p. 29).

Un supercalculateur mettra en œuvre plusieurs milliers de nœuds, introduisant des besoins et contraintes spécifiques à cette taille de machine. Outre la nécessaire présence d'administrateurs système experts, il faut disposer d'outils spécifiques de gestion des ressources qui devront être allouées aux travaux, et d'autres destinés à l'administration de la machine (déploiement du système d'exploitation, surveillance et réparation des nœuds à problème, système de fichiers parallèles ultra performants pour évacuer le plus rapidement possible les données produites...). Ces outils peuvent exister commercialement, mais les versions open source sont souvent préférables pour une maîtrise complète des fonctionnalités et une adaptation optimale à l'application envisagée.

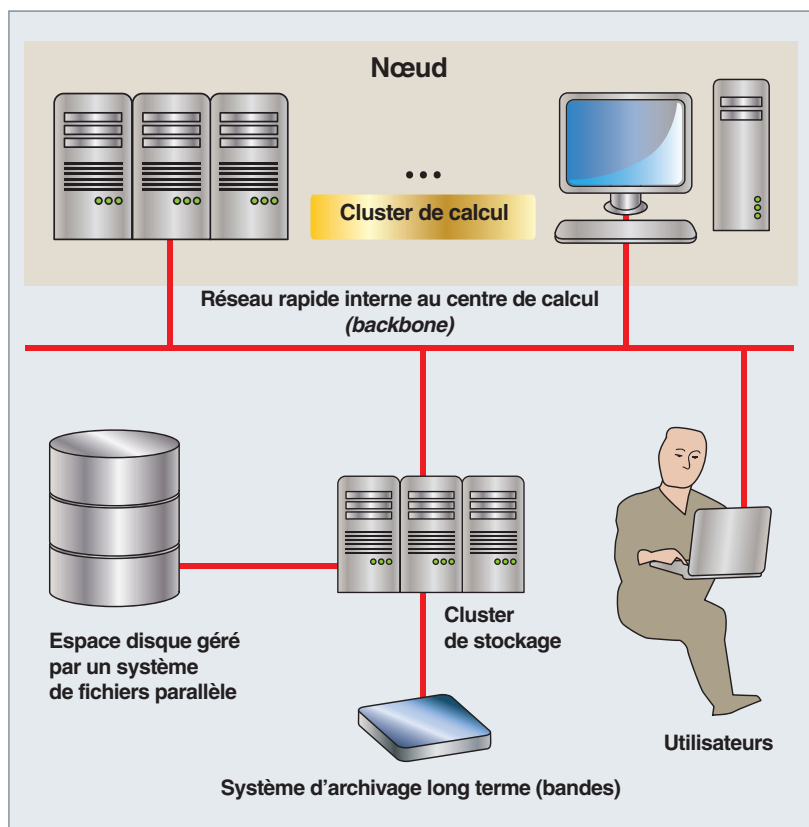


Fig. 26. Vision d'un centre de calcul centrée sur les données.

Ces supercalculateurs sont rarement disponibles sur catalogue. Dans le cas de besoins extrêmes, tels que la mise en service d'une machine exaflopique à l'horizon 2023, il est nécessaire de concevoir les nouvelles machines en collaboration étroite avec les fournisseurs et intégrateurs de solutions informatiques. Cette démarche a été retenue pour la conception de Tera 1000.

L'augmentation du nombre de composants dans les machines de calcul ne va pas sans inconvénient. Chaque composant est susceptible de tomber en panne et si la fiabilité des transistors actuels est sans commune mesure avec celle des lampes utilisées dans les premiers calculateurs des années 50, leur accumulation rend la probabilité d'une panne sur l'un des composants de l'ensemble d'une machine non négligeable. Plusieurs types de pannes peuvent avoir lieu et nous pouvons distinguer deux classes : les pannes franches (ou *crash*) qui interrompent le traitement de données et les autres, dites pannes « byzantines » qui peuvent produire des résultats faux sans interrompre le calcul. Un exemple de *crash* peut être dû à un processeur qui surchauffe et qui éteint le nœud par sécurité, alors qu'une faute byzantine pourrait être due à un rayon cosmique qui frappe la **RAM*** et y change la valeur d'un bit. On estime aujourd'hui que sur les grands calculateurs, le temps moyen entre deux fautes est de l'ordre de quelques heures à quelques jours. Dans ces conditions, il serait impossible d'exécuter entièrement un calcul dont la durée peut atteindre plusieurs semaines sans stratégie pour tolérer ces pannes et éviter qu'elles mènent à une erreur. Ces solutions peuvent être soit matérielles, soit logicielles.

Une première catégorie de solutions concerne le stockage et s'appuie sur des stratégies de répliquations. Chaque donnée est stockée plusieurs fois pour que la perte d'un réplicat puisse être compensée. Une application naïve de cette stratégie nécessite de doubler l'espace de stockage pour détecter une corruption de données (transformer une erreur byzantine en erreur franche), lorsque deux réplicats ne correspondent pas, et de le tripler pour pouvoir corriger la corruption *via* un processus de vote entre trois réplicats. Des codes de détection et correction d'erreur plus avancés comme, par exemple, les codes de redondances cycliques (CRC) réduisent le surcoût de stockage par rapport à cette stratégie naïve. Ils consistent à ajouter m éléments de contrôle à chaque bloc de n éléments de données et permettent de détecter un nombre d'erreurs pouvant aller jusqu'à m éléments parmi les $m+n$ et à en corriger un nombre plus faible variable suivant l'algorithme choisi. Cette stratégie est utilisée pour le stockage sur disque *via* la technologie **RAID*** (*Redundant Array of Inexpensive Disks*) et pour le stockage en mémoire *via* la technologie ECC (*Error-Correcting Code*). Par exemple, les mémoires ECC stockent typiquement 8 bits de données sur 10 bits physiques et permettent de corriger automatiquement les corruptions d'un bit et de détecter les corruptions simultanées de deux bits.

Au niveau du logiciel, les efforts se sont pour l'instant essentiellement portés sur la tolérance des fautes franches d'un ou plusieurs nœuds. L'approche classique consiste à stocker régulièrement l'état complet de la simulation (point de reprise) sur un stockage considéré comme pérenne, le système de fichier parallèle porté par des disques protégés par RAID et

sauvegardés sur bande. Dans le cas d'un *crash*, la simulation peut être reprise depuis la dernière sauvegarde et il n'est pas nécessaire de relancer l'exécution depuis le début. Avec une fréquence d'écriture des points de reprise suffisante par rapport à celle des fautes, la simulation est assurée de progresser. Il faut cependant noter que la taille des machines et donc de la mémoire globale tend à croître plus vite que le débit des systèmes de fichiers parallèles. L'écriture des points de reprise peut devenir coûteuse en temps. Par exemple sur la machine CURIE ayant une mémoire globale de plus de 300 To de mémoire et un débit atteignable vers le système de fichier parallèle inférieur à 100 Go/s, il faudrait compter plus de 50 minutes pour écrire sur disque l'intégralité de l'état de la mémoire. De plus, pour pouvoir reprendre le calcul, il est nécessaire qu'un état complet et cohérent puisse être stocké en évitant par exemple de stocker l'état d'un processus ayant envoyé un message et d'un autre n'ayant pas encore reçu ce même message et en incluant toutes les mémoires annexes comme, par exemple, celles des accélérateurs de type GPU. Ces deux raisons font que les stratégies de point de reprises gérés par le système qui ont l'avantage d'être complètement transparentes pour les développeurs de codes ont disparu au profit de stratégies de points de reprises gérés par les utilisateurs. Ceux-ci sont alors responsables d'identifier le sous-ensemble de la mémoire nécessaire à la reprise, quitte à recalculer certaines données dérivées si nécessaire ainsi que de choisir des instants dans le code où l'ensemble des processus est dans un état cohérent. D'autres approches qui reposent sur la réplication complète des processus de calcul ont été étudiées historiquement mais n'ont jamais réellement percé en raison de leur faible intérêt face à leur coût.

Dans ce contexte, il existe de nombreux axes de recherche pour continuer à améliorer la tolérance aux pannes. Parmi ceux-ci, nous pouvons, par exemple, en citer trois. Un premier fait suite au constat que les mémoires cache et les registres des processeurs qui ne sont pas protégés par le mécanisme ECC pour des raisons de coûts croissent en taille et risquent d'être à leur tour sujet à la corruption de donnée. Des travaux proposent d'intégrer aux codes des détecteurs logiciels permettant d'identifier les valeurs suspectes au sein des données et de les recalculer, typiquement depuis le dernier point de reprise, en parallèle de la simulation qui continue à avancer. Si la valeur ainsi recalculée diffère, le calcul complet est redémarré depuis le point de reprise. Un autre axe propose d'analyser les signes avant-coureurs de fautes fournis par les nombreux capteurs présents sur les composants des machines pour adapter la fréquence d'écriture des points de reprise au risque de panne. Un dernier axe propose de rendre les algorithmes eux-mêmes tolérants à la perte d'une partie de l'information en rendant alors un service dégradé, telle qu'une convergence plus lente vers la solution, mais en assurant que le résultat reste correct.

Les centres de calcul

De par sa taille, un supercalculateur (et son système de stockage) ne rentrera pas sous un bureau. Toute une infrastructure est nécessaire pour l'accueillir et le faire fonctionner. Un bâtiment (ou une partie de bâtiment) va héberger des salles machines (calculateur, stockage, réseaux) spécialement conçues pour supporter le poids des différentes baies de calcul et pour délivrer le froid utile au refroidissement des équipements (climatisation à des valeurs précises de température et d'hygrométrie, eau chaude ou froide) comme illustré sur la photo en bas à droite de la figure 27. Des équipes de spécialistes conçoivent et exploitent ces salles pour maximiser l'efficacité énergétique de l'ensemble, en suivant un ensemble de bonnes pratiques²⁴.

24. À ce titre, la démarche du CEA/DIF a été reconnue par la Commission Européenne qui lui a décerné le statut de membre participant au « *Code of Conduct for Data Centers* », une distinction importante reconnaissant les efforts d'un centre de calcul en matière de respect de l'environnement.

Des spécialistes sont nécessaires pour la conduite de la machine, que ce soit pour les opérations de surveillance des travaux soumis, et le bon fonctionnement de la machine principale ou de ses éléments périphériques tels que le stockage et les réseaux. Ils prennent aussi en charge sa mise à jour (évolutions naturelles des systèmes d'exploitation ou modifications urgentes pour des contraintes de sécurité).

L'intergiciel ou middleware

Si à l'origine les programmes étaient codés au plus près du matériel (en assembleur), il est très vite apparu qu'un ensemble d'outils était requis pour développer confortablement et efficacement des logiciels. Le système d'exploitation donnant une vue plus abstraite de la machine, les bibliothèques d'aide au calcul ou les langages de programmation et leurs supports d'exécution ou « exécutifs » associés sont souvent regroupés sous le vocable d'intergiciels (ou **middleware*** en anglais).



Les postes haute-tension transformant le courant « secteur » en courant utilisable par la machine.



Tours aéroréfrigérantes servant à évacuer la chaleur du calculateur. Plusieurs équipements de ce type sont indispensables pour évacuer plusieurs mégawatts.



Générateurs d'eau glacée servant au refroidissement des nœuds de calcul.



Arrivées d'eau servant au refroidissement des nœuds de calcul, ici dans une salle machine en cours de réalisation. Le plancher final sera à la hauteur de séparation entre partie noire et partie blanche du mur du fond.

Fig. 27. Photographies de quelques-uns des éléments indispensables au fonctionnement d'un supercalculateur. Ce sont les servitudes du centre de calcul.

La grille de calcul

Le CEA s'est engagé depuis plus de vingt ans dans la conception et la construction du collisionneur LHC au CERN (quadrupôles) et de trois de ses quatre détecteurs (ALICE, ATLAS et CMS). Les objectifs scientifiques sont la recherche du boson de Higgs et de nouvelle physique au-delà du modèle standard. L'IRFU doit contribuer au traitement des données (~15 PB/an) afin de garantir aux chercheurs l'accès aux informations permettant de réaliser les analyses de physique.

Le CERN (Tier0) et les expériences LHC ont mis en place un schéma (voir fig. 28) de traitement distribué des données en s'appuyant sur les grands centres nationaux (Tier1) existants en physique des hautes énergies qui sont chargés de péren-

niser et reconstruire les données brutes. Le schéma est complété par la création de centres Tier2, localisés dans les laboratoires, dont le rôle est de simuler et d'analyser les données. Le Tier0 et les 14 centres Tier1 sont interconnectés par un réseau privé LHCOPN. Les centres Tier2 (~200) sont connectés aux autres centres par les réseaux de recherche (DANTE, GEANT, RENATER) et plus récemment pour les plus gros d'entre eux par le réseau LHCONE. L'inhomogénéité des infrastructures de calcul est gommée par des intergiciels ou middleware (UMD, OSG...) développés et maintenus par la communauté LCG.

Afin de préparer au mieux le traitement et l'analyse des données, le CEA s'est engagé, en 2003 au côté de l'IN2P3 dans

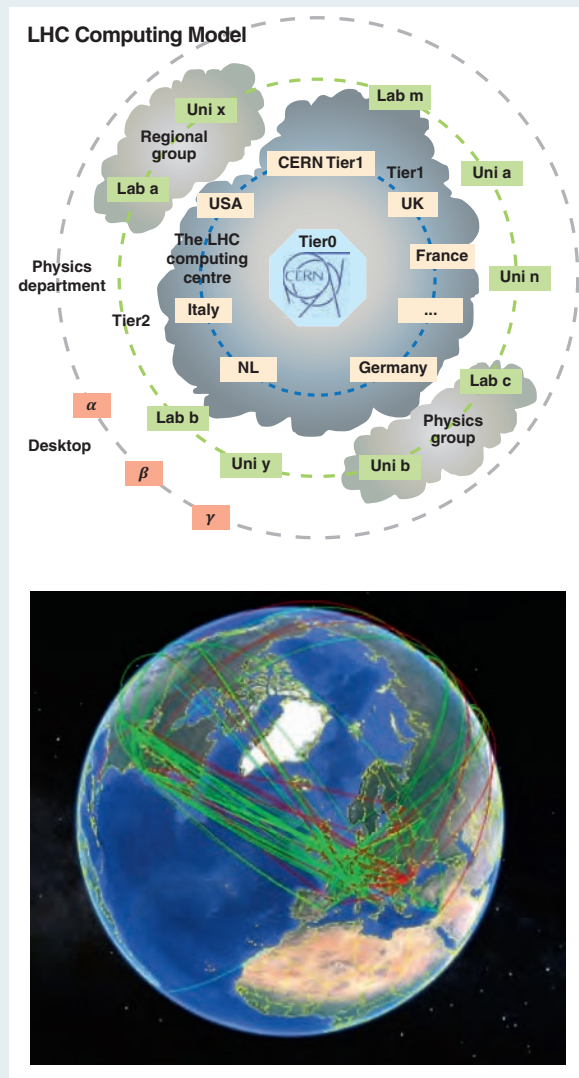


Fig. 28. Le modèle (en haut) de calcul des données du LHC. En bas, une vue instantanée de la grille en action (le 28 novembre 2013) avec 214 268 tâches en machine et un flux de données échangées de 42,74 GiB/s.

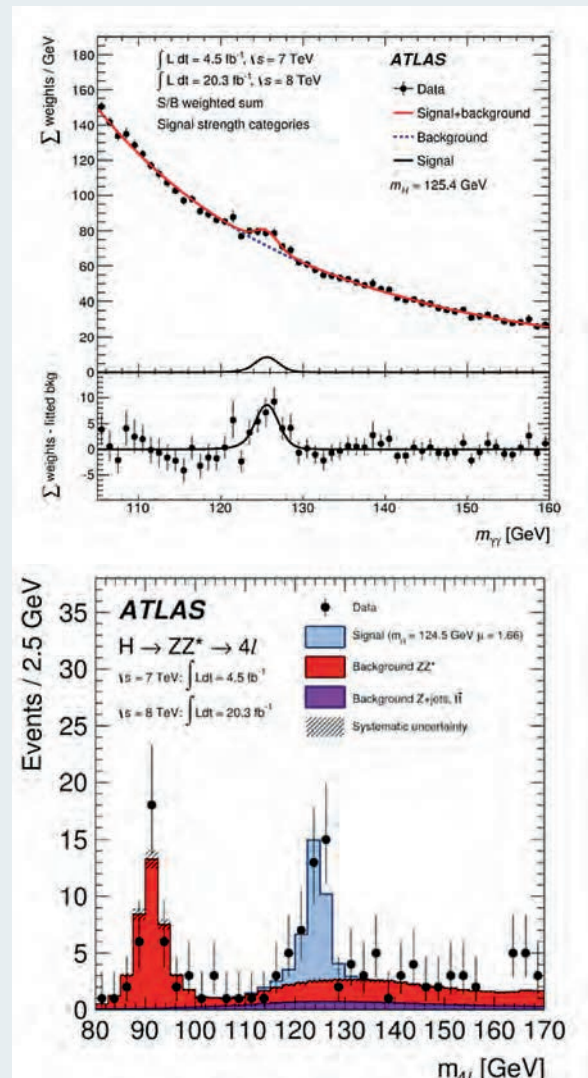


Fig. 29. Observation du boson de Higgs dans le détecteur ATLAS dans les canaux de désintégration Higgs en deux photons (en haut) et Higgs en 4 leptons (en bas).

La grille de calcul

la réalisation d'un Tier1 commun au CCIN2P3 et en 2005 dans GRIF, un Tier2 distribué en région Ile de France. Grâce à cette infrastructure, les données à analyser sont accessibles aux physiciens de l'IRFU en moins de 4h après la prise de données au CERN. La majorité des tâches (grandes campagnes de simulation et de reconstruction) sont pilotées centralement par les expériences. L'observation de nouveaux phénomènes de physique et leur interprétation statistique nécessitent de confronter signaux et bruits de fond observés à ceux attendus par la simulation. C'est ainsi qu'en 2012 les expériences ATLAS et CMS ont pu mettre en évidence l'existence d'une nouvelle particule ayant les caractéristiques du boson de Higgs (voir fig. 29). Début 2015, la seconde période de prise donnée du LHC (Run 2) à 13 TeV (contre 8 TeV en 2011 et 2012) a commencé pour une période de trois ans. L'observation plus précise des propriétés du boson de Higgs se poursuit et la recherche de nouvelle physique s'intensifie. Malgré un cadre relativement rigide au point de vue administration système, les grilles de calcul ont démontré leur capacité à effectuer la recherche de signaux extrêmement faibles dans le déluge de données du LHC.

Pour tenter de rendre l'administration des grilles plus souple, l'utilisation d'une infrastructure sous-jacente virtualisée (Cloud) a été testée avec succès pour les tâches de simulation et de reconstruction. Pour les tâches d'analyse, intensives en entrée/sortie, des pertes notables d'efficacité (30 %) ont été observées. Le coût de l'accès aux données reste également un frein à l'usage massif de ces infrastructures.

Avec l'augmentation progressive du nombre de cœurs par CPU, les expériences LHC font actuellement l'effort de réécrire les logiciels afin de les *multi-threader*. Le gain attendu est un meilleur usage de la mémoire des machines.

Le système d'exploitation et les logiciels bas niveau

De la création d'un programme à son exploitation par un utilisateur, un grand nombre d'étapes doivent être parcourues, elles peuvent être résumées dans le schéma de la figure 30.

Dans ce schéma, les étapes sont indiquées dans les cases violettes, les intervenants sont indiqués en noir et les logiciels dans les cases vertes. L'idée initiale d'un programme vient d'un utilisateur ingénieur ou chercheur, le programmeur est responsable de sa transformation dans un langage de programmation. Ces deux premières phases sont réalisées par des humains, les phases suivantes sont réalisées par des logiciels.

Dans le schéma temporel précédent le compilateur est responsable de la transformation du code source vers le code exécutable et de la création des liens vers les bibliothèques nécessaires au programme. Le système d'exploitation est responsable de la gestion des ressources de la machines pendant l'exécution du programme, du démarrage du programme (chargement mémoire) à sa fin (désallocation de ressources), ou durant son exécution avec les allocations de ressources (temps de calcul, mémoire, bande passante réseau, disque, etc.).

Nous trouvons plus souvent une description en couches comme dans la figure 31. Le système d'exploitation étant alors vu comme une virtualisation des périphériques physiques sur lesquelles les applications et les bibliothèques vont s'appuyer. Cette description en couche permet, de la même façon que les couches ISO en réseau, une certaine indépendance entre les couches les plus hautes et les couches physiques.

Nous pouvons parcourir les différentes couches en partant du bas :

- Le **processeur** ou, le plus souvent, un groupe de processeurs sont regroupés sur un circuit électronique. Il existe plusieurs familles de processeurs définis par leur jeu d'instructions (**ISA***), principalement Intel, ARM, MIPS, POWER, SPARC, etc. ;
- pour le **système d'exploitation***, en particulier dans le cadre de machines parallèles permettant d'exécuter des simulations à grande échelle, plusieurs approches sont possibles. Une machine parallèle sera constituée d'un grand nombre de processeurs. Plusieurs situations seront

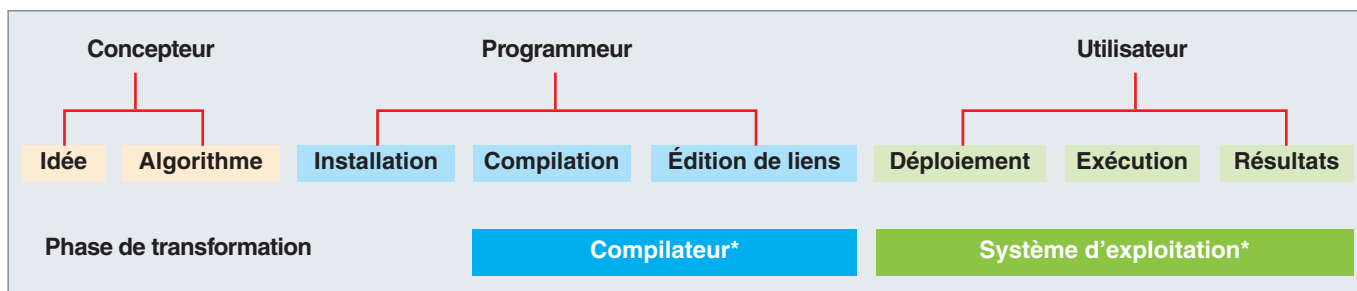


Fig. 30. Évolution d'une application de sa conception à son exécution.

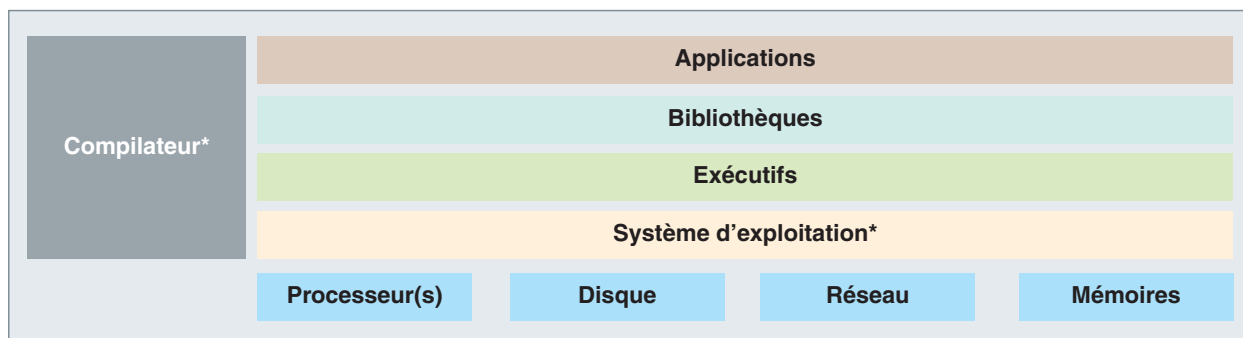


Fig. 31. Niveaux de virtualisation. Du processeur à l'application.

possibles : chaque processeur utilisera une instance d'un système d'exploitation. (système mono-processeur/cœur) ou des groupes de processeurs (des « chiplets ») seront regroupés, et le système d'exploitation sera chargé de répartir les différentes applications sur ces processeurs ;

- les **bibliothèques** et **exécutifs** sont des parties de programmes sur lesquelles un programmeur pourra s'appuyer afin de réaliser son application. Elles sont, en général, fournies par le constructeur de l'ordinateur et reposent sur une interface plus ou moins normalisée, ce qui permet de rendre le programme indépendant d'une plateforme matérielle (processeurs, mémoire, réseau...). Les bibliothèques incluent, entre autres, des fonctions permettant d'effectuer des calculs ou opérations de manière simplifiée et/ou optimisée, tandis que les exécutifs regroupent des fonctionnalités nécessaires pour interagir avec l'environnement système et matériel. Ainsi les supports exécutifs comportent

les implémentations de modèles de programmation parallèles comme MPI ou OpenMP (voir le chapitre suivant, p. 41). Suivant cette nomenclature, un exemple de bibliothèque est BLAS (*Basic Linear Algebra Subprograms*) : la bibliothèque de référence permettant d'effectuer des calculs d'algèbre linéaire (opérations sur vecteur et des matrices) et un exemple d'exécutif est **MPI*** (*Message Passing Interface*) : le modèle de référence pour la communication des données entre différents processeurs ;

- les **applications** sont écrites dans un langage de programmation (C, Fortran, Java, Python, R, etc). Ces langages sont soit compilés (traduits en code machine), soit interprétés. Pour les langages compilés (C, Fortran), le compilateur se chargera de transformer les programmes source en langage exécutable pour le processeur (ISA), pour les langages interprétés, le programme est interprété par une machine virtuelle.

Le logiciel

Introduction

Le deuxième niveau de la poupée russe présentée en introduction est composé de la partie logicielle. Plus exactement de l'architecture logicielle qui va être le squelette de l'application. Cette architecture aura besoin de répondre à différents besoins et s'adapter à différentes contraintes. Tout d'abord, elle devra permettre d'atteindre les objectifs de l'application qui utilisera cette architecture : performances, robustesse, pérennité, portabilité... (voir *infra*, p. 41). Elle devra autoriser l'utilisation d'un ou plusieurs modèles de programmation (voir *infra*, p. 42). Très souvent une application a pour but de modéliser des phénomènes complexes et multiphysiques. Il est donc nécessaire que les applications élémentaires se couplent entre elles afin d'offrir des capacités accrues de modélisation (voir *infra*, p. 46). Tout grand logiciel doit suivre un processus rigoureux de développement, processus décrit *infra*, p. 48.

Au-delà du cycle de vie du logiciel lui-même, une application a besoin de données d'entrées pour réaliser une simulation et produit des résultats, résultats qu'il est ensuite nécessaire d'analyser. C'est le cycle de vie des données abordé dans le paragraphe p. 51 qui donnera des éléments sur la problématique des entrées/sorties dans un contexte d'exécution parallèle et associée aux grandes infrastructures de calcul (voir *infra*, p. 53), mais également de processus d'analyse des données (voir *infra*, p. 55) et enfin au domaine de la visualisation de grandes masses données issues des résultats de simulations (voir *infra*, p. 56).

Le cycle de vie du logiciel

D'un choix de portabilité ou performance vers un concept de portabilité des performances

Le CEA développe pour ses besoins propres ou pour ses partenaires industriels de grands codes de simulation numérique. Que cela soit pour des applications en recherche fondamentale ou appliquée, ces codes de simulation nécessitent la conjonction de multiples talents et compétences : physique/chimie/biologie, mathématiques appliquées, algorithmique, informatique, etc. Ces codes sont donc le fruit de plusieurs années de recherche et sont le réceptacle de ces recherches. Cela a pour conséquence directe que très généralement le cycle de vie de ces logiciels est de l'ordre de la décennie voire de plusieurs décennies. Les problèmes extrême-

mement complexes que l'on cherche à modéliser nécessitent souvent l'utilisation de supercalculateurs et une recherche constante de la performance (en termes de précisions, de robustesse, de temps de retours et d'optimisation des ressources utilisées). Parallèlement, comme nous avons pu le voir, le temps de cycle des architectures de calcul et, dans une moindre mesure, des paradigmes de programmation, sont souvent inférieurs à la décennie. Les ingénieurs/chercheurs du CEA doivent donc concevoir leurs applications logicielles pour concilier ce qui peut paraître difficilement conciliable : disposer d'un code de simulation pérenne et performant, sachant que les temps de cycle de vie du code sont très largement supérieurs à ceux des architectures de calcul utilisées. À titre d'illustration, si l'on compare sur une période d'une trentaine d'années l'évolution du nombre de transistors sur une puce et les évolutions majeures d'un code de calcul dans le domaine de la physique des réacteurs, on passe de 1 000 au milliard de transistors dans le premier cas, et dans le même temps il n'y aura eu « que » deux générations de code sur la même période : premières modélisations mathématiques et résolution numérique des équations du transport et généralisation au 3D.

Ce phénomène générique est encore plus accentué dans le domaine du calcul intensif, où nous nous trouvons en présence de ruptures technologiques majeures régulières depuis une petite dizaine d'années (avènement des processeurs multicœurs, des accélérateurs de calcul, de l'augmentation des hiérarchies mémoires...). Cela a pour conséquence directe un changement de paradigme dans la conception des logiciels : nous passons du choix entre portabilité et performances au concept de la portabilité des performances. En effet, jusqu'au début des années 2000, il était fréquent de privilégier la conception de code portables (donc le plus indépendant des architectures de calcul) en faisant l'hypothèse de l'augmentation régulière de la fréquence et de la puissance des processeurs pour assurer des gains réguliers de performance de l'application. Ce choix n'est plus possible dorénavant, car pour tirer de la performance des calculateurs d'aujourd'hui, il est indispensable, *a minima*, d'exploiter le parallélisme des processeurs, voire des accélérateurs de calcul, sachant que les contraintes de portabilité n'ont pas baissé.

Afin de répondre à cet enjeu majeur, une des solutions passe par des conceptions de plus en plus modulaires des architectures logicielles des codes de simulation et la réuti-

lisation de composants logiciels spécialisés. L'idée est simple : découpler autant que faire se peut les modèles physiques, les méthodes numériques pour résoudre les équations, de l'implémentation informatique en charge de la mise en œuvre sur les architectures de calcul. Cette architecture en couches permet de séparer les cycles de vie des différents composants de l'application et également de s'appuyer sur des composants spécifiques optimisés sur telle ou telle architecture (on peut penser, par exemple, à des bibliothèques numériques optimisées).

Les modèles de programmation

On utilise un langage de programmation pour créer des applications car l'ordinateur n'est d'aucune utilité sans programmes. Chaque langage a des caractéristiques différentes et permet d'utiliser des paradigmes de programmation²⁶ plus ou moins complexe. L'étude de ces paradigmes pourrait faire l'objet d'un livre entier, nous nous contenterons de résumer les caractéristiques des langages de programmation les plus souvent utilisés.

Historiquement, la programmation des calculateurs a commencé par se faire au plus près du matériel. Les langages utilisés étaient le langage machine puis l'assembleur. Le paradigme supporté par ces langages est dit « impératif » : les instructions sont exécutées dans l'ordre où elles sont écrites. Certaines instructions de contrôle permettent de sauter à une autre partie du programme, par exemple pour n'exécuter une partie du code que de manière conditionnelle ou pour répéter l'exécution d'une partie du code. Le lien fort de ces langages avec l'architecture des machines sous-jacentes imposaient cependant de réécrire les codes à chaque changement de machine. Pour contourner ce problème, de nouveaux langages, dits « de haut niveau » ont été conçus comme FORTRAN²⁶ (*formula translator*) à la fin des années 50. Ces langages conservent le paradigme impératif, mais dans un langage qui est rendu indépendant de la machine cible. La traduction du code depuis le langage de haut niveau vers l'assembleur est alors de la responsabilité du compilateur.

Une seconde étape dans la conception des langages de haut niveau a consisté à identifier les structures de contrôle typiques construites à l'aide des instructions de saut. De nouveaux langages ont été proposés qui proposent des structures conditionnelles (bloc *if*) de boucles, à nombre d'itérations comptées (boucles *for*) ou jusqu'à obtention d'une condition (boucles *while*). De plus, la réutilisation de blocs de code communs dans plusieurs parties du code est supportée par la notion de procédure ou fonction réutilisable. Cette spécialisation du paradigme impératif est connue comme paradigme de programmation structurée. Ce paradigme est mis en œuvre dans des langages tels que C ou

Fortran dans sa version de 1977. Il est encore omniprésent dans l'informatique actuelle et règne sans partage pour les codes scientifiques. Cette évolution a aussi été l'occasion d'améliorer les compilateurs pour les faire passer de simples traducteurs à des compilateurs optimisant le langage machine produit. L'idée est de tirer parti de manière efficace des instructions de l'architecture ciblée, même si celles-ci n'ont pas d'équivalent direct dans le langage de haut niveau. Un exemple peut consister à identifier une boucle qui traite de manière similaire tous les éléments d'un tableau et à remplacer la structure de boucle par des instructions vectorielles du matériel. Les compilateurs Fortran sont connus pour être très efficaces pour ce travail, là où les compilateurs C étaient historiquement plus proches de simples traducteurs. Cela explique pour partie la prévalence du premier dans le monde du calcul scientifique. Malgré ses avantages, ce paradigme éprouvé a des limitations; il n'expose pas au développeur le parallélisme des machines de calcul actuelles et pose des difficultés en termes d'architecture logicielle, notamment en ce qui concerne la réutilisation de code.

Les langages de programmation que l'on rencontre le plus souvent sont :

- **Fortran** dont nous venons de parler. C'est un langage qui a eu beaucoup de succès dans le domaine scientifique car relativement éloigné des spécificités des machines. Beaucoup de bibliothèques scientifiques actuellement disponibles ont été écrites en Fortran ;
- **C**, développé à partir des années 70, ou C++ sont des langages impératifs (C++ est en plus orienté objet) et compilés plus proche de l'architecture des machines. C'est un inconvénient du point de vue de l'expressivité pour le scientifique, mais c'est un avantage pour la personne responsable de l'optimisation machine ;
- **Python** est un langage orienté objet interprété conçu dans les années 90. Les performances que l'on peut obtenir sont assez faibles, mais sa versatilité d'interfacer des programmes C/C++ permet d'utiliser facilement des bibliothèques, d'enchaîner plusieurs programmes ou d'utiliser des accélérateurs matériels ;
- **Matlab, Scilab** sont des langages interprétés spécialisés dans le calcul numérique. Ils permettent d'utiliser facilement de nombreuses bibliothèques spécialisées ;
- **Java** est un langage orienté objet, compilé en deux étapes, dont le développement a démarré dans les années 90. Une première étape permet de produire un programme exécutable indépendant d'une machine, une machine virtuelle est ensuite chargée d'interpréter le code puis de le compiler peu à peu au cours de l'exécution (compilation **JIT**²⁷).

26. https://en.wikipedia.org/wiki/Programming_paradigm

27. <https://en.wikipedia.org/wiki/Fortran>

27. https://fr.wikipedia.org/wiki/Compilation_à_la_volée

Historiquement, ce langage n'était pas apprécié pour le développement d'applications scientifiques, mais de récentes extensions montrent un regain d'activité dans le domaine du calcul haute performance :

- X10 est un langage programmation orienté objet spécialisé pour la programmation d'applications parallèles développé par IBM ;
- Scala est un langage de programmation orienté objet également dédié aux applications parallèles développé à l'EPFL ;

• **CUDA** (*Compute Unified Device Architecture*) et **OpenCL** (*Open Computing Language*) sont des langages dédiés à la programmation d'accélérateurs de calculs.

Pour effectuer des calculs importants (grande taille mémoire et/ou temps de calcul très important), il faut utiliser une machine parallèle. Dans ce cas, le programmeur doit s'appuyer sur trois niveaux de parallélisme :

- Un parallélisme d'instruction avec les architectures super-scalaires et les instructions vectorielles ;
- un parallélisme en mémoire partagée au sein d'un nœud où plusieurs flux d'exécution (threads) indépendants ont accès au même espace mémoire ;
- un parallélisme en mémoire distribuée entre les nœuds d'une grappe de calcul où des processus ont accès à des espaces mémoire séparés et communiquent *via* le réseau.

Pour se faire le programmeur doit :

- Paralléliser son application manuellement, c'est-à-dire préparer un programme pour tous les nœuds de la machine parallèle et utiliser des bibliothèques de communication comme MPI ;
- paralléliser son application automatiquement en utilisant soit :
 - un compilateur qui va réaliser automatiquement ou semi-automatiquement la démarche précédente. Les compilateurs parallélisants n'utilisent que le langage source pour extraire le parallélisme et produire le code binaire parallèle. Les compilateurs semi-automatiques sont guidés par des directives fournies par le programmeur pour produire du code parallèle (par exemple, OpenMP ou OpenACC).
 - un langage spécialisé pour les accélérateurs parallèles.

Voici deux exemples d'outils permettant une parallélisation automatique :

• **OpenMP**²⁸ (*Open Multi-Processing*) est un modèle de programmation pour la parallélisation d'application sur des

machines à mémoire partagées. Son utilisation se fait *via* C/C++ ou FORTRAN dans lesquels des directives spécifiques aident le compilateur à préparer le code pour une utilisation sur une machine parallèle ;

• **OpenACC**²⁹ (*Open ACCelerators*) est un modèle de programmation pour la parallélisation d'application pour des machines hétérogènes utilisant des accélérateurs de calcul (GPU). Son utilisation est similaire à OpenMP, il faut ajouter des directives à un programme pour indiquer au compilateur.

Chacun de ces deux langages est souvent associé à des bibliothèques auxiliaires appelées « supports d'exécution » (ou exécutifs pour faire court) assurant le lien entre les concepts de haut niveau exprimés par le langage et les capacités propres au système d'exploitation. Ces exécutifs sont particulièrement importants, par exemple dans le cas d'OpenMP, pour offrir le maximum d'efficacité au système. Comme l'architecture des machines parallèles est en évolution rapide, les logiciels associés, compilateurs et système d'exploitation ont de plus en plus de mal à cacher cette évolution pour les applications dans des structures en couches, malgré les progrès réalisés par les exécutifs tel que MPC³⁰ développé au CEA/DAM.

De plus, les accélérateurs de type GPU ou manycore doivent désormais être utilisés pour tirer parti pleinement des potentialités du matériel (meilleure efficacité énergétique). À l'échelle d'un nid de boucles, les compilateurs arrivent relativement bien à déconstruire l'ordre décrit par le développeur en détectant les dépendances entre instructions et en se ramenant à un ordre partiel qui permet de tirer parti du parallélisme d'instructions. Les algorithmes qui permettent cette parallélisation ont cependant typiquement une complexité qui explose avec le nombre d'instructions dans la zone à paralléliser et ils se généralisent mal aux échelles du parallélisme en mémoire partagée et encore moins en mémoire distribuée. Des modèles de programmation spécifiques ont donc été proposés pour gérer ce type de parallélisme.

Concernant le parallélisme en mémoire partagée, le modèle dominant est aujourd'hui celui des boucles parallèles telles que mises en œuvre au sein d'OpenMP. Il s'agit d'extensions au langage qui permettent de spécifier des zones parallèles au sein desquelles les boucles peuvent être annotées pour spécifier que leurs itérations sont indépendantes et peuvent être exécutées par des *threads* différents. Les variables peuvent alors soit être partagées entre tous les *threads* ou être répliquées et privées à chaque *thread*. Ce mécanisme est particulièrement adapté pour le parallélisme de données prévalant dans le calcul scientifique où un même calcul indépendant est appliqué à tous les éléments d'un tableau qui représentent, par exemple, une discrétisation de l'espace.

28. <http://openmp.org>

29. <http://www.openacc.org>

30. <http://mpc.hpcframework.paratools.com>

Les langages OpenCL ou CUDA pour la programmation GPU exposent un paradigme relativement proche où une itération de boucle est écrite au sein d'une fonction nommée « kernel » et où la boucle est implicitement spécifiée via l'appel à une interface de programmation dédiée. Dans ce modèle, la gestion de la mémoire se fait à un niveau d'abstraction beaucoup plus bas, puisque c'est au développeur de choisir dans quel type de mémoire allouer chaque variable. Ce choix est un exemple qui caractérise bien la différence entre OpenMP issu de la communauté concevant les compilateurs optimisant et CUDA issu de la communauté concevant le matériel. Un modèle intermédiaire qui a été proposé pour la programmation des GPU est OpenACC. À la manière d'OpenMP, il s'agit d'un langage à annotations où les boucles parallélisables sur le GPU sont identifiées, mais à la différence de ce dernier, la gestion du placement des données en mémoire est laissée de manière beaucoup plus forte à la charge du développeur. Depuis sa dernière version (version 4.0), OpenMP a aussi intégré le support des accélérateurs GPU de manière relativement similaire à OpenACC bien qu'en reposant plus sur le compilateur pour le placement des données en mémoire.

En s'appuyant sur du parallélisme de boucle, ces modèles limitent généralement le parallélisme exploitable dans l'application au parallélisme de données. Il existe cependant un second type de parallélisme, le parallélisme de tâche. Ce parallélisme apparaît quand plusieurs tâches différentes peuvent être exécutées en parallèle. Avec l'augmentation du degré de parallélisme des machines, il devient de plus en plus important de pouvoir tirer parti de ce parallélisme. C'est ce qui est proposé par les modèles à tâches tels que mis en œuvre au sein de moteurs d'exécution comme Cilk++, OMPSS, PaRSEC, StarPU ou Xkaapi. Dans ce modèle, le code est exprimé sous la forme d'un ensemble de tâches de calcul sans effet de bord prenant en entrée et fournissant en retour des données bien identifiées. L'analyse des dépendances portées par les données échangées entre ces tâches permet au moteur d'exécution de les exécuter en parallèle en garantissant que la sémantique séquentielle est conservée. La connaissance des données manipulées par chaque tâche permet aussi, lorsque c'est pertinent, de déplacer ces données sur un accélérateur et d'y exécuter la tâche en prenant en compte le temps d'exécution variable suivant le support d'exécution, le temps de transfert des données, ainsi que le possible recouvrement entre transfert d'une donnée et calcul sur une autre donnée. Ce modèle a été introduit dans OpenMP (début dans la version 3 et amélioration dans la version 4) via des annotations spécifiques et il semble que la majorité des moteurs d'exécution tendent à converger sur cette interface unifiée. Il reste malgré tout quelques propositions alternatives comme l'extension au C++ portée par Cilk++.

Concernant le parallélisme en mémoire distribuée, le paradigme de passage de message synchrone porté par la bibliothèque MPI (*Message Passing Interface*) et proche du formalisme CSP (*Communicating Sequential Processes*) connaît une domination écrasante. Il s'agit d'assigner un numéro (le rang) unique à chaque processus et à leur permettre de s'échanger des messages. L'échange est synchrone³¹ en ce qu'il nécessite non seulement que le processus envoyant les données spécifie la donnée à envoyer, mais aussi que le processus recevant spécifie l'adresse mémoire où stocker cette donnée. Au-dessus de ces communications point-à-point sont construites des communications dites « collectives » qui font intervenir plus de deux processus. Nous pouvons citer comme exemple la diffusion d'un même message à tout un groupe de processus. Un exemple un peu plus avancé est la réduction qui ramène un ensemble de valeurs distribué sur un groupe de processus à une unique valeur résultant de l'application d'une opération (par exemple, une somme) à ces valeurs. Des versions différentes de mises en œuvre de ces opérations collectives en fonction du matériel sont souvent proposées pour l'utiliser aussi efficacement que possible. Ce modèle a l'avantage d'être relativement proche du fonctionnement du matériel et ainsi de permettre de comprendre le comportement en terme de performance lors de l'optimisation. Ce niveau d'abstraction relativement bas impose cependant un coût d'entrée relativement élevé pour porter une application en MPI. En effet, contrairement à un modèle comme OpenMP ou une application séquentielle a la même comportement une fois OpenMP mis en place et où les zones parallèles peuvent être introduites de manière incrémentale, l'introduction de MPI implique que tout le code sera par défaut exécuté par l'ensemble des processus et la sémantique est donc changée par rapport à la version séquentielle.

D'autres modèles proposant une gestion plus transparente du parallélisme en mémoire distribuée ont été proposés et il s'agit encore d'un domaine actif de recherche. Parmi ces modèles, on peut citer le modèle PGAS (*Partitioned Global Address Space*) par exemple mis en œuvre au sein de coarray Fortran ou d'UPC (*Unified Parallel C*). Il s'agit, lors de la déclaration des tableaux, de pouvoir spécifier que ceux-ci doivent être alloués de manière partitionnée sur l'ensemble des nœuds. Les itérations de boucles traitant ces tableaux peuvent alors être distribuées de manière similaire pour qu'elles traitent des données locales. Dans le cas général, il est cependant classique que des itérations doivent accéder à la fois à des données locales et à des données distantes. Un mécanisme de transfert automatique peut cependant être mis en place par le compilateur pour rendre ces accès transparents. Le modèle de programmation proposé est au final

31. Dans les dernières versions de la norme MPI, il existe néanmoins la possibilité d'utiliser une version asynchrone des primitives MPI, permettant de recouvrir communications et calculs, voire des primitives de communication asymétriques (*one sided*).

très proche du mécanisme de parallélisme de boucle en OpenMP. Il a l'avantage de la transparence et de la simplicité d'accès mais tend à donner lieu à des codes qui passent moins bien à l'échelle lorsque les choix de parallélisation sont fait automatiquement par le compilateur plutôt que laissés à la responsabilité du développeur. Leur plus grande limitation est qu'ils tendent à masquer les coûts du parallélisme et ainsi à rendre l'optimisation difficile. Là où en **MPI***, une communication avec un processus distant est visible via un appel spécifique, les langages **PGAS*** rendent cette opération coûteuse transparente et elle s'écrit généralement de la même manière que l'accès à une variable locale, opération nettement moins coûteuse.

En plus de la performance, un autre intérêt majeur des langages structurés est la réutilisation de code qu'ils rendent possible. Ils permettent d'identifier des parties de code (procédures ou fonctions) qui appliquent un travail bien identifié sur un certain nombre de données d'entrées et fournissent un résultat dans des données de sorties bien spécifiées. Cette propriété permet de concevoir des bibliothèques de telles fonctions qui pourront être réutilisées de code en code. Un exemple particulièrement réussi de cette approche dans le cadre du calcul intensif sont les bibliothèques d'algèbre linéaire telles que BLAS (*Basic Linear Algebra Subprograms*) ou LAPACK (*Linear Algebra PACKage*). En spécifiant une interface, il devient possible non seulement de factoriser l'effort de développement en partageant le même code entre plusieurs applications, mais aussi de proposer plusieurs mises en œuvre de la bibliothèque adaptées et optimisées pour différentes machines qui peuvent être remplacées de manière transparente pour le développeur final.

D'autres bibliothèques proposent une vision plus globale en offrant des structures de données et des services autour desquels structurer l'application. Nous ne parlons alors plus de simple bibliothèque, mais de cadriciel (*framework*). Deux exemples particulièrement représentatifs sont les frameworks Trilinos ou PETSc (*Portable, Extensible Toolkit for Scientific computation*). En ne se limitant pas à la définition d'une bibliothèque de fonctions et en offrant au développeur des structures de données avec lesquelles mettre en œuvre l'application, un *framework* peut offrir des services nettement plus poussés. Trilinos et PETSc proposent, par exemple, des structures qui, si elles sont utilisées, permettent de s'abstraire de problèmes comme l'équilibrage de charge, l'interfaçage avec des langages de script, les entrées/sorties disques, la mise en œuvre des schémas numériques classiques, etc. Le problème de cette approche est qu'il est quasiment impossible de combiner plusieurs *frameworks* au sein d'une même application, puisque les structures pour lesquelles ils proposent leurs approches tendent à se recouvrir et sont généralement incompatibles.

Ce constat en termes de limitation de la réutilisabilité avec les bibliothèques limitées aux parties périphériques des codes et des *frameworks* incompatibles entre eux a amené d'autres communautés de développement, pour qui les performances brutes sont un objectif secondaire face à la maintenabilité et l'évolutivité des codes, à proposer de nouveaux paradigmes tels que, par exemple, les objets ou composants logiciels. Avec l'augmentation de la complexité des codes de calcul scientifiques et les besoins de portabilité de performance précédemment évoqués, des tentatives d'importation de ces paradigmes pour le calcul intensif sont en cours. Le C++ et le Java qui sont certainement les langages les plus utilisés pour la programmation orientée objet peinent à percer notamment parce qu'une utilisation naïve de leurs fonctionnalités mène à des performances inacceptables dans le monde du calcul intensif. Les composants logiciels semblent plus adaptés à une distinction entre une architecture de haut niveau reposant sur des blocs de code réutilisables et du code bas niveau continuant à s'appuyer sur le paradigme impératif classique. Des efforts pour proposer des mises en œuvre du paradigme spécifiquement adaptées au calcul scientifique ont été faits, nous pouvons, par exemple, citer CCA (*Common Component Architecture*) mais même ces modèles peinent à percer. La conception d'un modèle combinant efficacité et réutilisabilité reste donc un sujet de recherche actif.

Finalement, une dernière catégorie de langages fait son apparition plus récemment dans le monde du calcul scientifique : les langages interprétés. Les programmes de cette catégorie ne sont pas traduits dans le langage machine par un compilateur mais interprétés au moment de l'exécution par un programme dédié (l'interpréteur). Cette approche permet de rendre le langage plus concis et flexible, par exemple grâce au typage dynamique. Cette technologie était historiquement réservée aux scripts, mais elle fait une percée pour la mise en œuvre de l'architecture de haut niveau des codes, couplé à un langage plus classique pour l'écriture des parties critiques en terme de performance. Nous pouvons, par exemple, citer le couple formé par le langage interprété python et la bibliothèque codée en C numpy qui tend à être utilisé de plus en plus largement. Des travaux autour de la compilation à la volée (*Just In Time compilation – JIT**) rendent la frontière entre langages compilés et langages interprétés de plus en plus floue et de nouveaux travaux comme ceux autour du langage Julia proposent d'utiliser un langage dynamique pour une partie de plus en plus importante des codes.

Les aspects programmation et compilation sont donc des éléments importants de l'utilisation efficace des supercalculateurs (tout comme des ordinateurs de bureau, voire pour les ordinateurs personnels). Le CEA est actif aussi dans ces domaines comme illustré dans les trois points suivants :

- Sur l'aspect langage de programmation pour les machines parallèles, il existe une activité de recherche sur la création

de langages de programmation pour la programmation d'applications parallèles (voir la publication « *C: A Programming Model and Language for Embedded Manycores* ») ;

- sur l'aspect compilateur nous pouvons citer l'outil Frama-C (voir la publication « *Frama-C A Software Analysis Perspective* ») qui permet de réaliser des analyses complexes sur du code source principalement pour des objectifs de sécurité ;
- sur l'aspect compilation au vol, l'outil deGoal (voir la publication « *DeGoal a Tool to Embed Dynamic Code Generators into Applications* ») permet de produire du code binaire dépendant des jeux de données lors de l'exécution.

Le couplage de codes

Les codes de simulation utilisés aujourd'hui sont souvent nés au sein d'équipes spécialistes d'une thématique donnée, maîtrisant les aspects physiques et numériques liés à l'étude de cette thématique. Au fur et à mesure que les progrès en analyse numérique et en informatique l'ont rendu possible, des équipes pluridisciplinaires se sont formées et des couplages sont venus enrichir ces codes de calcul, permettant ainsi d'obtenir des outils de simulation toujours plus précis.

Cette notion de couplage de codes recouvre une grande diversité de situations, correspondant à des usages, des schémas numériques, des architectures différentes. Afin d'identifier ces différentes situations, nous pouvons utiliser les critères de classification qui suivent :

- Couplage fort, couplage faible, chaînage ;
- couplage multiphysiques et couplage multiéchelles ;
- couplage au sein d'un code ou couplage au sein d'une plateforme.

Couplage fort, couplage faible et chaînage

Ce critère permet de caractériser la façon dont les différents composants du couplage collaborent au sein du schéma numérique (voir fig. 32).

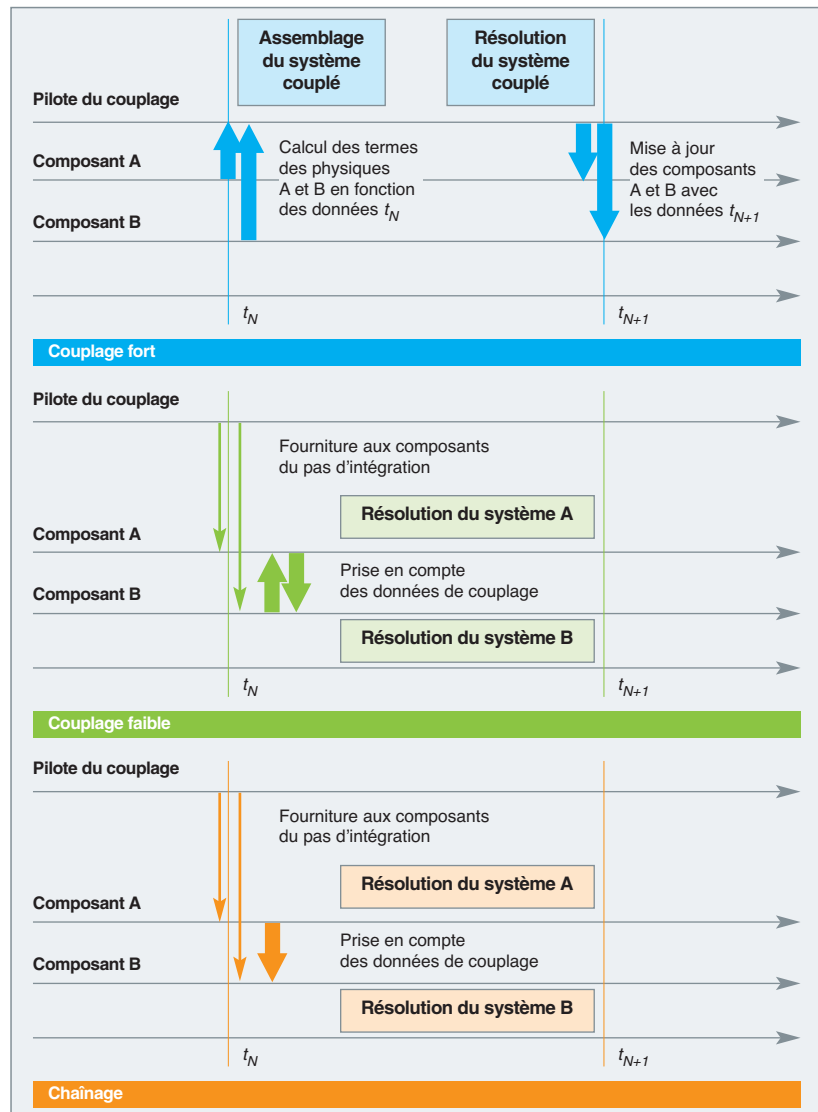


Fig. 32. Illustration des notions de couplage fort, couplage faible et chaînage sur un couplage entre deux composants physiques. Les responsabilités et les interactions entre l'algorithme de pilotage, le composant de simulation de la physique A et le composant de simulation de la physique B sont représentées au cours de la résolution du schéma numérique permettant d'obtenir les valeurs physiques à l'état t_{N+1} à partir des données en t_N .

On parle de couplage fort lorsque la résolution du schéma temporel prend simultanément en compte les différentes physiques. On résout alors typiquement un système linéaire unique pour l'ensemble des équations couplées, et les différents composants logiciels fournissent des coefficients pour cette matrice, l'assemblage et la résolution étant le fait d'un algorithme de pilotage jouant le rôle de chef d'orchestre.

Le couplage faible correspond à des situations où la résolution du schéma temporel se fait indépendamment pour chacune des physiques impliquées dans le couplage. Le couplage se fait par la prise en compte des autres physiques via les termes sources ou les conditions aux limites. Dans ce contexte, chaque composant possède son propre algorithme

de résolution du schéma temporel. Les échanges entre les composants et le composant de pilotage se limitent aux résultats de chaque composant. Le composant de pilotage se borne à appeler à tour de rôle les deux composants et à définir l'intervalle de temps à réaliser à chaque appel. Selon que les temps caractéristiques des différentes physiques sont proches ou non, le pilotage peut mettre en œuvre des pas de temps identiques pour tous les composants ou bien choisir des pas de temps différents.

Dans certaines situations, la rétroaction de la physique portée par le composant B vers celle du composant A est nulle ou négligeable. On peut alors résoudre le calcul de la physique de A indépendamment du composant B. Les données résultantes de chaque pas de temps de A sont fournies à B qui les utilise à chaque pas de temps pour définir les conditions initiales, les conditions aux limites ou les termes sources. On parle alors de « chaînage entre composants ». À noter que si le volume de données impliqué dans le transfert de A à B est important, le fait de travailler en chaînage ne dispense pas de faire fonctionner les deux composants simultanément. En effet, transférer les données à chaque pas de temps permet d'éviter d'importants stockages de données.

Couplage multiphysiques et couplage multiéchelles

Les couplages multiphysiques concernent des couplages de composants qui permettent chacun de modéliser des physiques de nature différentes. À titre d'exemple (fig. 33), dans un réacteur nucléaire, on pourra modéliser d'une part le transport des neutrons qui permettent de définir la réactivité du réacteur et la source de puissance thermique résultant des réactions de fission des noyaux lourds, d'autre part les problèmes de mécanique des fluides correspondant à l'écoulement du circuit primaire assurant le refroidissement du cœur et le transport de l'énergie vers les échangeurs de chaleur.

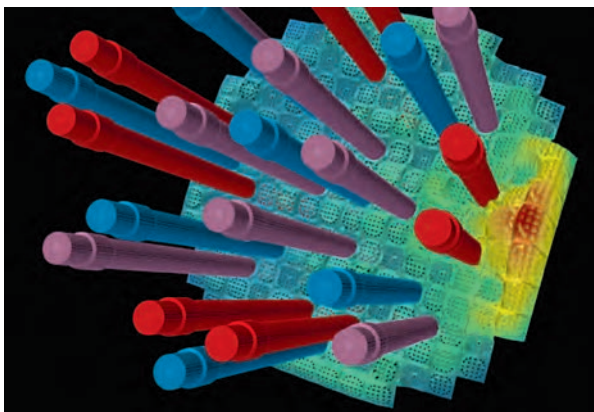


Fig. 33. Nappe de puissance thermique au sein d'un réacteur expérimental calculée par une simulation couplée neutronique/thermohydraulique au sein de la chaîne de calcul CORPUS.

Les couplages multiéchelles correspondent eux à des composants qui traitent des mêmes physiques mais qui les modélisent à des échelles différentes. Pour reprendre l'exemple des réacteurs nucléaires, on traitera différemment les phénomènes physiques à l'échelle du système complet et les phénomènes se déroulant à l'échelle du cœur du réacteur (fig. 34).



Fig. 34. Calcul multiéchelles de l'écoulement du sodium dans le réacteur à neutrons rapides ASTRID. Trois codes participent au calcul : le code système CATHARE pour l'écoulement sur l'ensemble du circuit primaire, le code CFD TrioCFD pour le calcul des recirculations de particules en amont et en aval du cœur et le code spécifique MC2 pour le calcul au sein du cœur d'ASTRID.

Le couplage au sein d'un code et couplage au sein d'une plateforme

D'un point de vue informatique, nous pouvons distinguer les couplages qui se font au sein d'un même code de calcul et les couplages qui sont faits par l'intermédiaire d'une plateforme. Le rôle de la plate-forme est alors le plus souvent d'héberger le processus de couplage (parfois appelé « processus de supervision ») et de définir les protocoles de communication entre les codes. Sans que cela soit systématique, nous pouvons dire que les situations de couplage au sein d'un même code correspondent le plus souvent à des situations de couplage fort et le couplage au sein d'une plateforme à des situations de couplage faible ou de chaînage. Dans le contexte de couplages de codes parallèles, ces plateformes fournissent les éléments suivants :

- Des normalisations des échanges de données entre groupes de processus ;
- des méthodes de répartition des codes de calcul au sein d'un ensemble de processus ;
- des méthodes de supervision des codes de calcul permettant d'orchestrer les envois de données et les différentes

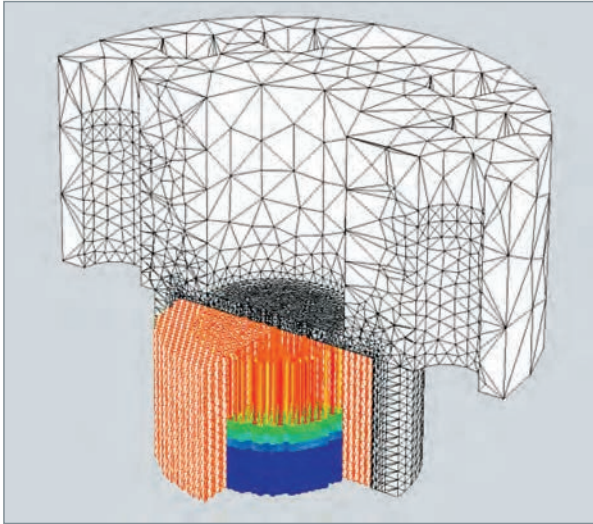


Fig. 35. Couplage entre le domaine de calcul **CFD*** et le domaine de calcul cœur dans le cadre du couplage thermohydraulique des écoulements sodium du réacteur à neutrons rapides ASTRID. La figure illustre les différentes discrétisations entre les différents domaines de calcul et le besoin d'outil de projection entre les différents domaines.

étapes des services de calcul (initialisation, préparation d'un pas temporel, exécution d'un pas temporel, etc.) ;

- des méthodes de traitements de données permettant notamment de projeter des données entre les différents composants (voir fig. 35).

Parmi les plateformes utilisées au CEA, nous pouvons citer les plates-formes SALOMÉ, OASIS, KEPLER.

Ces différents outils possèdent leurs caractéristiques propres. La plate-forme SALOMÉ (développée par le CEA, EDF R&D et OpenCascade) possède une série d'outils de CAO, de maillage et de visualisation qui permettent de créer des chaînes de calculs complètes avec une forte intégration des différentes étapes de prétraitement, de calcul et de posttraitement. La plate-forme OASIS a été développée dans le contexte des calculs en climatologie et possède des outils d'interpolation et de projection géométrique dédiées à la gestion des géométries sphériques. Quant à elle, la plate-forme KEPLER se distingue par l'emphasis mise sur les traitements de données entre composants, son interface graphique et sa capacité à orchestrer des composants présentés sous forme de services Web.

Parmi les autres plateformes existantes, nous pouvons notamment citer :

- MPCCI, qui possède notamment des interfaces vers des codes de simulations commerciaux et est particulièrement utilisée dans le domaine de l'aéronautique ;

- La plate-forme MOOSE, développée dans le cadre du programme de recherche américain sur l'énergie nucléaire, qui adresse plus particulièrement la problématique du couplage fort.

Le processus de développement des logiciels

Le processus de vérification/validation

Étape clef dans le cycle de vie du logiciel, le processus de vérification/validation (V&V) doit permettre de s'assurer que le logiciel développé répond de manière correcte aux exigences initiales. Afin de définir le processus lui-même, il est nécessaire de définir les concepts et la différence entre vérifier et valider :

- Vérifier consiste à s'assurer que les choses sont faites conformément à ce qui avait été défini ;
- valider consiste à s'assurer que le résultat est bien atteint.

Prenons un exemple : supposons qu'une fonction a pour but de créer un objet X. Vérifier consiste à s'assurer que la construction de X est correcte. Valider consiste à s'assurer que la fonction a construit le bon X. Bien comprendre la distinction entre ces deux notions est important, afin de différencier les étapes du processus et leurs mises en œuvre.

Cette mise en œuvre passe par la mise en place de tests qui vont avoir chacun leur rôle respectif. Il existe de nombreux cas tests différents, parmi les principaux, nous pouvons citer :

• Les tests unitaires

Les tests unitaires consistent à tester individuellement les composants de l'application. On pourra ainsi valider la qualité du code et les performances d'un module.

• Les tests fonctionnels

Ces tests ont pour but de vérifier la conformité de l'application développée avec le cahier des charges initial. Ils reposent donc sur les spécifications fonctionnelles et techniques. Tests unitaires et tests fonctionnels vont être utilisés conjointement afin de réaliser le processus de V&V. La mise en place de tous ces tests n'a de sens que s'ils sont associés à des métriques. En effet, rien ne sert de multiplier les cas tests s'il n'est pas possible de vérifier quels modules ou quelles fonctionnalités sont effectivement vérifiés et validés. Pour ce faire, deux métriques sont principalement utilisées :

• Le taux de couverture logicielle de la base de cas tests :

La couverture logicielle du code (ou « *code coverage* ») permet d'évaluer la qualité d'un jeu de test en vérifiant quelles sont les parties du code qui sont appelées lors des tests.

Si du code est appelé pendant un test, cette portion de code est considérée comme couverte ; *a contrario*, tout le code

non appelé est considéré comme non couvert. La couverture s'exprime donc sous forme d'un pourcentage représentant la proportion de code couverte sur la quantité totale de code.

• Le taux de couverture fonctionnelle de la base de cas tests :

Il s'agit ici de mesurer quelles sont les fonctionnalités (au sens physique du terme) couvertes par la base de cas tests. Ces fonctionnalités physiques à couvrir sont spécifiées via une approche de type PIRT (*Physical Identification Ranking Table*) et des outils permettent de vérifier automatiquement que ces fonctionnalités sont effectivement vérifiées.

Au-delà de cette première série de tests, il est nécessaire de rajouter une seconde série liée directement au cycle de vie du logiciel :

• Les tests d'intégration

Ces tests sont exécutés pour valider l'intégration des différents modules entre eux et dans leur environnement d'exploitation définitif.

Ils permettront de mettre en évidence des problèmes d'interfaces entre différents programmes.

• Les tests de non-régression

Les tests de non-régression permettent de vérifier que des modifications n'ont pas altéré le fonctionnement de l'application.

Toute cette démarche de V&V peut-être largement automatisée afin d'associer au processus de développement du code lui-même, un processus automatique de vérification de la portabilité du code, de sa non régression sur les différentes plates-formes jusqu'à la V&V. À titre illustratif (voir fig. 36), nous pouvons citer l'outil développé au CEA/DEN pour le logiciel APOLLO3® : CAT (Chaîne Automatique de Tests).

Dans le cadre du calcul intensif, certains de ces tests nécessitent d'être exécutés sur des supercalculateurs afin d'avoir accès à la puissance de calcul nécessaire. C'est le cas de certains tests d'intégration ou de non-régression qui doivent tourner sur un cas représentatif d'une exécution réelle pour fournir des résultats pertinents. Dans ce cadre, les outils d'automatisation de tests utilisés dans l'industrie mais non pensés pour ce cas particulier tels que Jenkins ou Buildbot posent deux types de problèmes. Tout d'abord des limitations techniques. Leur principe est de mettre en œuvre un concept de file d'exécution de tests et de les lancer lorsque

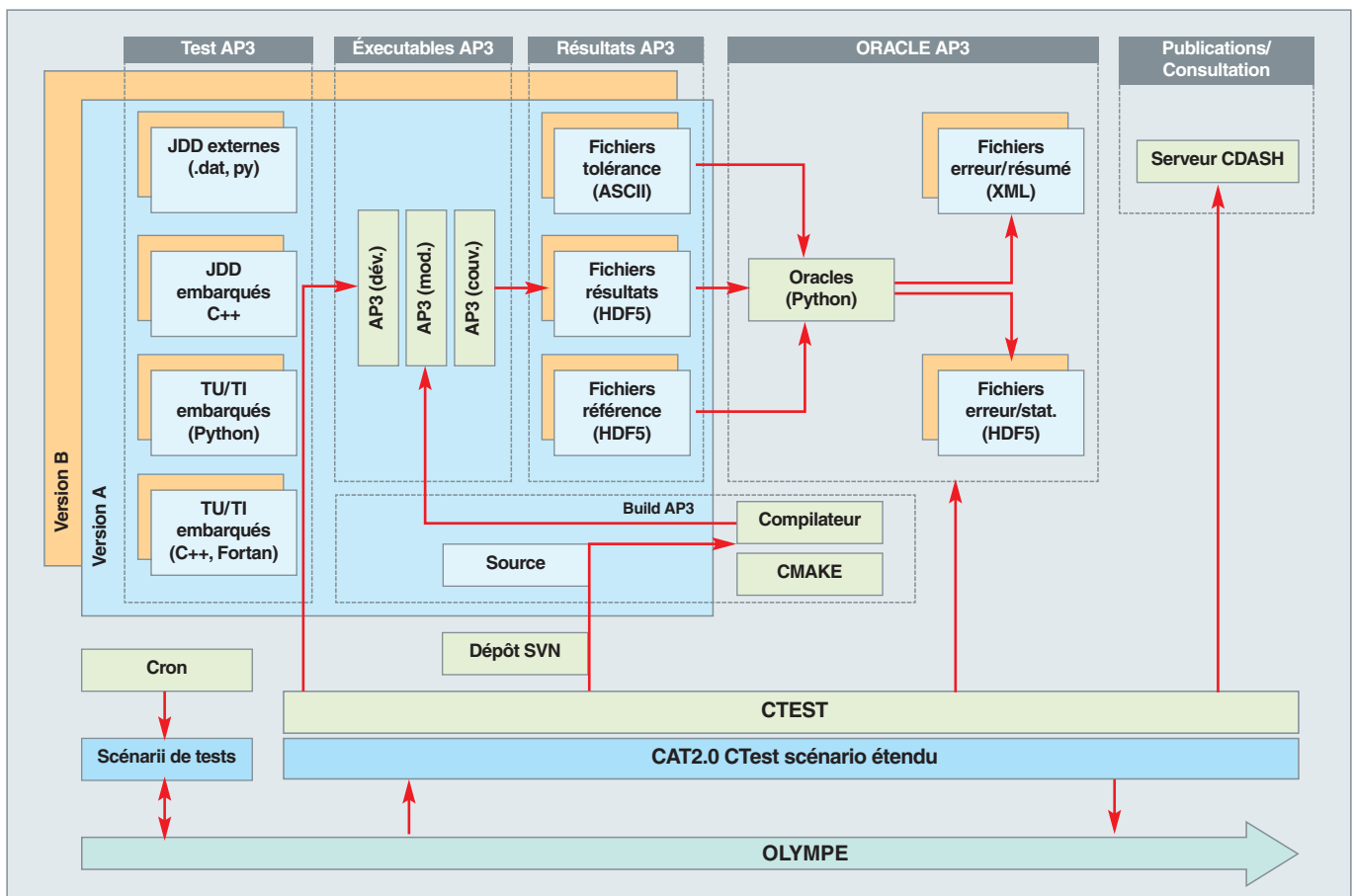


Fig. 36. Schéma de principe de fonctionnement de la chaîne automatique de test CAT2.0 pour le logiciel APOLLO3®.

les ressources d'exécution deviennent disponibles. Cette approche s'interface mal avec les ordonnanceurs (*job scheduler*) présent sur les machines de calcul. Il y a en effet un fort recouvrement de fonctionnalités entre les deux outils. La deuxième limitation concerne la sécurité. En effet, les outils d'automatisation de tests se connectent classiquement aux machines d'exécution sous une identité unique. Ce comportement est incompatible avec les politiques de sécurité des centres de calculs partagés qui nécessitent que chaque action sur la machine puisse être reliée à un utilisateur spécifique. Des travaux sont donc en cours en collaboration entre le CEA et les autres grands opérateurs de centres de calcul académiques français (Cines, Idris, TGCC...) pour adapter ces outils.

Le débogage de code

Lorsqu'un code ne s'exécute pas convenablement, il convient de trouver la (ou les) source(s) du problème. Elles peuvent être de différente nature ; liées à la compilation des sources – par exemple un problème de bibliothèques utilisées à l'exécution ou la compilation, ou plus fréquemment à une erreur dans l'algorithme implémenté ou les données lues pour le faire fonctionner. La commande « *ldd* » lancée dans le même environnement d'exécution aide à comprendre le travail du loader qui charge les bibliothèques à l'exécution. Dans le second cas, on est souvent aidé par l'affichage de la pile d'exécution dans la sortie d'erreur. Si le programme a été compilé avec sa table des symboles (ensemble des variables humainement lisibles), on aura parfois la bonne ligne de code, mais c'est souvent plus en amont que l'erreur a été commise. On utilise aussi différents outils de débogage en fonction de la nature du programme. Si le programme est séquentiel, le débogueur natif des systèmes gnu-linux est *gdb*. Il permet de charger un exécutable simple et après un arrêt posé judicieusement un peu avant la zone supposée de l'erreur de faire du pas à pas dans l'exécution du programme, tout en suivant les valeurs des variables, voire en modifiant certaines. Il est en ligne de commande, mais de nombreuses interfaces graphiques lui sont dédiées, telle que *ddd*. Ce débogueur est lié aux compilateurs gnu gcc, g++, gfortran... mais d'autres compilateurs peuvent être analysés. Toutefois, les compilateurs propriétaires, comme INTEL *icc* viennent souvent avec un compilateur dédié qui interprète souvent mieux leur table de symboles. Les codes parallèles peuvent être analysés avec *gdb* s'ils s'exécutent sur des petits cas, sur un seul nœud de calcul. Lorsque l'on utilise un grand nombre de nœuds, il est plus adéquat d'utiliser les débogueurs propriétaires tels que *Totalview* ou Alinéa *DDT*. Ces débogueurs prétendent à une très bonne scalabilité pour un impact minime sur le calcul. Ils permettent en tout cas de visualiser des variables réparties sur un grand nombre de processeurs. Enfin l'analyse de fuite de mémoire (perte du pointeur sur une zone de mémoire allouée) avec l'outil libre *valgrind* permet de stabiliser une exécution dans le temps, sans saturer la mémoire

des nœuds. Cet outil peut être vu comme une machine virtuelle simulant le processeur et requiert une beaucoup plus grande quantité de mémoire et un temps de calcul jusqu'à dix fois plus grand. Il n'est donc à utiliser que sur des petits cas. Il possède plusieurs autres utilitaires intégrés (*backend*) en plus de l'analyseur de mémoire *Memcheck* par défaut. Un second outil appelé « *callgrind* » vérifie le chemin des appels de fonction réellement effectué à l'exécution. C'est un bon complément au débogage et un premier pas vers le profilage de celle-ci.

Les outils d'analyses de performances

Un autre point important une fois le code écrit et exempt de défaut est de l'optimiser pour assurer son exécution aussi rapidement que possible *via* une utilisation efficace des ressources de calcul. De manière similaire au processus de débogage, le processus d'optimisation consiste avant tout à identifier les goulots d'étranglement dans le code pour pouvoir les corriger soit en retravaillant l'algorithme, soit en réécrivant sa mise en œuvre de manière plus adaptée au matériel. Il existe de nombreux outils facilitant ce travail, on parle d'« outils de profilage » (*profiling*). Chacun de ces outils a ses spécificités et il serait trop long de tous les identifier. Nous pouvons cependant avancer une liste non exhaustive en citant Alinea Map et Performance Reports, Callgrind, Dimemas, Extra-P, MAQAO, OpenSpeedShop, PAPI, Paraver, Scalasca, TAU, Vampir ou VTune.

La première étape de l'analyse consiste généralement à identifier les parties du code au sein desquelles l'essentiel du temps est passé afin de focaliser le travail d'optimisation sur ces parties. Ce type d'informations est, par exemple, fourni par les outils MAQAO, OpenSpeedShop, Scalasca, TAU ou VTune. Ces outils analysent une exécution du code, soit instrumenté pour intercepter tous les appels de fonction, soit *via* une méthode d'échantillonnage aléatoire et fournissent diverses méthodes de visualisation pour identifier les parties du code consommant le plus de temps et méritant donc d'être travaillées.

Une fois cette première information obtenue, il est parfois possible de changer les algorithmes utilisés pour en utiliser de plus efficaces, mais quand ce n'est pas possible, une deuxième étape consiste à analyser l'utilisation des ressources au sein d'un nœud de calcul pour déterminer s'il serait possible d'être plus efficace. Des sources potentielles d'inefficacité peuvent être issues d'une sous-utilisation du processeur, par exemple parce que le code produit n'utilise pas les instructions vectorielles du processeur ou parce qu'il n'expose pas assez de parallélisme d'instruction pour profiter au maximum du mécanisme super-scalaire. Ce type de problème peut notamment être détecté par les outils Alinea MAP et Performance Reports, PAPI, TAU ou VTune. Une autre raison possible de sous-utilisation de la machine à l'échelle d'un nœud peut être liée à la mémoire. Des algo-

rhythmes n'exhibant pas une localité mémoire suffisante vont sous-utiliser les caches et seront ainsi incapables d'atteindre les performances attendues pour la machine. Ce type d'informations est par exemple fourni par les outils Alinea MAP et Performance Reports, Callgrind, OpenSpeedShop, PAPI ou VTune.

Finalement, une dernière catégorie de métrique concerne la parallélisation du code. Il est possible d'identifier les parties du code passant beaucoup de temps dans les communications entre nœuds ou attendant un autre nœud sans rien faire. Ce dernier problème est connu comme un problème d'équilibrage de charge. Il existe plusieurs outils permettant d'identifier cette catégorie de problème comme, par exemple, Dimemas, Extra-P, MAQAO, OpenSpeedShop, PAPI, Paraver, Scalasca ou Vampir.

Le cycle de vie des données

Introduction

Les données sont de plus en plus au cœur de la recherche et à la source de découvertes et d'innovations. Elles sont devenues la richesse des communautés et de l'industrie au même titre que les brevets, le savoir-faire et les biens matériels. Ainsi, il devient crucial de penser leur génération et leur gestion au cours du temps. Cette démarche est décrite dans le cycle de vie des données (voir fig. 37).

Pour être efficace, cette démarche doit être faite bien en amont de la génération des données et nécessite une réflexion approfondie sur les données elles-mêmes. Par exemple, si les données doivent être conservées en format informatique sur une longue durée, il faut bien choisir le format des fichiers (par exemple, un standard comme HDF5) qui en garantira la relecture après plusieurs années. La démarche qui aide à cette réflexion est la rédaction d'un plan de gestion des données. Ce document couvre tous les aspects du cycle et identifie les acteurs. En particulier, il décrit la mise à disposition des données. De nombreuses recherches exploitent des données expérimentales ou sur des résultats de simulations. Souvent, la seule information diffusée l'est *via* les publications d'articles et il est quasiment impossible de reproduire les résultats à partir des informations contenues dans l'article. Ainsi, de plus en plus de communautés mettent en place le partage des données. Un bon exemple est la démarche de la communauté du climat qui *via* les projets CMIP, met à disposition les données complètes des simulations permettant de reproduire les calculs.

Une autre démarche récente est le mouvement *Open Data* qui consiste en la volonté d'ouvrir aux citoyens les données de l'administration et de passer d'une logique de protection des données à une logique de diffusion massive. Il s'agit de mettre à disposition du public les données brutes collectées par l'administration, permettant ainsi une totale transparence et une valorisation de la donnée publique.

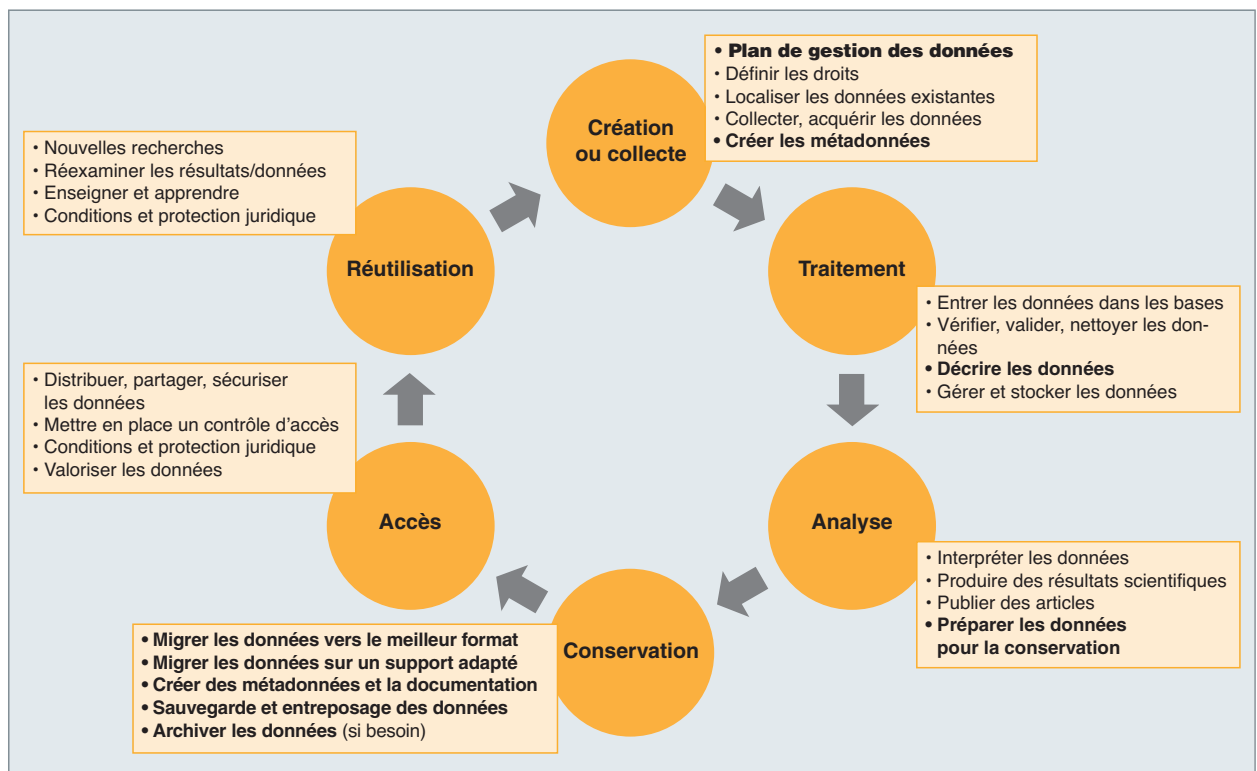


Fig. 37. Le cycle de vie des données.

Les mégadonnées, ou le big data

Littéralement, les « big data », ce sont les « grosses données », le volume gigantesque d'informations brutes ou déjà structurées, présentes sur les réseaux informatiques et les centres de données de la planète. Ces données proviennent de nos échanges (courriels, SMS, réseaux sociaux...), de nos données (photos, musiques...) ou de nos comportements (navigations sur la toile, déplacements physiques suivis *via* nos objets connectés, reconnaissance de visage) mais aussi de collectes d'informations par des objets connectés ou des ordinateurs. Par exemple, au sein des centres de calcul même, de nombreuses mesures sont faites sur les nœuds de calcul, leurs liens réseaux, leur utilisation (mémoire, processeur, réseau), leur consommation électrique ou leur température. Les termes « big data » couvrent ainsi les grands volumes de données mais aussi les très grandes quantités de petites informations. La quantité d'informations collectée est telle qu'aujourd'hui les moyens informatiques nécessaires à leur traitement et leur stockage sont très proches de ceux utilisés pour le calcul haute performance. Nous voyons ainsi arriver une convergence entre le HPC et le big data dénommée HPDA (*High Performance Data Analysis*), menant à une mutualisation des logiciels et matériels.

Il apparaît donc que les données sont bien au cœur de la recherche et de l'innovation et que l'explosion des volumes fait que seuls les systèmes comme les calculateurs hautes performances peuvent les traiter. Les entrées/sorties parallèles sont devenues un composant critique du calcul haute performance moderne. Les simulations sur les machines Petaflopiques produisent quotidiennement des jeux de données allant de plusieurs téraoctets aux pétaoctets. L'analyse de ces données et leur visualisation nécessitent des capacités de lectures et de traitement particulièrement efficaces. Nous allons décrire les principaux types de logiciels permettant ces traitements.

Les logiciels pour les entrées/sorties

Les logiciels nécessaires aux **entrées/sorties*** (fig. 38) peuvent être regroupés en deux catégories :

- Les systèmes de fichiers parallèles qui offrent une interface Posix. Cette interface permet de créer, écrire et lire des fichiers qui sont une suite d'octets sans structure connue du système de fichier. Ces fichiers sont hébergés dans une arborescence de répertoire. Des **métadonnées*** telles que le nom du fichier sont privées et les droits d'accès sont associés au fichier et gérés en interne. Ce logiciel qui est accédé depuis tous les machines simultanément, assure la cohérence des informations. Ainsi, le système de fichier parallèle garantit que si un processeur écrit un octet dans un fichier, tout autre processeur du centre de calcul pourra voir cet octet dès le retour réussi de la fonction d'écriture appelée par le premier processeur. Cette garantie, tout en

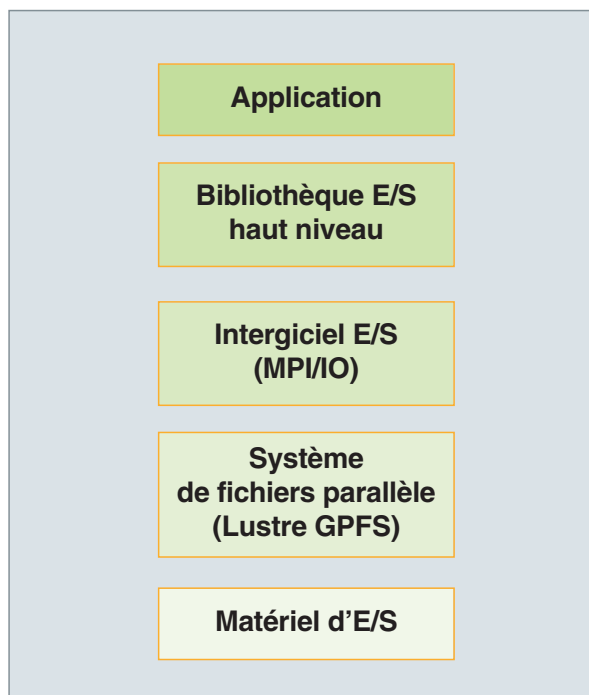


Fig. 38. Pile logicielle des entrées/sorties.

maintenant une haute performance en lecture, en écriture et une tolérance aux pannes, représente le défi principal pour ces logiciels. Dans cette catégorie, nous retrouvons GPFS et Lustre qui implémentent les deux architectures utilisées actuellement ;

- les bibliothèques d'entrées sorties parallèles qui offrent une interface distribuée et de plus haut niveau que Posix. Elles sont appelables depuis les applications parallèles et permettent de réaliser des opérations collectives, d'optimiser les entrées/sorties, d'organiser les données en index ou en arbres, de masquer le système de fichiers, voire d'offrir la cohérence des informations si le système de stockage utilisé n'est pas un système de fichiers. Certaines bibliothèques offrent aussi des interfaces de plus haut niveau allant jusqu'à la définition de dictionnaires et de formats propres à une communauté. Dans cette catégorie, nous retrouvons MPI-IO, HDF5, parallel-NetCDF.

Finalement nous décrirons les tendances pour le futur et les solutions envisagées pour l'Exascale (à l'horizon de 2023).

GPFS

GPFS est le système de fichiers parallèle créé par la société IBM pour répondre aux besoins du calcul haute performance et des applications de traitements de données. Il est issu d'un projet de recherche des années 90 nommé « *TigerShark* » dont l'objectif était de réaliser une solution de stockage pour le streaming vidéo. La première version commerciale de GPFS date de 1998. L'architecture de GPFS est

fondée sur le modèle de stockage partagé (voir fig. 39) : tous les nœuds du cluster accèdent à tout le stockage. Le logiciel, identique sur tous les nœuds, garantit la cohérence des données et des métadonnées par des mécanismes de collaborations.

Un cluster GPFS peut avoir trois types de configuration :

- *Storage Area Network Model* : tous les nœuds sont reliés par un réseau pour les communications entre nœuds et à un réseau de stockage pour accéder aux disques ;
- *Network Shared Disk Model* (NSD) : le même réseau est utilisé pour les communications entre nœuds et pour accéder aux disques *via* un logiciel client/serveur ;
- *Shared-Nothing Cluster Model* : tous les nœuds utilisent leur stockage local et implémentent des serveurs NSD.

La **scalabilité*** de GPFS est obtenue *via* la distribution de toutes les données et les métadonnées si possible au-dessus de toutes les ressources de stockage. Cette distribution permet à une application d'accéder depuis les nœuds du

cluster à toutes les ressources de stockage en parallèle et indépendamment les uns des autres. Cela permet de maximiser l'utilisation de la bande passante tout en limitant les contentions entre les nœuds du cluster. GPFS utilise un mécanisme de verrou distribué afin de synchroniser les accès aux ressources (données et métadonnées) et de permettre l'utilisation de caches locaux aux nœuds afin d'obtenir des performances proches d'un accès local. Les verrous sont gérés collectivement par les différents nœuds qui, après avoir obtenu une délégation d'accès exclusive sur une ressource ne font plus aucun accès réseau durant l'utilisation de cette ressource. GPFS permet de distribuer le contenu d'un répertoire sur plusieurs disques indépendants et ainsi atteint une vitesse de création de fichiers très rapide, même quand le répertoire contient des milliers d'entrées.

GPFS organise le stockage en groupes homogènes dénommés *pool* (flash, disque rotatif...). L'espace de nommage est divisé en *filesets* (ensembles de fichiers) afin de faciliter l'administration du cluster et d'appliquer des politiques de gestion de l'espace. GPFS dispose d'un langage de type SQL permettant de définir la politique de gestion de la donnée au sein d'un cluster GPFS, cette politique reposant sur les métadonnées des fichiers.

Le futur de GPFS est de s'adapter au nouveau défi que représente le big data (voir encadré, page 52) et d'offrir de nouvelles fonctionnalités de qualité de service pour les applications, de chiffrement de fichier ou de compression.

Lustre

Lustre est un système de fichiers parallèle OpenSource conçu pour le calcul haute performance et utilisé dans la majorité des centres de calcul. Son développement a commencé en 1999 à l'université de Carnegie Mellon, la première version utilisée en production arriva en 2001, les versions suivantes ont toujours été utilisées sur les premières machines du TOP500 (60 %). Son architecture (voir figure 40) permet des configurations de plusieurs dizaines de milliers de clients et des systèmes de fichiers capables de plus de 1 To/s. Lustre est entièrement implémenté dans le noyau Linux et utilise une architecture client/serveur utilisant des objets distribués sur les serveurs. Ces objets sont soit des données (une suite d'octets), soit des index accessibles par une interface de type clef/valeur. Les composants de Lustre sont :

- MDT : *Meta Data Target* utilisés pour l'espace de nommage.
- OST : *Object Storage Target* utilisés pour héberger les objets « données ».
- LDLM : *Lustre Distributed Transaction Manager* est un service de verrous offert par les « *Target* » et permettant de

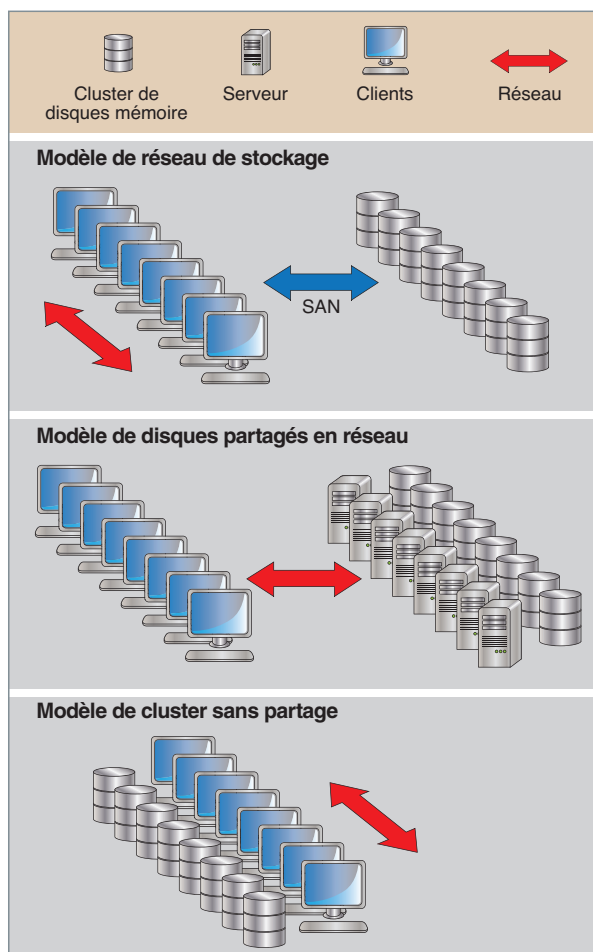


Fig. 39. Architecture du système de fichiers parallèle GPFS.

sérialiser les conflits d'accès aux ressources et ainsi de garantir la cohérence des caches distribués.

- LNet : *Lustre Networking* est une couche d'abstraction réseau qui permet le support de plusieurs réseaux haute performance comme InfiniBand ou Aries de Cray, voire tcp/ip pour la connectivité à des machines plus éloignées du cœur réseau du centre de calcul ou nécessitant moins de performance.
- Le Client : il est chargé de combiner les objets données et index hébergés par les « *Target* » pour offrir un espace de nommage Posix³² unique et cohérent.

Un centre de calcul utilisant Lustre comporte plusieurs dizaines de MDT, plusieurs centaines d'OST et des milliers de clients.

Chaque fichier est associé à un « *layout* » qui décrit les objets servant à constituer le fichier. Les accès à ces objets sont faits en parallèle sur les différentes *Target* permettant ainsi une scalabilité horizontale entre les *Target*. Grâce au LDLM, les clients et les *Target* implémentent des caches mémoires de grande taille, ce qui permet d'atteindre les débits maximum possibles sur les matériels tels que les interfaces réseaux ou les contrôleurs de stockage disque, tout en garantissant la cohérence des données entre tous les clients. Cela permet la scalabilité verticale entre les Clients.

Lustre offre aussi des mécanismes de migration de données permettant de supporter un stockage hétérogène (**Flash*** rapide, disques rotatifs capacitifs) et une extension quasi infinie vers du stockage externe. Dans ce mode, Lustre conserve la gestion de l'espace de nommage mais les données sont hébergées en dehors de Lustre. Les données sont déplacées de façon transparente par des agents de copie selon leur usage. Les données non accédées depuis une durée paramétrable sont copiées en dehors de Lustre et seule une coquille vide représentant le fichier est conservée dans Lustre. Au premier accès, les données sont rapatriées dans Lustre pour y être utilisées. Cette fonctionnalité a été développée par le CEA/DAM, c'est un des avantages des logiciels Open Source, la communauté peut enrichir le logiciel.

Le futur de Lustre est d'augmenter sa scalabilité selon les deux axes, pour répondre aux besoins de l'Exascale. Cela se traduit par une évolution permettant aux applications de relâcher explicitement les contraintes Posix afin d'avoir de meilleures performances.

32. POSIX est une famille de normes techniques définie depuis 1988 par l'Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), et formellement désignée par IEEE 1003. Ces normes ont émergé d'un projet de standardisation des interfaces de programmation des logiciels destinés à fonctionner sur les variantes du système d'exploitation UNIX. © Wikipedia.

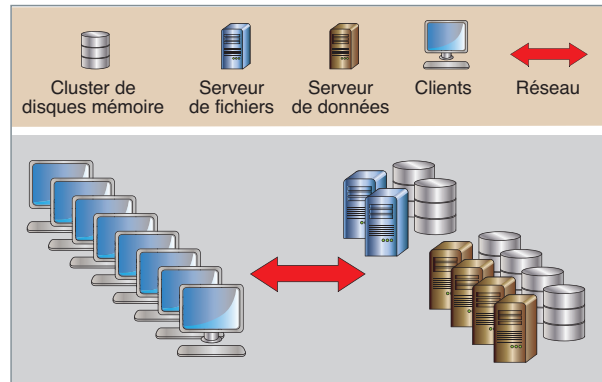


Fig. 40. Architecture du système de fichiers parallèle Lustre.

MPI-IO

MPI (*Message Passing Interface*) est un standard qui définit les structures, types et fonctions nécessaires à l'implémentation d'une bibliothèque de communication implémentant le modèle de programmation par passage de message. Elle est hautement portable et permet ainsi aux applications parallèles de tourner sur tout type de calculateur, tout en masquant les différences architecturales ou matérielles de ces machines.

MPI-IO, qui standardise une interface d'Entrée/Sortie (E/S ou I/O en anglais pour *Input/Output*), a été réalisée dans le cadre du standard MPI-2 en 1997. Elle définit comment plusieurs processus d'une application parallèle écrivent et lisent les éléments d'un unique fichier partagé. Généralement MPI-IO est implémenté au-dessus d'un système de fichier parallèle.

Il existe trois façons de faire des E/S depuis une application parallèle :

- Chaque processus utilise son propre fichier. Cette méthode est simple à implémenter mais entraîne un grand nombre de fichiers difficiles à gérer. Une autre conséquence est que sans réorganisation des données, l'application doit toujours avoir le même nombre de processus pour relire ou modifier les fichiers ;
- tous les processeurs envoient leurs requêtes d'E/S à un seul processus qui sert d'interface vis-à-vis du stockage. Cela permet une dynamique dans le nombre de processus de calcul et de traitement, mais le processus d'E/S peut devenir le facteur limitant ;
- tous les processus font des E/S en parallèle dans un unique fichier partagé. Cette méthode supprime les limitations des deux précédentes en offrant une vue unique du fichier tout en maintenant une grande performance.

MPI-IO permet de réaliser les E/S selon le troisième modèle. Chaque processus peut accéder au contenu d'un fichier soit

via une position implicite (qui avance au fur et à mesure des actions), soit via une position explicite (lire/écrire à telle position), soit via une position partagée (chaque action d'un processus du groupe fait avancer la position pour tout le groupe). Les E/S peuvent être synchrones ou asynchrones permettant ainsi un recouvrement entre l'E/S et du calcul. Elles peuvent être indépendantes (chaque processus fait ses E/S seul) ou collectives. Une E/S collective est une action pour laquelle tous les processus vont collaborer. Cela rend les E/S synchrone entre les processus mais permet de réorganiser les données avant de les écrire pour plus d'efficacité. MPI-IO apporte le concept « *File View* » qui permet à chaque processus d'adapter sa vision du fichier à la structure mémoire de ses données et ainsi de faciliter l'opération d'E/S. L'interface permet à l'application de fournir des indications sur les données et leur usage, afin que la bibliothèque puisse optimiser ses actions vis-à-vis du système de fichier, du réseau ou du cache mémoire. Enfin, elle permet aussi d'avoir de la vérification d'intégrité de donnée, une représentation portable des données permettant de relire les données sur toute machine même celle ayant un format de représentation binaire différent.

Parallel-NetCDF et HDF5

Parallel-NetCDF, noté pNetCDF, est une bibliothèque de haut niveau qui permet d'écrire et de lire des fichiers portables et auto-décrits, c'est-à-dire où les données ne sont plus des suites d'octets dont seule l'application connaît la signification mais où les données sont décrites explicitement en terme de format, taille. Ainsi, tout programme qui utilise la bibliothèque pNetCDF sera capable de relire et de modifier les données d'un fichier au format pNetCDF, et ce sans même connaître le programme qui a écrit les données. pNetCDF est conçu pour gérer des matrices à dimensions multiples.

HDF5, pour « *Hierarchical Data Format* » version 5, est un triptyque modèle de donnée, bibliothèque, format de fichier permettant de stocker et de gérer des données. HDF5 a été conçu en 1998 pour les très grands jeux de données devant être partagés au sein d'une communauté et entre communautés. Les fichiers HDF5 sont auto-décrits et permettent de décrire des structures complexes hiérarchiques. Le format de fichier HDF5 est portable, il contient des codes de protections permettant de garantir l'intégrité des données. Il supporte aussi le micro-versionnage des objets qui permet des évolutions douces des formats de données sans rompre la compatibilité. HDF5 dispose d'une communauté active qui développe de nombreux outils permettant de manipuler, visualiser les fichiers, faisant ainsi bénéficier tous les utilisateurs d'outils puissants et pérennes.

Les bibliothèques pNetCDF et HDF5 sont implémentées au-dessus de Posix ou de MPI-IO.

Le futur de HDF5 est de se préparer aux machines Exaflopiques qui verront une augmentation des parallélismes au sein d'un nœud (via le *multithreading*) ou entre nœuds.

Les tendances pour le futur

Au cours des vingt dernières années, l'informatique en général et le HPC en particulier ont suivi une progression régulière reposant sur les progrès de la lithographie du silicium. Ces progrès ont permis de régulièrement augmenter la fréquence des processeurs et la capacité de stockage des mémoires et des disques, tout en restant dans une enveloppe de consommation électrique à peu près constante. Cette progression est finie et maintenant, pour augmenter les performances, il faut faire appel à un parallélisme massif à niveaux multiples, comme expliqué *supra*, p. 33. Les technologies de stockage doivent être adaptées, voire repensées pour gérer un parallélisme massif, pour limiter les mouvements de données grands consommateurs d'énergie. Les principales conséquences sont :

- L'évolution vers un modèle de calcul centré sur les données où le traitement de la donnée va au plus proche de la donnée ;
- l'abandon de la sémantique Posix couplée à l'introduction d'interface permettant la transmission par les applications d'information sur l'usage, le type des données. Ces informations permettront d'optimiser la localisation et d'offrir la juste cohérence nécessaire à l'usage ;
- l'évolution vers un modèle de stockage de type objet où le stockage ne gère plus des blocs d'octets de taille fixe mais des objets de taille variée associés à des métadonnées les décrivant.

L'analyse et le post-traitement des données

Dans les précédents chapitres, nous avons vu l'importance des données expérimentales et issues de la simulation ainsi que les différents logiciels permettant de les produire, de les conserver et de les lire. Afin de faciliter la lecture et la compréhension de ses données, une autre famille de logiciels est nécessaire : les logiciels d'analyse et de post-traitement. Ces logiciels permettent de mettre en forme les données afin de la visualiser graphiquement ou de leur appliquer un traitement numérique afin de produire un nouveau jeu de données. Pour cela, les scientifiques utilisent soit des logiciels complets comme ParaView, Matlab ou Scilab soit ils développent leurs propres outils à l'aide de langages de programmation comme Python ou R et des bibliothèques d'extensions.

ParaView est un outil *Open Source* multiplateformes d'analyse et de visualisation de données. Il permet de créer rapi-

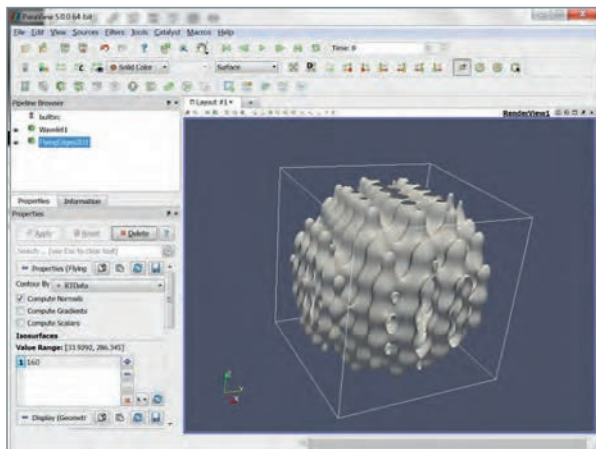


Fig. 41. Exemple de visualisation par l'outil d'analyse et de traitement de données ParaView.

dement des analyses quantitatives et qualitatives et permet une exploration 3D. Il a été conçu et développé pour les grands jeux de données et peut s'exécuter sur les super calculateurs ou sur une simple machine de bureau (fig. 41).

Python est un langage puissant, orienté objet, permettant des travaux de développement génériques et scientifique. Du fait de sa syntaxe concise, de sa rapidité de développement, de son modèle *Open Source*, et de la richesse des bibliothèques dont il dispose dans le domaine scientifique, il est très rapidement diffusé au sein des communautés scientifiques. Des bibliothèques comme Numpy permettent l'utilisation des tableaux multidimensionnels et des traitements de type algèbre linéaire. Scipy est une bibliothèque de calcul scientifique disposant de fonctions de traitement du signal, d'interpolation.

Dans le cas de traitements plus spécialisés, des langages spécifiques peuvent être développés. C'est le cas de R qui est un logiciel libre de traitement des données et d'analyse statistique. Il dispose dans sa version de base de la plupart des fonctionnalités utiles pour la statistique courante, mais comme tout logiciel moderne il est extensible *via* des bibliothèques. Ces bibliothèques couvrent un très large champ et vont de la statistique multivariée aux méthodes de ré-échantillonnage, de l'économétrie à la biométrie, de l'analyse des graphes au traitement des images, des modèles de régression sur séries chronologiques ou les modèles à équations simultanées, en passant par l'analyse de données écologiques (comme illustré par le logiciel ade³³), sans oublier l'approche bayésienne.

33. <http://pbil.univ-lyon1.fr/ade4/>

L'analyse *in situ*

L'analyse des données peut se faire de deux manières : soit à la fin de l'exécution du processus producteur (expérience ou simulation numérique), soit en cours de calcul. Dans le premier cas, il s'agit d'une analyse qualifiée de post-mortem ou hors ligne (*offline* en anglais) reposant sur la relecture de fichiers potentiellement très volumineux. Dans le second cas, il s'agit de réaliser un traitement en ligne (*inline*) ou *in situ* en parallèle du producteur. Cette dernière approche offre l'avantage de pouvoir limiter fortement les écritures sur disque et de produire les données de post-traitement (souvent des graphiques) de manière quasi synchrone avec le code, offrant aux utilisateurs un gain de productivité appréciable. Les inconvénients de l'approche *in situ* sont la consommation mémoire, la rigidité du dépouillement et la difficulté de réaliser un dépouillement *post mortem*. La consommation mémoire est impactée car le logiciel d'analyse a besoin d'un espace mémoire en propre pour pouvoir travailler. Il doit donc partager la ressource mémoire avec le code de calcul, réduisant de fait la taille des simulations possibles. Comme l'analyse des données est réalisée en parallèle du code, les directives données au logiciel d'analyse doivent être connues dès le départ du calcul. Cela introduit une rigidité qui n'existe pas dans le cas d'une analyse *post-mortem* où l'utilisateur pilote interactivement son analyse. Enfin, si l'on a effectué les analyses en vol sans stocker les données utilisées, on se trouve alors dans l'impossibilité de rejouer une autre séquence d'analyse sans relancer le calcul principal, ce qui est souvent hors de portée. L'utilisation des méthodes *in situ* est donc liée à un compromis immédiateté du dépouillement contre temps et volume d'écriture (puis relecture) des données pour une analyse différée mais souple. Néanmoins, les approches *in situ* et *post mortem* ne sont pas à opposer mais peuvent être conjuguées de manière efficace, notamment en couplant simulation et *in situ* afin de ne stocker que des informations pertinentes pour une analyse *post mortem* et ainsi minimiser le volume de données à stocker et à analyser.

La visualisation des données

Dans la section précédente, nous avons présenté des outils de post-traitement des données produites, dont la plateforme de visualisation scientifique Paraview³⁴. Les outils de visualisations scientifiques sont distribués sur tous les systèmes, mais les données produites par des supercalculateurs ne sont souvent pas transportables sur une machine distante. La visualisation des résultats est pourtant un complément essentiel à une chaîne de calculs statistiques répondant à une question précise. La phase de développement des algorithmes demande des validations visuelles régulières pour leur mise au point, ainsi que celle des post-traitements. Le débogage des codes de calcul est simplifié par

34. www.paraview.org

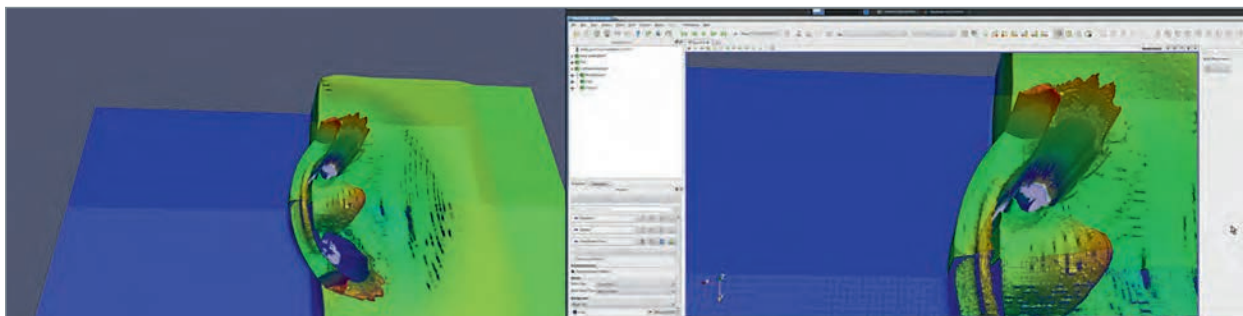


Fig. 42. Vue pleine résolution sur le mur d'images Mandelbrot et interface de Paraview du code AMR CanoP Pi4EST.

la compréhension visuelle des problèmes, par exemple des erreurs sur les conditions aux limites. Une visualisation périodique de la qualité des simulations est aussi nécessaire dans les productions d'expériences longues. Enfin, des techniques de manipulation (*steering*) en direct des paramètres, pendant l'exécution sur le supercalculateur, émergent et permettront de réduire le nombre de simulations à produire pour faire des analyses de sensibilités ou d'optimum des paramètres physiques lorsqu'on ne peut implémenter des algorithmes d'optimisation.

Le choix d'un outil permettant la visualisation des données produites par un code de simulation numérique dépend de plusieurs critères :

- La régularité des maillages utilisés par le modèle. Tous les outils peuvent lire des données très régulières, mais pas forcément les maillages totalement non structurés. Les données particulières ou issues de modèles à raffinement automatique (AMR, voir fig. 42) sont des cas particuliers difficiles ;
- la taille des fichiers sauvegardés et l'organisation des bases de données sont aussi essentielles pour ce choix. De même, l'organisation des variables (par exemple, temporelle) des fichiers permettra simplement de faire varier en temps les interactions de visualisation ou non. Un choix judicieux étant de construire le moins de fichiers possible avec, dans un fichier, une série par pas de temps sauvegardés de jeux de données pour différentes variables ;
- le niveau de portabilité du format de fichier est lui aussi un point à prendre en compte dès le choix des entrées-sorties d'un modèle. Choisir un format adapté à son modèle de donnée (non-structuré, particulière, AMR) et adopté par la communauté scientifique avec laquelle on souhaite pouvoir partager des résultats et inter-comparer des modèles est essentiel. C'est le cas du NetCDF dans la communauté climat.

Dans une simple vision de visualisation *post mortem* (à la fin du calcul), le parallélisme des outils de post-traitement et

particulièrement de visualisation est important si les données sont volumineuses. En effet, certains applications parallèles font très peu de sorties, mais si on en active la taille des fichiers peut dépasser le gigaoctet voir le téraoctet, parfois par variable à afficher. Il est alors complètement impossible d'utiliser une application de visualisation séquentielle sans avoir un **GPU*** (processeur graphique décrit *supra*, p. 26) parmi les plus puissants du marché. On utilisera plutôt une des application de visualisation parallèle décrit plus loin ou bien un coprocesseur graphique directement lié au code de calcul réparti sur le calculateur. Les outils parallèles permettent de répartir la lecture des données (surtout sur un système de fichiers parallèle décrit *supra*, p. 52) et le processus de rendu, qui construit la scène de visualisation avec les variables affichées en fonction des transformations (couleur, géométriques, volumique, ou dépendant d'autres variables), les lumières et les ombres ajoutées pour une meilleure lisibilité. On peut répartir ce processus, utilisant des algorithmes de lancer de rayon depuis l'observateur, sur des processeurs graphiques qui sont optimisés pour faire des calculs avec la librairie OpenGL ou bien sur de nombreux processeurs de calculs avec la bibliothèque de calcul OpenGL Mesa.

Les trois grands outils de visualisation scientifique (Paraview, VisIt et EnSight) possèdent chacun une cinquantaine ou plus de formats de lecture en entrée, avec un format spécifiquement entretenu et optimisé pour l'application par les équipes de développement. Ce n'est pas toujours celui qui est le mieux adapté aux données des modèles. Ainsi, VisIt développe une bibliothèque de construction de fichier HDF5 parallèle, appelé « silo », mais son lecteur de la convention d'écriture du HDF5 appelé « Pixie » a été beaucoup plus optimisé pour des données régulières dans son moteur de rendu parallèle.

Le processus de visualisation des données démarre par l'utilisation d'un serveur parallèle de rendu et de la lecture des données par ce serveur. Ce lecteur peut être situé sur le centre de calcul et la GUI de l'application sur la machine de l'utilisateur. Certaines applications s'en sortent alors mieux que d'autres dans la gestion des flux de pixels entre le client et

le serveur. L'utilisateur peut alors interagir sur les jeux de données contenus dans le ou les fichiers (s'il s'agit de séries temporelles ou spatiales) en affichant une variable en fausse couleur, par exemple. La construction d'un pipeline de transformations (statistique, topologique, géométrie) permet d'affiner l'analyse visuelle de la solution calculée et surtout de mettre différents phénomènes en corrélation à l'écran.

Comme nous venons de le voir, la simplicité de la fabrication des visualisations dépend de l'environnement informatique mis à disposition des utilisateurs. Ainsi, la présence de nœuds de calcul dits « larges » sur les supercalculateurs permet de rendre plus locale cette production. Et la mise à disposition d'une plate-forme de visualisation distante sécurisée telle que VisuPortal au TGCC, permet de s'affranchir des problèmes de transferts de données parfois gigantesques et de toute façon hors de portée pour les futures machines exascales dans l'avenir, car la progression des réseaux externes (par exemple RENATER) avance d'un facteur 10 tous les dix ans lorsque les machines de calculs gagnent un facteur 1 000.

L'utilisation de murs d'images en visualisation est simplifiée par les avancées en interaction sur les clusters graphiques. La montée en résolution des calculs HPC est beaucoup plus grande que l'augmentation en pixels des écrans de bureau. Aussi les murs d'images forment-ils une solution intéressante à la visualisation de milliards de mailles sur des murs qui dépassent les 30 millions de pixels, comme la plate-forme Mandelbrot à la Maison de la Simulation. Cette plate-forme offre la 3D stéréoscopique qui rend la profondeur des champs affichés beaucoup plus réaliste et simplifie la compréhension des simulations à trois dimensions. Ces très hautes résolutions permettent aussi d'analyser les ensembles de simulation, issus du lancement simultané de cen-

taines de simulations (voir fig. 43). Nous travaillons activement sur des projets d'affichage multiples et synchrones d'applications qui aideront les scientifiques à analyser visuellement des bancs d'expériences, en complément des analyses statistiques actuels, comme les métriques. Ces middlewares dédiés aux murs d'images sont construits pour permettre par exemple le classement visuel des éléments, l'interaction simultanée sur tous les outils d'affichage et la sélection de certains éléments pour un affichage en plus haute résolution.

Les principaux outils de visualisation développés et utilisés actuellement sont libres pour la plupart. L'outil propriétaire Ensight est utilisé dans beaucoup d'industries et certaines grandes écoles et instituts de recherches, mais n'est pas le plus répandu. L'outil SDVision développé par l'équipe COAST de la DRF/IRFU repose sur IDL et utilisé à la base pour des visualisations en astrophysiques. Il existe un moteur libre de droits pour l'IDL. L'outil Snorky3D est développé au CEA/DEN, permet un affichage particulière réaliste (suivi des trajectoires) de champs 3D issu notamment des simulations TrioCFD.

Les autres outils utilisent pratiquement tous la puissance de développement haut niveau du python. Une première bibliothèque intégrée dans le paquet scientifique Scipy est matplotlib, qui fait principalement des affichages 2D, mais utilise les atouts de la bibliothèque numérique numpy de python/Scipy. Cela simplifie grandement la construction de visualisations simples.

La société Kitware est une société américaine, avec une filiale française à Lyon, faisant la promotion du développement opensource de sa bibliothèque VTK et de plusieurs applications dont Paraview, utilisée et maintenue par une très grande communauté du libre. VTK peut être vue comme une surcouche logiciel de l'OpenGL, mais c'est surtout l'infrastructure de programmation des pipelines de filtres de données, depuis la lecture séquentielle ou parallèle jusqu'au filtre de découpage sur des plans ou de rendu volumique 3D. Un format moderne efficace est le VTK ADIOS (extension vta) qui permet un bon parallélisme d'écriture/ lecture avec VTK. Paraview est aussi un très bon outil pour la visualisation sur mur d'image car les moteurs de rendu parallèles peuvent afficher leur sortie sur le serveur graphique auquel le GPU qu'ils utilisent est connecté. Une sortie récente notable de la société Kitware est l'outil Cinema qui permet de produire des séries d'images tridimensionnelles à plusieurs épaisseurs pendant



Fig. 43. Plateforme Braintwister de visualisation d'IRM de cerveaux Neurospin, LRI, MdS.

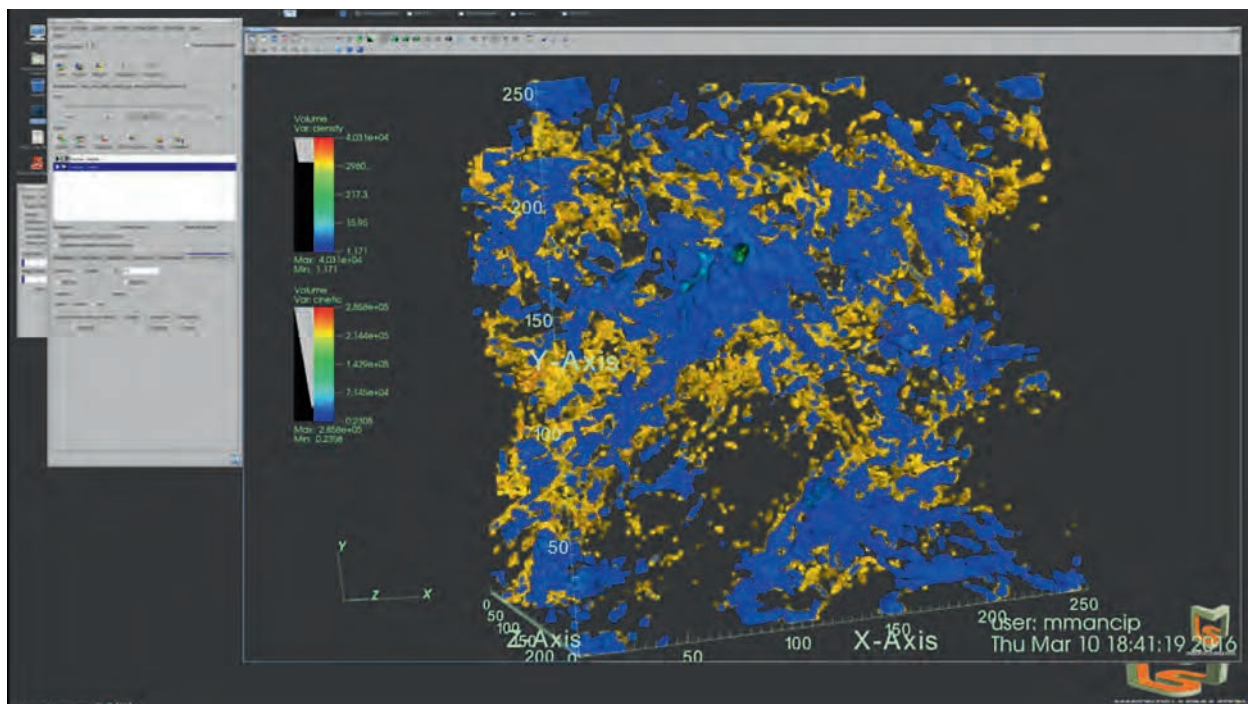


Fig. 44. Simulation du milieu interstellaire avec RAMSÈS GPU sur Titan. P. Kestener.

la simulation, car c'est là que cette production est la moins coûteuse. Ces films 3D peuvent être analysés à la fin de la simulation couche par couche de manière interactive (rotation, épaisseur).

D'autres outils sont aussi fondés sur VTK et son utilisation dans des scripts python, comme mayavi, vapor et VisIt. Ce dernier possède une implémentation très efficace des connections client-serveur de rendu qui le rend très performant sur des clusters de calculs (fig. 44), avec de très nombreux processus pour le moteur de rendu, mais aussi sur des fermes de GPU distantes. Seuls les flux de pixels finals transitent sur les réseaux **TCP*** (internet, par exemple) avec les bonnes configurations. Cela fluidifie la lecture temps réel de très grosses données.

Enfin, pour conclure cette partie sur la visualisation scientifique, la production de films issus des simulations est maintenant courante et nous maîtrisons toute la chaîne depuis la construction de scénarios, la fabrication des scènes avec des effets de caméra, comme des travelings adaptés au mouvement des modélisations calculées, jusqu'à la production de films stéréoscopiques ou non et de disques haute résolution pour la vulgarisation scientifique.

Les méthodes numériques et algorithmiques

L'arrivée de machines de très grande puissance est une fantastique opportunité pour les simulations numériques, dans les domaines où elles sont classiquement utilisées, mais aussi dans de nouveaux domaines. Nous présentons dans cette section les principales méthodes numériques et algorithmiques utilisées au CEA. La présentation de chaque type de méthode est volontairement brève, avec des exemples à but uniquement pédagogique. Une description plus détaillée des applications est donnée dans la seconde section de la monographie, p. 81. Nous passons d'abord en revue les méthodes pour les champs continus, *i.e.* les phénomènes physiques descriptibles à l'aide de variables continues, linéaires, comme les ondes, ou non linéaires, comme les écoulements fluide. Nous traitons ensuite de la résolution des problèmes dans un espace à grand nombre de dimensions, ce qui arrive par exemple en transport de particules, où, aux trois dimensions de l'espace usuel, s'ajoutent celles de l'espace des vitesses.

Sur un exemple : les algorithmes évolutionnaires, nous présentons enfin les méthodes d'optimisation (*infra*, p. 72) et les calculs d'incertitudes (*infra*, p. 75), domaines dans lesquels la puissance des machines a aussi permis des avancées considérables.

En contrepoint à tous ces progrès, il faut, pour tirer raisonnablement parti des machines actuelles et futures, revoir en profondeur les méthodes numériques pour les adapter et les mettre en adéquation avec ces machines. Ce sujet est abordé dans la section suivante.

Adéquation et adaptation des algorithmes et des méthodes numériques aux machines de puissance actuelles et futures

L'évolution matérielle, envisagée dans le cadre du renouvellement futur des grands centres de calcul mondiaux, progresse vers un parallélisme massif possédant des caractéristiques techniques bien différentes de celles des supercalculateurs parallèles actuellement utilisés, en particulier au CEA/DAM ou au TGCC. En effet, la volonté de maîtriser la consommation électrique et la stagnation de la fréquence d'horloge conduisent naturellement à une augmentation importante du nombre de cœurs³⁵ de calcul

au sein d'un même processeur associée à un temps d'accès à la mémoire différent en fonction de la zone accédée.

Conséquence de ces évolutions, la programmation homogène, qui consiste à n'avoir qu'un niveau de parallélisme plutôt macroscopique de type MPI³⁶, tire à sa fin. Il faut donc se préparer à vivre dans un monde dit « hybride » où il est impératif d'extraire tout le parallélisme possible d'un code de calcul. Ce nouveau monde peut être décomposé en trois niveaux de parallélisme : le niveau Macro (toujours représenté par MPI), le niveau Méso (représenté par la notion de *threads*³⁷) et le niveau Micro (représenté par la notion de vectorisation). Et aucun de ces niveaux ne doit être sacrifié ! Certaines méthodes numériques sont naturellement en adéquation avec ces contraintes de parallélisme massif.

De plus, il faudra aussi porter une attention particulière aux accès à la mémoire pour le stockage et le rapatriement des données au sein des algorithmes numériques. En effet, les accès à la mémoire peuvent vite devenir aussi longs et coûteux que le calcul lui-même et donc faire perdre tout le bénéfice apporté par le parallélisme hybride. Les méthodes à forte intensité calculatoire, *i.e.* réalisant beaucoup de calculs et peu d'accès mémoire, sont donc naturellement plus efficaces. Quant aux communications par échanges de messages de type MPI, elles sont très pénalisantes au niveau de l'efficacité d'un code dès que l'on va au-delà d'une dizaine de milliers de cœurs de calcul.

Pour répondre à ces nouveaux défis imposés par l'évolution des calculateurs, une des voies possibles est d'imaginer de nouveaux algorithmes s'appuyant plus fortement sur les calculs — même en les répétant plusieurs fois — mais beaucoup plus économes en accès mémoire et en échanges de données. Nous parlons alors de méthodes « *computationally intensive* » ou, en français, « intensives en calcul ». Dès lors, il existera plusieurs façons de résoudre un problème numérique dans un code de simulation, combinant différentes méthodes mathématiques et techniques de parallélisation.

Illustrons notre propos sur l'exemple plus concret de la diagonalisation itérative mise en jeu dans les codes de **dyna-**

35. Unité de calcul capable d'exécuter des programmes de façon autonome.

36. *Message Passing Interface* : fonctions spécifiques permettant l'échange de données entre deux processus indépendants.

37. Les *threads* sont des fils d'exécution indépendants et parallèles d'une partie du code.

mique moléculaire quantique* de type **DFT*** [1], voir p. 149. Le problème est de calculer efficacement les plus petites valeurs propres (celles correspondant aux états de plus basse énergie occupés par les électrons) de l'opérateur Hamiltonien. Les algorithmes de diagonalisation itérative peuvent être classés en plusieurs niveaux, en fonction du nombre d'applications (très consommatrices en opérations numériques) de cet opérateur, et des communications nécessaires pour maintenir les vecteurs propres orthogonaux entre eux.

Les algorithmes utilisés jusqu'à présent avec succès pour un nombre de cœurs inférieur à quelques milliers sont de type gradient conjugué multibloc. Citons à titre d'exemple l'algorithme de Davidson par bloc ou celui implémenté dans le code ABINIT, LOBPCG (*Locally-Optimal Block Preconditioned Conjugate Gradient*) [2]. Comme cette dénomination l'indique, le principe est de résoudre le problème par bloc, *i.e.* de diviser le système en plusieurs sous-espaces pour les traiter indépendamment les uns des autres. Le nombre d'applications nécessaires de l'opérateur **Hamiltonien*** est de l'ordre de trois à cinq par itération. Grâce à la méthode par bloc, il faut simplement orthogonaliser chacun des sous-espaces à chaque itération. Le traitement d'un bloc est lui-même parallélisé et nécessite des communications MPI sur un sous-ensemble de cœurs et non pas sur la totalité des cœurs. Il ne reste donc plus qu'une opération d'orthogonalisation globale par itération. Toutefois, le coût de l'ensemble des communications MPI du processus devient prohibitif quand le nombre de cœurs devient très grand. Il faudra donc abandonner ces algorithmes de diagonalisation itérative au profit d'algorithmes fondés sur une projection du spectre des valeurs propres, plus performants dans le cadre d'une utilisation sur un très grand nombre de cœurs, comme expliqué ci-après.

Le principe des algorithmes fondés sur une projection du spectre des valeurs propres repose sur la recherche des valeurs propres d'un opérateur auxiliaire dont le spectre est localisé exactement dans la région recherchée. Plusieurs méthodes existent ; parmi elles, celle basée sur un « **filtre de Chebyshev*** » [3]. Pour ces méthodes, il est nécessaire d'effectuer un nombre plus important d'applications (de l'ordre de 5 à 10) du nouvel opérateur Hamiltonien. Mais plus aucune communication MPI n'est maintenant nécessaire pendant les itérations ! Seule une communication globale doit être effectuée en fin de processus. La différence de performance entre les deux types de méthodes est notable, comme illustré sur la figure 45.

Ces résultats peuvent encore s'améliorer avec des travaux sur l'augmentation des capacités vectorielles de l'algorithme et une gestion mémoire prenant en compte les effets NUMA. Dans ce cas, la mise en œuvre de la méthode basée sur un filtre de Chebyshev se rapproche du Speedup idéal pour un très grand nombre de cœurs.

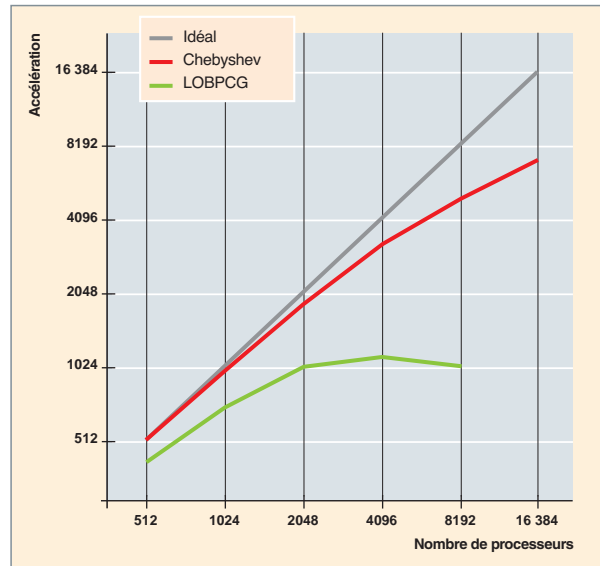


Fig. 45. Comparaison du facteur d'accélération entre les algorithmes LOBPCG et Chebyshev.

Cet exemple illustre bien le fait qu'il est impératif de repenser entièrement les algorithmes numériques pour mieux les adapter aux futurs calculateurs. Bien évidemment, cette conclusion s'applique dans la plupart des domaines d'application des codes de simulation destinés aux machines exaflopiques : **équations aux dérivées partielles*** (EDP), méthode Monte-Carlo, dynamique moléculaire, comme nous allons le voir dans les sections suivantes.

Les méthodes numériques pour les champs continus dans l'espace

Nous présentons d'abord brièvement les trois méthodes les plus classiques pour simuler les champs continus dans l'espace, *i.e.* pour résoudre des équations aux dérivées partielles (EDP), linéaires ou non, gouvernant ces champs : les différences, éléments, et volumes finis. Le lecteur est renvoyé aux références [4,32,33,34] pour plus d'information sur les fondements de ces méthodes et à la seconde section de cette monographie, pour des exemples.

Généralités : les équations aux dérivées partielles, différences, éléments, volumes finis, estimation d'erreur

La première étape est d'écrire l'équation aux dérivées partielles (EDP), définie comme une relation entre les dérivées partielles en temps et en espace, gouvernant le champ continu u . Par exemple, l'équation des ondes sonores en une dimension relie les dérivées partielles seconde en temps et espace de u et s'écrit $u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0$, où u est, par exemple, le champ scalaire de pression, c la vitesse du son.

Cette équation est assortie de conditions initiales (valeurs de u et de u_t au temps 0). Elle est résolue dans un domaine fini, en une dimension l'intervalle $[0,1]$, aux bornes duquel sont imposées des conditions aux limites, par exemple de Dirichlet : $u(0,t) = f(t)$, $u(L,t) = g(t)$. Plusieurs méthodes de discrétisation sont possibles : commençons par présenter la plus ancienne et la plus simple, les **différences finies**.

La méthode des différences finies [32] permet de calculer les valeurs de u aux points $(x_j = jh, t_n = n\Delta t)$ d'une grille de pas d'espace h et de pas de temps Δt uniformes. La valeur approchée de u au point (x_j, t_n) est notée u_j^n .

Les dérivées partielles sont approchées par des quotients différentiels en supposant toute la régularité nécessaire sur u . La dérivée seconde en espace est, par exemple, approchée par

$$u_{xx} \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}.$$

L'approximation différences finies de l'équation des ondes s'écrit alors :

$$\frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\Delta t^2} - c^2 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} = 0,$$

ou encore, $u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1} = \eta^2(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$,

avec $\eta = \frac{c\Delta t}{h}$, paramètre de Courant.

Cette relation, associée aux conditions aux limites, qui vont imposer $u_0^n = f(n\Delta t)$ et $u_{J+1}^n = g(n\Delta t)$, permet de calculer les valeurs de la solution au temps $n+1$ si on les connaît aux temps n et $n-1$, donc de calculer les u_j^n $1 \leq j \leq J$ aux J points intérieurs à partir des conditions initiales, et de résoudre (approximativement) notre EDP.

On généralise aisément (au moins sur le principe...) au cas de plusieurs dimensions d'espace : la grille est maintenant multidimensionnelle en espace et on calcule (par exemple en 2D) les u_{ij}^n grâce à des équations aux différences analogues à celles obtenues en une dimension.

Si l'insertion des valeurs ponctuelles $u(x_j, t_n)$ de la solution exacte dans le schéma permet d'obtenir un résidu de la forme $O(h^p + \Delta t^q)$, le schéma est dit consistant à l'ordre p en espace et q en temps. Le théorème de Lax permet alors d'affirmer que, sous condition de stabilité (un schéma est stable s'il n'amplifie pas le bruit numérique, nous renvoyons à [4] pour une définition plus formelle de la stabilité), l'erreur numérique (définie comme la norme, par exemple L^2 , de la différence entre la solution exacte et son approximation numérique) est d'ordre $O(h^p + \Delta t^q)$, c'est-à-dire majorée par $C(h^p + \Delta t^q)$ quand h et Δt tendent vers 0, où C est une

constante. On pourra vérifier que le schéma présenté ci-dessus est d'ordre 2 en temps et en espace : un raffinement par 2 du maillage conduit à diviser par quatre l'erreur. La condition de stabilité (dite « condition de Courant ») du schéma [4] est que η soit inférieur à 1.

L'approximation numérique est ici définie comme la solution exacte des équations aux différences obtenues. Or, les ordinateurs travaillent en précision finie. Les nombres réels sont en effet représentés par un nombre fini de bits, le plus couramment 32 (simple précision) ou 64 bits (double précision). L'approximation numérique effectivement obtenue peut donc être différente de l'approximation numérique « théorique ». Nous ne discuterons pas de cette question et renvoyons le lecteur à [5]. En somme, ni l'erreur due au schéma numérique (dont seul le comportement asymptotique pour h et Δt « petits », comme expliqué plus haut, est déterminé) ni celle due à la précision finie des ordinateurs ne sont exactement connues : on parlera d'incertitudes numériques, à bien distinguer des incertitudes de modèle (voir *infra*, p. 75). Ces incertitudes numériques peuvent toutefois être estimées par exemple en réalisant plusieurs simulations avec des mailles de finesses différentes.

La méthode des différences finies est très bien adaptée aux processeurs vectoriels, de par la régularité des structures et des accès aux données, et se parallélise bien, en affectant à chaque processeur une partie du domaine de calcul. Elle tire donc le meilleur parti des trois niveaux de parallélisme (micro, méso, macro) décrits dans la section *supra*, p. 43. Elle peut être rendue plus précise en utilisant des approximations d'ordre élevé des dérivées partielles. Par contre, une difficulté apparaît si le problème est à résoudre dans un domaine dont les frontières ont une géométrie quelque peu complexe. En effet, les conditions aux limites sont imposées en des points de la grille de calcul, ce qui peut conduire à une perte de précision (effet de l'approximation « marche d'escalier » de la frontière). Les méthodes de frontière immergée résolvent ce problème, mais au prix d'une dégradation de l'efficacité de calcul.

Les méthodes d'**éléments finis**³⁸ [33] permettent, en particulier, de pallier cette difficulté. Elles s'appuient sur le choix d'un espace d'approximation de la solution. Présentons un cas modèle de problème stationnaire, tiré de [4], de discrétisation par éléments finis de l'équation $u_x - f = 0$ sur l'intervalle $[0,L]$ sur un maillage régulier de pas h , i.e. $x_j = jh$, j varie de 0 à J , u_0 est donné. Choisissons comme espace d'approximation l'espace vectoriel engendré par les fonctions (dites de forme) φ_j linéaires par morceaux, valant 1 au

38. Introduites principalement pour obtenir des formulations variationnelles des problèmes.

point x_j , 0 aux points x_i , si $i \neq j$. L'approximation de la solution est donc recherchée sous la forme

$$\sum_{j=0}^J u_j \varphi_j.$$

On impose la nullité de la projection de $u_x - f$ sur l'espace d'approximation, *i.e.*

$$\sum_{j=0}^J u_j \int_0^L \varphi_j'(x) \varphi_i(x) dx = \int_0^L f(x) \varphi_i(x) dx, \forall i \in [1, J]$$

Notant M la matrice des coefficients

$$m_{ij} = \int_0^L \varphi_j'(x) \varphi_i(x) dx - v \text{ le vecteur des inconnues } u_j \text{ et } f$$

celui des $f_j = \int_0^L f(x) \varphi_i(x) dx$, on obtient un système linéaire³⁹

(creux) $Mv = f$. Ce résultat s'étend à des EDP générales $Lu = f$, où L est un opérateur différentiel « raisonnable », et à un nombre quelconque de dimensions. L'espace d'approximation peut être défini sur un maillage, qui discrétise le domaine où il faut résoudre l'EDP. Un des intérêts est la grande flexibilité de la méthode : le maillage n'est plus astreint, comme en différences finies, à être uniforme. Les formes des mailles et de leurs frontières peuvent être assez générales, ce qui permet de traiter précisément la géométrie du problème, à l'intérieur du domaine et sur la frontière extérieure. La frontière de maillage peut notamment être une approximation très précise de la frontière sur laquelle sont imposées les conditions aux limites, ce qui permet de les approcher avec plus de précision qu'en différences finies. Au final, la solution obtenue est la projection sur l'espace d'approximation de la solution exacte⁴⁰. L'erreur est en h^p , où p est l'ordre de l'erreur d'approximation par les fonctions de forme : l'utilisation de fonctions de forme linéaires conduit par exemple à une erreur (souvent mesurée en norme L^2) $O(h^2)$.

Si on considère maintenant une équation d'évolution de la forme $u_t + Lu = 0$, une méthode possible⁴¹ (appelée « *method of lines* » dans la littérature) est de discrétiser d'abord par éléments finis en espace, ce qui conduit à une équation d'évolution en temps pour le vecteur des inconnues v de la forme $v_t + Mv = 0$. Le problème est ensuite discrétisé en temps. (voir l'encadré sur les méthodes de discrétisation temporelle, p. 65).

Les méthodes d'éléments finis conduisent, en général, à des structures et accès aux données moins réguliers que les méthodes de différences finies, et peuvent s'avérer moins efficaces que les méthodes de différences finies sur des processeurs vectoriels, *i.e.* au niveau « micro » de parallélisme.

L'efficacité peut être restaurée en utilisant des maillages structurés, *i.e.* où chaque élément est repéré par un ensemble d'indices (par exemple deux indices en dimension 2), au moins par blocs.

Nous concluons par les méthodes de volumes finis [34]. Elles utilisent une intégration des équations dans les mailles, conduisant à une équation de bilan sur chaque maille. Prenons l'exemple de l'équation du transport $u_t + \nabla a u$ (a est le vecteur vitesse) en dimension 3. Intégrant l'équation sur une maille M , on obtient une équation d'évolution pour l'intégrale de u sur M . $\frac{d}{dt} \int_M u dV + \int_{\partial M} u(a.n) dS = 0$.

Il faut ensuite définir les **flux numériques***, gouvernant les entrées dans la maille, *i.e.* les intégrales de $u(a.n)$ sur les faces constituant le bord. Nous renvoyons à [4] pour le choix de ces flux numériques.

Ces méthodes possèdent des propriétés de conservativité (au sens où certaines quantités sont conservées exactement), et sont en particulier très utilisées en simulation des écoulements. Ce point est repris plus loin, voir *infra*, p. 66 dans le passage consacré aux champs régis par des équations non linéaires. Nous présentons maintenant brièvement quelques exemples de méthodes numériques couramment utilisées pour les champs régis par des équations linéaires, comme les équations d'ondes.

Champs continus régis par des équations linéaires : exemples de méthode de résolution des équations des ondes

Les méthodes les plus utilisées pour résoudre les équations d'ondes sonores, électromagnétiques, et élastiques* (voir *infra*, par exemple, p. 83) sont les méthodes de différences finies et d'éléments finis, présentées ci-dessus.

Comme dit plus haut, les méthodes de différences finies sont très efficaces, tant du point de vue du parallélisme, que de celui de la vectorisation. Un schéma très utilisé pour les équations de Maxwell est le **schéma de Yee***, extension aux ondes électromagnétiques du schéma d'ordre 2 présenté au paragraphe précédent. Il s'avère extrêmement efficace, et des simulations à 10^{11} mailles sont possibles sur machines pétaflopiques. Par contre, le traitement des conditions aux limites est, sauf utilisation de frontières immergées, peu précis. Un autre inconvénient est la relation dite de dispersion (relation entre la pulsation et le vecteur d'onde) numérique : la vitesse (numérique...) de la lumière n'est approchée qu'à l'ordre 2 par le schéma numérique, et dépend de la direction de propagation.

Les méthodes d'éléments finis d'ordre élevé s'affranchissent de ces deux difficultés, et sont très utilisées pour simuler les problèmes d'ondes élastiques et électromagnétiques [6].

39. Dans notre cas, il prend la forme simple $u_{j+1} - u_{j-1} = 2 \int f \varphi_j dx$.

40. Nous considérons dans ce paragraphe des éléments finis continus, et l'espace d'approximation est un sous espace de l'espace de fonction auquel appartient la solution.

41. Une autre technique consiste à ne pas dissocier ces étapes, comme dans le schéma de Lax-Wendroff.

Comme noté plus haut, leur efficacité, notamment sur les processeurs vectoriels, est moindre, si le maillage est non structuré, que les différences finies, mais il est souvent possible d'utiliser des maillages structurés par blocs. Dans les méthodes dites « de Galerkin discontinu* » [7], le champ dans chaque élément est décomposé sur un ensemble de fonctions de forme locales à l'élément, sans imposition de contrainte de continuité, contrairement aux méthodes d'élé-

ments finis continus décrites plus haut. Cette indépendance relative entre les éléments aide à paralléliser efficacement. De plus, ces méthodes sont intensives en calcul. Elles sont donc spécialement adaptées aux nouvelles machines.

Nous allons maintenant présenter les champs régis par des équations non-linéaires, qui demandent un traitement spécifique.

L'intégration en temps

Les méthodes d'intégration en temps ont été développées pour intégrer des systèmes d'équations différentielles, de la forme $\dot{q} = f(q, t), q \in \mathbb{R}^N$ qui apparaissent par exemple dans la résolution d'équations aux dérivées partielles dépendant du temps, si on sépare les étapes de discrétisation spatiale et temporelle, ou en dynamique moléculaire classique.

La méthode la plus immédiate a été proposée par L. Euler. Il s'agit d'une méthode explicite : notant q_n le vecteur q au pas de temps n , q_{n+1} est calculé par une formule explicite en fonction de q_n . La dérivée en temps est approchée par une approximation d'ordre 1 :

$$\dot{q} = \frac{q_{n+1} - q_n}{\Delta t} + O(\Delta t).$$

Nous obtenons donc $q_{n+1} = q_n + f(q_n, n\Delta t)\Delta t$. Cette méthode a des inconvénients : faible précision, instabilité si la discrétisation en espace à laquelle elle est couplée n'introduit pas une dissipation numérique suffisante (par exemple, le schéma dit « de Richardson » pour l'équation d'advection où la méthode d'Euler est associée à une discrétisation centrée de la dérivée en espace est instable...).

Pour améliorer la précision, tout en restant sur une méthode à un pas (au sens où le calcul de q_{n+1} ne fait intervenir que q_n) l'idée naturelle est de partir de la formule exacte

$$q_{n+1} = q_n + \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f(q(t))\Delta t, \text{ mais le problème est que } q(t)$$

n'est pas connu. On peut toutefois améliorer la précision par rapport à la méthode d'Euler, qui approxime $q(t)$ par $q(tn)$ dans l'intégrale. Cette idée est notamment exploitée (avec d'autres ingrédients assez techniques) dans les méthodes dites « de Runge et Kutta », décrites par exemple dans l'ouvrage [35].

En pratique, on approxime l'intégrale à l'aide d'une méthode d'intégration numérique. Ramenons-nous pour simplifier à $n = 0$:

$$q(\Delta t) = q(0) + \int_0^{\Delta t} f(q(t))\Delta t.$$

L'intégrale est remplacée par une somme pondérée :

$$q(\Delta t) = q(0) + \Delta t \sum_{i=1}^q b_i f(q(c_i \Delta t)).$$

Mais on ne connaît pas les $y(c_i \Delta t)$. Nous allons donc les approximer $y(c_i \Delta t) \approx \xi$. Les ξ sont calculés récursivement.

Des méthodes de Runge Kutta d'ordre très élevé ont été obtenues (au moins jusqu'à l'ordre 8), mais, en pratique, on se limite la plupart du temps à l'ordre 4. Même à un ordre donné, il existe plusieurs variantes de schémas d'intégration.

Une autre façon de monter en ordre est d'utiliser l'information de plusieurs des pas de temps précédents (méthodes multipas). La plus simple des méthodes multipas est la méthode « saute-mouton », qui approxime la dérivée en temps à l'ordre 2 par

$$\dot{q} = \frac{q_{n+1} - q_n}{2\Delta t} + O(\Delta t^2).$$

L'inconvénient des méthodes explicites est que le pas de temps doit vérifier une condition de stabilité. Une des plus citée est la condition de Courant, établie en 1928 par Courant Friedrichs et Lewy : le pas de temps doit vérifier $\Delta t < C u \Delta x$, où u est une vitesse (par exemple la vitesse du son si on simule l'équation des ondes acoustiques), C une constante dépendant du schéma. La limitation est encore plus drastique pour l'équation de la chaleur, avec une contrainte en (Δx^2) sur le pas de temps. Pour s'affranchir de ce type de limitation, on peut utiliser des méthodes implicites, où f est pris au pas de temps $n+1$. La version implicite de la méthode d'Euler est par exemple $q_{n+1} = q_n + f(q_{n+1}, (n+1)\Delta t)\Delta t$.

Le coût calcul du pas de temps unitaire est bien sûr plus élevé, mais le nombre de pas de temps à réaliser peut être fortement réduit.

Pour conclure, nous évoquerons les schémas dits « symplectiques », utilisés notamment pour intégrer des systèmes d'équations de Hamilton. Ces schémas préservent, comme dans le cas continu, le volume de l'espace des phases. Les remarquables propriétés de ces schémas, qui permettent d'intégrer sur des temps longs, sont passées en revue dans [36]. L'algorithme de Verlet, fréquemment utilisé en dynamique moléculaire classique, est un exemple de schéma symplectique.

Champs continus régis par des équations non linéaires : exemple de la simulation en mécanique des fluides et des structures

Après les champs continus présentant la propriété de linéarité dont un exemple figure au paragraphe précédent, nous nous intéressons au cas le plus général des champs dont l'évolution dans le temps obéit à des équations non linéaires.

La variété des systèmes physiques régis par de tels systèmes d'équations étant considérable, nous nous restreignons volontairement à des fins d'illustration sans perdre en pertinence au cas de la mécanique, pour les fluides ou les solides. Nous y trouvons la matière permettant de caractériser les sources usuelles de non linéarités.

Une première source peut venir de la méthode d'observation du système mécanique considéré. L'équation la plus simple donnant l'évolution locale d'un système dont on suit le mouvement à la même vitesse que la matière (soit en **représentation lagrangienne***) est l'équilibre dynamique (1), dérivé de la loi de Newton, selon laquelle la quantité d'accélération locale égale la somme des forces (forces de volume ou de cohésion interne) s'exerçant sur le contour d'un volume infinitésimal, soit :

$$\rho \dot{\mathbf{v}} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})] = \mathbf{f} \quad (1)$$

Où \mathbf{u} est le champ de déplacement définissant le mouvement, \mathbf{v} le champ de vitesse, $\boldsymbol{\sigma}$ est la contrainte dans le système (pression et cisaillement le cas échéant), dépendant de la mesure de la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$, et \mathbf{f} les forces externes.

En changeant de point de vue, par exemple en adoptant une **représentation eulérienne*** où on observe la matière passer par un point fixe de l'espace, la dérivée temporelle classique est remplacée par la dérivée particulaire de la vitesse et l'équation (1) devient :

$$\rho \dot{\mathbf{v}} + \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f} \quad (2)$$

L'expression (2) fait apparaître un terme non linéaire associée à la convection de la matière, bien connu des mécaniciens des fluides, puisqu'il constitue une des difficultés à traiter dans la résolution des équations de Navier-Stokes gouvernant l'écoulement général d'un fluide, en ajoutant à l'équation (2) les relations classiques de conservation de la masse et de l'énergie en représentation eulérienne.

Une seconde source de non-linéarité en mécanique provient de l'expression de la contrainte, et plus généralement de la modélisation du comportement local du système, avec une double origine : la mesure de la déformation d'une part, et la relation entre la contrainte et la déformation, d'autre part (la contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ est une fonction de la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$: $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$).

Dans le premier cas, s'il est possible d'estimer la déformation d'un système en déplacement infinitésimal par un opérateur linéaire, par exemple la partie symétrique du gradient du déplacement, il en va différemment pour des déplacements d'amplitude finie, en particulier pour les rotations. Il est alors nécessaire de construire une mesure invariante par rotation, dont la mesure de Green-Lagrange est un exemple parmi d'autres, contenant une partie quadratique introduisant la non-linéarité dans le système :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u} \nabla \mathbf{u}) \quad (3)$$

Dans le second cas, c'est la relation même entre contrainte et déformation qui peut représenter des mécanismes internes complexes, faisant intervenir des seuils et des variations de pentes, comme pour la plasticité dans les structures. Dans certains cas, par exemple lorsqu'un matériau s'endommage, on peut même rencontrer au-delà d'un certain seuil une diminution de la contrainte avec l'augmentation de la déformation, ce qui s'accompagne de phénomènes spécifiques à considérer absolument dans toute méthode numérique mise en œuvre pour reproduire l'évolution du système (perte d'hyperbolicité, localisation...).

Enfin, les forces externes elles-mêmes peuvent être non linéaires, si elles ne sont pas de simples efforts imposés par l'environnement mais l'expression de couplages cinématiques plus complexes comme des contacts dépendant des distances relatives entre des corps.

On voit apparaître avec ces quelques illustrations simples la variété des situations non linéaires, dont les conséquences sur l'évolution du système peuvent aller du cas relativement régulier, comme l'élongation d'un barreau métallique en traction finie, aux cas les plus chaotiques comme les systèmes à chocs multiples ou les successions d'instabilités comme le flambage dynamique. La gestion numérique de ces problèmes remarquables par leur variété requiert un soin particulier, aussi bien pour obtenir une solution, sans assurance qu'elle soit unique, que pour tirer parti des supercalculateurs dont les caractéristiques se prêtent couramment plus à de grands systèmes homogènes qu'à des problèmes singuliers fortement irréguliers.

Des exemples d'applications sont présentés en simulation de la dynamique des structures (au sens large) dans la partie *infra*, p. 83, en physique des plasmas *infra*, p. 121, et en dynamique des fluides *infra*, p. 213, avec les écoulements dans les réacteurs à eau pressurisée, et *infra*, p. 225, avec les calculs de climat.

Par rapport aux problèmes linéaires, qui conservent la régularité des conditions initiales, les champs non linéaires en évolution peuvent de plus produire des discontinuités. Au voisinage des discontinuités, les méthodes d'ordre élevé

perdent leur ordre de convergence, et des oscillations parasites apparaissent. De plus, il est souvent essentiel pour la simulation des écoulements observés en représentation eulérienne d'assurer exactement la conservation des grandeurs mécaniques (masse, quantité de mouvement et énergie) dans un volume de contrôle, ce qui conduit alors à privilégier fréquemment les méthodes de volumes finis, en combinant notamment des méthodes de **reconstruction à l'ordre 2*** et des **limiteurs***. Les limiteurs [4,34] visent à limiter (d'où leur nom) les pentes à des valeurs réalistes, pour éviter les oscillations parasites. En pratique, ils calculent

le ratio des pentes $r_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{u_{i+1} - u_i}$ à droite et à gauche de i et les corrige [4] à l'aide d'une fonction (qui dépend du limiteur) $\Phi(r_i)$: par exemple $\Phi(r) = \frac{r^2 + r}{r^2 + 1}$ pour le limiteur « Van

Abdala 1 ». Le calcul des limiteurs demande donc un assez grand nombre d'opérations, si bien que les méthodes de volumes finis d'ordre 2 sont assez intensives en calcul. Elles sont actuellement utilisées dans la majorité des cas. Toutefois, l'utilisation des méthodes d'ordre élevé, en particulier de Galerkin discontinu [7], se développe, pour améliorer la précision des simulations et tirer encore mieux parti des machines actuelles et futures.

Le grand nombre de dimensions

Généralités : malédiction de la dimension et solutions possibles

Quand le nombre d de dimensions du problème à traiter augmente, le nombre de degrés de liberté croît très rapidement avec le pas de maillage. Par exemple, dans un espace à 6 dimensions, une discrétisation sur 100 points (donc assez grossière) dans chaque direction conduit à quelque 10^{12} degrés de liberté. Cette difficulté est parfois évoquée sous l'acronyme « malédiction de la dimension ». Deux approches sont possibles pour vaincre cette malédiction : la plus classique est de recourir à des méthodes de Monte-Carlo (voir *infra*, p. 187 et p. 241). Ces méthodes s'avèrent en effet efficaces même pour d grand, et sont donc particulièrement adaptées, comme nous le verrons un peu plus loin, à la résolution de l'équation de Schrödinger à n corps ($d = 3n$), dans les cas où la DFT est insuffisamment précise, et au transport de particules, particulièrement en trois dimensions ($d = 6$). Elles sont de plus naturellement adaptées au parallélisme massif. Toutefois, leur convergence est relativement lente quand le nombre de particules numériques N augmente, et elles sont, par nature affectées par un bruit statistique : l'écart type du résultat est en $1/\sqrt{N}$. Une approche alternative pour traiter les problèmes de transport, permise par les capacités des machines actuelles, est d'utiliser une méthode déterministe bien optimisée, comme expliqué dans la section ci-après. Des applications à la neutronique sont présentées *infra*, p. 187.

Méthodes déterministes et parallélisme pour l'équation de transport

La méthode numérique

Pour simuler le transport des photons ou des neutrons, on est souvent amené à résoudre le modèle aux ordonnées discrètes S_N . Ce modèle consiste à mailler la sphère angulaire unité et à résoudre par direction discrète l'équation de Boltzmann linéaire

$$\Omega_m \cdot \nabla u(m, g, x) + (\sigma_s(g) + \sigma_a(g))u(m, g, x) = S(m, g, x)$$

dont est solution le flux $u(m, g, x)$ fonction de la direction m , du groupe g et de la variable en espace x . Dans cette équation, Ω_m est le vecteur unitaire porté par la direction m , $\sigma_s(g)$, et $\sigma_a(g)$ les sections efficaces de diffusion et d'absorption, $\sigma_{s,g' \rightarrow g, m' \rightarrow m}$ la section différentielle de diffusion et

$S(m, g, x) = \sum_{g'} \sum_{m'} \omega_{m'} \sigma_{s,g' \rightarrow g, m' \rightarrow m} u(m', g', x)$ le terme source dépendant du flux pour toutes les directions et tous les groupes.

Nous découplons le système linéaire en introduisant le processus itératif de la source itérée qui consiste à résoudre à l'itération $q+1$ le système :

$$\Omega_m \cdot \nabla u^{q+1} + (\sigma_s(g) + \sigma_a(g))u^{q+1} = S^q, \text{ où } S^q \text{ est calculé avec les flux de l'itération } q.$$

Il reste à discrétiser le système en espace. Les méthodes les plus utilisées reposent sur les **éléments finis discontinus*** qui ont sous certaines conditions la **limite diffusion***. Elles permettent de traiter à la fois des milieux transparents et opaques sur des maillages de taille raisonnable. De nombreuses variantes de ces schémas existent ; UCB [8], Bailey [9]. Leur point commun est que sur un maillage composé de polygones en 2D et de polyèdres en 3D, les degrés de liberté sont les valeurs du flux aux sommets de chaque maille.

Dans ces méthodes, pour chaque couple (m, g) , nous résolvons explicitement un système d'équations dont celle correspondant à la maille i s'écrit :

$$A^{m,g,i} U(m, g, i) = S(m, g, i) + \sum_{i' \text{ éclairant } i} A^{m,g,i'} U(m, g, i')$$

Nous disons qu'une maille i' éclaire la maille i si le produit scalaire de la direction m avec la normale extérieure (vue de la maille i) à la face séparant la maille i de la maille i' est négatif.

$U(m, g, i)$ désigne le vecteur contenant les valeurs du flux sur la maille i , $A^{m,g,i}$ une matrice de taille (N, N) où N est le nombre de sommets de la maille i , $A^{m,g,i'}$ une matrice de taille (N, N') où N' est le nombre de sommets de la maille i' éclairant la maille i . ε désignant l'écart au sens d'une norme entre

les flux sur deux itérations successives, l'algorithme de la source itérée s'écrit en pseudo-code :

```
Tant que  $\varepsilon > \varepsilon_0$ 
  Pour toutes les directions  $m$ 
    Calculer  $S(m, g, i)$  pour tous les groupes  $g$ 
    et toutes les mailles  $i$ 
  Pour toutes les directions  $m$ 
    Calculer  $U(m, g, i)$  pour tous les groupes  $g$ 
    et toutes les mailles  $i$ 
  Calculer  $\varepsilon$ 
fin tant que  $\varepsilon > \varepsilon_0$ 
```

Le parallélisme

En 3D, le nombre d'inconnues à stocker et calculer est le produit du nombre de groupes (de l'ordre de 100), du nombre de directions (de l'ordre de 100) et du nombre de degrés de liberté en espace (de 10^4 à 10^9). Cela peut représenter des terabytes en mémoire et des teraflops en puissance calcul.

Nous concevons qu'un nœud ne puisse pas toujours avoir une mémoire suffisante pour un tel nombre d'inconnues.

La stratégie de parallélisation consiste alors à partager le domaine spatial entre les nœuds et à faire calculer par nœud l'ensemble des directions et des groupes sur son domaine spatial.

Nous pouvons envisager d'inverser le système linéaire par une **méthode itérative*** adaptée aux systèmes non symétriques mais une meilleure stratégie consiste à chercher un ordonnancement des mailles par direction tel que les mailles i' éclairant la maille i soient calculées avant cette dernière dans la même itération, ce qui revient à rendre la matrice du système triangulaire par blocs.

Comme cet ordonnancement ne dépend pas des groupes et que le mécanisme de la source itérée rend les groupes indépendants, nous pouvons calculer les groupes dans la boucle la plus interne en utilisant un parallélisme de type « *multi-threading* » pour charger les processeurs, la vectorisation étant dévolue à la résolution des petits systèmes dont la taille est le nombre de sommets de la maille.

Au préalable, il faut s'être assuré que l'ordonnancement existe. Ce n'est pas toujours le cas en 2D si le maillage comporte des mailles concaves et ce n'est généralement pas le cas en 3D même si le maillage est peu déformé. On doit alors chercher les **cycles des graphes*** d'éclairage associés à chaque direction et rendre ces **graphes acycliques***. La conséquence est que certains flux sont alors pris à l'itération précédente, ce qui peut augmenter le nombre d'itérations nécessaire à la convergence.

Cette étape est en soi un défi car l'**algorithme de Tarjan***, le plus efficace pour rechercher les cycles, n'est pas adapté à la recherche de cycles traversant les sous-domaines. La détection des cycles en parallèle est un thème actif de recherches, l'objectif consistant à casser en un temps minimum le minimum d'arêtes pour permettre l'ordonnancement sans trop augmenter le nombre d'itérations.

Une fois l'ordonnancement trouvé, nous pouvons résoudre pour chaque couple (i, g) le système d'équations pour la maille i . Dans cette étape, lorsque la maille i' n'appartient pas au même sous-domaine que la maille i , deux stratégies sont possibles.

La première consiste à prendre la valeur du flux pour la maille i' à l'itération précédente [10]. L'avantage est que tous les processeurs travaillent en même temps. Un autre avantage est que la recherche des cycles traversant les sous-domaines n'est plus nécessaire, rendant la recherche de cycles facilement parallélisable. L'inconvénient est que le nombre d'itérations nécessaire pour converger dépend du découpage en sous-domaines et donc que les résultats obtenus entre un calcul parallèle et un calcul séquentiel ne sont pas strictement identiques.

La seconde stratégie consiste à attendre pour que le processeur possédant la maille i calcule son flux que le processeur possédant la maille i' ait calculé le sien [11]. Cela garantit la reproductibilité séquentiel/parallèle et un nombre minimum d'itérations. Les temps d'attente sont alors minimisés par le caractère non bloquant des communications. Lorsqu'un processeur ne peut pas traiter une direction car le processeur voisin n'a pas fini son travail, on l'autorise à en traiter une autre. Nous pouvons noter que l'ordonnancement n'est ni précalculé ni stocké, il se fait naturellement lors du calcul des flux.

L'efficacité de cet algorithme dépend du découpage spatial et du nombre de directions. Sur un maillage cartésien structuré, un découpage en colonnes permet une scalabilité supérieure à 90 % jusqu'à plusieurs milliers de processeurs. Cela est beaucoup plus difficile à obtenir dans un code multi-physiques où le découpage spatial n'est plus libre.

Après cette présentation d'un exemple de méthode déterministe pour l'équation de transport, nous présentons les méthodes de Monte-Carlo, dont une des applications est cette même équation.

Les méthodes de Monte-Carlo

Nous présentons d'abord brièvement l'application des **méthodes de Monte-Carlo*** au transport de particules (neutrons, photons, en particulier), en contrepoint à la section précédente consacrée au traitement déterministe de ce pro-

blème, avant de présenter ces méthodes d'un point de vue plus général.

La résolution de l'équation de transport par méthode de Monte-Carlo

Alors que les méthodes déterministes traitent l'équation de transport prise sous la forme d'une équation aux dérivées partielles, les méthodes de Monte-Carlo traitent cette équation sous forme intégrale.

Elles consistent à simuler les trajectoires de particules numériques représentant un nombre important de particules physiques en suivant la probabilité de transition présente dans l'équation intégrale. Cette probabilité de transition est la composée d'un noyau de transport et d'un noyau de collision. La trajectoire d'une particule se décompose ainsi en la succession d'une phase de transport libre, sans changement de direction ni d'énergie, et d'une collision, où l'énergie de la particule ainsi que sa direction sont modifiées. Les collisions représentent l'interaction des particules avec le milieu ambiant : réactions nucléaires sur les noyaux si les particules sont des neutrons, diffusion-émission-absorption par les électrons si ce sont des photons dans un plasma.

Ces méthodes ne nécessitent aucun maillage de l'espace des phases contrairement aux méthodes déterministes. Elles sont particulièrement bien adaptées à la résolution des problèmes où la connaissance du flux n'est requise que dans une faible portion de l'espace des phases. Dans ce cas, on peut favoriser les trajectoires qui passent par cette région. Différentes techniques de biaisage : *splitting*, importance *sampling*, transformation exponentielles, sont utilisées pour cela.

Comme il n'y a pas de collisions entre particules contrairement au transport de molécules dans un gaz raréfié par exemple, les trajectoires des particules sont indépendantes les unes des autres. On peut alors réunir les particules en paquets, affecter chaque paquet de particules à un processeur et les traiter en parallèle. Le « scaling » de ce parallélisme sur les particules est alors parfaitement linéaire. Une technique fréquemment employée pour mettre en œuvre ce parallélisme sur les particules est la méthode de réplique de domaine. Dans cette méthode, chacun des processeurs traite l'ensemble du domaine (qui est donc répliqué entre les processeurs), et gère un paquet de particules. Cette méthode se prête bien au parallélisme hybride : OpenMP entre cœurs d'un même processeur, MPI entre processeurs. La seule communication globale entre processeurs intervient en fin de phase de poursuite des particules, où les contributions des différents processeurs sont regroupées.

Cependant, lorsque la méthode est couplée à d'autres physiques (par exemple à l'hydrodynamique, dans une simulation d'hydrodynamique radiative où le transport des photons

est traité en Monte-Carlo), elle doit s'appuyer sur un maillage spatial, qui est en général partagé sur plusieurs processeurs. Un processeur traite alors les particules présentes dans un domaine (un ensemble de mailles), et le parallélisme est maintenant sur les domaines, ou en espace, ce qui présente deux inconvénients. D'une part, au cours du calcul, certains processeurs sont contraints d'attendre que des particules viennent des processeurs voisins. D'autre part, les processeurs gérant des domaines contenant peu de particules sont insuffisamment chargés. Le parallélisme en espace est ainsi moins efficace que le parallélisme sur les particules. Pour remédier à ces problèmes, on effectue périodiquement des équilibrages de charge entre les différents processeurs, ce qui permet de retrouver une bonne efficacité, au prix d'une certaine quantité de communications entre les processeurs. Les méthodes de Monte-Carlo pour le transport de particules sont bien adaptées aux deux niveaux supérieurs, méso et macro, de parallélisme des machines actuelles et futures, et leur intensité calculatoire est importante. Par contre, l'utilisation efficace des unités vectorielles (niveau micro de parallélisme) est plus délicate, à cause notamment des instructions conditionnelles présentes dans ces méthodes. En somme, les méthodes déterministes et les méthodes de Monte-Carlo ont, du point de vue de l'adaptation aux machines, des forces et faiblesses différentes. Les deux types de méthodes sont complémentaires : elles sont et resteront concurremment utilisées.

Les méthodes Monte-Carlo sont utilisées dans bien d'autres domaines que le transport de particules : physique quantique, physique statistique, biologie, finance... [12,13]. Nous allons maintenant les présenter dans un cadre assez général.

Présentation générale des méthodes de Monte-Carlo

Les méthodes Monte-Carlo ont notamment pour objectif de calculer des intégrales de grandes dimensions, trop complexes pour pouvoir être calculées par des méthodes directes.

Le principe de la méthode Monte-Carlo est de produire un échantillonnage aléatoire $\{x_r\}_{r=1}^R$ de l'espace de configurations, où x est dans le cas général une variable multidimensionnelle. Si les intégrales à calculer sont du type

$$\langle \varphi \rangle = \int dx P(x) \varphi(x),$$

alors il est plus efficace de pondérer l'échantillonnage avec la distribution de probabilité $P(x)$: c'est l'échantillonnage préférentiel (*importance sampling*).

Nous pouvons par ailleurs réaliser un échantillonnage en utilisant une chaîne de configuration dans l'espace des phases $x_1, x_2, x_3, \dots, x_N$ appelée **chaîne de Markov*** (d'après le nom du mathématicien russe Andrey Markov). Le choix pratique du passage d'une configuration à une autre doit être suffi-

samment judicieux pour garantir l'**ergodicité*** de la simulation. Comment toutefois passer d'une configuration à une autre dans l'espace des phases ? Nous montrons qu'il peut être intéressant que la probabilité de passage $p(x_n \rightarrow x_{n+1})$ respecte l'équation dite « du bilan détaillé » [13,14,15] :

$$P(x_n) p(x_n \rightarrow x_{n+1}) = P(x_{n+1}) p(x_{n+1} \rightarrow x_n)$$

Dans ce cas, en effet, nous montrons que la distribution résultant de la chaîne de configuration obtenue sera bien $P(x_n)$. Comme la chaîne de Markov produit dans ce cas un échantillonnage préférentiel, on a alors, si la simulation est ergodique :

$$\langle \varphi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \varphi(x_j)$$

Il reste toutefois à trouver un algorithme pratique pour obtenir une chaîne de Markov tout en respectant l'équation du bilan détaillé. Par exemple, l'algorithme de Metropolis [13,14] remplit cette dernière condition en proposant une formulation explicite pour la probabilité de passage d'une configuration à une autre :

$$P(x_n) p(x_n \rightarrow x_{n+1}) = \min\left(1, \frac{P(x_{n+1})}{P(x_n)}\right)$$

On utilise alors un générateur de nombres aléatoires entre 0 et 1. Le mouvement est accepté si le nombre aléatoire est inférieur à la probabilité, sinon on prend $x_{n+1} = x_n$.

Une fois cette méthode mise en œuvre dans le cadre du problème physique considéré, nous disposons d'une chaîne de configuration et/ou de valeurs moyennes. Discutons maintenant de trois concepts importants lors d'une simulation Monte-Carlo :

- **Variance** : La variance est l'erreur commise sur la valeur moyenne. Elle dépend de la longueur de la chaîne ;
- **corrélation entre mesures et ergodicité** : Quelle distance dans la chaîne doit-il y avoir entre deux configurations et pour qu'elles puissent être considérées comme indépendantes (et utilisées pour faire des moyennes) ? Le calcul des fonctions d'autocorrélation apporte une réponse à cette question. Par ailleurs, il faut veiller à ce que la chaîne de Markov ne reste pas bloquée dans une zone de l'espace des phases et donc que la simulation échantillonne toute les zones importantes de l'espace des phases. Dans ce cas, on dit que la simulation est ergodique ;
- **le temps de thermalisation** : C'est le temps de simulation nécessaire pour que les configurations obtenues soient adaptées aux conditions thermodynamiques de la simulation et puissent donc être utilisées pour calculer des moyennes statistiques. Ce temps est le plus souvent déterminé de façon empirique.

Les méthodes Monte-Carlo se prêtent bien au calcul à haute performance et à la parallélisation [15]. En effet, des chaînes de Markov indépendantes peuvent être déterminées sur des processeurs différents. Nous nous rapprochons donc d'un algorithme⁴² au *scaling* linéaire, extrêmement utile, puisque le temps de calcul pour une précision donnée est divisé par le nombre de processeurs N_p . Les communications n'apparaissant qu'en début et en fin de simulation, leur coût est d'autant plus faible que la simulation est longue (notons que des tentatives existent pour paralléliser une seule chaîne de Markov [16]).

Afin de voir les avantages de ces simulations en parallèle, passons en revue les trois points précédents dans le cadre d'un calcul Monte-Carlo en parallèle :

- **Variance** : les valeurs moyennes des observables sur le calcul complet correspondent alors aux moyennes des résultats de toutes les chaînes de Markov. L'avantage est que la variance est alors, selon le théorème central limite, divisée par le nombre de processeurs N_p et l'erreur est donc réduite de $\sqrt{N_p}$;
- **ergodicité** : le fait d'avoir recourt à des chaînes de Markov indépendantes, permet d'améliorer l'ergodicité des simulations dans le cas où certaines chaînes sont bloquées dans des zones de l'espace des phases. Dans ce cas, il est bien sûr préférable d'avoir recours à des méthodes plus astucieuses pour construire la chaîne de Markov ;
- **thermalisation** : dans la plupart des cas, la thermalisation de la chaîne (parfois appelée « *burn-in* ») doit être faite sur chaque processeur et donc le temps de thermalisation ne peut être réduit. Le temps de thermalisation indique donc la limite inférieure du temps de calcul au-dessous duquel il sera impossible de descendre. Il est donc important de minimiser ce temps [15]. Cette problématique se posera de façon encore plus aiguë avec l'apparition des machines exaflopiques.

Enfin, notons que dans le cadre des calculs Monte-Carlo menés en parallèle, les valeurs moyennes sont très peu affectées par la défaillance d'un nœud de calcul. Ces méthodes sont donc naturellement résilientes.

Des exemples de simulations Monte-Carlo appliqués à la neutronique (voir *infra*, p. 187) et à la chromodynamique quantique (voir *infra*, p. 241) seront détaillés plus loin dans cette monographie. Nous concluons cette partie par une présentation des méthodes de simulation d'un grand nombre de particules en interaction.

42. Au parallélisme dit « embarrassant », sans que ce terme soit péjoratif...

La simulation d'un grand nombre de particules en interaction : dynamique moléculaire classique

La **dynamique moléculaire classique*** permet d'avoir accès au mouvement des atomes par intégration directe des équations de Newton, les atomes interagissant mutuellement par l'intermédiaire d'un potentiel posé *a priori*. Très bien adaptée à la simulation sur machines massivement parallèles, cette technique favorise la simulation des échantillons de tailles proches du μm^3 , ce qui permet d'avoir accès à de nombreuses grandeurs de nature macroscopique, à condition que les phénomènes soient relativement rapides (quelques nanosecondes à quelques microsecondes, selon les cas). La dynamique moléculaire est mise en œuvre dans de très nombreux domaines allant de la biologie à la physique des chocs, pour simuler et analyser le comportement de matériaux complexes loin de leur état d'équilibre thermodynamique, comme, par exemple, dans le cas d'un choc ou une détente rapide. Dans cette section, nous nous focalisons sur la simulation des matériaux (principalement des métaux) sous sollicitations. Des exemples de simulation de molécules biologiques en interaction seront traités dans la troisième partie de l'ouvrage.

En dynamique moléculaire classique, les propriétés physico-chimiques d'un système sont entièrement déterminées par la fonction d'énergie potentielle qui définit les interactions entre atomes. De nombreuses formes analytiques de potentiel ont été proposées dans la littérature pour reproduire les spécificités de certains systèmes (potentiel « *Embedded Atom Model* » pour les métaux, potentiels de Tersoff pour le carbone ou le silicium...). Néanmoins, pour les matériaux complexes, la rigidité imposée par une forme fonctionnelle simple et peu coûteuse empêche souvent de reproduire simultanément plusieurs propriétés. Grâce aux capacités de calcul des futures machines exaflopiques, des potentiels beaucoup riches du point de vue physique mais aussi beau-

coup plus complexes et coûteux pourront être implantés et mis en œuvre dans des simulations nécessitant un grand nombre de particules. Nous pouvons citer, par exemple, le potentiel EAM modifié (MEAM) qui prend en compte les caractéristiques directionnelles de la liaison chimique des particules avec une dépendance angulaire explicite de la densité électronique locale [16]. Mais il existe d'autres voies prometteuses et encore inexploitées pour de grosses simulations, comme celle qui consiste à construire un potentiel de façon purement numérique à partir d'une base de données de référence (obtenues par des calculs *ab initio* par exemple), sans définition *a priori* de forme fonctionnelle. Par exemple, les méthodes à noyaux (dans le cadre des RKHS ou « *Reproducing Kernel Hilbert Spaces* »), comparant directement l'environnement atomique d'intérêt à chacun des éléments d'une base de données pouvant être assez volumineuse, présentent un intérêt potentiel certain mais restent aujourd'hui prohibitives du point de vue CPU. Elles seront progressivement mises en œuvre au fur et à mesure de la montée en puissance des machines.

Grâce à ces avancées en termes de méthodes et de capacités de calcul, la dynamique moléculaire concerne de plus en plus de domaines de la physique et de la biologie, et devient un outil utilisé jusque dans le monde industriel. Elle permet, dans certains cas, la simulation complète d'une expérience, complétant ainsi cette dernière par l'observation des processus qui lui sont inaccessibles. La dynamique moléculaire est également utilisée pour construire et paramétrer des modèles compatibles avec les codes hydrodynamiques. Par exemple, dans le cas de la physique de l'endommagement et plus particulièrement de l'éjection de matière (fig. 46), la dynamique moléculaire a permis de comprendre et de formaliser les processus d'endommagement, et de calculer des grandeurs thermodynamiques inaccessibles à l'expérience. En hydrodynamique, la simulation complète de l'éjection de matière est très difficile à cause d'un

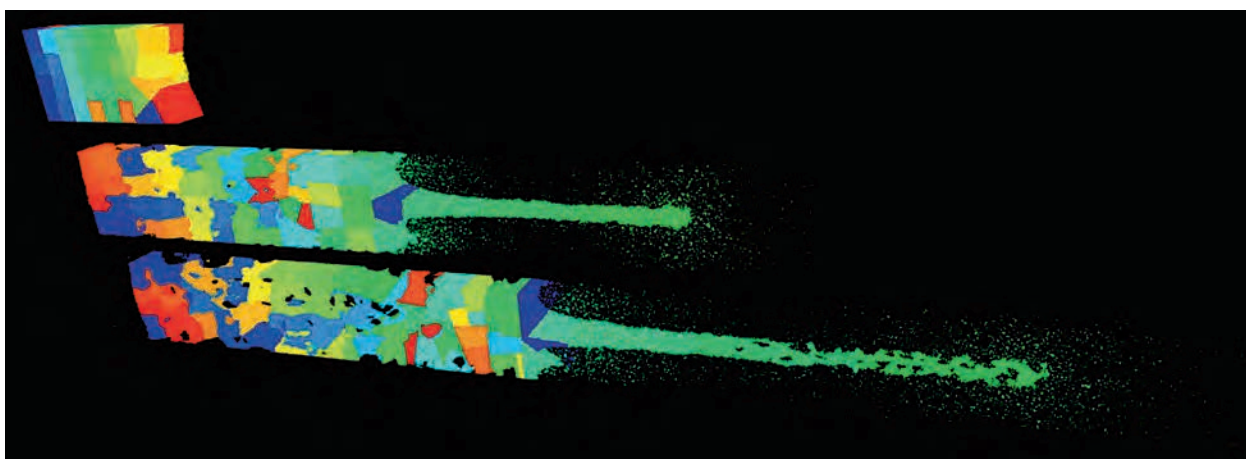


Fig. 46. Simulation de la fragmentation d'un jet métallique par dynamique moléculaire classique. Évolution de la répartition dynamique de la charge des cœurs de calcul.

manque de données thermodynamiques permettant de traiter correctement ce phénomène (tension de surface, viscosité) et de l'absence d'un modèle de rupture : les simulations de dynamique moléculaire à grande échelle ont permis une description complète du processus et donc la production des données manquantes [17]. Des applications de ces méthodes aux solides et aux protéines sont présentées *infra*, pp. 149, 165 et 177.

Des méthodes proches dans leur principe (il s'agit d'objets interagissant *via* le potentiel gravitationnel), mais bien sûr à des échelles très différentes sont utilisées en dynamique des galaxies, comme nous le verrons *infra*, p. 137.

En pratique, les méthodes de dynamique moléculaire classique reviennent à résoudre les équations différentielles de la mécanique classique gouvernant l'évolution de la position r_i de chaque particule, subissant une accélération a_i sous l'effet des forces F_{ij} exercées sur elle par les autres particules :

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = a_i = \frac{1}{m_i} \sum_j F_{ij}$$

Les algorithmes les plus fréquemment utilisés sont ceux proposés par L. VERLET, en particulier l'algorithme en vitesses, qui discrétise les équations du premier ordre (de Hamilton) équivalentes à l'équation précédente, soit

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i, \quad \frac{dp_i}{dt} = a_i$$

Les positions et les vitesses sont mises à jour suivant les formules ci-dessous :

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t v_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2} a_i(t),$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{\Delta t}{2} (a_i(t) + a_i(t + \Delta t))$$

En pratique, on calcule d'abord les positions r_i à l'instant $t + \Delta t$, puis les accélérations découlant de ces positions, et enfin, les vitesses. Cet algorithme est d'ordre 2. Il est invariant par renversement du temps. Il est symplectique (voir encadré sur les méthodes d'intégration en temps, *infra*, p. 165), ce qui lui confère de bonnes propriétés de conservation : l'impulsion est exactement conservée, l'énergie n'est pas exactement conservée, mais oscille autour de sa valeur moyenne, sans dérive.

Ce paragraphe conclut la partie du chapitre consacrée aux méthodes numériques proprement dites. La section suivante, consacrée aux méthodes d'optimisation, se focalise sur une méthode spécifique utilisée pour l'**optimisation*** du rechargement du combustible.

Les problèmes d'optimisation

Les problèmes de recherche d'*extrema* de fonctions très complexes, difficiles à calculer à cause de la complexité des équations qui les déterminent ou du grand nombre de variables qu'elles mettent en jeu, constituent un autre domaine important des sciences du numérique et du calcul haute performance. Nous ne donnerons pas ici un exposé général des **méthodes d'optimisation***, mais seulement deux aperçus sur l'optimisation par algorithmes évolutionnaires et sur l'optimisation multiobjectifs.

L'optimisation par algorithmes évolutionnaires

En optimisation, les **algorithmes évolutionnaires** ont commencé à être utilisés dans les années 60 et 70 avec l'accessibilité à des machines de calcul suffisamment puissantes. Plusieurs approches ont été étudiées indépendamment, les plus connues étant les **algorithmes génétiques***. Ils sont inspirés de la modélisation de phénomènes réels ou vivants, et leur empruntent leurs vocabulaires (théorie de Darwin et génétique, notamment). Le terme fédérateur d'algorithme évolutionnaire apparaît dans les années 90, conjointement à un rapprochement des différentes communautés. C'est dans ces mêmes années que démarre leur utilisation pour traiter des problèmes d'optimisation multiobjectif ou multicritère.

Ces algorithmes sont généralement utilisés lorsque les algorithmes classiques font défaut (problème ayant des discontinuités, non dérivable, présence de nombreux minimums locaux, problème mixte alliant variables continues et discrètes). Ils sont robustes et flexibles, mais nécessitent un nombre d'évaluations plus important, qui peut être atténué par leur parallélisme intrinsèque.

Les algorithmes évolutionnaires sont des **algorithmes à population***. Chaque individu de la population représente une solution potentielle. La population évolue avec l'apparition et la disparition d'individus par phase successive appelée « génération ».

Pour chaque individu, nous distinguons son **génotype**, sa représentation interne manipulée par les opérateurs de l'algorithme et son **phénotype** permettant l'évaluation de l'individu. Une part du génotype peut ne pas s'exprimer dans le phénotype, comme dans les individus diploïdes (gène dominant ou récessif). Chaque individu est évalué et une **fitness** lui est associée, caractéristique de son adaptation à l'environnement.

Chaque génération va évoluer par apparition et disparition d'individus selon plusieurs opérateurs stochastiques :

- Des **opérateurs de sélection** : la sélection parentale choisit les individus performants *a priori* qui serviront de matrice

pour de nouveaux individus et la sélection environnementale élimine certains individus *a contrario* peu performants ;

- des **opérateurs de variation** : le croisement qui produit un nouvel individu à partir d'autres individus (généralement deux) ; la mutation qui introduit des modifications aléatoires locales ; la réparation optionnelle qui corrige certains gènes afin de rendre l'individu viable (contraintes à respecter).

On peut aussi utiliser des opérateurs issus du **bio mimétisme** ou de l'**intelligence collective**, comme les colonies de fourmis ou les essaims de particules. Ces opérateurs doivent réaliser un bon compromis entre exploration et exploitation et sont généralement stochastiques.

Les algorithmes évolutionnaires font parties des méta-heuristiques. Le terme *méta* (« au-delà » en grec) souligne le niveau abstrait de leur description. Le codage permet d'adapter l'algorithme au problème à résoudre en spécifiant une représentation des individus et leur évolution. Cela apparaît particulièrement pour les problèmes combinatoires de différentes natures (affectation, ordonnancement, partitionnement, sélection...).

Pour que les algorithmes génétiques soient réellement efficaces, les opérateurs de sélection et de variation, le génotype et le codage du phénotype doivent être adaptés à la résolution du problème. Une illustration de l'adaptation des opérateurs au contexte spécifique sera donnée sur le problème de l'optimisation du rechargement du combustible dans les REP.

L'optimisation multiobjectifs

La formalisation du problème à résoudre est une étape qui peut être fastidieuse, et aboutit rarement à un critère unique. L'utilisation de l'optimisation multiobjectifs permet une plus grande souplesse dans l'expression du besoin (ne pas tout réduire à un coût) et offre des outils d'exploration et d'analyse des solutions potentielles particulièrement utiles lors d'une démarche de conception.

L'optimisation multiobjectifs traite non plus d'un seul objectif scalaire, mais d'un vecteur $f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x))$ décrivant les objectifs à optimiser. Dans la suite du texte, sans perte de généralité, nous considérerons qu'ils doivent être minimisés. Le résultat théorique d'une optimisation multiobjectif n'est plus une solution unique, mais un ensemble de compromis. Pour formaliser, nous utilisons la **notion de dominance de Pareto**. Une solution v domine au sens de Pareto une solution u (noté $v < u$) si et seulement si $\forall i f_i(v) \leq f_i(u)$ et $\exists j f_j(v) < f_j(u)$. Nous aurons remarqué que la dominance de Pareto ne définit qu'un ordre partiel : deux solutions peuvent être non comparables. La zone de Pareto regroupe l'ensemble des points non dominés et le front de Pareto est l'image par la fonction $f(\cdot)$ de la zone de Pareto.

Une optimisation multiobjectifs vise à fournir une population d'individus décrivant au mieux le front de Pareto. Les solutions doivent donc être le plus proche possible du front de Pareto (convergence) ; elles doivent le recouvrir le plus uniformément possible (répartition) et le plus complètement possible (couverture).

La dominance ne définissant qu'un ordre partiel, son utilisation pour la sélection nécessite un traitement particulier. Pour cela, on va donner à chaque solution une performance qui ne sera plus absolue comme en optimisation mono-objectif mais relative à la population courante. Dans la majorité des algorithmes proposés, il s'agit d'un système à deux niveaux. Le premier niveau compare les individus deux à deux en utilisant la dominance et calcule un indicateur. Par exemple, le plus simple des indicateurs calcule le nombre de fois où la solution est dominée. Ce premier indicateur ne définit généralement qu'un ordre partiel : les solutions non dominées de la population sont non comparables. Le second niveau cherche à discriminer les solutions non comparables. Par exemple, en utilisant un indicateur d'isolement. D'autres principes sont proposés, fondés sur des indicateurs de qualité ou par décomposition de l'espace des critères. Ce domaine de recherche est encore très actif, notamment pour améliorer la scalabilité en fonction du nombre d'objectifs.

Paralléliser les calculs d'optimisation multicritères

Les algorithmes évolutionnaires sont assez naturellement parallèles, chaque génération de nouvelles solutions étant indépendante. C'est un parallélisme simple à mettre en œuvre. Le nombre de communications entre les ressources informatiques est proportionnel aux nombres d'individus créés. Sa mise en œuvre n'est pertinente que si le temps d'évaluation des individus est suffisamment long.

Le **modèle des îlots** (*island model*) propose un parallélisme de plus haut niveau. Chaque îlot possède sa propre population et fait tourner son algorithme de manière autonome. Périodiquement, certaines solutions vont migrer d'un îlot à un autre. Ce principe a montré son efficacité (supra-linéaire), et illustre le phénomène de « synergie » chère à l'intelligence collective. Le nombre de communications liées aux migrations est bien moindre et ces deux types de parallélisme sont compatibles.

Une des caractéristiques du parallélisme par îlot est, en limitant les interactions à la migration de solutions, de leurs laisser une grande autonomie. Nous pouvons ainsi avoir des îlots similaires (paramètres différents, taille de la population, nombre de ressources), ou nettement différents (n'utilisant pas les mêmes algorithmes de croisement). L'utilisation d'îlots hétérogènes ouvre des possibilités importantes pour l'amélioration de la recherche.

Un exemple d'utilisation sur l'optimisation du rechargement du combustible

À chaque arrêt d'un réacteur nucléaire REP, les assemblages combustibles sont réarrangés dans le cœur. Les plus anciens sont retirés et remplacés ; les autres restent en réacteur mais sont déplacés. Parmi les arrangements possibles, il s'agit de trouver celui qui permettra une irradiation assez homogène des assemblages combustibles tout en respectant certains critères de sûreté.

L'optimisation du rechargement du combustible dans les REP fait partie des **problèmes de permutation** pour lesquels l'objectif est de trouver parmi une liste d'éléments un ordre particulier minimisant un critère donné. L'exemple type est celui du voyageur de commerce devant passer par un ensemble de villes en minimisant la distance parcourue. C'est un problème **NP-complet** car le temps d'exécution de la résolution est exponentiel en fonction du nombre de villes. L'application présentée porte sur l'optimisation bi-objectif du rechargement du combustible d'un réacteur EPR sur les critères **puissance locale** et effet de **vidange**. À noter que par rapport aux premiers REP, l'optimisation du rechargement des EPR est plus complexe du fait des contraintes, des critères de sûreté, de l'hétérogénéité des assemblages et du manque de retour d'expérience.

Pour le résoudre, nous avons utilisé un algorithme génétique [18] avec un croisement dédié intégrant des connaissances du problème : **équivalence** (inutile de permuter des assemblages combustibles équivalents neufs), **similarité** (les assemblages de même type et de même nombre de tours) ou des **contraintes** (positions ne pouvant accueillir certains assemblages). Le repositionnement du combustible est traité comme un problème multiobjectif (pic de puissance, effet de vidange) avec des contraintes de sécurité.

Une solution pour le rechargement est représentée par une séquence définissant la position de chaque assemblage dans le cœur. En notant N le nombre d'assemblages, une solution est donc définie par une permutation des entiers $\{1, 2, \dots, N\}$. La prise en compte des contraintes de **symétrie sur les positions**, a permis de réduire considérablement la cardinalité de l'espace de recherche. Nous avons décomposé les assemblages en deux sous-ensembles, le premier regroupant les assemblages placés dans des positions à symétrie 1/4 (4 axes principaux) et le second sur le reste des assemblages placés dans des positions à symétrie 1/8. Ce choix *a priori* peut donc éventuellement conduire à des solutions sous optimales.

Le codage des assemblages a été fait en distinguant leur type de matériau (fissile, fertile) et le nombre de tours $\{0, 1, 2, 3\}$. L'assemblage est donc représenté par $x \in \{0, 1, \dots, 7\}$. On complète cette représentation par un indicateur de *burn-up* réparti sur 6 classes $y \in \{0, 1, \dots, 5\}$.

L'assemblage est alors codé par l'**allèle** $x \otimes y \in \{0, 1, \dots, 7\} \otimes \{0, 1, \dots, 5\}$ (pour les assemblages fertiles et fissiles neufs on a évidemment $y = 0$). Cette partition dans le codage s'est révélée efficace par la réduction de la complexité obtenue tout en restant suffisamment précise. Le **chromosome** d'un individu codant une solution du rechargement est donc composé des éléments (les allèles) d'une liste ordonnée de N valeurs $(x_i \otimes y_i)_{i=1, \dots, N}$.

Le croisement entre individus (parents) a été défini de façon à préserver l'admissibilité des solutions (enfants) apparues. Pour cela, nous avons utilisé le **Cycle Crossover operator**, particulièrement adapté aux problèmes de permutation. Cet opérateur identifie les cycles entre deux parents de façon à les conserver dans le chromosome de l'enfant. Le croisement se fait en ne prenant en compte que la valeur x de l'allèle :

Dans la figure 47, les trois premiers allèles (sans la partie *burn-up*) des chromosomes des deux parents sont 0-3-7 et 0-1-5. L'enfant a hérité de l'assemblage 0 en première position car commun aux deux parents. Le premier cycle identifié (en rouge) est 3-1, 1-5, 5-3 et le second cycle (en bleu) est 7-5, 5-7. L'enfant hérite des cycles aléatoirement. Dans notre cas, l'enfant a hérité du premier cycle porté par le Parent 1 et du second porté par le Parent 2. En tenant compte du *burn-up* (partie de l'allèle), le même assemblage peut alors apparaître deux fois dans un chargement. Dans ce cas, un opérateur de réparation sur les *burn-up* intervient pour rendre la solution admissible. Les mutations, modifications aléatoires sur les chromosomes, sont introduites en réalisant (avec une faible probabilité) des permutations aléatoires sur les positions de deux ou plusieurs assemblages tout en préservant les contraintes sur les positions des assemblages.

Les calculs numériques ont été réalisés par APOLLO 3, code de calcul neutronique multifilière de physique des réacteurs sur le calculateur TITANE installé au CCRT. Les calculs APOLLO ont été pilotés par la librairie Vizir intégrée à URANIE offrant diverses méta-heuristiques d'optimisation mono et multicritère.

Différents îlots hétérogènes ont été simulés [19]. Le premier utilise des fonctions d'évaluation différentes plus ou moins

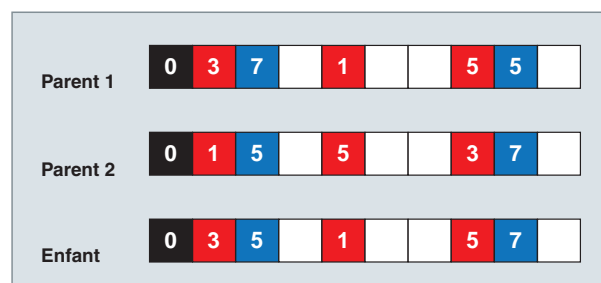


Fig. 47. Illustration du « Cycle Crossover Operator ».

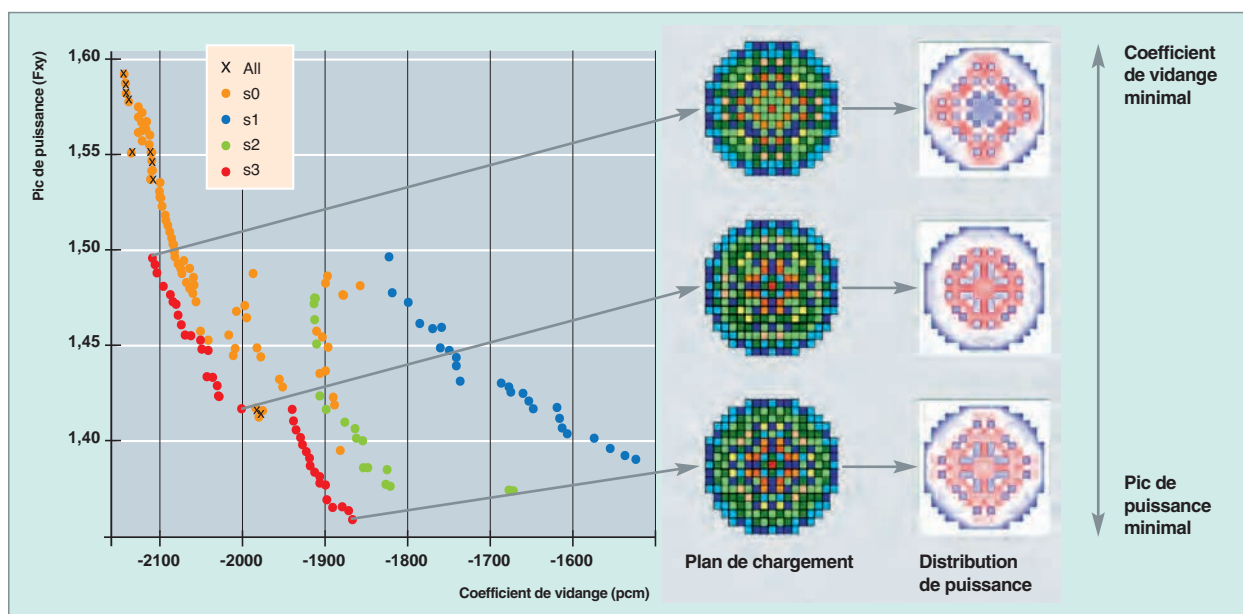


Fig. 48. Optimisation du plan de chargement des assemblages combustibles dans un cœur de réacteur nucléaire. Dans le plan {puissance locale \otimes coefficient de vide}, les fronts de Pareto obtenus par trois stratégies différentes d'îlots.

précises 2D et couteuses 3D, le second des méta-heuristiques différentes (algorithme génétique, colonies de fourmis et essaim de particules). La figure 48 montre les fronts de Pareto obtenus avec différentes configurations de taille de la population pour l'optimisation du pic de puissance et de l'effet de vidange pour un REP. Les meilleures solutions (en rouge) ont été obtenues par la stratégie où les îlots contiennent suffisamment d'individus pour représenter le front de Pareto.

Autres exemples d'utilisation

En neutronique, le besoin des utilisateurs pour des **calculs de transport multigroupes** est large et divers, du calcul grossier et rapide au calcul très précis. Pour cette raison, on a besoin d'utiliser des **bibliothèques de sections efficaces multigroupes** adaptées. Dans [20], nous avons proposé un constructeur adaptatif d'un maillage énergétique en fonction de la précision requise et des contraintes sur les temps de calcul. Au niveau optimisation, le problème peut être vu comme la sélection d'un sous-maillage d'un maillage de référence fin (1 200 groupes) en préservant au maximum la précision obtenue. C'est un problème combinatoire. On utilise un essaim de particules avec un opérateur de mouvement adapté. Cet opérateur cherche à préserver la répartition des groupes lors de la génération des nouvelles solutions. À noter que cet opérateur a été réutilisé pour deux autres problèmes : la conception de crayons de combustibles hétérogènes (répartition axiale de pastilles) [19], et plus récemment sur des travaux en cours portant sur l'optimisation de la répartition de débit pour les cœurs de réacteurs rapides refroidis au sodium RNR-Na.

Dans [21,22] ces algorithmes ont été utilisés pour la conception de nouveaux cœurs RNR-Na. L'exploration dans l'espace de recherche s'est faite par l'intermédiaire de méta-modèles (réseaux de neurones) pour réduire les temps de calcul. Ces travaux ont attiré notre attention sur des améliorations possibles pour traiter de ce qu'on appelle le *many-objectif*, lorsque le nombre d'objectifs est élevé (six dans son cas), cas pour lequel la notion de dominance n'est plus discriminante. D'autres domaines de recherche sont ouverts, notamment l'optimisation sous incertitudes, qu'il s'agisse d'incertitudes aléatoires ou épistémiques.

Ces études ont montré l'intérêt des algorithmes évolutionnaires sur machines de puissance pour résoudre des problèmes complexes d'optimisation multicritère sous contraintes. Aujourd'hui, les moyens de calcul performants permettent d'utiliser ces méta-heuristiques. De plus, la stratégie par décomposition en îlots coopératifs permet d'une part d'exploiter naturellement le parallélisme des moyens de calcul et d'autre part de combiner différentes stratégies de recherche. La première étude [18] avait été retenue lors de l'appel à projets HPC pour la mise en route du cluster TITANE.

Nous concluons ce sous-chapitre par une section sur les incertitudes affectant une simulation numérique. Aux incertitudes numériques, produites, comme nous l'avons vu plus haut, par la précision limitée des schémas et de la représentation des nombres sur ordinateur, s'ajoutent d'autres sources d'incertitude, que nous allons présenter.

Les incertitudes en simulation numérique

En simulation numérique, la prise en compte des incertitudes est fondamentale. La façon dont on les représente dans le **modèle conceptuel** (physique) puis dans le **modèle opérationnel** qui en est sa représentation numérique (code de calculs), va influencer sur les résultats des simulations numériques (tableau 4).

Dans le **modèle conceptuel**, les **incertitudes aléatoires** représentent la variabilité naturelle de certains phénomènes (signaux sismiques) et sont irréductibles car imposées par l'extérieur. Les **incertitudes épistémiques** traduisent le manque de connaissance sur le système étudié ou sur les approximations faites lors de sa modélisation. Elles sont considérées comme réductibles à partir de connaissances supplémentaires (mesures expérimentales). Les **modèles probabilistes** sont utilisés pour représenter ces deux types d'incertitudes. Nous retrouvons la dualité de l'interprétation des probabilités : la vision objective pour décrire une vraie variabilité et la vision subjective **Bayésienne*** pour traduire un manque de connaissance.

Dans le **modèle opérationnel**, viennent s'ajouter les **incertitudes numériques** (présentées *supra*, p. 63) et les **incertitudes statistiques** dans le cas de calculs Monte-Carlo (voir *infra*, p. 187). Par le théorème « central limite », la modélisation des incertitudes statistiques ne pose pas de problème ; elles peuvent être approchées par des lois gaussiennes. Les incertitudes épistémiques du modèle conceptuel peuvent être représentées par une loi de probabilité *a priori* (jugements d'experts). Elles peuvent ensuite être réduites par **calibration Bayésienne** en inférant à partir de la loi *a priori* et de données expérimentales une loi *a posteriori* de plus petite variance.

La propagation d'incertitudes

Lorsque ces différentes sources d'incertitudes sont modélisées par la variable aléatoire **X** (multivariée dans le cas général) de loi F_X , la propagation des incertitudes dans le modèle $Y = G(\mathbf{X})$, vise à calculer la loi F_Y de Y . Dans le cas général F_Y n'est pas calculable. En fonction de l'objectif de l'étude, on se limite à des résumés statistiques, appelés **grandeurs d'intérêt**, comme la moyenne $E(Y)$, la variance $V(Y)$, des probabilités de dépassement de seuil $P(Y > \text{seuil})$ ou certains de ces quantiles y_α définis par $P(Y < y_\alpha) = \alpha \in [0,1]$.

Un cas très simple de la propagation est celui où le modèle G peut être approché par un développement du premier ordre autour de l'espérance de **X**. Dans ce cas, la moyenne et la variance de Y sont calculables. De plus, lorsque les incertitudes **X** sont représentées par des variables gaussiennes, la variable Y suit également une loi gaussienne. Les grandeurs d'intérêt sont alors parfaitement calculables. Cette méthodologie est largement utilisée en neutronique pour propager les incertitudes des données nucléaires.

Dans le cas général, lorsque le modèle G est non linéaire, les grandeurs d'intérêts sont modélisées par estimateurs statistiques. Un **plan d'expériences*** numériques ($\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_n$) est réalisé par tirages aléatoires selon la loi F_X . Le tirage **LHS (Latin Hypercube Sampling*)** par stratification iso-probabiliste, assure une bonne représentation des marginales de **X**. En grande dimension, le tirage LHS doit être associé aux heuristiques de contrôle de la **discrédance*** pour assurer une bonne couverture de l'espace. Les calculs spécifiés par le plan d'expériences peuvent évidemment être menés indépendamment les uns des autres. On peut donc exploiter les capacités du HPC. Cette méthode de propagation permet d'estimer les grandeurs d'intérêt centrales comme la moyenne et la variance avec une erreur asymptotique en

Tableau 4.

Une classification des diverses sources incertitudes en simulation numérique	
Modèle conceptuel (physique)	
Validation : les expériences sont-elles reproduites correctement par le modèle conceptuel ?	
Aléatoires	Épistémiques
• Variabilité naturelle de certains phénomènes : durée de vie d'un composant, onde sismique.	• Manque de connaissance sur les paramètres, les modèles : pertes de charge, modèles de turbulence.
• On ne sait pas donner une valeur unique.	• On ne sait pas quelle valeur donner.
• Irréductibles.	• Réductibles : expertise et données expérimentales, formalisme bayésien adapté.
Modèle opérationnel (numérique)	
Vérification : les équations du modèle conceptuel sont-elles résolues correctement ?	
Statistiques	Numériques
• Calculs Monte-Carlo, échantillonnage.	• Maillage géométrique, méthodes de résolution.
• Réductibles : plus de simulations/particules, méthodes de réduction de la variance.	• Réductibles : maillage plus fin (convergence).

$O(1/\sqrt{n})$. Pour les grandeurs d'intérêt extrêmes caractérisant les queues de distribution comme les **événements rares** ou les quantiles extrêmes, les méthodes de réduction de variance peuvent s'avérer nécessaires pour accroître la précision de l'estimateur sans trop augmenter le nombre de simulations. Des travaux sont en cours au CEA et à EdF sur la réduction de variance par échantillonneurs **Monte-Carlo Séquentiel** fondés sur les compromis entre l'**exploration** aléatoire pure par Monte-Carlo classique et l'**exploitation** des simulations déjà réalisées pour se focaliser sur les zones d'importance en adaptant la loi initiale F_X . D'autre part, pour l'estimation de **quantiles*** associés à des probabilités pas trop extrêmes, la **méthode de Wilks** fondée sur les statistiques d'ordre offre un cadre rigoureux et de mise en œuvre pratique. Cette méthode permet d'estimer des intervalles de confiance sur les valeurs possibles de Y et cela indépendamment de la connaissance de la loi F_Y , c'est la propriété fondamentale. Cette méthodologie appelée GRS [23] est largement utilisée dans les études de sûreté.

L'analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité [24] vise à hiérarchiser les effets des incertitudes des paramètres sur l'incertitude de la sortie calculée Y . Nous verrons qu'elle peut également apporter une indication sur la structure fonctionnelle du modèle (forme linéaire, additive). Dans le cas où le modèle est supposé linéaire et les composantes X_i représentées par des **variables**

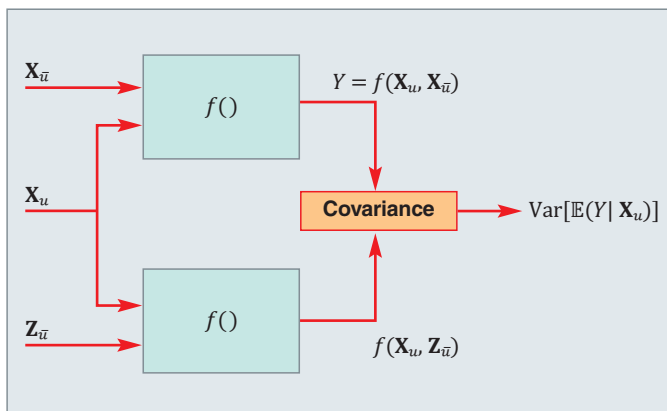


Fig. 49. Principe de la méthode de Sobol. La variable aléatoire multivariée \mathbf{X} représente les incertitudes. La variable aléatoire \mathbf{Z} a même loi que \mathbf{X} et lui est indépendante. L'indice de sensibilité du groupe de variables \mathbf{X}_u avec $\mathbf{X} = \mathbf{X}_u \oplus \mathbf{X}_{\bar{u}}$ et $\mathbf{Z} = \mathbf{Z}_u \oplus \mathbf{Z}_{\bar{u}}$. Le code de calcul est représenté par $Y = f(\mathbf{X})$. La covariance entre les vecteurs $f(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}_{\bar{u}})$ et $f(\mathbf{X}_u, \mathbf{Z}_{\bar{u}})$ partageant les réalisations communes du groupe \mathbf{X}_u est égale à la variance de l'espérance conditionnelle $V[E(Y | \mathbf{X}_u)]$. L'indice de sensibilité du groupe S_u est égal au rapport entre cette variance et la variance de Y . L'indice S_u est donc équivalent au coefficient de corrélation linéaire entre les variables $f(\mathbf{X}_u, \mathbf{X}_{\bar{u}})$ et $f(\mathbf{X}_u, \mathbf{Z}_{\bar{u}})$. L'estimateur statistique de l'indice de sensibilité S_u est donc équivalent à l'estimateur d'un coefficient de corrélation linéaire pour lequel il existe une méthode permettant d'estimer un intervalle de confiance (transformation de Fisher).

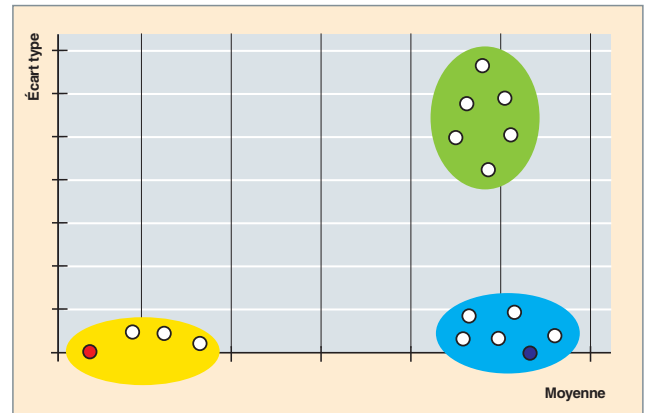


Fig. 50. Analyse de sensibilité par la méthode de Morris. L'analyse a détecté 3 groupes de variables. Le premier en jaune regroupe les variables peu influentes. Le second en cyan regroupe les variables ayant un effet important et quasi linéaire et le troisième en vert regroupant les variables ayant un effet important et non linéaire. À noter l'effet linéaire pour les 2 variables rouge et bleue car l'écart-type de leurs variations est nul.

bles aléatoires indépendantes, l'analyse de sensibilité fondée sur la **décomposition de la variance** est immédiate. Dans le cas général, lorsque le modèle est non linéaire la décomposition de la variance peut dépendre des effets combinés entre les incertitudes. Et dès que le nombre d'incertitudes dépasse quelques unités, le calcul de la totalité de la décomposition devient très vite prohibitif. On se limite alors à l'indice de sensibilité du premier ordre S_i représentant la part relative de la variance apportée par la seule composante X_i . Dans la **méthode de Sobol** dont le principe est illustré par la figure 49, l'indice de sensibilité est obtenu à partir de la variance de l'espérance conditionnelle $E(Y | X_i)$ représentant la meilleure approximation fonctionnelle de $Y = G(\mathbf{X})$ par la seule composante X_i . La valeur S_i comprise entre $[0,1]$ détermine la part relative de X_i dans la variance de Y . Mais lorsque S_i est petit, voire nul, nous ne pouvons pas conclure à la non-influence de la composante X_i dans la variance de Y . Pour s'en assurer, on calcule l'indice de sensibilité totale qui prend en compte les éventuelles interactions dans le modèle $Y = G(\mathbf{X})$ entre la composante X_i et les autres composantes de \mathbf{X} . Une méthode statistique très efficace permet d'estimer les indices de sensibilité [24] et leur intervalle de confiance. À noter que lorsque les deux indices de sensibilité sont proches $S_i \approx ST_i$, on peut conclure que le modèle peut se mettre sous forme additive. Cette propriété permet d'analyser plus efficacement la modélisation physique. Lorsqu'il existe des corrélations par blocs entre les incertitudes, la méthode peut s'appliquer mais uniquement sur les groupes d'incertitudes indépendants.

Une seconde méthode, la **méthode de Morris** [25] (fig. 50) est fondée sur l'analyse des variations de Y lorsqu'un seul paramètre incertain varie. Pour un paramètre $X_i \in [\min_i, \max_i]$, plusieurs variations de Y sont calculées par différences finies

en plusieurs points du domaine puis synthétisées par la moyenne μ_i^* de leur valeur absolue et leur écart-type σ_i . Un paramètre incertain sera jugé peu influent lorsque la moyenne μ_i^* est petite. Il sera jugé influent avec effet linéaire si la moyenne μ_i^* est grande et l'écart-type σ petit et avec effet non linéaire lorsque l'écart-type σ est grand. La méthode de Morris est particulièrement adaptée pour les problèmes où le nombre de paramètres trop grand nécessite une étape préalable de criblage pour sélectionner les paramètres les plus influents (problème d'optimisation, de conception à grande dimension).

Les méta-modèles

Certaines études exigent un très grand nombre de simulations (incertitudes, optimisation). Pour réduire les temps de calcul, on substitue alors au modèle opérationnel (code de calcul) un modèle simplifié appelé méta-modèle (*surrogate model*). Cette méthodologie s'inspire de celle des surfaces de réponses polynomiales mises en œuvre pour construire des modèles à partir de mesures expérimentales (la théorie des plans d'expériences en est issue). Aujourd'hui, la méthodologie des méta-modèles s'appuie sur les méthodes d'apprentissage supervisé (moyens de calculs plus performants, données plus riches et plus complexes). En approximation non linéaire, les **réseaux de neurones*** de type MLP (*Multi Layer Perceptron*) sont des modèles très efficaces. Plus récemment, les modèles de **krigeage*** par processus gaussiens (fig. 51) ont été proposés [26]. Leur intérêt est de modéliser les erreurs prédictives. Ces modèles ont été intro-

duits en géostatistique pour résoudre des problèmes de cartographie dans le but de prendre en compte la dépendance spatiale entre les données. Le point de vue du probabiliste consiste à supposer les données comme réalisations d'un processus gaussien. Nous utilisons alors les outils classiques de l'estimation sur des modèles linéaires et gaussiens pour inférer le modèle statistique de la prédiction. L'application du krigage aux codes de calcul a donné lieu à la méthodologie **DACE**, acronyme de *Design and Analysis of Computer Experiment* [27]. Un deuxième intérêt des modèles de krigage est leurs capacités à produire des stratégies de planification séquentielle d'expériences numériques par des heuristiques utilisant la variance prédictive [28] (axe de R&D initié au CEA). Des travaux au CEA ont montré que cette technique permet d'une part de compléter la modélisation physique du modèle conceptuel par un modèle statistique inféré à partir des écarts calculs-expériences [29] et d'autre part de détecter parmi un ensemble de simulations numériques certaines contenant des erreurs [30].

Une autre approche fonctionnelle est celle des **polynômes de chaos** [31]. En supposant les composantes X_i indépendantes, le modèle $Y = G(\mathbf{X})$ peut être approché par un développement en chaos polynomial $Y \cong \sum_{\alpha} y_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\xi)$. Les Ψ_{α} sont des polynômes mono ou multidimensionnels du vecteur aléatoire $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_d)$ obtenus par tensorisation de polynômes orthogonaux monodimensionnels en ξ_i . En général, la base des polynômes orthogonaux est choisie en fonction des lois de probabilité des composantes : Hermite,

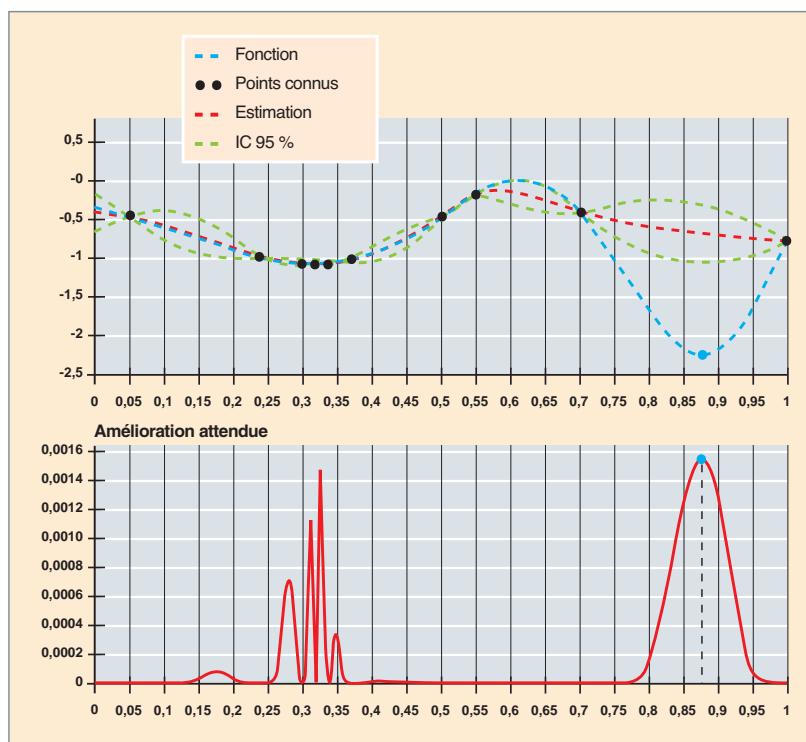


Fig. 51. Recherche du minimum d'une fonction en utilisant le krigage par processus gaussiens. Figure du haut : approximation d'une fonction (en bleu) connue seulement à partir de quelques réalisations (points en noir), la prédiction du krigage est en rouge avec son intervalle de confiance à 95 % en vert. Les méthodes d'optimisation séquentielle de type EGO (*Efficient Global Optimization*) sont fondées sur le compromis exploitation-exploration. Elles utilisent les prédictions du krigage (exploitation) et la variance prédictive (exploration) pour sélectionner le nouveau point à ajouter au plan d'expériences. La figure du bas représente le profil du critère de sélection (*Expected Improvement*). Le nouveau point retenu (en bleu) est celui qui correspond à la plus grande valeur du critère : la stratégie a décidé d'explorer la zone présentant une grande incertitude.

Legendre, Laguerre et Jacobi respectivement pour les lois gaussienne, uniforme, exponentielle et *bêta*. Une fois la base et le degré retenus, les seules inconnues sont les coefficients γ_α du développement. Les coefficients peuvent être calculés par régression linéaire ou par techniques d'intégration numérique. Cette approche par chaos polynomial est adaptée à l'analyse de sensibilité car elle permet d'obtenir la décomposition fonctionnelle de la variance (**ANOVA fonctionnelle**). Néanmoins, un des problèmes de cette décomposition est l'explosion exponentielle du nombre de coefficients en fonction du nombre des incertitudes et du degré du polynôme. Des stratégies de construction itératives existent pour limiter le nombre de simulations et la complexité du chaos polynomial.

URANIE

Au CEA, ces méthodes sont intégrées dans URANIE (sourceforge.net/projects/uranie), un logiciel Open Source développé avec le logiciel ROOT du CERN dont il tire des fonctionnalités de haut niveau, notamment dans la gestion et la visualisation de données complexes. URANIE est conçu pour réaliser facilement des propagations d'incertitudes, des analyses statistiques et de sensibilité, des explorations paramétriques, des constructions de méta-modèles ou résoudre des problèmes d'optimisation.

► Références

- [1] W. KOHN and L. J. SHAM, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", *Phys. Rev.*, 140, p. 1133-1138, 1965.
- [2] F. BOTTIN, S. LEROUX, A. KNYASEV and G. ZÉRAH, "Large-scale *ab initio* calculations based on three levels of parallelization", *Computational Materials Science*, 42, p. 329, 2008.
- [3] A. LEVITT and M. TORRENT, "Parallel eigensolvers in plane-wave Density Functional Theory", *Computer Physics Communications*, 187, pp. 98-105, 2015.
- [4] B. DESPRÉS, « Méthodes numériques pour les EDP instationnaires », https://www.ljll.math.upmc.fr/mathmodel/enseignement/polycopies/BD_2014-2.pdf
- [5] N.J. HIGHAM, "Accuracy and Stability of Numerical Algorithms" SIAM, 2002.
- [6] P. MONK, *Finite Element Methods for Maxwell's Equations*, Oxford University Press, 2003.
- [7] J.S. HESTHAVEN and T. WARBURTON, *Nodal Discontinuous Galerkin Methods*, Springer, 2008.
- [8] M. ADAMS, "Subcell Balance Methods for Radiative Transfer on Arbitrary Grids", *Transport Theory and Statistical Physics*, 26, pp. 385-431, 1997.
- [9] T. BAILEY, *The Piecewise linear Discontinuous Finite Element Method applied to the RZ and XYZ Transport Equations*, PhD, 2008.
- [10] P. NOWAK and M.K. NEMANIC, "Radiation Transport Calculations on Unstructured Grids Using a Spatially Decomposed and Threaded Algorithm" *Proc. American Nuclear Society Conf. Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in nuclear Applications*, p. 379, 1999.
- [11] S.J. PLIMPTON, B. HENDRICKSON and S.P. BURNS, "Parallel Sn Sweeps on Unstructured Grids: Algorithms for Prioritization, Grid Partitioning and cycle Detection", *Nucl. Sci. Eng.*, 150, pp. 267-283, 2005.
- [12] D.P. LANDAU and K. BINDER, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2009.
- [13] DJC MACKAY, *Introduction to Monte Carlo methods*, Springer Netherlands, 1998.
- [14] W. KRAUTH, Introduction To Monte Carlo Algorithms, in "Advances in Computer Simulation", J. Kertesz and I. Kondor, eds, *Lecture Notes in Physics*, Springer Verlag, 1998.
- [15] J.S. ROSENTHAL, "Parallel computing and Monte-Carlo algorithms", *Far East Journal of Theoretical Statistics*, 4, p. 207, 2000.
- [16] BEN CALDERHEAD, "A general construction for parallelizing Metropolis-Hastings algorithms", *Proc. Nat. Acad. Science*, 114, 2014.
- [16] J. LEE and M.I. BASKES, "Second nearest-neighbor modified embedded-atom method potential", *Phys. Rev. B*, vol. 62, no. 13, pp. 8564-8567, 2000.
- [17] O. DURAND and L. SOULARD, "Power law and exponential ejecta size distributions from the dynamic fragmentation of shock-loaded Cu and Sn metal under melt conditions", *Journal of Applied Physics*, 114, p. 194902 (2013).
- [18] J.M. DO, G. ARNAUD, A.M. BAUDRON and J.J. LAUTARD, "Fuel loading pattern for heterogeneous EPR core configuration using a distributed evolutionary algorithm", *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009)*, Saratogo Springs, New York, May 3-7, 2009.
- [19] J.M. DO, J.J. LAUTARD, A.M. BAUDRON, S. DOUCE and G. ARNAUD, "Use of metaheuristics for design of fuel loading pattern in light reactors comprising some radial and axial heterogeneities", *Proceedings of the 2011 IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing Workshop*, pp. 374-380.
- [20] P. MOSCA, C. MOUNIER, R. SANCHEZ and G. ARNAUD, "An adaptive energy mesh constructor for multi group library generation for transport codes", *Nuclear Science and Engineering*, vol. 167, No 1, January 2011, pp. 40-60.
- [21] E. HOURCADE, F. GAUDIER, G. ARNAUD, D. FUNTOWIEZ and K. AMMAR, "Supercomputing application for reactors code design and optimization", *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte-Carlo 2010*, Tokyo, Japan, October 17-21, 2010.
- [22] K. AMMAR, *Conception multi-physiques et multi-objectifs des cœurs de RNR-NA hétérogènes*, thèse université Paris-Sud, soutenue le 9/12/2014.
- [23] H. GLAESER, "GRS Method for Uncertainty and Sensitivity Evaluation of Code Results and Applications", *Science and Technology of Nuclear Science*, Hindawi Publishing Corporation, vol. 2008.

- [24] A. SALTELLI *and al.*, *Global Sensitivity Analysis: The Primer*, Wiley, January 2008.
- [25] M. D. MORRIS, "Factorial Sampling plans for preliminary computational experiments", *Technometrics*, vol. 33, no 2, pp. 161-174, May 1991.
- [26] C. E. RASMUSSEN and C.K.I. WILLIAMS, *Gaussian Processes for Machine Learning*, MIT Press, 2006.
- [27] T. SANTNER, B. WILLIAMS and W. NOTZ, *The Design and Analysis of Computer Experiments*, Springer series in Statistics, 2003.
- [28] D. R. JONES, M. SCHONLAU and W. WELCH, "Efficient Global Optimization of Expensive Black-Box Functions", *Journal of Global optimization*, 13, pp. 455-492, 1998.
- [29] F. BACHOC, G. BOIS, J. GARNIER and J.M. MARTINEZ, "Calibration and improved prediction of computer models by universal kriging", *Nuclear Science and Engineering*, 176(1), pp. 81-97, 2014.
- [30] K. AMMAR, *Conception multi-physiques et multi-objectifs des cœurs de RNR-Na hétérogènes*, thèse Université Paris-Sud, soutenue le 9/12/2014.
- [31] O. LE MAÎTRE and O.M. KNIO, *Spectral Methods for Uncertainty Quantification*, Springer, 2010.
- [32] J. STRIKWERDA, "Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations", SIAM, 2004.
- [33] C. JOHNSON, *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*, Dover Publications, 1987.
- [34] R.J. LE VEQUE, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge University Press, 2002.
- [35] E. HAIRER *et al.*, *Solving Ordinary Differential Equations, Non Stiff Problems*, Springer Verlag, 1993.
- [36] E. HAIRER *et al.*, *Geometric Numerical Integration*, Springer Verlag, 2006.

Liste des auteurs pour l'ensemble de cette section

Bernard AMADON,
Direction des applications militaires

Gilles ARNAUD,
Direction des énergies

Vincent BERGEAUD,
Direction de la recherche technologique

Julien BIGOT,
Direction de la recherche fondamentale

Daniel BOUCHE,
Direction des applications militaires

Christophe CALVIN,
Direction de la recherche fondamentale

Patrick CARRIBAULT,
Direction des applications militaires

Henri-Pierre CHARLES,
Direction de la recherche technologique

Guillaume COLIN DE VERDIÈRE,
Direction des applications militaires

Laurent COLOMBET,
Direction des applications militaires

Marc DURANTON,
Direction de la recherche technologique

Denis DUTOIT,
Direction de la recherche technologique

Vincent FAUCHER,
Direction des énergies

Frédéric HEITZMANN,
Direction de la recherche technologique

Pierre KESTENER,
Direction de la recherche fondamentale

Jacques-Charles LAFOUCRIÈRE,
Direction des applications militaires

Martial MANCIP,
Maison de la simulation

Jean-Marc MARTINEZ,
Direction des énergies

Jean-Pierre MEYER,
Direction de la recherche fondamentale

Marc PERACHE,
Direction des applications militaires

Gerald SAMBA
Direction des applications militaires

et Laurent SOULARD,
Direction des applications militaires

Exemples d'application des sciences du numérique et du calcul haute performance

Cette seconde partie de la monographie présente une sélection d'une dizaine d'applications des sciences du numérique et du calcul haute performance dans les différents domaines d'activité du CEA.

Depuis la dynamique des galaxies jusqu'à la génomique en passant par le calcul de climats, ces applications sont d'une extrême diversité. Après une courte présentation du problème physique, nous montrerons les spécificités de son traitement du point de vue numérique et algorithmique. Nous expliquerons pourquoi le problème considéré est justiciable d'un calcul haute performance puis comment il a été traité, en présentant les principaux résultats obtenus. Dans la plupart des cas présentés ici, le calcul vise à simuler un système physique afin de prédire son comportement : la confrontation de cette simulation à l'expérience sera alors évoquée.

Il s'agit d'exemples destinés à montrer comment sont utilisés en pratique les outils et méthodes décrits dans la section précédente de la monographie. Nous avons regroupé dans un même chapitre les applications utilisant des méthodes similaires. Nous cherchons ici à montrer la richesse du domaine, sans viser l'exhaustivité des applications des sciences du numérique et du HPC au CEA.

Les structures en évolution dynamique, du séisme aux accidents industriels

Introduction générale

La dynamique des structures s'intéresse au mouvement des corps solides, aussi bien au niveau de leur cinématique d'ensemble dans l'espace qu'à celui des ondes mécaniques qui s'y propagent. Elle fait ainsi apparaître, comme dans d'autres systèmes physiques, de nombreuses échelles imbriquées, suivant le point de vue choisi pour observer les phénomènes.

Pour simuler des situations transitoires complexes, telles que les séismes, de l'échelle planétaire à leurs conséquences locales, il est essentiel de déterminer les composantes physiques et les échelles prépondérantes puis de déterminer la technique de discrétisation adéquate de l'espace et du temps et les méthodes numériques de résolution des équations du modèle. C'est seulement ensuite qu'on peut évaluer la charge de calcul et dimensionner les ressources nécessaires, ou identifier les besoins de communications entre échelles. Chaque processus considéré individuellement possède son propre temps caractéristique : de quelques secondes ou minutes pour les séismes, de quelques heures ou jours pour la phase de consolidation post-sismique dans le cas de terrains saturés... ou de quelques dizaines de millisecondes pour les transitoires explosifs industriels. La difficulté principale apparaît dès lors que l'on cherche à simuler des phénomènes fortement non linéaires (liquéfaction, fissuration, chocs, fragmentation, etc.) et/ou incluant des couplages multiphysiques (solide-fluide, gaz-fluide-solide). Les échelles de temps, la discrétisation afférente, ainsi que les modèles de comportement rhéologique des matériaux constitutifs, sont alors à choisir avec soin.

Dans le cadre de la prévention ou de la remédiation des conséquences environnementales, humaines et économiques des catastrophes naturelles (séismes, etc.) et technologiques, la simulation numérique constitue un outil indispensable permettant de compléter les observations et expérimentations, pour améliorer la connaissance des phénomènes complexes mis en jeu et pour mieux quantifier les incertitudes associées. Le recours à des moyens de calcul lourds est nécessaire lorsque les dimensions du modèle physique à étudier et/ou les incertitudes à évaluer sont importantes. La simulation permet, par exemple, d'inverser les données observées pour retrouver les paramètres clés impliqués dans l'origine des phénomènes et bien souvent inaccessibles par mesures directes.

Pour les calculs sismiques, afin de garantir les critères de stabilité numérique et de convergence des calculs, la discrétisation spatiale est conditionnée par les valeurs de vitesses de propagation des ondes des couches géologiques ou plus généralement des structures traversées, ainsi que par le contenu fréquentiel attendu ou possible pour le signal sismique lui-même qui n'est pas connu à l'avance. De ce fait, il est nécessaire de construire des scénarios permettant d'établir la probabilité d'occurrence de séismes de caractéristiques plausibles (magnitude, mécanismes à la source, etc.) pour une période de retour et une zone donnée, basés en général sur l'analyse des données de sismicité historique et/ou instrumentale (p. ex. : stations accélérométriques) disponibles.

Nous retrouvons une illustration de cette dualité temps/espace dans la représentation de phénomènes dits « rapides » à l'échelle de la structure : le suivi précis de la propagation d'ondes à grande vitesse, issues d'impacts ou d'explosions, exige une finesse d'observation temporelle et une partition de l'espace suffisamment raffinée pour bien reproduire les fronts et préserver la stabilité de la propagation de l'information.

Dans la première partie de cette contribution, nous nous proposons de décrire les méthodes de parcours des différentes échelles permettant d'appréhender les conséquences des séismes sur leur environnement, proche ou lointain de l'épicentre.

À l'échelle de la terre, il est nécessaire de disposer d'un modèle global qui puisse être exploitable dans une large gamme de fréquences. Les méthodes de tracé de rayons sont des méthodes monodimensionnelles peu coûteuses en temps de calcul et bien adaptées pour le traitement d'un grand nombre de données. Elles sont principalement utilisées en tomographie (pour la caractérisation des structures géologiques), ainsi que pour la détermination des mécanismes sismiques au niveau des failles à partir des données mesurées par les réseaux de stations sismiques (accéléromètres, sismomètres). L'exploitation de ces données doit permettre d'améliorer la caractérisation de la structure interne de la Terre (imagerie...) et la compréhension de la physique associée. Cette exploitation constitue néanmoins un enjeu, du fait des volumes de données considérables impliqués. Une application illustrant l'enjeu des big data est présentée *infra*, p. 249. Des simulations de propagation

d'ondes sismiques sont possibles à l'échelle de la terre, mais nécessitent des calculs intensifs sur plusieurs dizaines, voire centaines de processeurs ou ordinateurs mis en parallèle. À ce stade, l'objectif des simulations est de mieux comprendre les mécanismes à l'origine des mouvements sismiques observés et non pas de quantifier précisément les effets induits.

À l'échelle régionale (~ 100 km, voir tableau 5), un grand nombre de méthodes numériques tridimensionnelles sont utilisables pour des calculs haute performance (éléments finis, différences finies...). À cette échelle, les modèles de comportement rhéologique restent encore relativement simples et linéaires (p. ex. : élasticité, viscoélasticité). Les simulations sont conçues pour fournir des résultats valides dans une gamme de fréquences assez restreinte (en général, quelques Hz). Les principales difficultés proviennent d'une méconnaissance des milieux géologiques traversés (nature, interfaces, propriétés mécaniques, hétérogénéité, etc.) et des hypothèses fortes, telles que celle de linéarité, ou celle de couches homogènes du point de vue des propriétés physiques et mécaniques. Les résultats des simulations régionales sont généralement utilisés pour évaluer la réponse géodynamique globale en cas de séismes faibles à modérés et fournir les conditions aux limites des modèles locaux.

À l'échelle du site (~ 10 km à quelques mètres), il est possible de mieux prendre en compte des phénomènes physiques plus complexes, tant au niveau des terrains que des structures (couplages multiphysiques, comportement dynamique non linéaire, hétérogénéité des milieux, interactions sol-structure et fluide-structure...). Dans ce cas, la réalisation de calculs intensifs implique également le développement de stratégies numériques avec des schémas de résolution numérique plus adaptés (par exemple, emboîtement

d'échelles avec mise en œuvre de méthodes numériques différentes selon les domaines, schémas de résolution mixtes implicite-explicite, etc.). Cependant, dans le cadre de la prévention du risque sismique, et en particulier dans le cadre des démonstrations réglementaires de sûreté pour les installations à risque spécial, il est nécessaire de disposer de méthodes validées. Généralement, du fait de l'enjeu (sûreté) et de la complexité des phénomènes impliqués, la validation se fait *via* des méthodes de qualification *in-situ* (p. ex. : instrumentation et monitoring de bâtiments réels) et/ou en laboratoire, par exemple en testant des maquettes si possible à l'échelle 1 et en conditions de sollicitation quasi réelles (p. ex. : essais sismiques sur table vibrante).

Un certain nombre des méthodes et codes numériques utilisés au CEA, afin de simuler le comportement dynamique de systèmes mécaniques complexes aux différentes échelles, est récapitulé dans le tableau 5, ci-dessous.

La seconde partie de cette contribution est spécifiquement dédiée à l'échelle la plus petite dans la classification proposée ci-dessus, celle de la structure, en se focalisant sur les chargements extrêmes, ayant pour conséquence la ruine totale ou partielle du système mécanique initial. Il peut s'agir de séismes dans certains cas, mais plus couramment d'explosions en champ proche ou d'impacts. Une importance particulière est donnée à la stratégie originale portée par le CEA pour produire des solutions de référence dans ces situations, compatible notamment avec la rigueur exigée par les analyses de sûreté. En particulier, ce référentiel implique une maîtrise maximale des données d'entrée et des paramètres numériques, ce qui contraint fortement le choix des algorithmes de résolution avec des conséquences potentielles majeures sur les méthodes parallèles associées à l'utilisation performante des supercalculateurs.

Tableau 5.

Codes numériques utilisés au CEA et domaines d'utilisation selon l'échelle spatiale ciblée				
	Terre	Région (100 km)	Site (10 km)	Structure
Types de modèles rhéologiques	Viscoélasticité	Viscoélasticité	Viscoélasticité, Élastoplasticité cyclique avec mécanismes d'endommagement, écrouissage, fracturation	Élastoplasticité cyclique avec mécanismes d'endommagement, écrouissage, fissuration, fragmentation
Complexité des modèles rhéologiques	Simple	Simple / Complexe	Complexe	Complexe
Domaine d'utilisation de différents codes				
Tracé de rayons	●			
Code SEM		●		
Code FEM GEFDYN		●	●	●
Codes FEM CAST3M				●
Code DEM CeaMka3D		●	●	●
Code FEM EUROPLEXUS			●	●
<div> <div>SEM : Spectral Element Method Méthode spectrale</div> <div>FEM : Finite Element Method Méthode des éléments finis (voir <i>infra</i>, p. 62)</div> <div>DEM : Discrete Element Method Méthode des éléments (voir <i>infra</i>, p. 62)</div> </div>				

Simulation des séismes et de leurs conséquences

Mégadonnées, ou big data

Le Département Analyse, Surveillance de l'Environnement (DASE) est chargé, entre autres missions, de l'analyse et de la surveillance de l'activité sismique en cas d'essais nucléaires étrangers (surveillance du Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires), de forts séismes et de tsunamis. Afin de pouvoir détecter le moindre événement sismique, le DASE s'appuie sur un large réseau de capteurs sismiques qui mesurent d'infimes mouvements de la terre. Les données enregistrées sont envoyées par satellite en temps réel au Centre National de Données (CND) du DASE où les sismologues étudient chaque événement afin de le localiser, d'en définir la cause et de déclencher éventuellement l'alerte. Pour accomplir ses missions, le CND recueille, traite et produit des ensembles de données complexes dont le volume est en croissance exponentielle. Aujourd'hui, les enregistrements de plus de 800 capteurs répartis sur l'ensemble du globe sont collectés en continu, ce qui représente environ 5 téraoctets (To) par an, un chiffre qui ne cessera de croître dans les années à venir avec l'augmentation du nombre de capteurs. Ces informations viennent chaque jour enrichir nos archives, où près de 700 000 événements sismiques sont référencés, et plus de 30 ans de signaux numériques sont sauvegardés (soit près de 100 To).

Pour tirer de nouvelles conclusions, prouver les théories scientifiques et produire des connaissances, ces données doivent être nettoyées, transformées, partagées, analysées et visualisées, ce qui pose de nombreux problèmes (algorithmes, gestion des entrées/sorties, etc.), connu sous le nom de « big data ». Le terme big data (ou mégadonnées en français) désigne des ensembles de données dont le volume, la vitesse de génération et la variété (ou diversité) sont telles que les capacités des technologies actuelles pour les manipuler à un coût raisonnable et selon un délai acceptable sont dépassées. À moyen terme, les systèmes de gestion de données, les algorithmes et les architectures informatiques nécessiteront des changements fondamentaux pour répondre aux besoins. Il faut donc imaginer de nouvelles solutions pour stocker, traiter et transporter ces masses considérables de données. Dans le livre *The Fourth Paradigm* [1], les auteurs décrivent une nouvelle ère de recherche scientifique fondée sur la richesse, la manipulation et l'exploration de ces données par des moyens informatiques puissants (fig. 52). De nombreux pays investissent massivement dans la recherche autour de ces nouveaux enjeux, stratégiques pour les entreprises et les États. Ainsi, les États-Unis consacrent 200 millions de dollars pour créer des outils capables d'analyser ces mégadonnées dans le but d'améliorer la recherche scientifique mais aussi la sécurité nationale. La France a pris aussi conscience de l'importance de ce défi et a lancé en 2012, un appel à projets de R&D sur le thème du « big data » dans le cadre du programme « économie numérique » des Investissements d'avenir.

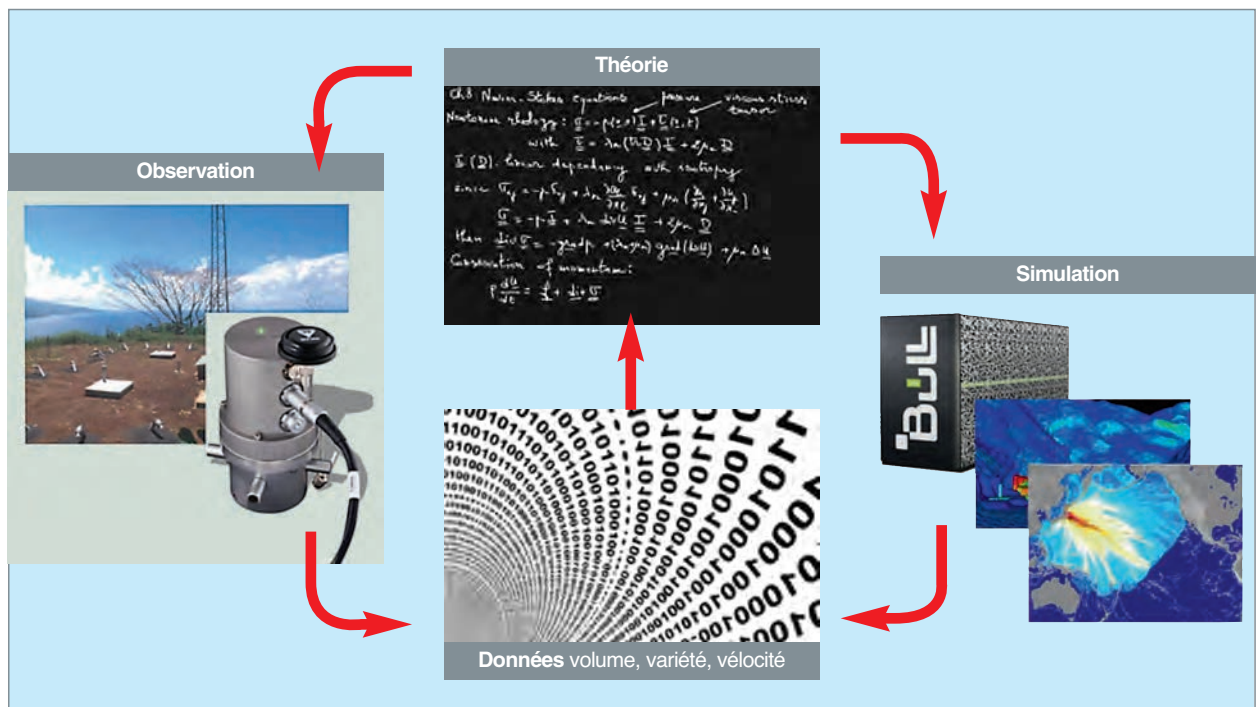


Fig. 52. Les simulations et les instruments de mesure produisent des flux massifs de données qui nécessitent des outils spécifiques de traitement et d'analyse. Ces données, riche source d'information, constituent le 4^e paradigme scientifique selon [1].

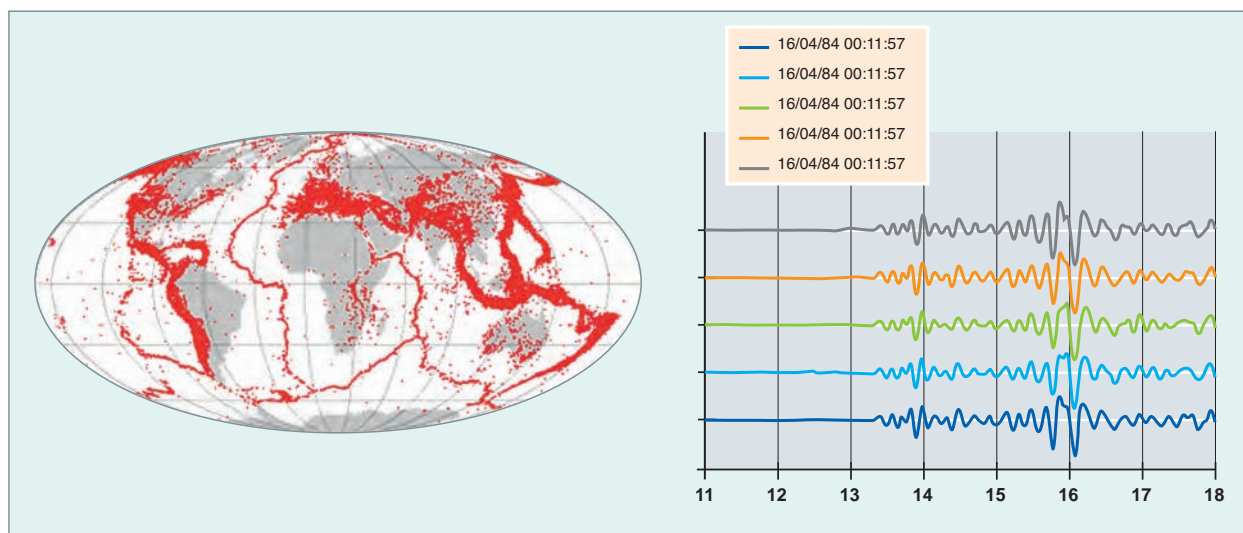


Fig. 53. Les centres de données comme l'IDC (*International Data Centre*) détectent plus de 40 000 événements sismiques par an. Parmi tous ces événements, certains produisent des signaux similaires à ceux engendrés par des événements déjà présents dans les archives. Une technique efficace pour les détecter consiste à comparer en continu le flux de données enregistrées sur les capteurs avec les signaux historiques, mais la complexité de la tâche en fait un problème « big data ».

Le DASE et le DSSI (Département des Sciences de la Simulation et de l'Information) sont associés à l'un de ces projets, appelé « DataScale ». Le projet DataScale regroupe sept partenaires (PME, grandes entreprises et centres de recherches aux compétences variées) qui cherchent ensemble à développer des solutions efficaces au problème du « big data » adaptées à des cas réels d'utilisation. L'application proposée par le DASE a pour objectif de réviser la sismicité en utilisant dix années de données. Cette tâche consiste à rechercher *a posteriori* des événements sismiques qui auraient pu être omis par les traitements effectués en temps réel. Alors que les algorithmes de détection traditionnels recherchent un changement d'amplitude dans le sismogramme, le procédé utilisé compare le flux continu de signal enregistré avec les signaux correspondants à des événements historiques. Le signal mesuré étant comme une « empreinte digitale » pour les tremblements de terre, si celui-ci ressemble à une observation passée, cela signifie qu'un événement similaire vient certainement d'avoir eu lieu. Il existe en effet de nombreux exemples où des séismes distants de quelques kilomètres ont produit des signaux quasi identiques sur un même capteur (fig. 53). Ces séismes peuvent avoir eu lieu à quelques heures d'intervalle lors des crises sismiques ou parfois à plusieurs années d'intervalle [2].

Cette technique est connue pour pouvoir détecter des événements de très faible magnitude et estimer précisément une localisation et une magnitude [3]. Malheureusement, étant donné le flux de données et le grand nombre d'événements qui peuvent être comparés, cette approche ne peut pas être généralisée avec des moyens informatiques « rai-

sonnables ». Elle est donc uniquement utilisée pour étudier un ensemble restreint d'événements sur une petite période de temps. Avec l'appui technique du DSSI et l'expertise du support applicatif du CCRT, la chaîne de traitement a été redessinée afin de pouvoir traiter des millions de fichiers (soit environ dix ans de données) puis a été testée en utilisant 32 000 cœurs du supercalculateur CURIE.

Avec ce nombre de cœurs, l'innovation technique proposée repose sur la mise en œuvre d'une structuration et d'une gestion efficace des données distribuées, ainsi que sur l'orchestration des traitements sur les cœurs de calcul disponibles. La gestion d'un grand nombre de fichiers n'étant pas envisageable sur les systèmes de fichiers actuels, tous les fichiers signaux d'une journée ont été regroupés dans une même archive (soit environ 4 000 archives) puis celles-ci ont été indexées dans une base de données PostgreSQL. Pour optimiser la gestion des entrées/sorties et la répartition des traitements, nous avons utilisé GLOST, un utilitaire développé par le DSSI, qui implémente le principe « Map » (traitement appliqué à l'ensemble des données). Pour ce faire, les données à traiter sont copiées et réparties sur les nœuds de calcul, puis le traitement est réalisé sur chaque nœud en fonction de la donnée présente sur celui-ci. La copie des données (base de données, ressources, archives...) sur les nœuds est donc la première étape et celle-ci nécessite d'être optimisée pour les supercalculateurs de grande taille. Le DSSI et les équipes du support applicatif du TGCC ont alors proposé une nouvelle fonctionnalité à GLOST qui duplique un ou plusieurs fichiers d'un système de fichiers Lustre vers chaque nœud de calcul dans le répertoire temporaire local. Grâce à l'utilisation de deux zones de mémoire tampon

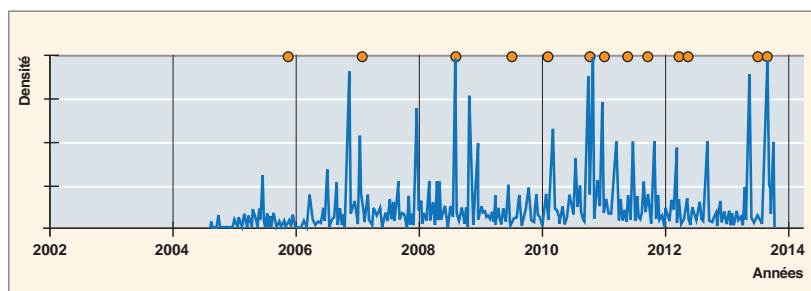


Fig. 54. Densité de l'activité sismique autour du volcan Kasatochi (volcan des îles Aléoutiennes situé en Alaska) estimée par l'application : les pics indiquent une forte probabilité de détecter un nouvel événement. Certains pics de densité élevés ne correspondent pas à des événements sismiques de référence (point orange sur l'axe du temps) ce qui indique probablement des événements manqués par le système actuellement en opération. D'autres pics ont lieu peu de temps avant un événement historique, ce qui suggère la présence de « précurseurs ».

séparées, la lecture et l'écriture sont réalisées simultanément pour plus d'efficacité.

Le projet DataScale a été une occasion unique pour analyser la sismicité de plusieurs régions volcaniques entre 2004 et 2014 en exploitant les bases de données du CID (Centre International de Données de l'OTICE, Organisation du Traité d'Interdiction Complète des Essais nucléaires). La méthode mise en œuvre estime la distribution temporelle de l'activité sismique autour d'un volcan et permet donc la surveillance grâce à des capteurs localisés à grande distance (à plus de 5 000 km dans notre cas d'étude) [fig. 54]. Cela présente évidemment un grand intérêt dans les régions où les volcans sont peu ou mal instrumentés. En outre, les études en cours cherchent à utiliser les événements nouvellement détectés pour estimer la probabilité d'une éruption et la hauteur potentielle du panache éruptif ainsi que pour reconstruire les structures géologiques profondes situées au-dessous du volcan.

Cette méthode peut aussi s'appliquer dans le contexte de l'alerte sismique, où la croissance exponentielle des données et le désir de détecter des événements de faible amplitude produisent une augmentation de la charge de travail des analystes. C'est particulièrement le cas lors de crises sismiques, lorsque le système automatique détecte et présente de nombreux événements aux analystes. Le prochain objectif du DASE est d'aider ses experts lors de l'examen interactif des événements en les classant dans deux catégories, l'une correspondant aux événements « déjà vus », et une autre permettant de mettre en évidence la sismicité inhabituelle. Le système fournira prioritairement aux analystes les événements qui méritent une attention particulière, afin qu'ils se concentrent sur les tâches nécessitant un haut niveau d'expertise. La migration vers un système opérationnel big data est un processus complexe mais stratégique. Au travers du projet DataScale, le DSSI accompagne le DASE dans cette transformation, qui nécessite des compétences et des savoir-faire dans des domaines aussi variés que les infrastructures, le HPC, les bases de données, l'ad-

ministration de système, la fouille de données et le traitement de signal. Grâce à son expertise en matière de suivi des événements géophysiques et fort de l'expérience acquise dans le domaine du calcul haute performance, la DAM dispose des atouts pour répondre aux défis du big data.

La modélisation des structures géologiques

Le choix du domaine géologique cible constitue un enjeu important pour la simulation numérique. En effet, du fait de la complexité des phénomènes étudiés et de l'objectif de prédiction de

l'évolution du système naturel face à une agression potentielle, telle que le séisme, il est nécessaire de construire un modèle géométrique tridimensionnel intégrant au mieux les données et paramètres ayant une influence potentielle ou avérée sur les résultats recherchés : topographie, nombre et épaisseur des couches géologiques, propriétés mécaniques des terrains, conditions de saturation des sols, hétérogénéités spatiales, failles, etc. Les données géoréférencées disponibles (cartes géologiques, données d'affleurements, logs de forages, profils sismiques ou électriques interprétés, données structurales liées aux interfaces entre les couches...) sont donc collectées, stockées et exploitées grâce à un outil SIG (Système d'Informations Géographiques) ou à un modéleur géologique 3D qui permet de reconstruire le modèle géométrique via des méthodes d'interpolation. Le modèle 3D discrétisé utile pour les simulations (**maillage***, **éléments finis***, etc.) est ensuite construit en utilisant des outils de maillage sur base **CAO*** (voir la plate-forme SALOMÉ : <http://www.salome-platform.org/>).

La figure 55 illustre l'enchaînement des traitements à réaliser pour aboutir à un modèle 3D discrétisé via un outil SIG :

1. Le relief de la zone d'étude est représenté par un MNT (Modèle Numérique de Terrain) converti sous forme d'une grille régulière où chaque point est défini par ses coordonnées géographiques et son altitude. Cette grille de référence (F) va permettre de superposer toutes les autres données dans le SIG.
2. L'outil SIG est utilisé pour traiter l'ensemble des données (géologiques, hydrogéologiques...). Pour couvrir l'ensemble de la zone d'étude, des cartes géoréférencées multi-sources et multi-échelles, avec des précisions géologiques variées (A), sont nécessaires. Fusionner les cartes (D) nécessite de privilégier les plus détaillées, en respectant la cohérence des formations géologiques au niveau des jointures entre cartes. On superpose à cette couche, des polygones décrivant les épaisseurs de sédiments de la

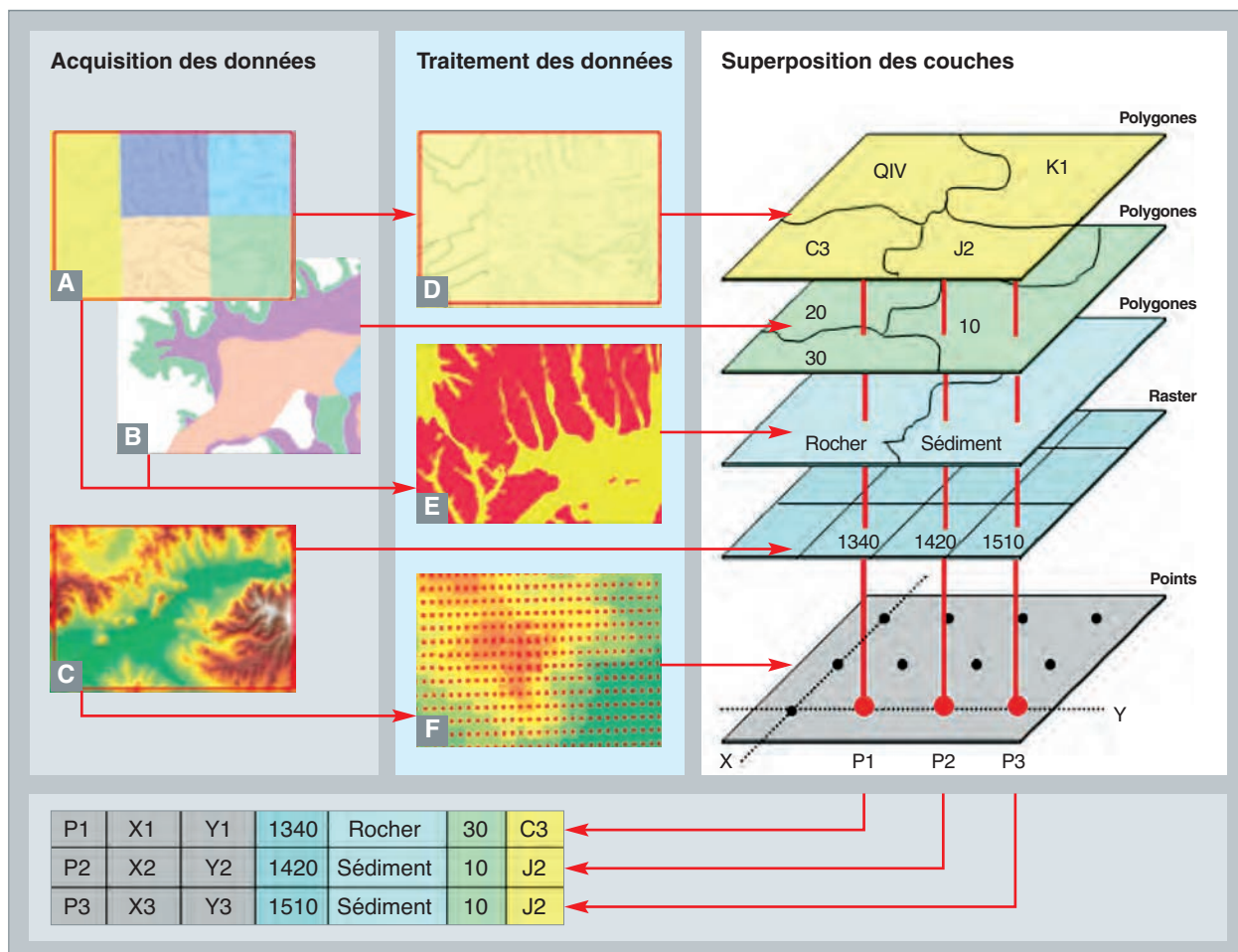


Fig. 55. Étapes de construction d'un modèle géologique discrétisé à l'aide d'un outil SIG (Système d'Informations Géographiques).

zone (B). Une troisième couche est alors extraite, par croisement des deux premières qui permet de distinguer le rocher du sédiment (C).

3. Un maillage est produit à partir de cette grille. Sa finesse est dictée par les fréquences d'intérêt des signaux. Afin de pouvoir réaliser le calcul en parallèle, ce maillage est ensuite partitionné en autant de sous-ensembles que de processeurs utilisés pendant le calcul, par exemple en utilisant le code METIS qui réalise un partitionnement du graphe de connectivité des mailles.

De la terre à la structure, un ensemble de méthodes numériques imbriquées

L'échelle régionale

Le code SEM (*Spectral Element Method*), développé à partir d'une collaboration entre l'Institut de Physique du Globe de Paris [4], CentraleSupélec et le CEA, permet de traiter la propagation des ondes sismiques à l'échelle régionale en

considérant des modèles de comportement linéaires (viscoélasticité), selon un schéma d'intégration explicite en temps (voir ci-après) et une intégration spatiale de Gauss-Lobatto qui, par construction, diagonalise la matrice du système à résoudre et donc, évite son inversion.

L'échelle locale (site) : approches dynamiques couplées en éléments finis

Le code FEM GefDyn, développé par CentraleSupélec et EDF, en collaboration avec le BRGM (Bureau de Recherches Géologiques et Minières), et auquel le CEA a apporté sa contribution, permet d'utiliser des modèles de comportement complexes bien adaptés à la dynamique non linéaire pour les géomatériaux (sols, roches) en tenant compte des couplages hydromécaniques ou thermo-hydromécaniques éventuels, et dans une moindre mesure, pour les structures simples de génie civil. Les applications sont cependant très coûteuses en temps de calcul, du fait des non linéarités nécessitant une discrétisation fine (pas de maillage souvent très inférieur au mètre), et son utilisation

est plutôt réservée aux simulations à l'échelle locale (quelques dizaines à centaines de mètres), même si une version parallélisée a été développée récemment et mise en œuvre sur des applications dynamiques non linéaires à large échelle [5] et [6], pour lesquelles le milieu était supposé sec.

La formulation dynamique couplée utilisée dans la version parallèle du code GefDyn repose sur une formulation simplifiée du modèle de Biot, proposée par [7] pour les milieux poreux et valide pour des sollicitations basse fréquence (cas des séismes). Le sol est modélisé à l'échelle macroscopique par un milieu continu solide et déformable, à travers lequel peut circuler un fluide interstitiel (présent dans les pores de la matrice solide). À cette échelle, le milieu peut être représenté comme la superposition dans l'espace et le temps d'une phase solide et d'une phase fluide (généralement de l'eau). Les hypothèses principales de cette formulation sont les suivantes :

- Le milieu est saturé par un fluide parfait compressible de type visqueux newtonien, dont l'écoulement est décrit par la loi de Darcy ;
- la phase solide est homogène, isotrope et incompressible et sa cinématique est privilégiée pour décrire le mouvement du milieu poreux global ;
- l'accélération relative de la phase fluide et les termes convectifs associés sont négligés, ce qui est généralement vérifié pour les sollicitations sismiques à basses fréquences, et qui conduit à ne considérer que les déplacements et les pressions interstitielles comme inconnues du problème dynamique transitoire ;
- les constituants des phases solide et fluide sont chimiquement inertes et ne peuvent subir de changement de phase ;
- les modèles de comportement non linéaires disponibles pour les géomatériaux sont écrits en contraintes effectives, en adoptant le principe de Terzaghi qui exprime les interactions fluide-solide au sein du milieu poreux : $\sigma = \sigma' - p\mathbf{1}$ (convention de signe de la mécanique des milieux continus), avec σ et σ' , les tenseurs de contraintes de Cauchy (resp. totale et effective), et p , la pression du fluide interstitiel.
- La loi de Darcy généralisée est supposée pour décrire l'écoulement du fluide dans le milieu poreux :

$$\mathbf{K}^{-1}\dot{\mathbf{u}}_{rf} + \rho_f \ddot{\mathbf{u}}_s = -[\mathbf{grad}p - \rho_f \mathbf{g}] \quad (1-1)$$

Avec :

\mathbf{u}_f et \mathbf{u}_s Vecteurs déplacement respectivement des phases solide et fluide ;

$\mathbf{u}_{rf} = n(\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_s)$ Déplacement relatif du fluide par rapport au solide (n , porosité du milieu égale au rapport du volume des vides sur le volume total) ;

ρ_f Masse volumique du fluide interstitiel ;

\mathbf{g} Vecteur accélération de la pesanteur ;

$\mathbf{K} = \mathbf{k}/\mu_f$ Tenseur de perméabilité (\mathbf{k} , tenseur de perméabilité cinématique et μ_f , viscosité dynamique du fluide).

Sous ces hypothèses, le système à résoudre repose sur les équations de conservation globale (quantité de mouvement, masse) et sur la loi de Darcy généralisée, en négligeant l'accélération du fluide devant celle de la phase solide :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (\rho \ddot{\mathbf{u}}_s - \mathbf{div} \boldsymbol{\sigma}' + \mathbf{grad}p - \rho \mathbf{g}) d\Omega = \mathbf{0} \\ \int_{\Omega} [\mathbf{div} \dot{\mathbf{u}}_s + \mathbf{div} \dot{\mathbf{u}}_{rf} + \dot{p}/Q] d\Omega = 0 \end{cases} \quad (1-2)$$

Avec :

$\rho = n\rho_f + (1 - n)\rho_s$ Masse volumique saturée (ρ_s , masse volumique de la phase solide) ;

$Q = K_f/n$ Compressibilité du milieu, exprimée en fonction de la compressibilité de la phase fluide K_f (compressibilité de la phase solide négligée pour les sols).

Pour compléter la formulation mathématique du problème dynamique transitoire (1-2) en description lagrangienne totale, on définit :

- Des conditions initiales sur la configuration initiale :
 - pour la mécanique : déplacements et vitesses (ou accélérations) du solide et contraintes totales ;
 - pour la partie hydraulique : pressions et flux ;
- des **conditions aux limites de type Dirichlet*** sur les déplacements et pressions de fluide ;
- des **conditions aux limites de type Neumann*** sur les contraintes totales et les flux de fluide.

La formulation variationnelle du problème est alors construite en supposant que les fonctions tests associées aux champs solutions, à savoir les déplacements virtuels cinématiquement admissibles et les pressions virtuelles admissibles, sont indépendantes du temps : elles sont fonctions uniquement des points matériels.

En utilisant une discrétisation spatiale classique par éléments finis, nous obtenons le système matriciel à résoudre à un instant t :

$$\begin{cases} \mathbf{M} \ddot{\mathbf{U}}_s - \mathbf{LP} + \mathbf{F}_{int}(\mathbf{U}_s) = \mathbf{F}_{ext}^s \\ \mathbf{M}_f \dot{\mathbf{P}} + \mathbf{HP} + \mathbf{L}^T \dot{\mathbf{U}}_s = \mathbf{F}_{ext}^f \end{cases} \quad (1-3)$$

où \mathbf{U}_s et \mathbf{P} désignent les vecteurs de contributions nodales en déplacements et pressions mesurés par rapport à la configuration initiale. \mathbf{M} est la matrice de masse ; \mathbf{F}_{int} est le vecteur des forces internes dépendant non linéairement du déplacement discret ; \mathbf{F}_{ext}^s et \mathbf{F}_{ext}^f sont respectivement les vecteur des forces mécaniques et hydrauliques extérieures (volumiques et surfaciques). \mathbf{M}_f et \mathbf{H} sont les matrices de compressibilité et de perméabilité, et \mathbf{L} (ou sa transposée \mathbf{L}^T) inclut les termes de gradients.

La discrétisation en temps consiste classiquement à remplacer le déroulement continu des événements par une série d'instants distincts, séparés par des intervalles nommés couramment *pas de temps*. Le schéma temporel pour intégrer le système différentiel en temps à résoudre consiste à relier les inconnues à un instant donné, indexé pour l'exemple $n+1$, à celles des instants passés (entre 1 à n).

Dans notre cas, l'intégration en temps s'effectue au moyen d'un schéma de prédiction-correction de type Newmark [8], consistant à relier les grandeurs cherchées, par exemple \mathbf{u}_s (idem si p) entre les instants n et $n+1$ par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{u}_s^{n+1} = \mathbf{u}_s^n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_s^n + \Delta t^2 [(1/2 - \beta) \ddot{\mathbf{u}}_s^n + \beta \ddot{\mathbf{u}}_s^{n+1}] \\ \dot{\mathbf{u}}_s^{n+1} = \dot{\mathbf{u}}_s^n + \Delta t [(1 - \gamma) \ddot{\mathbf{u}}_s^n + \gamma \ddot{\mathbf{u}}_s^{n+1}] \end{cases} \quad (1-4)$$

On dit que la prédiction d'une quantité est *explicite* si elle ne dépend que de quantités connues aux instants précédents. Sinon, elle est dite *implicite*. Par extension, on qualifie le schéma d'intégration d'*explicite* s'il conduit à une évaluation directe du système d'équations à résoudre (ici 1-4) pour progresser d'un instant au suivant. Dans le cas contraire, si la

résolution d'un système (éventuellement non linéaire) est nécessaire pour pouvoir progresser, on le qualifie d'*implicite*. Deux combinaisons classiques dans les schémas de Newmark sont le schéma implicite dit « de l'accélération moyenne » ($\gamma = 1/2$, $\beta = 1/4$) et le schéma explicite des *différences centrées* ($\gamma = 1/2$, $\beta = 0$). L'utilisation d'un schéma explicite va de pair avec une limitation de la taille des pas de temps pour rester stable, en raison du contrôle réduit sur l'accumulation d'erreurs de troncature qu'il implique. Au contraire, de nombreux schémas implicites ne présentent aucune restriction sur la taille du pas pour préserver la stabilité de l'intégration temporelle. Pour l'approche dynamique couplée étudiée dans cette section, un schéma implicite à accélération moyenne est préféré en cas de fortes non linéarités.

Le choix de valeurs de $\gamma > 1/2$ et $\beta > 1/4$ permet d'introduire un léger amortissement numérique ($< 1\%$) permettant de reproduire l'atténuation observée pour des matériaux naturels à très faibles niveaux de distorsion. Certains auteurs (par exemple [9]) proposent de calculer les coefficients γ et β en fonction du rayon spectral à l'infini ρ_∞ :

$$\gamma = \frac{3 - \rho_\infty}{2(\rho_\infty + 1)} \quad \beta = \frac{1}{(\rho_\infty + 1)^2} \quad (1-5)$$

La figure 56 présente le schéma itératif global de résolution utilisé dans la version parallèle de GefDyn. Cette résolution s'appuie sur une méthode de Newton-Raphson modifiée, dans laquelle à chaque pas de temps, la matrice de rigidité tangente est calculée au début d'étape et des itérations d'équilibre sont ensuite effectuées pour évaluer le vecteur des forces non linéaires.

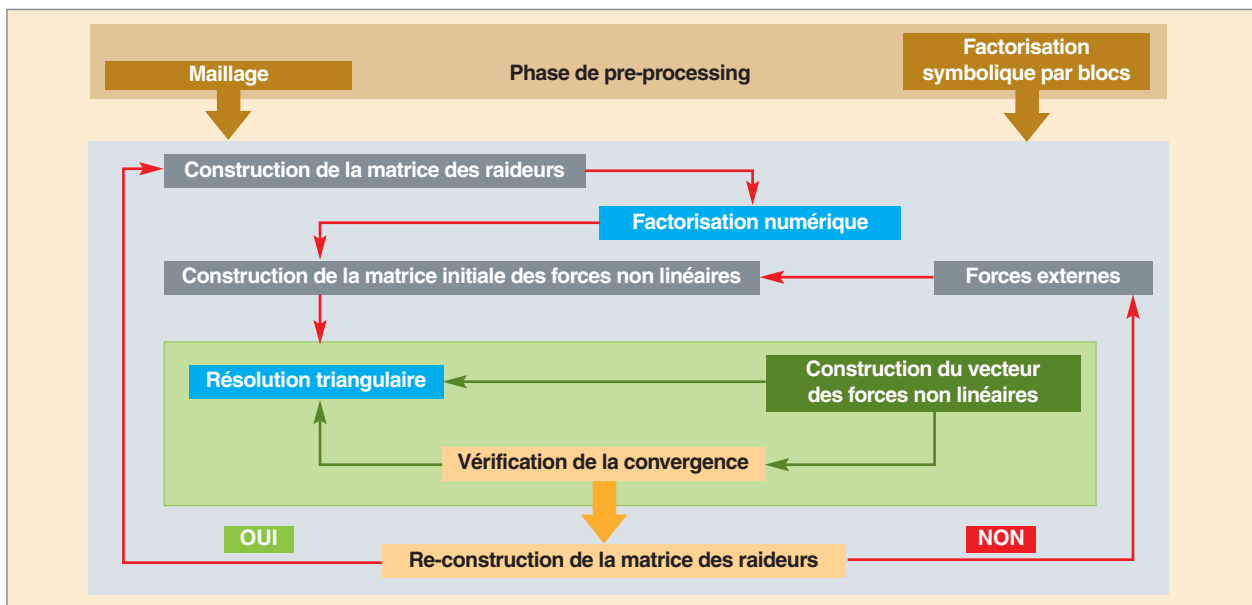


Fig. 56. Schéma itératif global de résolution de la version parallèle de GefDyn. En vert, la phase itérative de Newton-Raphson et en bleu, les parties relatives au solveur de matrice creuse [6].

L'échelle locale (site) : approches par la méthode des éléments discrets

À cette échelle, la simulation se rapproche de la faille et il est nécessaire d'utiliser des méthodes numériques capables de traiter une physique plus complexe comme la fracturation et la fragmentation. Dans ce cas, il a été choisi de développer la méthode des **éléments discrets***.

Les notions de contraintes développées par Cauchy et de tenseur des déformations s'appuyant sur le gradient des déplacements ont donné des outils mathématiques pour le développement des lois de comportement. Néanmoins, la fracturation et la fragmentation restent encore des sujets complexes à aborder dans ce cadre de la mécanique des milieux continus. Il faut remarquer que la matière est considérée comme continue quelle que soit l'échelle et qu'elle n'a donc pas de taille caractéristique. Enfin, dans cette approche de la mécanique des milieux continus, la rotation disparaît par ce passage à la limite des contraintes. Néanmoins, cette notion de rotation est parfois réintroduite dans les éléments « coque » où l'épaisseur représente une taille caractéristique.

La méthode des éléments discrets va permettre d'avoir une autre vision de la matière solide. Le solide est considéré comme un ensemble de particules indéformables qui exercent entre elles des forces et des moments. La cinématique en translation et en rotation de chaque particule est alors donnée par la mécanique générale. Cette approche va naturellement permettre de traiter la génération de fragments et la cinématique de ces fragments dès que l'on casse les liens entre les particules. La difficulté va être de déterminer l'expression des forces et des moments qui permettent de restituer des lois de comportement de la mécanique des milieux continus.

Prenons une poutre encastree à une extrémité et soumise à un déplacement à l'autre extrémité. Cette poutre peut être discrétisée par deux éléments finis, approche mécanique des milieux continus, ou par deux éléments discrets (fig. 57). Imaginons ces deux éléments A et B en caoutchouc (comportement élastique) et collés selon une face F (fig. 57). Selon la mécanique des milieux continus, les deux éléments vont se déformer en restant contigus, ce qui entraîne que la face F_A selon l'élément A sera identique à la face F_B selon B. La géométrie de la face F déformée peut être très complexe mais les contraintes entre les deux éléments permettent de maintenir cette continuité de la matière. Si la colle est maintenant enlevée entre les deux éléments, les éléments A et B vont reprendre leurs formes initiales du fait de leur comportement élastique avec des contraintes qui deviennent nulles. Les deux éléments peuvent se concevoir alors comme des éléments indéformables qui s'inscrivent dans le cadre de la mécanique générale. Par contre, la face F_A n'est plus coïncidente avec la face F_B . Un point G de la

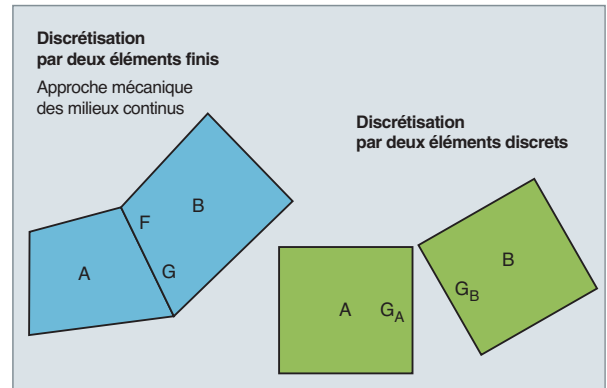


Fig. 57. Prise en compte de la déformation selon les approches par éléments finis et par éléments discrets FEM et DEM.

face initiale commune F va donc avoir deux positions finales G_A ou G_B selon que nous calculons son déplacement solide selon l'élément A ou l'élément B. Il apparaît alors dans cette représentation un saut de déplacement pour le point G de la face F qui correspond au vecteur $G_A G_B$. En prenant G au centre de gravité de la surface F de contact entre les deux éléments A et B, le vecteur saut de déplacement $G_A G_B$ est alors utilisé pour définir la loi de comportement du lien entre ces deux éléments. Bien entendu, les positions G_A ou G_B sont définies à partir des six degrés de libertés des particules solides A ou B (trois translations et trois rotations).

À partir de cette nouvelle conception d'un solide déformable, l'ensemble du formalisme mathématique a été développé en collaboration avec le Cermics [10]. Cela a donné lieu à l'écriture d'un livre détaillant la description théorique de la méthode aux éléments discrets et plus spécifiquement précisant la formulation du code aux éléments discrets CeaMka3D pour des particules polyédriques. L'ensemble des forces et des moments dérivent de potentiels dans le domaine élastique, ce qui assure une conservation de l'énergie dans le cadre Hamiltonien. De nouveaux schémas symplectiques pour les rotations solides ont aussi été développés.

Ainsi, avec un formalisme unique, il est possible de représenter un solide, une poutre, une plaque ou une coque mince. Par exemple, un *benchmark* de plaque mince en élasticité non linéaire peut être utilisé pour tester les éléments finis coque. Il s'agit d'un anneau circulaire mince fendu selon un rayon. Une extrémité est bloquée tandis que l'on applique une force verticale sur l'autre extrémité. Les grandes déformations de l'anneau entraînent un comportement non linéaire géométriquement, bien que le comportement soit réversible. Pour simuler ce test avec le code CeaMka3D, une seule particule est prise dans l'épaisseur de la plaque (fig. 58a). La déformée obtenue (fig. 58b) correspond avec moins de 1 % d'écart à une solution de référence de la méthode des éléments finis de type coque [11].

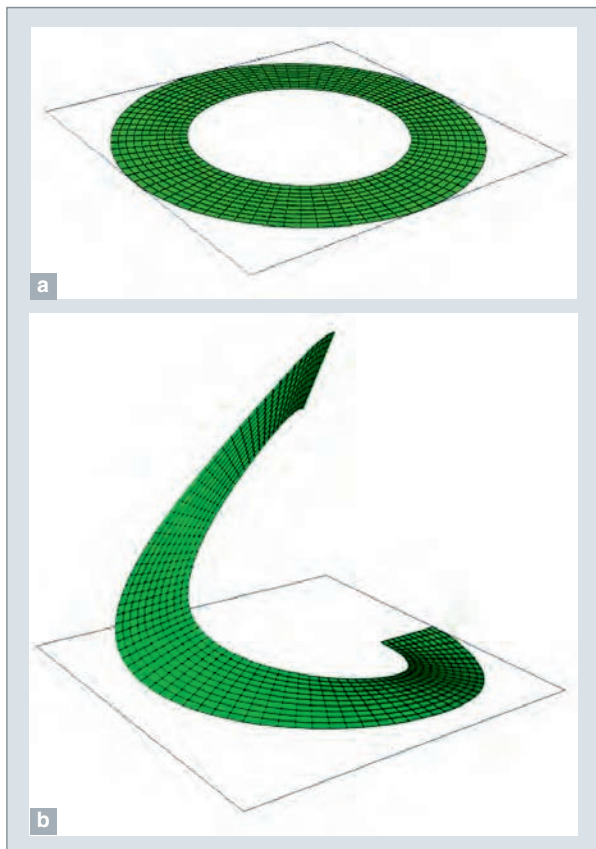


Fig. 58. Maillages initial (a) et déformé (b) de l'anneau.

La loi de comportement a aussi été développée pour pouvoir traiter les chocs, la plasticité et la rupture. Dans le cadre sismique, nous utilisons ce code pour simuler les zones où peuvent se produire de la fracturation et de la fragmentation. Ainsi, extrait d'un calcul plus global de la faille à la structure (<http://www-dase.cea.fr>), nous avons simulé la tenue au séisme d'un flanc de montagne (fig. 59) où l'effondrement des blocs rocheux vient obstruer la vallée (fig. 60 et 61).

Enfin, une méthode de couplage fort et conservative en énergie a été développée entre le code CeaMka3D et le code SEM afin de pouvoir utiliser ces deux méthodes simultanément dans une même étude [12] à la fois dans le domaine régional et le domaine local.

À l'échelle de la structure

Dans le cadre des évaluations de sûreté des installations vis-à-vis du séisme, il est nécessaire de disposer d'outils logiciels adaptés permettant de vérifier la conception et de prédire le comportement des ouvrages de génie civil et de leurs équipements sous séisme. Pour ce faire, des logiciels aux éléments finis sont généralement utilisés en pratique. Par exemple, le code de calcul CAST3M (<http://www-cast3m.cea.fr>), développé au CEA, a fait l'objet de dévelop-

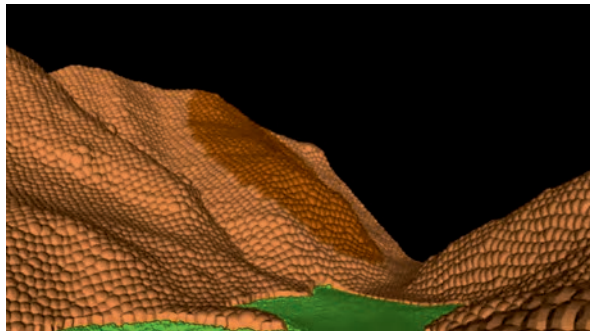


Fig. 59. Flanc de montagne avant séisme.

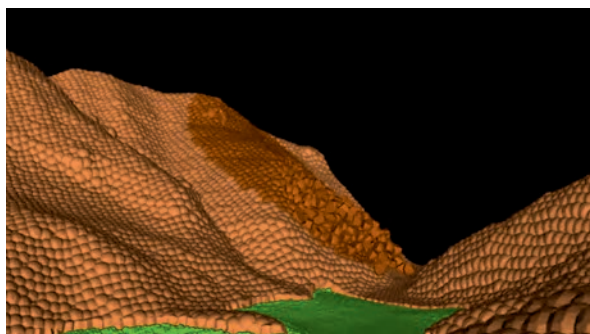


Fig. 60. Effondrement gravitaire des blocs rocheux déstabilisés par le séisme.

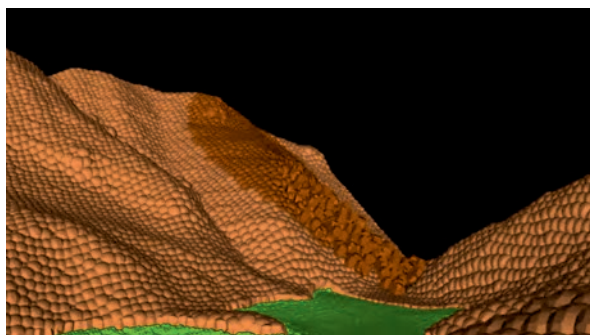


Fig. 61. Vue de la vallée obstruée par les blocs rocheux après le séisme.

pements récents pour adapter les approches numériques et/ou les modèles de comportement, afin de mieux simuler les phénomènes non linéaires ayant un impact sur l'intégrité sismique des ouvrages, tels que la fissuration ou le glissement acier/béton pour le cas des structures en béton armé. Différentes approches existent pour simuler l'endommagement des structures de manière diffuse ou localisée.

Classiquement, l'endommagement mécanique des matériaux quasifragiles tels que le béton, est simulé de manière locale, en introduisant une variable interne au niveau de la **loi de comportement*** [13]. Cette variable permet de décrire l'évolution de l'état de dégradation du matériau par microfissuration, soit de manière isotrope (variable scalaire) ou de manière anisotrope (variable tensorielle). Ce type d'ap-

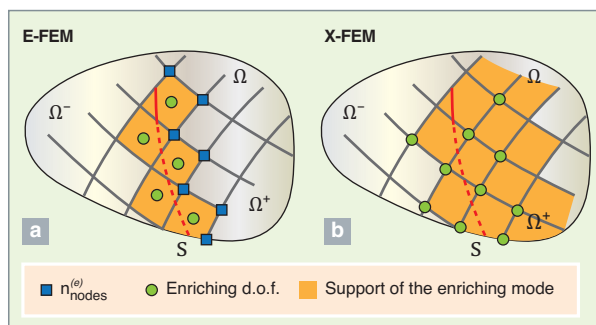


Fig. 62. Enrichissement (a) élémentaire (méthode E-FEM) ou (b) nodal (méthode X-FEM) [15].

proche, bien que robuste, ne permet pas de donner une information quantitative sur la fissuration (p. ex. : ouverture de fissure), car, en pratique, la dégradation est localisée au niveau d'une bande d'éléments finis qui traduit une discontinuité des vitesses de déformations. Cette localisation des déformations induit des instabilités numériques et sans traitement numérique spécifique, l'énergie dissipée lors de la rupture dépend de la finesse du maillage. Une méthode de régularisation pouvant être utilisée pour éviter cette dépendance au maillage, avec un surcoût de calculs, consiste à utiliser un modèle non local⁴³ [14]). Une alternative consiste à introduire explicitement les discontinuités dans le maillage éléments finis *via* un enrichissement pouvant être au niveau nodal ou élémentaire (fig. 62).

Les méthodes d'enrichissement local (élémentaire), telles que proposé dans la méthode E-FEM (*Embedded Finite Element Method*), permettent de préserver la structure de résolution classique du code aux éléments finis, les phénomènes non linéaires étant concentrés au sein de chaque discontinuité qui, lorsqu'elle est activée, sépare les éléments finis en deux sous-domaines. Le comportement sur la discontinuité est décrit par une loi discrète exprimée en termes de vecteur contrainte – saut de déplacement permettant d'exprimer l'ouverture de fissure explicitement [16].

43. La variable locale à calculer en un point matériel donné est obtenue en faisant la moyenne des valeurs sur un voisinage fixe du point, dont la taille caractéristique est définie au préalable.

Quelques exemples de simulations sismiques

Nous présentons ci-après quelques exemples d'évaluation des effets de site⁴⁴ réalisés dans un cadre prédictif.

L'évaluation des effets de sites dans le bassin sédimentaire d'Oulan-Bator (échelle régionale)

Des collaborations existent depuis plusieurs années entre le CEA/DASE et l'IAG (*Institute of Astronomy and Geophysics of Mongolian Academy of Sciences at Ulan-Bator*) d'Oulan-Bator, capitale de la Mongolie. Des données de terrain précises (géologie, réseau des failles...) sont ainsi accessibles, pour cette région soumise à une forte activité sismique [17].

La ville d'Oulan-Bator (fig. 63), construite au fond d'une vallée, repose sur une couche sédimentaire pouvant atteindre 120 m d'épaisseur. La reconnaissance récente des failles autour de la ville a révélé la potentialité d'un fort séisme (magnitude d'environ 7) au voisinage immédiat de la ville. Cela constitue une menace sérieuse pour l'agglomération.

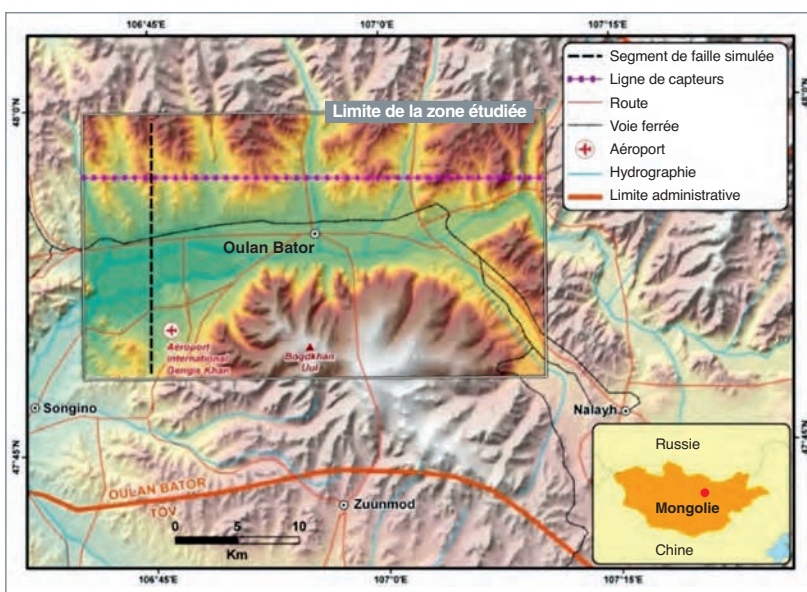


Fig. 63. Zone d'étude sismique autour de la ville d'Oulan-Bator.

Poursuivant l'effort d'un travail récent en deux dimensions [17], le code SEM est utilisé ici pour déterminer le champ d'onde local et les possibles amplifications de l'onde sismique liées à la présence des sédiments. Une faille hypothétique, verticale, de direction nord-sud de dimensions 12 x 14 km², est placée à l'ouest de la ville d'Oulan-Bator (fig. 63). Le scénario choisi est celui d'une faille en cisaillement prenant naissance au sud et se propageant vers le nord. L'énergie de cette source sismique correspond à un

44. Modification (amplification ou atténuation) du mouvement sismique en surface, du fait des caractéristiques locales d'un site : (topographie, géologie, etc.).

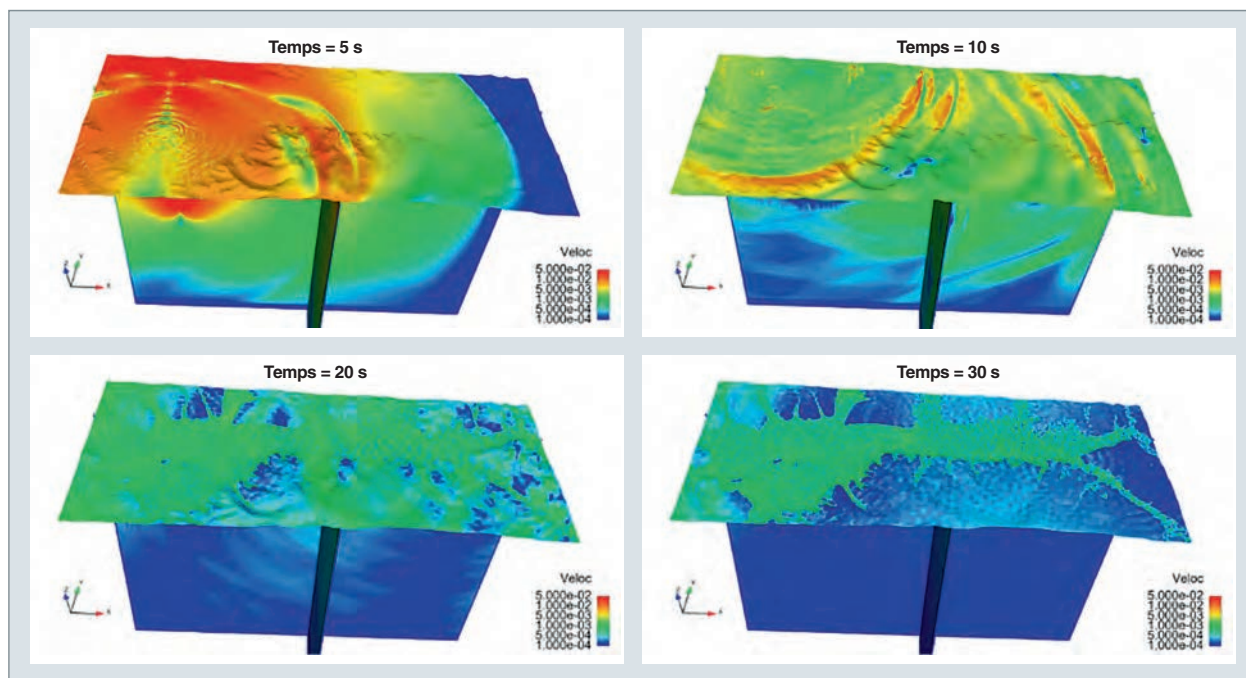


Fig. 64. Évolution temporelle des modules de vitesses sismiques sur la ville d'Oulan-Bator.

séisme de magnitude 6 avec une énergie répartie entre 0 et 8 Hz (fig. 65). Sept jours ont été nécessaires à 2 048 processeurs de Tera 100 pour obtenir 30 secondes de temps physique.

Le bassin sédimentaire crée un **effet de site*** qui se traduit de plusieurs façons. D'une part, en regardant à plusieurs ins-

tants le module de la vitesse des ondes, nous constatons que l'énergie se trouve piégée dans le bassin (fig. 64). Ainsi, à l'instant 30 s, il reste encore de l'énergie dans le bassin sédimentaire alors que le rocher a cessé de bouger. D'autre part, nous avons placé dans le calcul deux lignes de capteurs perpendiculairement à la faille afin de mesurer la vitesse. La première ligne se trouve en surface et la seconde

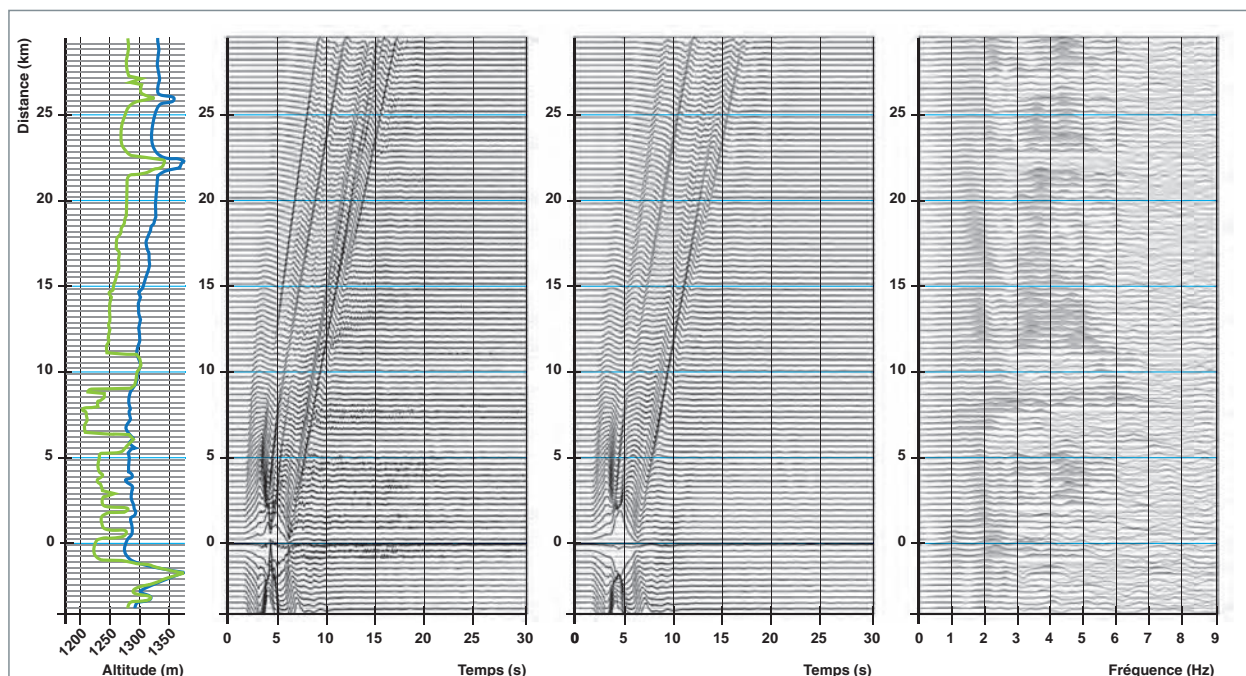


Fig. 65. Mesure des effets de site sur la ville d'Oulan-Bator mesurés sur des lignes de capteurs.

à 400 m de profondeur dans le rocher à l'aplomb de la première. La figure 65 permet d'illustrer les résultats obtenus sur ces capteurs. La figure de gauche montre la topographie (ligne noire) suivant cette ligne de capteurs ainsi que la profondeur à laquelle se trouve le rocher (ligne rouge). Les capteurs sont référencés par rapport à la distance au plan de faille. Les deux figures centrales montrent la composante nord-sud de la vitesse sur les capteurs de surface et sur les capteurs en profondeur. Nous retrouvons clairement le phénomène de piégeage des ondes dans les couches sédimentaires par un allongement significatif des signaux sur les capteurs dans le sédiment. Nous pouvons faire une analyse plus fine de ces signaux en calculant un facteur d'amplification selon la fréquence par comparaison entre le capteur de surface et son équivalent en profondeur (rapport spectral, fig. 65). Nous voyons que la couche sédimentaire engendre des amplifications en fonction de sa fréquence de résonance. Cette fréquence de résonance dépend de l'épaisseur. Ces résultats sont très importants pour quantifier le risque sismique, éventuellement pour le cartographe en fonction de la position dans la ville et pour pouvoir dimensionner les constructions à ces sollicitations.

L'évaluation des effets de sites dans la région de Nice (échelle régionale)

Le projet ANR QSHA (« *Quantitative Seismic Hazard Assessment* », 2006-2008, [18]), visait à estimer de manière quantitative, l'aléa sismique de trois zones côtières autour de la Méditerranée Occidentale avec des densités de population forte (Zone de Naples, la Côte d'Azur et la mer Ligure, la zone d'Alger). Cette section présente les principaux résultats obtenus dans le cadre de la collaboration avec le BRGM, pour le bassin sédimentaire Liguro-provençal, pour lequel des simulations de propagation d'ondes (éléments finis, différences finies) à l'échelle régionale ont été réalisées autour de la ville de Nice sur un domaine de dimensions 30 x 23 x 10 km dont l'origine O des coordonnées locales est situé aux latitude/longitude 43.66°/7.11° (fig. 66). Les paramètres des trois scénarios de sources sismiques utilisés pour ces simulations sont rappelés dans le tableau 6.

Le modèle éléments finis (2 470 593 degrés de liberté) a été réalisé à partir d'un modèle géologique 3D simplifié de la région (fig. 67) comprenant 4 couches représentant le manteau, la croûte (parties inférieure et supérieure) et les sédi-

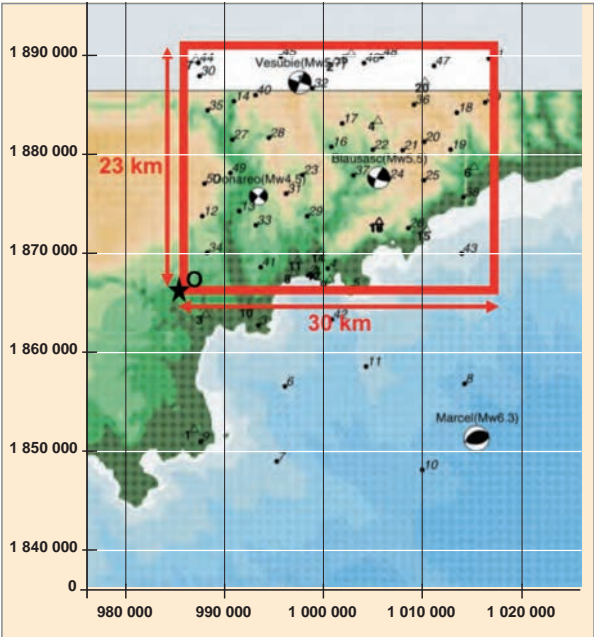


Fig. 66. Zone d'étude du bassin Ligure considérée pour les simulations régionales : en rouge, emprise du modèle aux éléments finis utilisé pour analyser les scénarios liés aux sources sismiques Donaréo (Mw 4.5) et Blasasc (Mw 5.5).

ments en surface, dont les épaisseurs sont respectivement : infinie, 900 m, 400 m et 100 m. Nous avons par ailleurs considéré un comportement élastique linéaire pour le manteau et la croûte, et un comportement élastique linéaire ou élastoplastique parfait (critère de Mohr-Coulomb) pour les sédiments. Les paramètres élastiques sont rappelés dans le tableau 7.

Tableau 7.

Paramètres élastiques des couches du modèle géologique « Ligure » simplifié			
Couche	Densité (kg/m³)	V _P (m/s)	V _S (m/s)
Manteau	2 200	4 330	2 500
Croûte « inférieure »	2 100	2 598	1 500
Croûte « supérieure »	2 000	1 385	800
Sédiments	1 800	595	300

Tableau 6.

Paramètres de sources sismiques considérés pour les simulations sur le bassin Ligure									
Scénario de source sismique	Hypocentre			Faille		Magnitude Mw	Mécanisme au foyer		
	Lat. (°)	Long. (°)	Prof. (km)	Longueur (km)	Largeur (km)		Strike (°)	Dip (°)	Rake (°)
Marcel	43,54	7,60	8	18	9	6,3	243	41	74
Blasasc	43,78	7,37	5	6	5	5,5	204	77	15
Donaréo	43,77	7,22	4	2	2	4,5	220	90	0

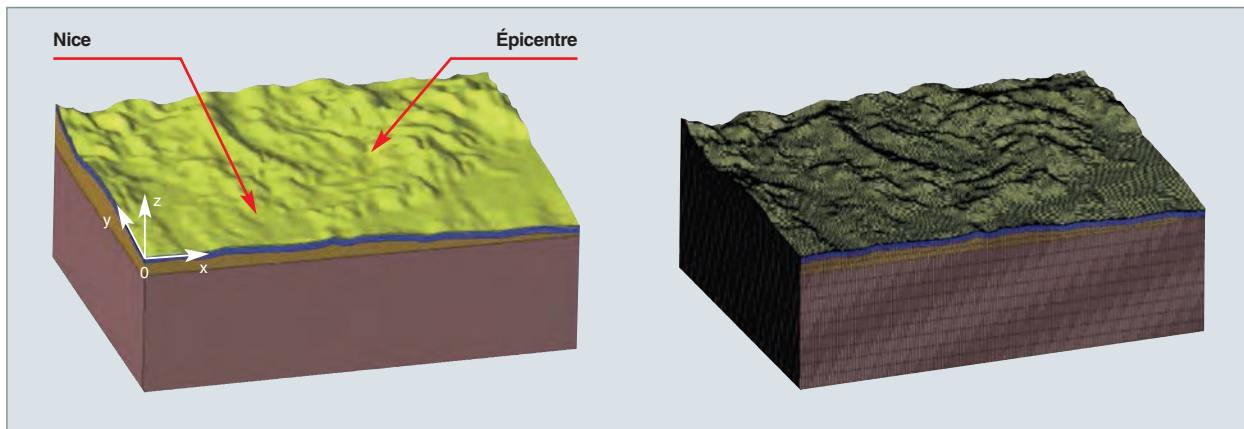


Fig. 67. Vues 3D du modèle géologique simplifié (gauche) et du maillage éléments finis hexaédriques (droite) de la zone simulée incluant la ville de Nice et la source de Blausasc ; l'axe positif des x est dans la direction ouest-est.

La discrétisation spatiale des couches géologiques a été réalisée au moyen d'éléments volumiques de type hexaédrique et d'éléments surfaciques de type quadrangulaire aux bords latéraux et à la base du modèle, afin de représenter des conditions aux limites absorbantes *via* une approximation paraxiale d'ordre 0 [19], et permettre ainsi de minimiser les réflexions d'ondes parasites aux bords du domaine de calcul, le milieu à modéliser étant non borné.

Les simulations ont été réalisées avec le code GefDyn (version parallèle) en faisant l'hypothèse de matériaux secs et en considérant un schéma d'intégration implicite (voir *supra*, p. 88). La source sismique a été modélisée à l'intérieur du modèle selon la théorie de double-couple [20], qui montre que la dislocation sismique équivaut à l'action de deux couples de forces dans un milieu sans coupure en utilisant quatre nœuds auxquels des forces équivalentes ont été appliquées (fig. 68) afin de reproduire le moment sismique.

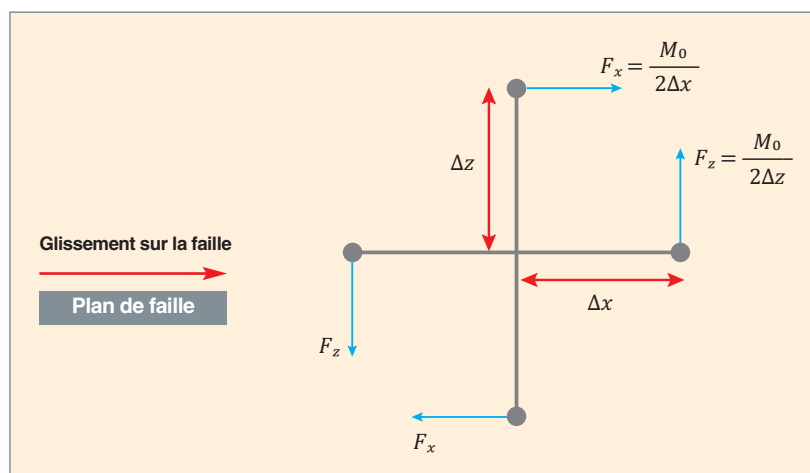


Fig. 68. Représentation des deux couples de forces associés au moment sismique M_0 et appliqués aux nœuds du maillage éléments finis (points solides) pour modéliser la source sismique selon la théorie de double-couple [20].

Nous présentons dans la suite les résultats des simulations réalisées avec la source Blausasc, qui visaient à comparer l'impact de la prise en compte ou non de non-linéarités de comportement, en considérant des scénarios sismiques de magnitudes croissantes (M_w 5.7, 6.0 et 6.2). À noter que la ville de Nice est directement menacée, car située le long du plan de décrochement de la faille, comme le montre le diagramme de radiation des ondes de cisaillement de cette source (fig. 69a). Les spectres de Fourier correspondant à la fonction source temporelle utilisée (fonction tangente hyperbolique) sont indiqués en figure 69b. La fréquence maximale de 0,5 Hz est compatible avec la résolution du maillage utilisée (cinq points par longueur d'onde).

Les résultats des trois simulations réalisées (fig. 70 et 71) montrent que la prise en compte de la non-linéarité de comportement des couches sédimentaires est importante en présence de mouvements forts (magnitude supérieure à 6). La

non-linéarité se traduit par l'apparition de déplacements irréversibles et la génération de hautes fréquences plus visibles sur les accélérations (fig. 70). Ce dernier phénomène est bien connu et nécessite généralement de dimensionner le maillage en doublant la fréquence maximale cible par rapport au cas élastique, pour éviter la dispersion numérique liée à la dépendance des vitesses de phase des ondes planes discrétisées par rapport au vecteur nombre d'ondes et qui se traduit par des oscillations parasites.

Par ailleurs, l'apparition de la non-linéarité se traduit par une dissipation accrue de l'énergie et donc une baisse des vitesses maximales des ondes observées en surface (fig. 70).

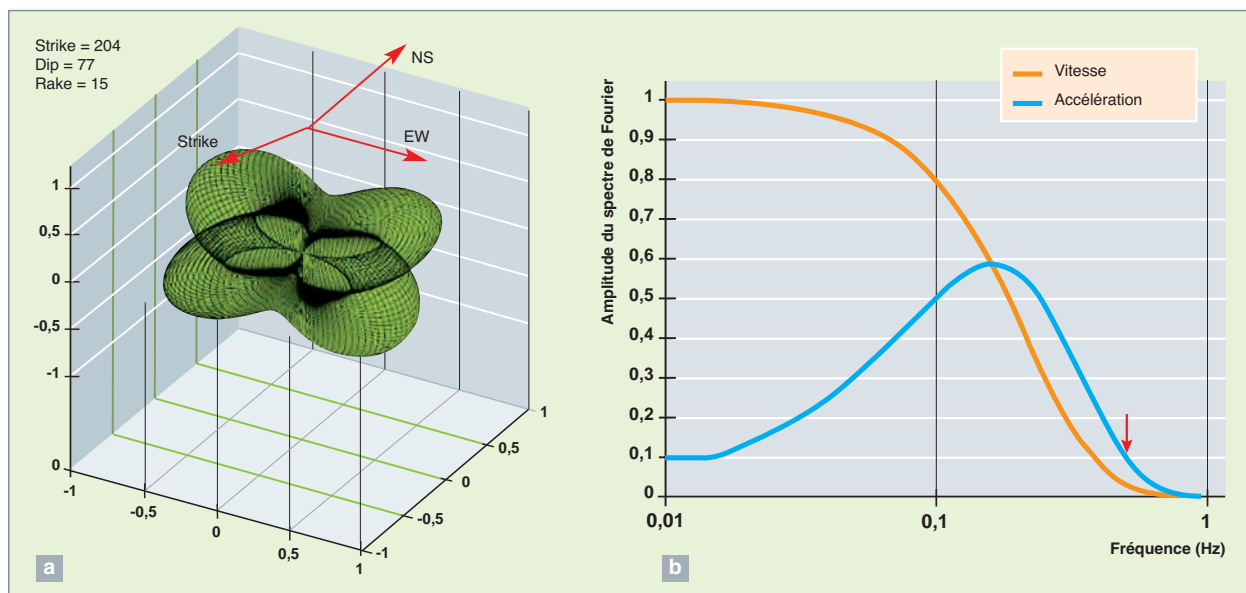


Fig. 69. Diagramme de radiation des ondes de cisaillement de la source Blausasc (a) obtenu par un modèle de point source double-couple (a) et spectres de Fourier (vitesse, accélération) associés à la fonction source (b) [la flèche indique la fréquence maximale de 0,5 Hz].

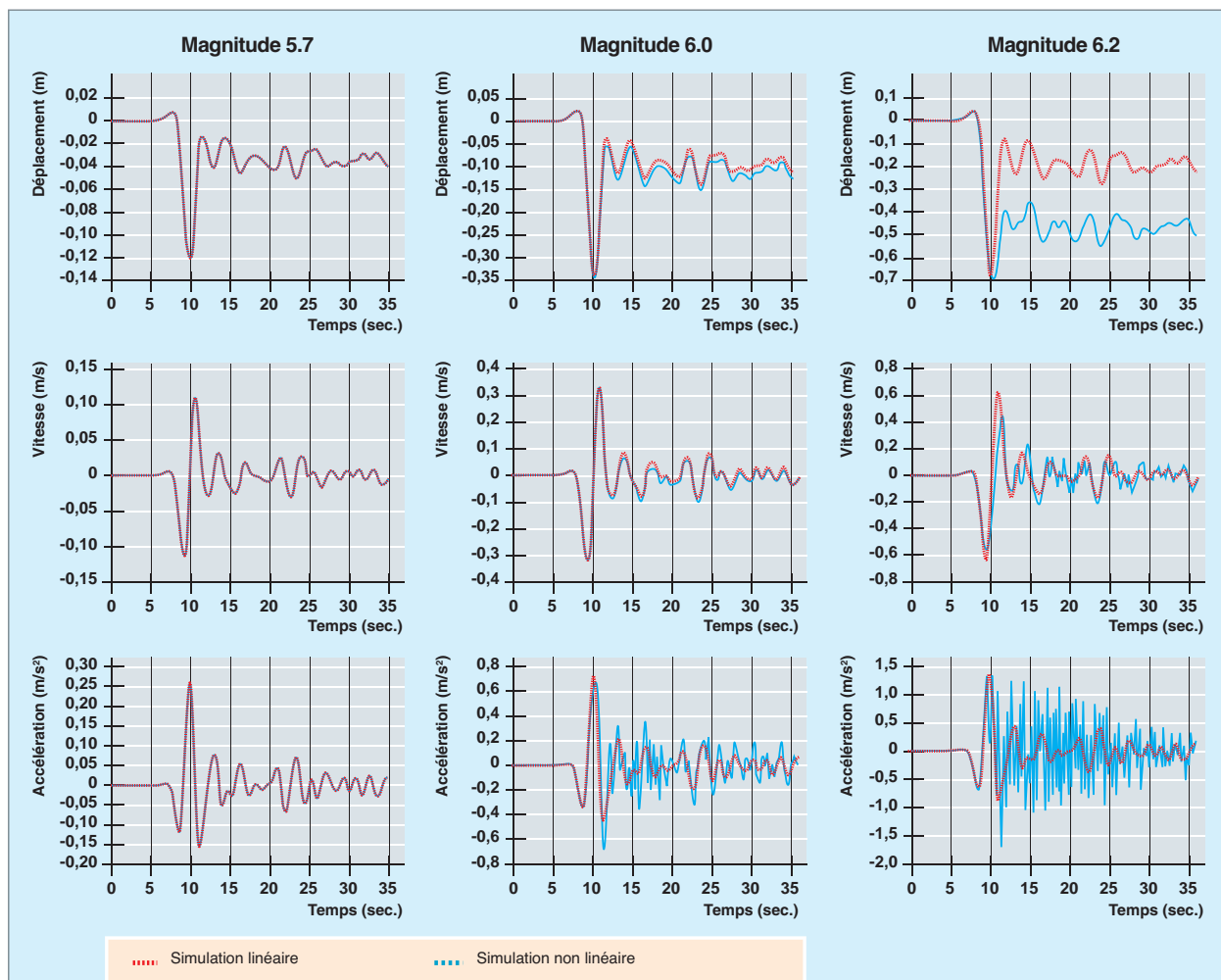


Fig. 70. Composantes Est-Ouest des déplacements, vitesses et accélérations calculées à un récepteur proche de la ville de Nice, pour des séismes de magnitude Mw 5.7, Mw 6.0 et Mw 6.2.

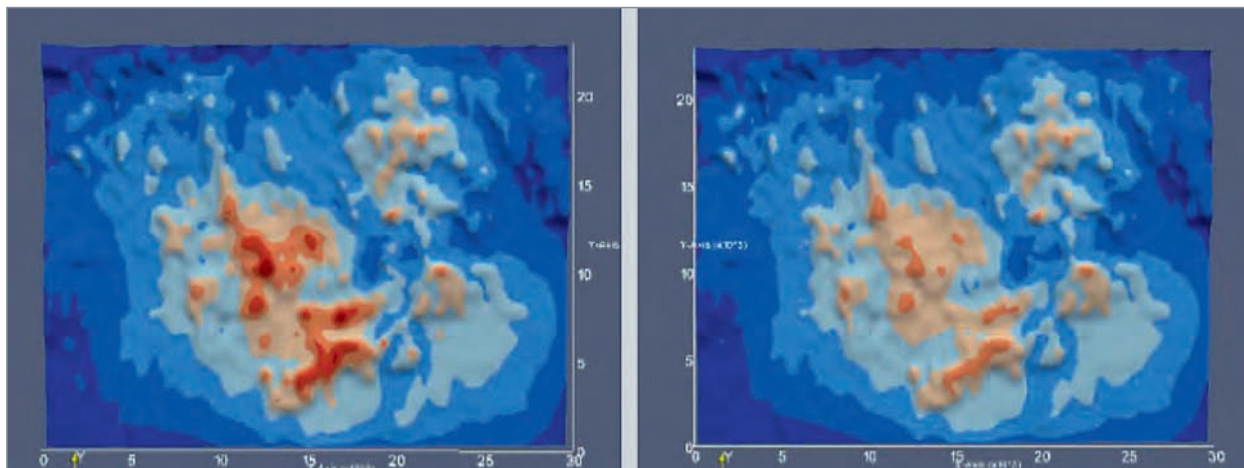


Fig. 71. Isovaleurs des vitesses maximales finales des ondes obtenues en surface (PGV) pour les simulations élastiques (gauche) et non linéaires (droite) d'un séisme hypothétique au voisinage de la ville de Nice.

Simulation des systèmes dynamiques fortement couplés sous chargement transitoire extrême

Introduction

Contexte industriel et enjeux

Afin d'étendre le panorama des méthodes en dynamique des structures après les propagations et les vibrations dans le domaine du séisme, nous descendons maintenant dans cette section d'une échelle en temps pour nous intéresser aux phénomènes transitoires mécaniques dits « rapides » : il s'agit de situations d'impacts ou de chocs où les propagations d'ondes jouent un rôle sur de petites distances comparativement à la dimension caractéristiques des structures considérées. Cela s'accompagne couramment de phénomènes non linéaires, localisés au voisinage des points d'impact, ou généralisés si les sollicitations sont suffisamment

intenses pour conduire à des grands déplacements et à une ruine totale ou partielle des structures, ce qu'illustre pour l'exemple l'impact d'un projectile cylindrique sur une dalle en béton armé donné par la figure 72.

Ces problématiques sont représentatives de conditions accidentelles et interviennent de manière prépondérante dans le domaine de la sûreté des systèmes industriels, nucléaires ou non, que ce soit pour leur résistance à des événements internes critiques ou à des agressions externes. Nous pouvons, par exemple, citer l'évaluation indispensable de la tenue du confinement d'un réacteur à un scénario explosif retenu pour le dimensionnement, intervenant au niveau du cœur et dont la nature dépend de la technologie concernée, ou celle de son enceinte externe soumise à l'impact d'un avion. Il en résulte des enjeux sociétaux significatifs, ces démonstrations de résistance ayant couramment pour objet la dernière barrière entre des systèmes mécaniques complexes potentiellement dangereux et les personnes.

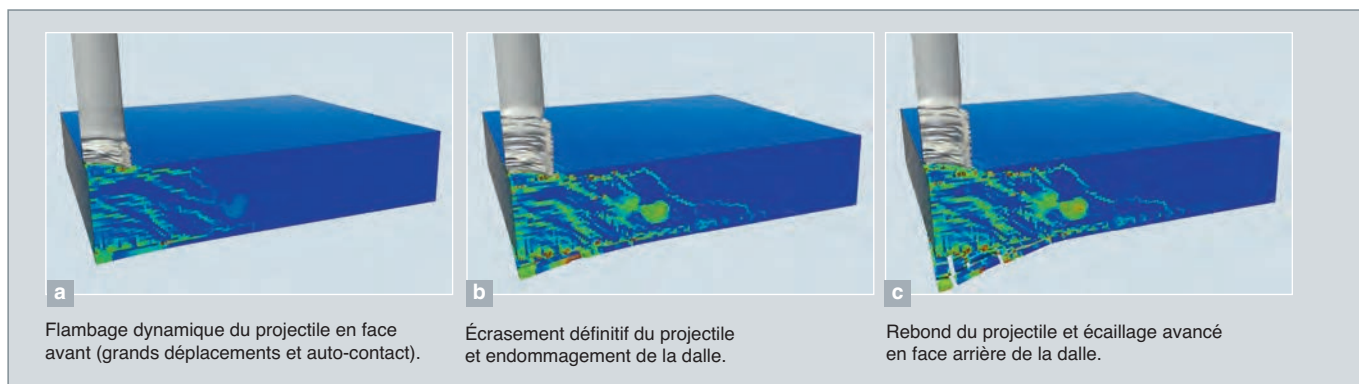


Fig. 72. Impact d'un projectile cylindrique sur une dalle en béton armé.

Les systèmes dynamiques non linéaires couplés : les équations locales

Les systèmes mécaniques sous impact brutal présentent deux caractéristiques orientant fortement les méthodes numériques associées :

- Leur comportement est fondamentalement non linéaire, que ce soit en raison de l'amplitude des déplacements ou de l'activation de mécanismes irréversibles dans les matériaux ;
- ils mettent en œuvre de fréquents couplages, éventuellement entre des physiques différentes (par exemple entre fluide et structure, voir encart dédié, *infra*, p. 105), ou entre structures, *via* des interactions de contact, notamment.

De ce fait, les équations locales s'écrivent classiquement comme l'association de l'équation d'équilibre dynamique sans hypothèse de linéarité et de contraintes cinématiques exprimant les conditions aux limites et les relations de couplage, variables dans le temps et l'espace sans restriction *a priori* :

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \{\boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})]\} = \mathbf{f}_{vol} \quad (2-1a)$$

$$\mathbf{d}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \ddot{\mathbf{u}}) = \mathbf{s} \quad (2-1b)$$

où ρ est la masse volumique, \mathbf{u} le déplacement, $\boldsymbol{\sigma}$ la contrainte de Cauchy exprimant la cohésion de la structure, $\boldsymbol{\varepsilon}$ une mesure adéquate des déformations (voir ci-dessous), \mathbf{f}_{vol} les forces de volumes, telles que la gravité, et \mathbf{d} le vecteur des relations cinématiques associées au second membre \mathbf{s} .

Aucune limitation n'étant appliquée sur l'amplitude du déplacement \mathbf{u} , on doit considérer une mesure des déformations *a minima* invariante dans les rotations d'amplitude finie, telle

que par exemple la mesure d'Almansi-Euler, supposant que la configuration de référence est la configuration courante (les contraintes étant alors des contraintes de Cauchy) :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + {}^t\nabla \mathbf{u} - {}^t\nabla \mathbf{u} \nabla \mathbf{u}) \quad (2-2)$$

Le système est fermé par la donnée de la relation de comportement reliant les contraintes dans les structures à la mesure des déformations. Ces relations sont non linéaires dans le cas général (voir la figure 73 pour une relation typique entre contrainte et déformation dans le cadre d'une traction monodimensionnelle).

L'insertion des forces de réaction aux contraintes cinématiques dans les équations d'équilibre est explicitée au paragraphe suivant.

Discretisation et stratégie de résolution

Nous nous restreignons aux approches en déplacement, le vecteur \mathbf{u} et ses dérivées temporelles étant les inconnues du problème à résoudre. Le processus de discrétisation comporte trois étapes principales : la discrétisation de l'espace et celle du temps, ainsi que la prise en compte au niveau discret des réactions aux contraintes cinématiques.

Discretisation spatio-temporelle et système à résoudre

L'espace est discrétisé par une approche classique par éléments finis. Cela consiste, d'une part, à remplacer les éléments de structure continus par un assemblage de cellules géométriques simples adjacentes, tels que des triangles et quadrangles en 2D, ou des tétraèdres et hexaèdres en 3D, et, d'autre part, à construire entre les sommets, ou *nœuds*, de ces cellules (et moyennant éventuellement des points additionnels sur les arêtes, les faces et au centre des volumes) une approximation polynomiale des champs cinématiques inconnus.

Une formulation faible de l'équilibre dynamique (2-1a) est écrite et projetée sur l'espace d'approximation, produisant, en choisissant les fonctions test comme les fonctions de base de cet espace et en intégrant par partie pour faire apparaître les forces exercées sur la frontière du domaine structural, un système discret continu en temps de la forme :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + \mathbf{F}_{link} + \mathbf{F}_{int}(\mathbf{U}) = \mathbf{F}_{ext}^{vol} + \mathbf{F}_{ext}^{surf} = \mathbf{F}_{ext} \quad (2-3)$$

où \mathbf{U} est le vecteur des inconnues cinématiques discrètes, \mathbf{M} est la matrice de masse, \mathbf{F}_{int} le vecteur des forces internes dépendant non linéairement du déplacement discret, \mathbf{F}_{ext} est les vecteurs des forces extérieures, volumiques et surfaciques et \mathbf{F}_{link} exprime les réactions aux contraintes cinématiques additionnelles données par (2-1b).

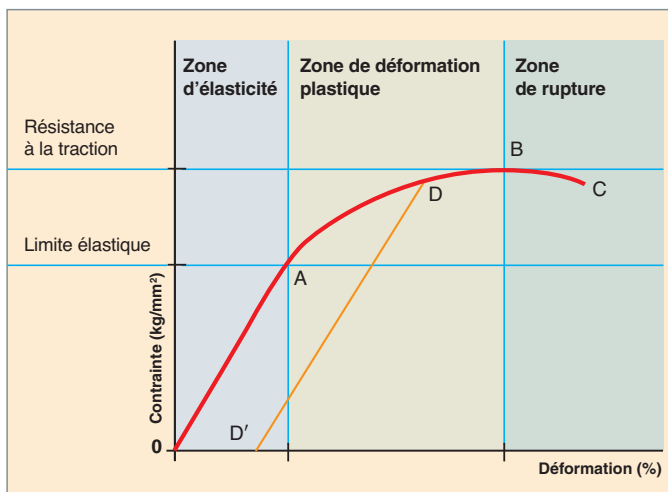


Fig. 73. Courbe de traction non linéaire typique.

Concernant la discrétisation temporelle et d'un point de vue pratique, nous retiendrons pour le choix de la technique d'intégration qu'un schéma explicite est adapté lorsque la durée caractéristique des phénomènes physiques considérés est de l'ordre de grandeur du pas de temps limite imposé par la condition de stabilité. Dans les cas les plus courants, la discrétisation conjointe espace/temps conduit à un pas limite de l'ordre d'une microseconde. Cela associe naturellement l'intégration explicite à la représentation des explosions et des impacts, produisant des propagations mécaniques dans les structures à des célérités que des pas de cette taille permettent de suivre avec précision. De ce fait, le schéma explicite des différences centrées (voir *supra*, p. 90) est choisi pour discrétiser le temps dans la suite de ce texte, en bénéficiant en particulier de la robustesse qu'il procure dans la gestion des fortes non linéarités à prendre en compte. Nous obtenons alors le système à résoudre pour passer d'un instant n à un instant $n+1$, en faisant l'hypothèse classique que les contraintes cinématiques portent sur les vitesses discrètes :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{U}}^{n+1/2} &= \dot{\mathbf{U}}^n + \Delta t_{/2} \ddot{\mathbf{U}}^n \\ \mathbf{U}^{n+1} &= \mathbf{U}^n + \Delta t \dot{\mathbf{U}}^{n+1/2} \\ \dot{\mathbf{U}}^{n+1} &= \dot{\mathbf{U}}^{n+1/2} + \Delta t_{/2} \ddot{\mathbf{U}}^{n+1} \\ \mathbf{M} \ddot{\mathbf{U}}^{n+1} + \mathbf{F}_{link}^{n+1} &= \mathbf{F}_{ext}^{n+1} - \mathbf{F}_{int}(\mathbf{U}^{n+1}) = \mathbf{F}^{n+1} \\ \mathbf{C}^{n+1} \dot{\mathbf{U}}^{n+1} &= \mathbf{S}^{n+1}\end{aligned}\quad (2-4)$$

où les conditions cinématiques sont représentées par des équations linéaires à l'aide de la matrice \mathbf{C}^{n+1} et du vecteur \mathbf{S}^{n+1} , la variabilité dans le temps de ces opérateurs exprimant la non-linéarité des contraintes (comme pour le contact intermittent, par exemple).

Nous progressons dans le temps en calculant à l'instant $n+1$, où le déplacement discret est connu, tout d'abord l'accélération, sans inversion de système une fois la matrice de masse rendue diagonale par des techniques de sommation nodale classique, puis la vitesse, permettant ainsi de passer à l'instant suivant.

Sur la base d'une discrétisation spatio-temporelle de cette nature, une expression élégante de la contrainte de stabilité

portant sur le pas de temps est donnée par la condition de Courant-Friedrich-Levy, ou CFL [21], exprimant qu'« une onde mécanique ne doit pas se propager de plus de la taille d'un élément en un pas de temps ». Cette condition, suffisante pour la stabilité de la solution, a le mérite de sa simplicité et d'exhiber en quoi l'utilisation d'un schéma explicite stable est conforme à la représentation précise de phénomènes propagateurs. Elle relie les caractéristiques matérielles locales, donnant la vitesse des ondes, et la finesse de discrétisation spatiale.

Il reste dans le système (2-4) un vecteur inconnu non-cinématique \mathbf{F}_{link}^{n+1} , à savoir les forces de réaction aux contraintes additionnelles, dont la gestion fait l'objet du paragraphe suivant.

Gestion des couplages : pénalité, multiplicateurs de Lagrange

Il s'agit d'un point crucial pour la production de solutions de référence pour des systèmes mécaniques fortement couplés. En utilisant le schéma d'intégration temporel, nous pouvons reporter les équations de contraintes cinématiques sur les accélérations discrètes et exprimer le système à résoudre comme la stationnarité d'une fonctionnelle J telle que :

$$\begin{aligned}\mathbf{M} \ddot{\mathbf{U}}^{n+1} + \mathbf{F}_{link}^{n+1} &= \mathbf{F}^{n+1} \Leftrightarrow \frac{\partial J}{\partial \dot{\mathbf{U}}^{n+1}} = 0 \\ \text{avec } J &= {}^t \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \mathbf{M} \ddot{\mathbf{U}}^{n+1} + \mathbf{R}(\tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \dot{\mathbf{U}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1}) + {}^t \dot{\mathbf{U}}^{n+1} \mathbf{F}^{n+1}\end{aligned}\quad (2-5)$$

où les opérateurs $\tilde{\mathbf{C}}^{n+1}$ et $\tilde{\mathbf{S}}^{n+1}$ sont obtenus à partir des opérateurs initiaux en exprimant les vitesses à partir des accélérations inconnues.

La stratégie de gestion des couplages tient alors au choix de la fonction \mathbf{R} agissant sur le résidu sur les contraintes cinématiques, avec la relation :

$$\mathbf{F}_{link}^{n+1} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \dot{\mathbf{U}}^{n+1}} \quad (2-6)$$

Le tableau 8 illustre deux voies parmi les plus courantes (voir, par exemple [22] et [23]).

Tableau 8.

Stratégies d'expression des forces de couplage	
Approche par pénalisation (reposant sur des paramètres additionnels)	Approche duale (reposant sur des inconnues additionnelles ou multiplicateurs de Lagrange)
Fonction \mathbf{R}	
$\mathbf{R} = {}^t(\tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \dot{\mathbf{U}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1}) \mathbf{K}_p (\tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \dot{\mathbf{U}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1})$ (2-7a)	$\mathbf{R} = {}^t(\tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \dot{\mathbf{U}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1}) \mathbf{\Lambda}$ (2-8a)
	$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{\Lambda}} = 0 \Leftrightarrow \tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \dot{\mathbf{U}}^{n+1} = \tilde{\mathbf{S}}^{n+1}$ (2-8b)
Expression des forces de réactions aux contraintes	
$\mathbf{F}_{link}^{n+1} = {}^t \tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \mathbf{K}_p (\tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \dot{\mathbf{U}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{S}}^{n+1})$ $\approx {}^t \tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \mathbf{K}_p (\mathbf{C}^{n+1} \mathbf{U}^{n+1/2} - \mathbf{S}^{n+1})$ (2-7b)	$\mathbf{F}_{link}^{n+1} = {}^t \tilde{\mathbf{C}}^{n+1} \mathbf{\Lambda}$ (2-8c)

Dans l'approche par pénalisation, K_p est une matrice diagonale contenant des coefficients arbitraires, assimilables à des raideurs additionnelles. Ils ont une influence sur la solution cinématique, peuvent dégrader la stabilité de l'intégration explicite du système et n'assurent qu'une satisfaction approchée des contraintes cinématiques. Cependant, l'expression (2-7b) des forces de couplage peut alors être rendue totalement explicite en approchant l'expression des forces de réaction en utilisant les vitesses intermédiaires au demi-pas de temps. Le vecteur F_{link}^{n+1} apparaît ainsi au second membre de l'équation d'équilibre, pour une résolution identique au cas sans couplage, ce qui fait de cette méthode la plus populaire dans les logiciels de simulation sous licence commerciale.

Au contraire, l'approche duale est libre de paramètre additionnel et assure une vérification exacte des contraintes sans influence sur la stabilité de l'intégration temporelle, la prise en compte des forces de réaction en tant qu'inconnues supplémentaires correspondant à une *implication* de cette partie du système à résoudre. Pour cela, elle a notre préférence dans la suite, en soulignant qu'il en résulte une complexité significativement accrue dans le processus de résolution de l'équilibre couplé, qui s'écrit finalement :

$$\begin{bmatrix} M & {}^t\tilde{C}^{n+1} \\ \tilde{C}^{n+1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{U}^{n+1} \\ \Lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F^{n+1} \\ \tilde{S}^{n+1} \end{bmatrix} \quad (2-9)$$

Le système n'est plus diagonal et sa structure évolue au gré des couplages non permanents, ce qui exige de la souplesse dans l'agencement de données et le cheminement algorithmique de toute application destinée à la résolution performante de problèmes de dynamique de cette nature. Le programme EUROPLEXUS (<http://www-epx.cea.fr>, abrégé EPX dans la suite du texte) est un représentant de ces codes originaux dont la particularité est de traiter sans approximation ou simplification le problème (2-9). Les considérations stratégiques particulières et les illustrations proposées dans la suite se rapportent exclusivement à ce logiciel, co-propriété du CEA et de la Commission européenne via le *Joint Research Center* d'Ispira (Italie), et développé dans le cadre d'un consortium impliquant en outre EDF et ONERA en tant que partenaires dits « majeurs », disposant d'un accès complet au code source de l'application.

L'algorithme final du code EPX et l'identification des macro-tâches

La résolution du système (2-9) se fait en deux temps, pour tirer parti du caractère diagonal de la matrice de masse. La première étape consiste à condenser le problème sur les multiplicateurs de Lagrange en éliminant les accélérations, et la seconde à calculer les multiplicateurs, et donc les forces de réaction, en résolvant un système linéaire non diagonal de taille largement réduite par rapport au système initial, via un solveur direct ou itératif indifféremment.

La condensation, dite « de Schur », s'écrit :

$$\begin{aligned} \ddot{U}^{n+1} &= M^{-1}(F^{n+1} - {}^t\tilde{C}^{n+1}\Lambda) \Rightarrow \tilde{C}^{n+1}M^{-1}{}^t\tilde{C}^{n+1}\Lambda \\ &= \tilde{C}^{n+1}M^{-1}F^{n+1} - \tilde{S}^{n+1} \Leftrightarrow H^{n+1}\Lambda = B^{n+1} \quad (2-10) \end{aligned}$$

L'obtention finale des accélérations suit la procédure immédiate classique du schéma explicite, une fois toutes les forces connues.

Nous distinguons finalement trois macro-tâches dans le parcours algorithmique sur un pas de temps dans EPX, avec des caractéristiques de calcul propres et dont la cohabitation fait l'originalité de l'approche proposée :

Macro-tâche 1. Évaluation classique du vecteur des forces internes par intégration de la contrainte dans les éléments finis.

Macro-tâche 2. Écriture des contraintes cinématiques intermittentes sur la base d'opérations de géométrie (tris spatiaux, calculs d'intersection et d'inclusion).

Macro-tâche 3. Résolution du problème linéaire condensé sur les multiplicateurs et calcul final des accélérations.

Le passage à l'échelle sur les supercalculateurs

Enjeux et problématiques spécifiques de la dynamique des systèmes en forte évolution topologique

Comme pour les autres disciplines faisant l'objet de la présente monographie, le recours aux supercalculateurs, actuels et futurs, rend possible la simulation de systèmes de complexité croissante, à condition d'être en mesure d'en exploiter les capacités. Cela impose de construire une stratégie de résolution extensible et robuste, permettant de mobiliser efficacement un grand nombre d'unités de calcul (nommés « cœurs* » dans la suite).

Dans ce domaine, le système (2-9) à considérer présente des spécificités notables, en particulier en raison de la nature évolutive des blocs liés aux contraintes cinématiques et des coûts relatifs variables des différentes macro-tâches identifiées ci-dessus. L'approche proposée doit être par essence adaptative, prenant en compte que les techniques parallèles pour accélérer les macro-tâches individuellement sont dans de nombreux cas antagonistes.

Nous nous intéressons, dans la suite de ce chapitre, uniquement aux cœurs de processeurs classiques, en mettant de côté les « accélérateurs », qu'il s'agisse de coprocesseurs graphiques ou massivement multicœurs. Ils sont évoqués sommairement dans la section de conclusion.

L’algorithmique parallèle originale mise en œuvre dans le code EPX

La stratégie repose sur une hypothèse fondatrice, à savoir la prédominance dans le coût de résolution des calculs sur les éléments finis pour l’obtention du vecteur des forces internes (i.e. **macro tâche 1**) dans la majorité des situations. Il s’agit naturellement d’un postulat à maîtriser, ce qui caractérise la stratégie complète (voir ci-dessous).

La gestion parallèle d’une tâche de la nature de la macro-tâche 1 repose classiquement sur l’association d’un parallélisme de boucle à mémoire partagée destiné à des cœurs partageant une même mémoire et d’une décomposition de domaine pour s’adapter aux architectures à mémoire distribuée, la plupart des calculateurs courants se présentant comme un réseau interconnecté de nœuds à mémoire partagée, échangeant des données via la librairie classique MPI (*Message Passing Interface*). La problématique principale dans cette démarche est l’équilibrage de la charge entre les cœurs, dans les deux classes de parallélisme, pour répondre à l’hétérogénéité des coûts dans la boucle sur les éléments finis, de formulations différentes et associés à des modèles de comportement également différents. Le tableau 9 résume les choix faits dans EPX pour y répondre [24].

Il reste ensuite à rendre les macro tâches 2 et 3 compatibles avec les choix précédents sans détruire l’extensibilité assurée par l’équilibrage de la charge proposé. Seul le volet à

mémoire distribuée de la stratégie présente des particularités fortes pour ces travaux.

Pour la macro tâche 2, il devient nécessaire d’adapter les algorithmes géométriques à la gestion d’entités (nœuds ou éléments) appartenant à des sous-domaines différents en assurant les échanges de données nécessaires via le réseau entre les nœuds du calculateur. Chaque relation cinématique produite est attachée à un unique sous-domaine pour éviter la duplication et implique logiquement des inconnues soit locales à ce sous-domaine, soit « distantes », i.e. appartenant à un autre sous-domaine.

Pour les macro tâches 2 et 3, la prédominance d’inconnues distantes liées par des contraintes cinématiques est la source principale de perte d’efficacité de la méthodologie globale, ce qui justifie deux compléments stratégiques majeurs, présentés sur le tableau 10 [25].

Illustration

Un exemple significatif des difficultés présentées ci-dessus pour la préservation de l’extensibilité parallèle en présence d’importantes modifications topologiques d’un système dynamique sous chargement extrême est donné par un transitoire accidentel dans une turbomachine, que l’on peut rencontrer dans le circuit tertiaire de production d’électricité pour une centrale nucléaire ou dans le domaine aéronautique. Il s’agit, pour l’exemple, d’une perte accidentelle selon un scénario arbitraire d’aubes de turbine rentrant en contact avec

Tableau 9.

Équilibrage de la charge de calcul	
Parallélisme de boucle	Parallélisme à mémoire distribuée
Stratégie retenue	
Ordonnancement dynamique avec vol de travail.	Décomposition de domaine automatique pondérée <i>a posteriori</i> .
Description sommaire	
L’ordonnancement dynamique est assuré par le recours à une librairie externe (KA-API, INRIA, https://gforge.inria.fr/projects/kaapi) permettant avec un surcoût minimal à des cœurs inactifs de voler du travail à des cœurs encore chargés, assurant un équilibre strict du temps de calcul entre les cœurs.	L’équilibrage de la charge de calcul entre les sous-domaines est assuré par une pondération des éléments au moment de la décomposition, ce qui suppose que le coût de calcul des couples élément/modèle de comportement associé est totalement connu. Ce coût est difficile à appréhender analytiquement et il donc est évalué avec précision par des mesures internes dans le code pour une configuration donnée, d’où le qualificatif <i>a posteriori</i> . On exploite alors le fait que la condition CFL impose un grand nombre de pas de temps pour une simulation industrielle (de l’ordre de 100 000 à 1 million), si bien qu’on peut mettre à profit les premiers pas (de l’ordre de 1 000) pour le calcul du coût numérique des éléments avec une décomposition de domaine mal équilibrée, pour poursuivre ensuite la simulation dans les conditions optimales après mise à jour de la décomposition (voir tableau 10).

Tableau 10.

Optimisation de la stratégie parallèle globale	
Décomposition de domaine dynamique	Solveur distribué pour le problème condensé sur les multiplicateurs
<p>Pour un système en forte évolution topologique (voir la figure 74), il est logique de considérer que la partition du domaine à l'instant initial ne peut pas rester optimale au cours de la simulation. Il est donc indispensable d'intégrer au processus de résolution une mise à jour automatique de la décomposition, en veillant rigoureusement à sa performance en termes de temps de calcul et d'empreinte mémoire.</p> <p>Cette mise à jour permet d'une part de rassembler à l'intérieur des sous-domaines les entités que le mouvement a rapprochées pour limiter les inconnues distantes et d'autre part d'améliorer l'équilibrage de la macro-tâche 1 en bénéficiant d'une pondération également mise à jour.</p>	<p>La construction du système condensé global contenant des inconnues locales et distantes sur chaque sous-domaine est à l'origine d'opérations collectives bloquantes dégradant fortement la performance en présence de nombreuses inconnues distantes (approche dite « centralisée », voir la figure 75).</p> <p>Cet écueil est contourné par l'élaboration d'un solveur itératif fondé sur un préconditionneur spécifique utilisant uniquement des opérateurs condensés localement. Ce solveur converge d'autant mieux que la décomposition de domaine limite le nombre d'inconnues distantes, ce qui associe positivement les deux axes d'optimisation de la stratégie parallèle.</p>

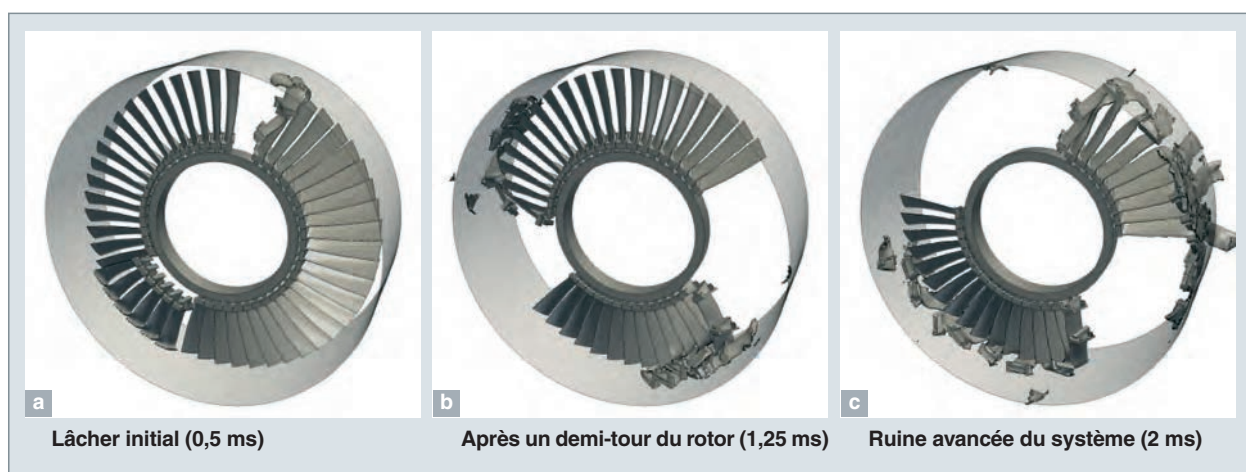


Fig. 74. Impact rotor-stator avec ruine avancée de la structure durant le transitoire.

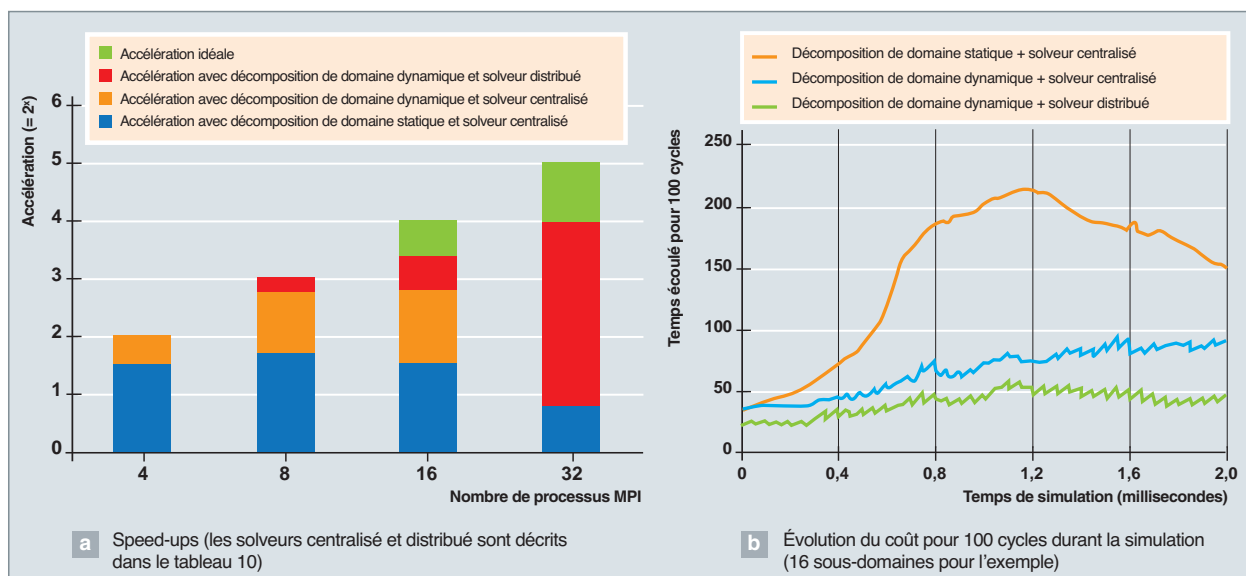


Fig. 75. Maîtrise de l'extensibilité de la résolution avec décomposition de domaine dynamique et solveur distribué pour les forces de réaction.

le blindage entourant le dispositif. La figure 74 donne l'évolution du système à quelques instants clés de la simulation, alors que la figure 75 montre la performance de la stratégie parallèle globale proposée, en particulier pour l'approche à mémoire distribuée la plus complexe à maîtriser dans ces circonstances. Il est à noter qu'un nombre de sous-domaines de 32 à 64, associés, en général, à 16 ou 32 cœurs par nœud, correspond à une mobilisation totale de l'ordre de 1 000 cœurs, ce qui représente l'objectif d'exploitation des supercalculateurs de la génération *petaflopique* pour ce type de simulations.

Nous voyons, sur la figure 75, que seule la combinaison des optimisations proposées dans le tableau 10 permet de conserver une extensibilité linéaire et de maintenir constant le coût par pas de temps quelle que soit la configuration géométrique du système, même jusqu'à un très fort niveau de dégradation.

Conclusions et perspectives

La présente contribution dresse un état de l'art du domaine de la dynamique des systèmes solides en se focalisant sur deux problématiques complexes représentatives des besoins de compréhension et de simulation rencontrés dans ce domaine par le CEA. D'une part, nous avons présenté les avancées méthodologiques réalisées durant cette dernière décennie dans la représentation à plusieurs échelles des conséquences des séismes, à l'aide de techniques de modélisation judicieusement choisies à chaque échelle. D'autre part, une approche a été décrite pour la simulation de systèmes dynamiques sous chargement extrême, combinant une résolution rigoureuse de l'équilibre dynamique couplé en régime transitoire rapide et une stratégie parallèle spécifique préservant l'extensibilité de la résolution même pour de forts niveaux de dégradation des structures.

Les perspectives d'amélioration sont toutefois encore multiples. Dans le domaine du séisme, du fait de la complexité des phénomènes étudiés et du caractère souvent fortement non linéaire du problème posé, aussi bien au niveau géométrique que matériel (notamment rhéologies des éléments étudiés : roches, sols, fluides, béton armé, etc.), un certain nombre de difficultés se posent au niveau de la mise en œuvre des outils de simulation, qui demeurent encore du domaine de la recherche, et notamment :

- La simulation du passage d'un milieu continu à un milieu discontinu (liquéfaction des sols, déstabilisation de versant sous séisme, fissuration en cas d'endommagement structural...) ;
- la simulation des interactions à grande échelle (p. ex. : interactions sol-structure à l'échelle de la ville) ;

- l'utilisation de méthodes mixtes, permettant de coupler différentes approches au sein d'une même simulation, pour représenter différentes échelles (de l'échelle microscopique à macroscopique) ou pour tenir compte soit de l'hétérogénéité des milieux/matériaux modélisés ou des signaux sismiques en entrée (variabilité aléatoire), soit des incertitudes épistémiques (modèles).

Par ailleurs, les évaluations de sûreté concernant les installations à risque spécial, telles que les installations nucléaires, reposent essentiellement sur des approches probabilistes qui permettent d'évaluer les marges de dimensionnement éventuelles ou les probabilités de défaillance (fragilité) des structures et équipements, et qui nécessitent de fait de mettre en œuvre des stratégies d'optimisation numérique complémentaire des approches de calculs HPC. Les recherches portent, par exemple, sur l'optimisation des formulations (approches intrusives) dans les codes de calcul déterministes existants pour permettre la réalisation d'un grand nombre de simulations à moindre coût (mise en œuvre de stratégie de réduction de modèles), ou sur l'utilisation de méta-modèles (approches non intrusives) tels que mis en œuvre, par exemple, dans [26], pour au contraire réduire le nombre de simulations nécessaires.

En ce qui concerne la dynamique rapide, si les méthodes actuelles aboutissent à une exploitation satisfaisante des machines de la génération pétaflopique pour des systèmes de ce niveau de complexité algorithmique, le passage à la prochaine génération de supercalculateurs, dits « exaflopiques », exigera d'importantes extensions des concepts proposés ici, en raison de la généralisation des accélérateurs et de l'hétérogénéité programmée des machines, aussi bien au niveau des composants eux-mêmes que de leur performance instantanée locale, pilotée par des contraintes externes telle que la consommation totale d'énergie de l'installation. Cela impose, en particulier, d'introduire la gestion asynchrone de l'enchaînement des tâches algorithmiques pour limiter au maximum la sensibilité aux latences dans les échanges de données. Dans le cas présent, l'expérience acquise avec EPX suggère de pousser encore les approches adaptatives et dynamiques de la stratégie parallèle, ce qui s'accompagnera, de toute évidence, d'une rupture technologique et d'évolutions profondes dans la structure de données du programme.

Dans de nombreuses situations d'intérêt pour la sûreté des installations industrielles, nucléaires ou non, ou pour la protection des citoyens, en général, le chargement vu par les structures est appliqué *via* le fluide environnant, qui doit être représenté pour obtenir la réponse mécanique correcte du système. Les niveaux de couplage entre fluide et structure dépendent de nombreux paramètres, en particulier des différences de célérité des ondes entre les milieux fluide et solide. Nous retiendrons que dans le cas de structures légères (structures métalliques minces, par exemple), de fluides lourds (eau ou métal fondu, par exemple) ou de niveaux de pression élevés (situations explosives en général), il est indispensable d'intégrer l'interaction fluide-structure fortement couplée dans la modélisation.

Nous nous limitons dans cet encadré, à la représentation des fluides et des structures en interaction à l'aide de formalismes continus, laissant de côté les approches particulières aux caractéristiques spécifiques, telle que l'approche bien connue *Smooth Particle Hydrodynamics*.

Quelques représentations en interaction fluide-structure

Le mouvement des structures solides est classiquement observé en suivant la matière, selon une représentation lagrangienne. Au contraire, en raison des très grands déplacements d'un fluide au cours de son écoulement, on préfère la plupart du temps observer ses caractéristiques d'un point de vue fixe dans l'espace, soit en représentation eulérienne. Entre ces deux cas limite, on trouve une infinité de représentations, communément appelées « représentations ALE » (pour *Arbitrary Lagrange Euler*), selon lesquelles l'observateur se déplace suivant une vitesse arbitraire, non nulle et différente de la vitesse matérielle.

En matière d'interaction fluide-structure en présence d'une discrétisation spatiale, le choix d'une représentation est intimement lié à la technique choisie pour connecter les maillages pour le fluide et la structure (voir la figure 76).

Le choix de grilles conformes impose de déformer le maillage fluide pour suivre le déplacement des structures. Pour ne pas engendrer de cellules exagérément distordues, il faut également propager ce mouvement à l'intérieur du domaine, d'où une collection de techniques ALE de mouvement de grille.

Au contraire, le choix de maillages topologiquement déconnectés permet de conserver une grille fixe pour le fluide.

Caractéristiques méthodologiques et algorithmiques pour les stratégies d'interaction fluide-structure

Le choix d'une gestion conforme (*i.e.* les nœuds du fluide et de la structure sont confondus au niveau des interfaces) ou sans connexion topologique (*i.e.* les maillages du fluide et de la structure sont totalement indépendants) pour l'interaction fluide-structure a des conséquences majeures sur les algorithmes et la stratégie de résolution, dont l'influence est encore accrue en présence de grands déplacements de structure.

Nous en résumons les principales caractéristiques sur le tableau 11, en termes de qualité de la solution, de simplicité de mise en données, de robustesse et de performances parallèles.

Il convient de souligner que les approches ne sont pas exclusives et qu'elles sont fréquemment combinées, comme dans le cas d'une explosion en cuve avec structures internes plongeantes (voir la figure 77).

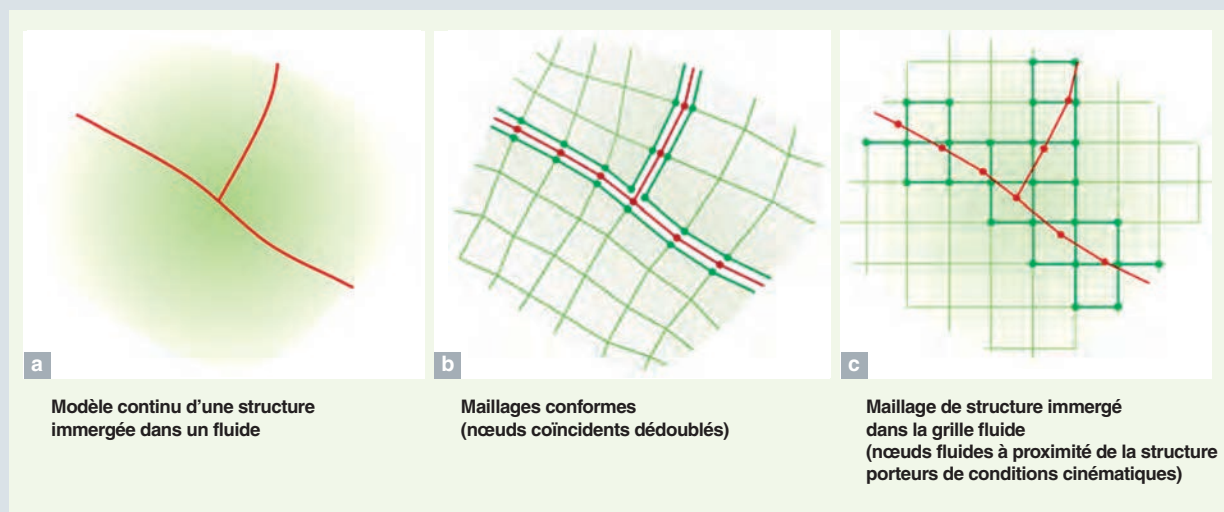


Fig. 76. Principes de connection des maillages pour fluide et structure.

Tableau 11.

Caractéristiques des différentes stratégies pour l'IFS		
	Approche avec grilles conformes	Approche avec grilles déconnectées
Maîtrise de la qualité de la solution	Solution de référence	Méthode approchée , précision à contrôler
Contraintes sur la mise en données	Maillage très complexe pour des structures immergées Perte de flexibilité dans le choix des éléments	Maillages aisés et pilotés par la qualité de la solution dans les domaines fluide et structure
Robustesse pour des transitoires à forte énergie	Solution inaccessible pour des déplacements de structure de grande amplitude et/ou en présence de rupture et fragmentation	Approche autorisant tous les déplacements de structure sans restriction
Complexité de l'algorithme de résolution	Surcoût négligeable sur le temps de résolution associé à la prise en compte de l'interaction fluide-structure	Complexité voisine de celle associée au contact généralisé (voir la figure 77), bénéficiant des mêmes travaux algorithmiques

Illustration à l'échelle industrielle

Nous proposons, avec la figure 77 une illustration de la mise en œuvre de techniques avancées en interaction fluide-structure à l'échelle industrielle dans un cas typique des analyses de sûreté pour les réacteurs du futur.

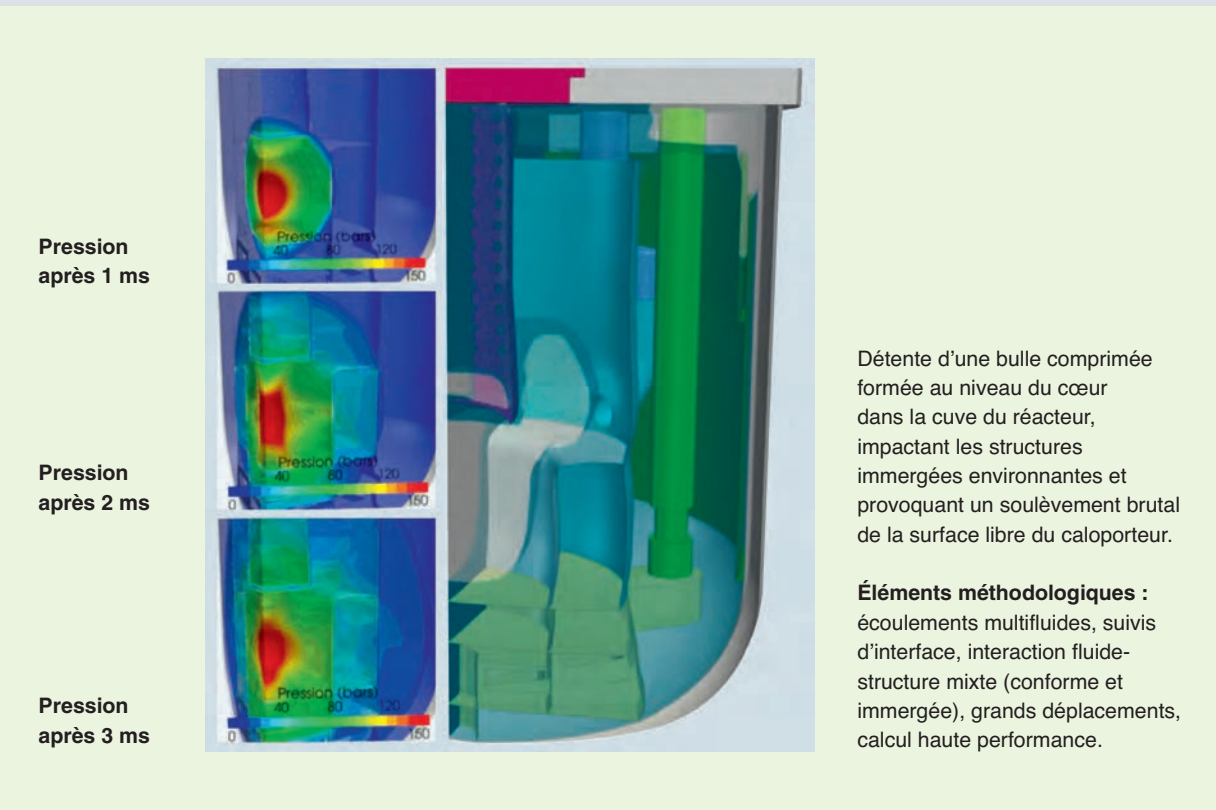


Fig. 77. Simulation de l'accident de référence dans un réacteur de quatrième génération.

Évelyne FOERSTER, Vincent FAUCHER, Serge PASCAL

Direction des énergies

et Christian MARIOTTI

Direction des applications militaires

► Références

- [1] T. HEY, S. TANSLEY and K. TOLLE (ed.), "The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery", *Microsoft Research*, Redmond, Washington, 2009.
- [2] D.P. SCHAFF and P.G. RICHARDS, "On finding and using repeating seismic events in and near China", *Journal of Geophysical Research*, 116, B03309, 2011.
- [3] S. GIBBONS and F. RINGDAL, "The detection of low magnitude seismic events using array-based waveform correlation", *Geophysical Journal International*, 165, pp. 149-166, 2006.
- [4] D. KOMATITSCH and J.-P. VILOTTE, "The Spectral Element Method: An efficient tool to simulate the seismic response of 2-D and 3-D geological structures", *Bull. Seism. Soc. Am.*, 88, pp. 368-392, 1998.
- [5] E. FOERSTER and F. DE MARTIN, "Large-scale Finite Element landslide simulations under earthquake loading", 4th Int. Conf. on Earthquake Geotechnical Engineering, paper 1243, Thessaloniki, Greece, June 25-28, 2007 (https://www.researchgate.net/publication/282219280_Large-scale_finite_element_landslide_simulations_under_earthquake_loading).
- [6] F. DUPROS, F. DE MARTIN, E. FOERSTER, D. KOMATITSCH and J. Roman, "High-performance finite-element simulations of seismic wave propagation in three-dimensional non linear inelastic geological media", *Parallel Computing*, 36: pp. 308-325, 2010.
- [7] O.C. ZIENKIEWICZ, C.T. CHANG, P. BETTRESS, "Drained, undrained, consolidating and dynamic behavior assumption in soils", *Géotechnique*, 30, pp. 385-395, 1980.
- [8] M. N. NEWMARK, "A method of computation for structural dynamics", *Proc. ASCE* 85, EM3, 1959.
- [9] S. KONTAE, L. ZDRAVKOVIC and D. POTTS, "An assessment of time integration schemes for dynamic geotechnical problems", *Comput. Geotech.*, 35(2), pp. 253-264, 2008.
- [10] C. MARIOTTI and L. MONASSE, "From general mechanics to discontinuity, unified approach to elasticity", ed. Presses des Ponts, ISBN: 978-2-85978-460-7, 352 pages, 2012.
- [11] K.Y. SZE, X.H. LIU, S.H. LO, "Popular benchmark problems for geometric nonlinear analysis of shells", *Finite Elements in Analysis and Design*, 40, pp. 1551-1569, 2004.
- [12] C. MARIOTTI, F. LE PIVER and L. AUBRY, "A least-squares coupling method between a finite element code and a discrete element code", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 101(10), pp. 731-743, 2015.
- [13] M. VASSAUX, « Comportement des matériaux quasi fragiles sous sollicitations cycliques : de l'expérimentation numérique au calcul des structures », Thèse de doctorat de l'école Normale Supérieure de Cachan, Rapport CEA-R-6405, 2015.
- [14] G. PIJAUDIER-CABOT et Z.P. BAZĂNT, "Nonlocal damage theory", *Journal of Engineering Mechanics*, 113, pp. 1512-1533, 1987.
- [15] J. OLIVER, A. HUESPE and P. SANCHEZ, "A comparative study on finite elements for capturing strong discontinuities: E-FEM vs X-FEM", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(37), pp. 4732-4752, 2006.
- [16] E. KISHTA, B. RICHARD, C. GIRY, F. RAGUENEAU, "Reduced kinematic formulation based on the strong discontinuity method for reinforced concrete components", COMPLAS, 2015 (https://www.researchgate.net/profile/Benjamin_Richard/publication/278726939_REDUCED_KINEMATIC_FORMULATION_BASED_ON_THE_STRONG_DISCONTINUITY_METHOD_FOR_REINFORCED_CONCRETE_COMPONENTS/links/55844b3d08aef58c039b32a0.pdf).
- [17] C. ODONBAATAR, « Caractérisation des effets de sites dans le bassin d'OulanBator », sous la direction de L. RIVERA et A. SCHLUPP, Université de Strasbourg, 2011 (http://scd-theses.u-strasbg.fr/2475/01/CHIMED_Odonbaatar_2011.pdf).
- [18] J. VIRIEUX, P.Y. BARD, H. MODARESSI, "Quantitative Seismic Hazard Assessment", *Earthquake Early Warning Systems*, doi:10.1007/978-3-540-72241-0_9, pp. 153-177, 2007.
- [19] R. W. CLAYTON and B. ENGQUIST, "Absorbing boundary conditions for acoustic and elastic wave equations", *Bull. seism. Soc. Am.*, 6, pp. 1529-1540, 1977.
- [20] K. AKI and P. G. RICHARDS, "Quantitative Seismology", 2nd ed., University Science Books, 2002.
- [21] T. BELYTSCHKO and T.J.R. HUGHES, "Computational methods for transient analysis", North Holland, 1986.
- [22] A.E. SMITH and D.W. COIT, "Constraint Handling Techniques - Penalty Functions, in Handbook of Evolutionary Computation", Chapter C5.2, Institute of Physics Publishing and Oxford University Press, Bristol U.K., 1997.
- [23] R. UNGER, M. C. HAUPT, P. HORST, "Application of Lagrange multipliers for coupled problems in fluid and structural interactions", *Comput. Struct.*, 85(11-14), pp. 796-809, 2007.
- [24] V. FAUCHER, P. GALON, A. BECCANTINI, F. CROUZET, F. DEBAUD and T. GAUTIER, "Hybrid parallel strategy for the simulation of fast transient accidental situations at reactor scale", *Annals of Nuclear Energy*, 82: pp. 188-194, 2014.
- [25] V. FAUCHER, "Advanced parallel strategy for strongly coupled fast transient fluid-structure dynamics with dual management of kinematic constraints", *Advances in Engineering Software*, 67: pp. 70-89, 2014.
- [26] J. ROHMER and E. FOERSTER, "Global sensitivity analysis of large-scale numerical landslide models based on Gaussian-Process meta-modeling", *Computers & Geosciences*, 37, pp. 917-927, 2011.

La simulation des Contrôles Non Destructifs

Contexte, enjeux

Par les termes « Contrôle Non Destructif (CND*) » est désigné l'ensemble des essais et techniques mis en œuvre dans l'industrie pour s'assurer de l'absence de défauts critiques dans une pièce manufacturée ou sur une installation. Les contrôles sont effectués soit lors de la fabrication, soit lors de phases de maintenance. Dans le second cas, l'objectif est de s'assurer de l'absence de dégradations de la pièce soumise à des contraintes de nature diverse, mécanique, chimique, thermique ou encore dues à l'exposition aux rayonnements. Le domaine du CND concerne à des degrés divers de très nombreux secteurs industriels (transports, énergie, sidérurgie, pétrochimie, etc.) avec, au niveau mondial, deux moteurs principaux pour la R&D qui sont l'industrie nucléaire et l'industrie aéronautique. Cela, en raison des exigences de sûreté/sécurité particulièrement élevées auxquelles obéissent ces deux secteurs.

Comme l'ensemble de la société, le domaine du CND connaît une révolution numérique et le rôle joué par la simulation en constitue le principal volet. Les applications de la simulation ne cessent de croître et de se diversifier avec essentiellement trois objectifs principaux qui sont : la conception des méthodes et des sondes, la démonstration de performances et l'aide au diagnostic.

L'évolution des usages de la simulation reflète à la fois l'évolution des techniques mises en œuvre et celle des performances attendues.

C'est le cas, en particulier, de l'avènement et de l'essor considérable des techniques **ultrasons*** multiéléments. Ces techniques utilisent un réseau de **transducteurs*** piézo-électriques pilotés électroniquement et de façon indépendante afin d'exciter une onde ultrasonore dans la pièce inspectée et de collecter la réponse de la structure à cette stimulation. Ainsi, par exemple, il est courant d'exciter ces réseaux en appliquant des retards individuels calculés pour obtenir un faisceau ultrasonore incident ayant des caractéristiques fixées. La complexité de ces nouvelles techniques relativement aux méthodes plus conventionnelles a conduit au développement d'outils de simulation spécifiques pour la conception des réseaux, leur mise en œuvre (calcul des retards), le traitement et l'imagerie des données collectées.

L'apport de la simulation à des fins de démonstration de performances des méthodes d'inspection est aujourd'hui de

plus en plus reconnu. C'est, en particulier, le cas dans le domaine du nucléaire avec l'intégration de la simulation dans les approches recommandées par l'ENIQ (*European Network for Inspection Qualification*) pour l'établissement des dossiers de qualification.

Historiquement, le CEA a joué un rôle de précurseur dans ce domaine avec le développement de la plate-forme de simulation CIVA qui est aujourd'hui considérée comme le logiciel de référence du domaine. Dans un même environnement, CIVA rassemble des modules de simulation et d'analyse qui portent sur les principales techniques d'inspection : méthodes ultrasonores, électromagnétiques (**courants de Foucault***) et **radiographiques*** (X, *gamma*, tomographie). Les codes sont connectés à une description CAO de la pièce ainsi qu'à des interfaces métiers qui rendent la simulation accessible à des opérateurs non spécialistes en modélisation. Les équipes de l'Institut LIST font évoluer le logiciel en y intégrant, au fil des nouvelles versions maintenant annuelles, de nouveaux outils résultats de la R&D menée sur différents fronts : modélisation des phénomènes, nouveaux usages de la simulation, stratégie d'implémentation.

Les stratégies de modélisation

La simulation des CND s'est développée autour des trois principales modalités de contrôle que sont les méthodes ultrasonores, les méthodes dites « électromagnétiques » et la radiographie. Nous avons ainsi affaire à différentes physiques. Cependant, les spécificités et contraintes liées à l'application sont les mêmes et conduisent à des choix méthodologiques analogues.

La première exigence est que les codes de calcul puissent être utilisés par des ingénieurs n'ayant aucune expertise particulière sur la modélisation numérique elle-même. En particulier, la mise en œuvre ne doit pas impliquer de réglages de paramètres de calcul ou d'opérations de maillage sophistiquées. Cela est une contrainte également nécessaire pour la reproductibilité des calculs. Une seconde exigence concerne le matériel sur lequel sont déployés les codes de calcul. Nous nous adressons ici à des usages de la simulation sur des machines de type PC permettant une grande versatilité d'utilisation. Enfin, le temps d'exécution est un des critères d'acceptabilité majeurs pour les codes. La simulation est, en effet, un outil au service d'opérationnels devant fournir des réponses rapides dans un contexte industriel.

D'un point de vue tout à fait général, la simulation doit rendre compte i) d'un système excitateur provoquant un stimulus, mécanique ou électromagnétique, ii) de l'interaction de ce stimulus avec le milieu ambiant contenant la pièce inspectée et iii) du système récepteur permettant de collecter la réponse de la pièce. Quand nous parlons ici de modélisation, nous ne considérons que la modélisation de l'interaction du stimulus avec le milieu ambiant : propagation de l'onde ultrasonore de l'émetteur jusqu'au récepteur, dans le milieu ; établissement d'un champ électromagnétique conduisant à une variation d'impédance aux bornes d'une sonde électromagnétique ; interaction d'un rayonnement X ou γ entre une source et un détecteur. En général, en effet, les systèmes excitateur et récepteur font l'objet de modèles heuristiques qui interviennent en amont et en aval, modèles qui ne sont pas critiques en termes de performances numériques. Ainsi, quand nous parlons de modélisation nous considérons un problème physique régi par un système d'équations différentielles partielles sur un volume contenant la pièce inspectée et son milieu environnant. Les méthodes de résolution numériques classiques pour ce type de problème s'appuient sur un maillage spatial du volume considéré, telle, par exemple, la méthode des éléments finis. Les exigences relatives à l'application qui ont été rappelées plus haut ont conduit historiquement à préférer des méthodes dites « semi-analytiques » par opposition à ces méthodes entièrement numériques de type éléments finis. La raison principale en est fondamentalement la différence d'échelle entre la région à prendre en compte dans la simulation (la pièce en courants de Foucault, la distance entre capteur ou source et le défaut en ultrasons ou RX) et les dimensions caractéristiques des problèmes à modéliser (longueur d'onde, taille du défaut, distance « d'entrefer » entre la sonde courant de Foucault et la pièce, etc.). Cela est particulièrement vrai en ultrasons où, en pratique, l'utilisation des éléments finis reste encore aujourd'hui limitée à des calculs 2D. Les méthodes semi-analytiques s'appuient sur des approximations ou des hypothèses spécifiques qui certes réduisent la « généralité » de la solution, mais présentent l'avantage de simplifier la formulation mathématique et de s'affranchir d'un maillage de l'espace. Ces méthodes constituent ainsi un bon compromis entre précision quantitative et performances numériques. En contrepartie, elles impliquent de multiplier les solutions spécifiques pour les différentes configurations rencontrées.

L'utilisation du calcul haute performance pour la simulation en contrôle non destructif

Les stratégies de parallélisation au sein de la plate-forme CIVA

La plate-forme CIVA possède une variété de modèles représentative de la diversité des études et des techniques présentes dans le domaine du CND : nous trouvons des outils

qui permettent la modélisation des contrôles par ultrasons classiques, par ondes guidées, par courants de Foucault et par radiographie. Au sein même de ces familles de techniques, nous allons rencontrer des outils de calcul différents selon le type d'étude réalisée, ainsi que des couplages qui mettent en œuvre deux noyaux de calcul (voir *infra*, p. 119).

L'accélération des calculs permet aux utilisateurs de CIVA, d'une part de réduire le temps d'attente d'un résultat de simulation, d'autre part de lancer des études statistiques à partir d'une configuration de référence. Afin de permettre une telle accélération, l'architecture de CIVA met en œuvre une parallélisation à deux niveaux. Le premier niveau est une parallélisation grossière qui permet de distribuer différents noyaux de calcul sur différents nœuds d'un **cluster***. Cette distribution permet de réaliser des études statistiques, des calculs d'optimisation ou d'effectuer des calculs à des positions différentes d'un contrôle. Elle est assurée par l'utilisation d'un *scheduler* de tâches et d'un gestionnaire de ressources sur un cluster.

Le second niveau est une parallélisation fine qui permet de répartir les tâches au sein d'un noyau de calcul. Sont alors employées des techniques de parallélisation décrites ci-après, à savoir le déport des calculs sur carte graphique, la vectorisation des instructions et l'utilisation du **multithreading***. Ce second niveau est adaptable à des architectures matérielles tout à fait courantes, exploitant le *multithreading* et/ou la présence de cartes graphiques qui sont maintenant présentes sur des PCs de bureau.

Les trois exemples décrits dans les paragraphes suivants permettent d'illustrer cette variété des noyaux de calcul et des méthodes de parallélisation présentes dans CIVA.

L'accélération des calculs de champ ultrasonores avec des architectures avancées

Les objectifs

L'un des outils de simulation principaux utilisés dans le cadre de la préparation et de l'interprétation des contrôles par ultrasons est le calcul de champ ultrasonore. Cet outil permet de connaître le champ de déplacement induit par un transducteur piézo-électrique au sein d'un matériau. Il est ainsi possible de vérifier que la zone contrôlée est bien couverte par le champ émis par le transducteur, en prenant en compte la géométrie de la pièce, la nature des matériaux, les réglages électroniques du transducteur piézoélectrique. Ce calcul de champ est également une donnée d'entrée pour les simulations d'inspection qui permettent de simuler la signature d'un défaut lors d'une inspection (fig. 78).

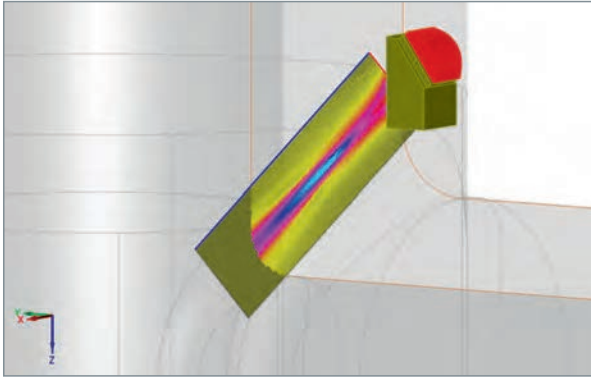


Fig. 78. Illustration d'un calcul de champ ultrasonore réalisé dans CIVA. Le champ d'amplitude de déplacement représenté ici correspond à un capteur piézo-électrique multiéléments rayonnant par l'intermédiaire d'un sabot en plexiglas dans un piquage métallique.

Les travaux d'accélération des calculs de champ ont donc plusieurs visées :

- Rendre possible des études d'analyse de sensibilité et d'optimisation pour des configurations complexes ;
- accélérer les calculs de simulation d'inspection afin de pouvoir résoudre des problèmes d'inversion (remonter aux caractéristiques du défaut à partir d'un fichier de données expérimentales) ;
- atteindre des calculs interactifs afin de donner la possibilité à l'utilisateur de voir en temps réel l'effet de changements de paramètres.

Calcul de champ par la méthode des pincesaux

Le calcul de champ réalisé dans CIVA est une méthode semi-analytique choisie pour son bon compromis entre précision et rapidité des calculs. Est utilisée comme modèle physique l'équation de la diffraction de Rayleigh Sommerfeld qui pour un transducteur immergé dans un fluide et un point d'observation M placé dans ce même fluide se formule :

$$\varphi(M) = \iint_{P \in \text{trad}} V_0(P) \frac{e^{jkr}}{2\pi r} e^{-j\omega t} dS$$

La grandeur $\varphi(M)$ est le potentiel acoustique engendré au point M , $V_0(P)$ est la vitesse particulière normale à la surface émettrice du traducteur au point P , r est la distance entre P et M , k est le nombre d'onde et ω la pulsation.

Le calcul de champ de CIVA utilise une généralisation de cette équation pour prendre en compte des géométries complexes. La méthode utilisée est la méthode dite « des pincesaux », qui s'apparente aux méthodes de tracés de rayons. Est considérée la propagation d'un faisceau issu d'une source ponctuelle avec un angle solide initial et une direction

de propagation initiale. Au cours de la propagation du faisceau, est calculé l'effet des réflexions et des réfractions du faisceau, d'une part sur le rayon central, d'autre part sur l'étalement du faisceau. Le pinceau est modélisé comme une série de segments représentatifs du rayon central et une série de matrices de transformation reflétant la déformation des caractéristiques du pinceau au passage d'une interface (fig. 79).

$$\psi = L_{prop_n} \cdot L_{interf_{n-1}} \cdot L_{prop_{n-1}} \cdot \dots \cdot L_{interf_2} \cdot L_{prop_2} \cdot L_{interf_1} \cdot L_{prop_1} \cdot \psi_0$$

où ψ décrit les caractéristiques du pinceau à un point d'observation, ψ_0 représente le pinceau à la source, la matrice L_{prop_i} représente l'atténuation dans le milieu i et la matrice L_{interf_j} représente la diffraction à l'interface j . Le vecteur ψ caractérisant le pinceau est formé du quadruplet (d_x, d_y, ds_x, ds_y) , d_x et d_y caractérisant l'étalement du pinceau dans le plan normal au rayon axial, ds_x et ds_y représentant le vecteur lenteur⁴⁵ de l'onde dans ce plan.

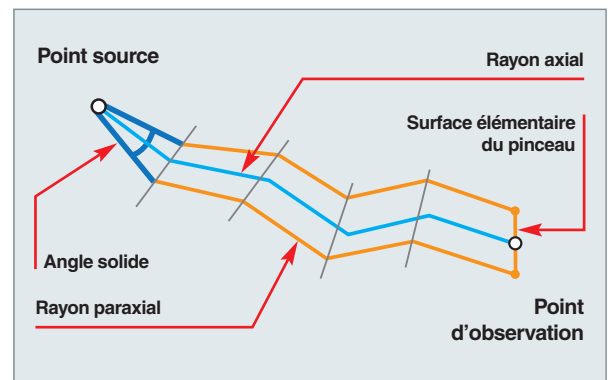


Fig. 79. Modification des propriétés d'un pinceau à la traversée des interfaces.

Une fois ces trajets obtenus, pour définir la réponse impulsionnelle en un point d'observation M , est discrétisé le capteur en une série de surfaces élémentaires dS et l'on somme les contributions des différentes parties du capteur à partir des trajets. À ce stade, il est possible de sommer les réponses impulsionnelles de l'ensemble des modes de propagation ou bien faire la sommation mode par mode afin de différencier les contributions des différents modes de propagation (trajets en ondes longitudinales, transverses, hybrides) en un point donné et ainsi affiner l'analyse physique.

Une fois cette réponse impulsionnelle définie, il faut convoquer cette réponse impulsionnelle au signal de référence ayant servi à exciter le capteur piézo-électrique. Est ainsi

45. En acoustique, le vecteur lenteur désigne un vecteur dirigé selon la vitesse du son et dont la norme est l'inverse de celle du vecteur vitesse.

obtenue l'amplitude du déplacement produit par l'onde acoustique au point *M* en fonction du temps *t*.

Les noyaux de calcul

Le calcul se décompose donc en trois étapes principales : le calcul des trajets suivis par chaque pinceau, la sommation des réponses impulsionnelles correspondant à ces différents trajets et la convolution des réponses impulsionnelles au signal de référence qui a été utilisé pour l'excitation du transducteur piézo-électrique. Si nous considérons le point de vue de l'implémentation informatique, à ces trois étapes principales, nous devons ajouter une étape de réduction permettant de calculer la taille des structures mémoire nécessaires pour l'étape de sommation des réponses impulsionnelles.

Nous obtenons les étapes de calcul suivantes :

- Le calcul des trajets des pincesaux ;
- le calcul des tailles de structures mémoire ;
- la sommation des réponses impulsionnelles ;
- la convolution au signal de référence.

L'adaptation aux architectures HPC

L'architecture GPU

Lorsque nous considérons les noyaux de calcul participant au calcul de champ, nous constatons que certains sont très spécifiques (calculs liés à la forme des pincesaux), alors que d'autres sont fondés sur des briques algorithmiques largement répandues (FFT* utilisées dans le calcul de convolution des signaux). Afin de minimiser les coûts de développement et de s'appuyer sur des briques logicielles reconnues, le choix s'est donc porté sur les bibliothèques CudaFFT pour l'implémentation des FFT sur GPU. *A contrario*, il a été nécessaire de recoder l'algorithme de calcul des pincesaux afin de tirer parti de la puissance de calcul offerte par les cartes graphiques.

Pour chacun des noyaux, il est ensuite nécessaire de définir le paramétrage des appels CUDA permettant de maximiser le nombre d'opérations en arithmétique flottante par seconde (flops*) utiles. Deux paramètres sont accessibles au développeur pour réaliser cette optimisation : le nombre de **threads*** par **bloc*** et le nombre de **registres*** par **thread**⁴⁶.

Le nombre de *threads* par *bloc* définit le nombre de tâches exécutées simultanément par un processeur CUDA. Il est *a priori* naturel de prendre un nombre de *threads* aussi élevé que possible dans la limite physique du nombre de *threads* gérable par la carte graphique. En pratique, la mémoire par-

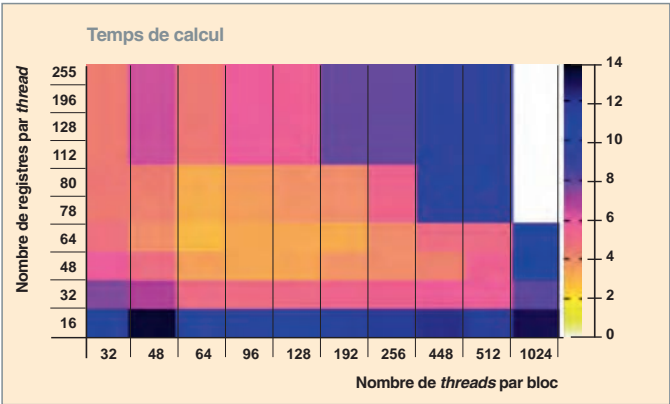


Fig. 80. Temps de calcul obtenu sur une carte graphique Titan en exécutant le kernel de calcul des pincesaux. On a ici fait varier le nombre de *threads* par *bloc* et le nombre de registre par *thread*. La meilleure performance est obtenue pour 64 *threads* par *bloc* et 64 registres par *thread*.

tagée étant allouée pour un bloc de *threads*, on peut être amené à réduire ce nombre afin que l'accès mémoire de l'ensemble des *threads* puisse se faire dans la mémoire partagée.

Le nombre de registres par *thread* est limité par le nombre total de *threads* exécuté simultanément, pour des performances optimales, il doit coïncider au mieux avec la mémoire locale nécessaire à l'exécution du noyau.

La figure 80 montre le cas d'un noyau de calcul pour lequel cette optimisation est importante : le maximum de performance est atteint pour 64 *threads* par *bloc* lors de l'exécution du noyau de calcul de sommation des réponses impulsionnelles sur la carte graphique GTX Titan. Est ainsi obtenue une performance trois fois supérieure à la performance obtenue en utilisant le nombre maximum de *threads* par *bloc*.

Au total, ces travaux d'amélioration permettent sur une configuration de calcul de champ ultrasonore de référence d'obtenir les performances décrites dans le tableau ci-dessous. Ces performances permettent d'obtenir un rendu fluide (28 images par seconde) avec une carte graphique de la génération Titan.

Tableau 12.

Performance obtenue sur une configuration de calcul de champ sur une zone 100 x 100			
	GTX 580	Tesla C 2070	GTX Titan
Architecture de la carte graphique	Fermi	Fermi	Kepler
Performance (images par seconde)	6,5 s ⁻¹	4,8 s ⁻¹	28,8 s ⁻¹

46. Les notions de *thread* et de *bloc*, ainsi que les architectures des cartes graphiques sont décrites *supra*, p. 15 et suivantes.

L'architecture MiC

Sur une architecture MiC (*Many Integrated Core*), l'obtention d'une bonne performance passe par deux niveaux de parallélisation. En effet, ces architectures comprennent cinquante-sept cœurs, chacun étant capable d'exécuter quatre *threads*. Il faut donc travailler sur un premier niveau de **vectorisation**^{*47} permettant d'exploiter 4 *threads* sur chaque cœur et un second niveau permettant d'exploiter les 57 cœurs. À l'instar de ce qui a été fait sur les travaux sur GPU, on s'appuie sur des bibliothèques standard pour les FFT et on a développé des noyaux de calcul spécifiques pour accélérer les algorithmes de calculs de pinceaux.

Les travaux de vectorisation s'appuient sur la bibliothèque Boost.SIMD [<https://www.numscale.com/boost-simd/>] qui permet de spécifier des opérations de vectorisation et de générer le code optimisé correspondant sur différentes architectures. L'exploitation des 57 cœurs est, quant à elle, réalisée au moyen de la bibliothèque OpenMP.

Pour cette parallélisation, deux schémas d'exécution ont été testés : une approche dite « verticale » dans laquelle la boucle externe de l'algorithme se situe sur les points de champ (l'ensemble des noyaux de calculs est alors exécuté sur chaque point de champ) et une approche dite « horizontale » dans laquelle on appelle les noyaux les uns après les autres, la boucle sur les points de champ étant située à l'intérieur de chaque noyau. La version verticale a l'avantage d'une meilleure localité de la mémoire et d'un nombre de calculs plus élevé pour chaque *thread*. La version horizontale a pour avantage de connaître l'ensemble des tailles des FFTs à l'issue de l'étape 2, ce qui permet d'optimiser les calculs des plans FFT pour l'étape 3.

Nous constatons que sur la configuration de référence, l'accélération totale est d'un facteur 58 pour la version horizon-

47. La vectorisation est un type de parallélisme dans lequel la même instruction est appliquée simultanément à plusieurs données. (voir *supra*, p. 24).

tale et de 223 pour la version verticale. Si l'on étend ces tests à d'autres configurations, nous constatons que la conclusion varie selon les géométries considérées, et qu'il serait nécessaire de mettre en place une stratégie de sélection automatique de l'algorithme (dite de « *smart-tuning* ») pour tirer le meilleur parti des performances des architectures.

Les perspectives de la parallélisation des calculs de champ

Ces travaux de parallélisation permettent d'ores et déjà d'obtenir des calculs de champ interactifs ouvrant la voie aux nouveaux usages décrits *infra*, p. 119. Afin, d'une part, de généraliser ces accélérations à des géométries plus complexes et, d'autre part, de bénéficier des bibliothèques de tracé de rayons rapides développées par les constructeurs (Intel Embree, Nvidia Optix), des travaux sont en cours afin de modéliser les pinceaux à partir de plusieurs rayons dont les trajectoires sont explicitement calculées.

La probabilité de détection assistée par le modèle avec calcul distribué

La distribution des calculs sur clusters Windows

La réalisation des études MAPOD (*Model Assisted Probability of Detection*) est caractérisée par la nécessité de lancer des séries de calculs pour obtenir des échantillons statistiques suffisamment importants pour quantifier la confiance obtenue sur une probabilité de détection de défaut. Ce nombre de simulations dépend du quantile cible, de l'intervalle de confiance souhaitée sur l'estimation de ce quantile et de la non linéarité du problème. Typiquement, il est de quelques milliers de simulations. Dans des situations d'études réalistes, une simulation de calcul de simulation d'inspection dure plusieurs minutes. Pour les ingénieurs en charge de ces études MAPOD, la parallélisation des calculs est alors essentielle pour permettre de ramener le temps de restitution à quelques heures.

Tableau 13.

Accélérations obtenues sur la configuration de référence						
Pour la version horizontale, les gains des différentes étapes sont présentés dans les premières lignes du tableau. Les deux dernières lignes présentent les gains totaux obtenus pour les deux versions. Le gain total est décomposé en deux parties : le gain apporté par la vectorisation SIMD et le gain apporté par le <i>multithreading</i> sur les 57 cœurs de l'architecture MiC.						
	Scalaire	SIMD	Gain SIMD	228 threads	Gain HT	Gain total
Étape 1 – Trajets des pinceaux	6 738,8 ms	1 189,0 ms	X5,7	23,1 ms	X51,4	X291,3
Étape 2 – Calcul des tailles de structures mémoire	373,9 ms	973,5 ms	X1,0	7,8 ms	X47,9	X47,9
Étape 3 – Sommation et convolution	3 338,8 ms	2 513,3 ms	X1,3	147,1 ms	X17,1	X22,7
Gain total version horizontale	10 451,4 ms	4 077,8 ms	X2,6	178,1 ms	X22,9	X58,7
Gain total version verticale	9637,8 ms	3 547,5 ms	X2,7	43,1 ms	X82,2	X223,4

La stratégie de parallélisation retenue est liée à deux contraintes : d'une part, la plateforme CIVA est développée sous Windows, d'autre part, les utilisateurs n'ont pas tous accès à des supercalculateurs mais plutôt à des clusters de calcul comprenant quelques dizaines de nœuds. La solution retenue consiste donc depuis un poste client à déporter le calcul sur le cluster de manière transparente pour l'utilisateur, à réaliser les calculs sur le cluster puis à rapatrier les fichiers de résultats pour réaliser l'analyse sur le poste client. Du point de vue de l'interface utilisateur, c'est une simple option de calcul qui définit si les calculs sont réalisés en local ou sur un cluster.

L'outil utilisé pour mettre en place ce mécanisme est la bibliothèque ProActive développée par l'INRIA et la société ActiveEon. Cet outil permet :

- De gérer les mécanismes de transfert de fichiers entre le poste client, la frontale du serveur et les nœuds de calcul ;
- d'assurer le *scheduling* des tâches et le démarrage des tâches sur les différents nœuds ;
- de gérer l'état des nœuds de calcul et d'arrêter/redémarrer les serveurs de calcul sur ces nœuds.

De plus, l'outil est doté d'une interface Java qui permet l'interfaçage direct aux couches logicielles de CIVA (dont l'IHM, les modèles de données et les ordonnanceurs de calculs sont codés en Java). Enfin, l'outil bénéficie d'interface Web pour faciliter l'administration du *scheduler* et des services de calcul.

La figure 81 résume la structure mise en place pour lancer les calculs CIVA sur clusters et les différentes fonctionnalités de ProActive utilisées.

Les calculs de POD pour simulation d'inspection par courants de Foucault

L'étude suivante présente les résultats d'une évaluation de probabilité de détection (**POD***) obtenue pour une inspection par courants de Foucault. Cette technique de contrôle consiste à créer un courant induit dans la pièce métallique à inspecter par l'intermédiaire d'une bobine excitatrice placée à proximité de la surface. Une bobine réceptrice vient mesurer le champ magnétique modifié par ces courants induits. La présence de défauts en surface de la pièce provoque des modifications du signal reçu par la bobine réceptrice.

Nous considérons ici la probabilité de détection d'une entaille de surface dans une plaque d'acier dans le cadre d'une inspection manuelle réalisée au moyen d'une sonde magnétique à courants de Foucault. Lors de cette inspection, nous considérons la longueur du défaut comme le paramètre mesurant le défaut (caractéristique de la POD). Les paramètres incertains identifiés sont la hauteur du défaut, la position de la sonde par rapport au défaut, ainsi que l'angle de positionnement de la sonde.

On associe à ces paramètres incertains des distributions de probabilités, et il est ensuite procédé à une série de simulations avec des paramètres d'entrée produits aléatoirement conformément aux distributions des paramètres incertains.

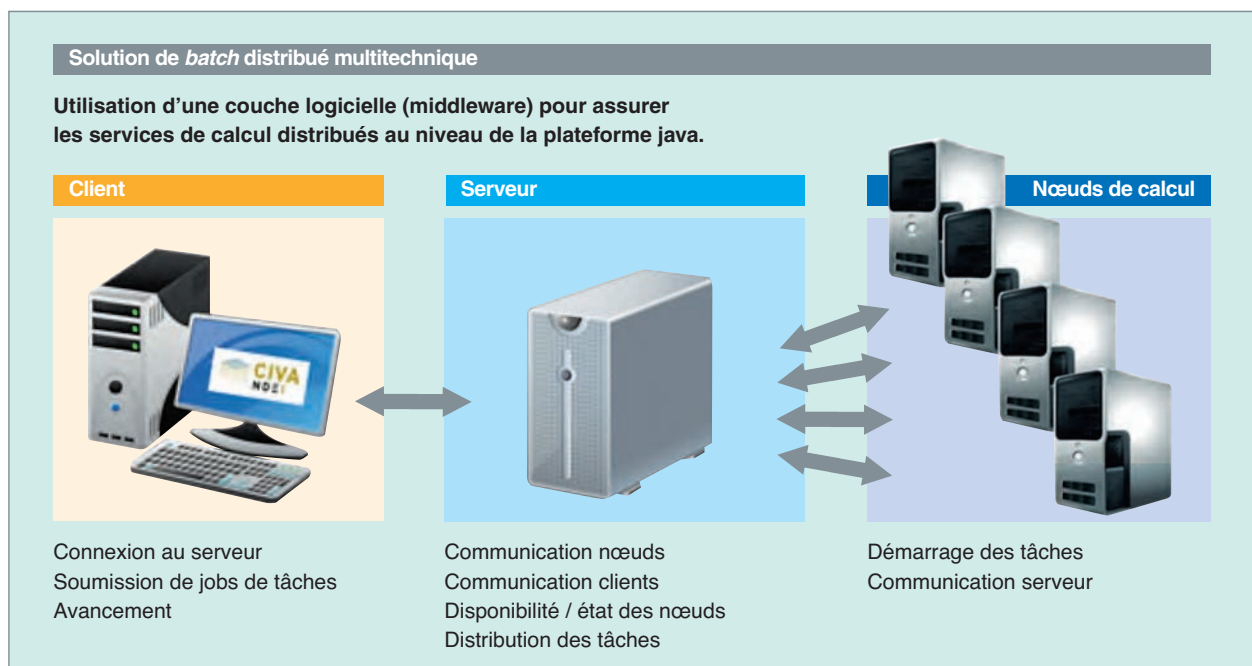


Fig. 81. Illustration des services utilisés pour le déploiement des calculs et leur supervision dans la plateforme CIVA.

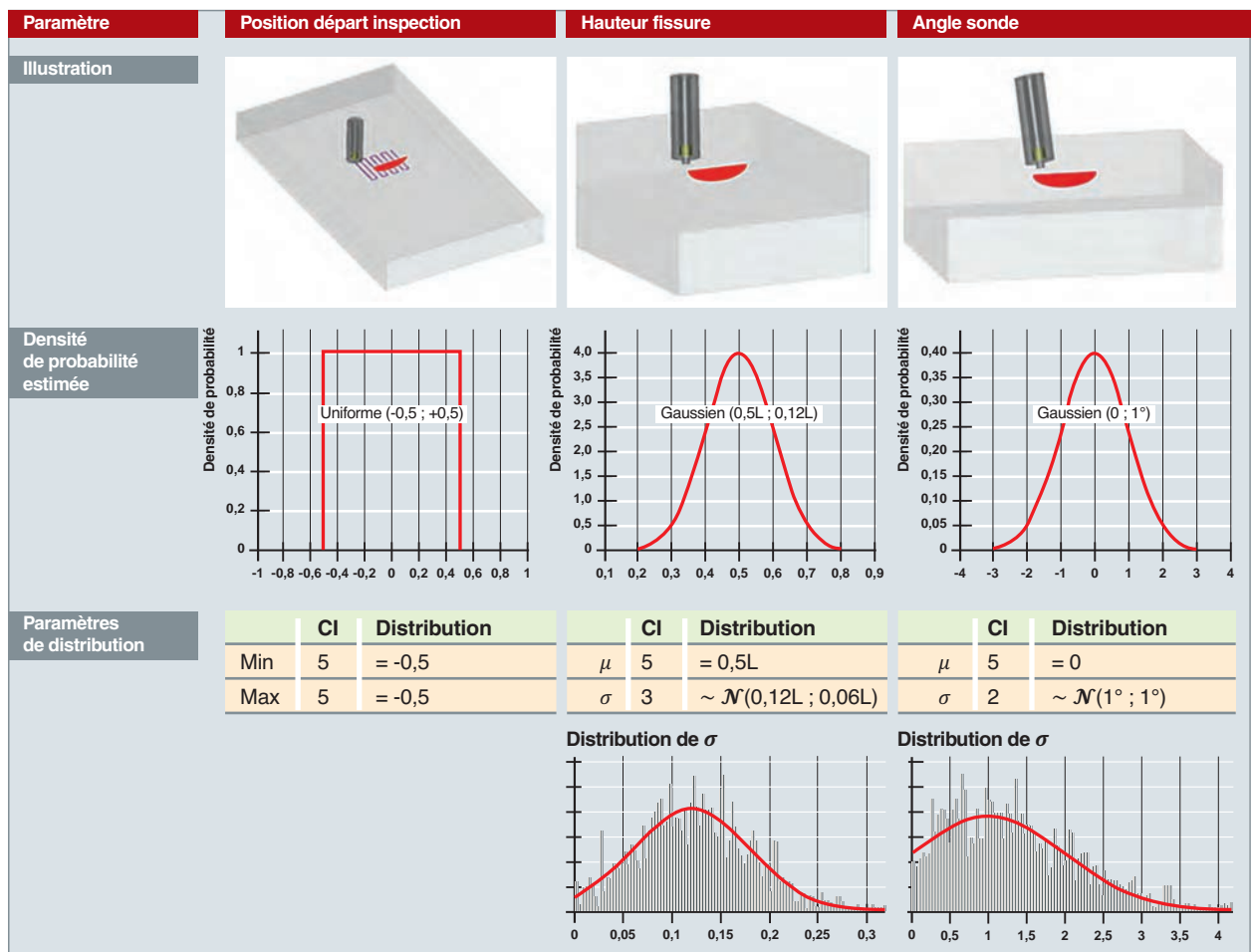


Fig. 82. Distribution des paramètres d'entrée incertains choisis pour l'étude de probabilité de détection (POD) sur les calculs de simulation d'inspection par courants de Foucault. Est considérée une loi uniforme pour la position du capteur et des lois gaussiennes pour la hauteur de fissure et pour l'angle d'attaque du capteur.

Sont alors lancés les calculs en faisant varier le paramètre dimensionnant, en utilisant une génération de nombres aléatoires pour définir les trois paramètres d'entrée conformément à leur distribution de probabilité. Typiquement, pour obtenir la courbe POD, sont utilisées cent valeurs pour le paramètre d'entrée et six tirages pour chaque valeur (fig. 82).

Pour définir un intervalle de confiance sur cette courbe POD, est répété le processus cent fois afin d'obtenir un faisceau de courbes POD. À partir de ce faisceau de courbes, il est possible de définir une courbe POD avec une confiance de 95 %. 60 000 simulations sont donc nécessaires pour obtenir cette courbe POD à 95 %. La figure 83 illustre la courbe obtenue sur le cas de contrôle par courant de Foucault présenté.

Le temps moyen d'une simulation étant de 30,3 s, le temps total nécessaire pour réaliser une étude POD complète est donc de 68,5 h sans parallélisation. Ce temps étant prohibitif pour des études industrielles, la parallélisation permet de ramener à quelques heures la réalisation d'une étude, grâce à des clusters dotés de quelques dizaines de nœuds de calcul.

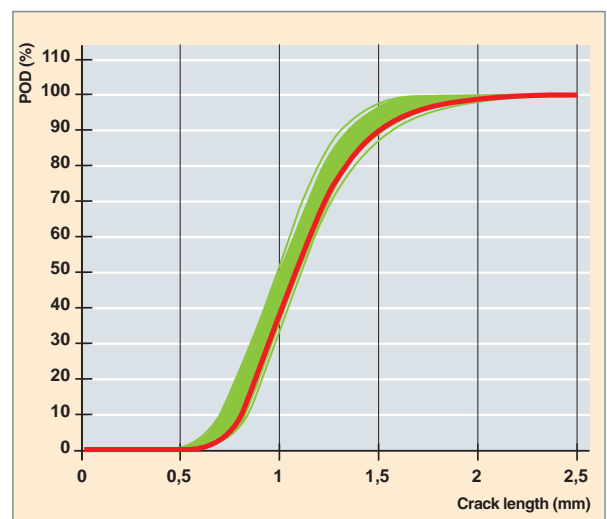


Fig. 83. Faisceau de courbes de probabilité de détection de défaut (POD) par courant de Foucault, obtenu avec la construction de 100 courbes.

L'accélération de reconstruction tomographique sur architectures GPU

Les enjeux

La **tomographie*** consiste à reconstruire un objet en trois dimensions à partir d'une série de clichés radiographiques 2D pris à des endroits connus autour de l'objet. Cette technique, très développée dans le domaine de l'imagerie médicale (scanner médical), permet de reconstruire l'intérieur d'un objet en trois dimensions sans avoir d'informations *a priori* et sans y avoir accès directement. Dans le cas de la tomographie par transmission de rayons X, est utilisée la loi de BEER-LAMBERT qui permet de relier l'intensité mesurée (I) à l'intensité mesurée sans objet (I_0), au coefficient d'absorption μ_i , à la masse volumique ρ et à la longueur traversée par les rayons X à travers l'objet l .

$$I = I_0 \exp(-\mu_i \rho l)$$

Qu'elles soient issues de données réelles ou bien de simulations, les données tomographiques représentent des volumes de données très importants : nous avons typiquement des centaines de positions avec des détecteurs qui ont maintenant des caractéristiques offrant des résolutions de plusieurs mégapixels. L'augmentation de ces résolutions doit permettre d'accéder à des images 3D des objets reconstruits, elles-mêmes très fines. Néanmoins, dans ce contexte, la durée des reconstructions devient le principal facteur limitant pour obtenir des résolutions de reconstruction 3D en rapport avec les résolutions des images 2D. En effet, pour obtenir ne serait-ce que des images reconstruites en $1024 \times 1024 \times 1024$ **voxels***, le volume mémoire représente plusieurs Go, et les temps de reconstruction peuvent représenter plusieurs heures sans stratégie d'accélération.

Présentation des noyaux de calcul utilisés en tomographie

Construire une tomographie revient à résoudre un problème inverse pour lequel on cherche à reconstruire un objet à partir de projections obtenues à partir de différents couples source/détecteur (voir fig. 84).

Afin d'introduire les notions utiles pour la compréhension des méthodes de reconstruction employées en tomographie, nous nous placerons dans le cas de mouvements de rotation circulaire du couple source/détecteur autour de l'objet (voir fig. 85)

Sont modélisées les projections obtenues sur le détecteur via la transformée de Radon, qui s'écrit dans le cas 2D comme

$$p(t, \theta) = Rf(t, \theta) = \int_{L_\theta} f(t \cos \theta - u \sin \theta, t \sin \theta + u \cos \theta) du$$

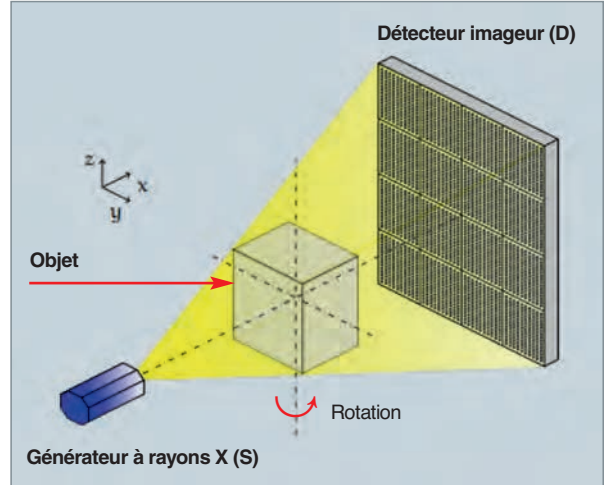


Fig. 84. Schéma d'un système de tomographie industrielle par rayons X comprenant un générateur à rayons X (S) et un détecteur imageur (D) fixes. L'objet à imager est posé entre ces deux éléments sur un système mécanique permettant sa rotation autour de l'axe vertical z.

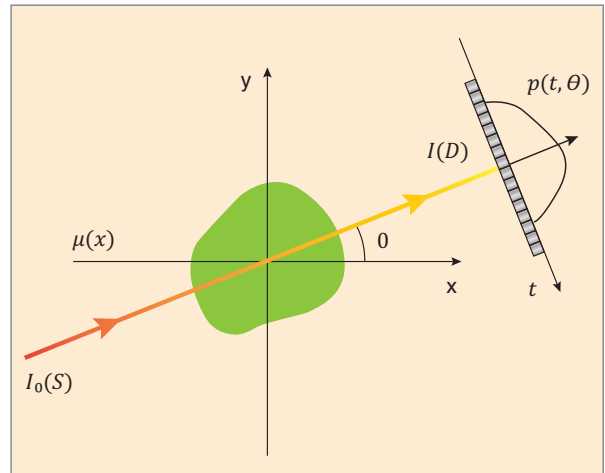


Fig. 85. La figure ci-dessus permet d'illustrer les notations utilisées. Il est parlé de projection définie à l'angle θ , et le détecteur est représenté par une droite paramétrée selon t . $\mu(x)$ représente l'atténuation du milieu en un point. $I_0(S)$ représente l'intensité de flux de photons au niveau de la source et $I(D)$ représente l'intensité au niveau du détecteur. $p(t, \theta)$ représente le nombre de photons mesuré par le détecteur à la position t lors de la mesure prise à l'angle θ .

Où f est la fonction objet qui est caractéristique de l'atténuation μ .

La reconstruction consiste à retrouver les valeurs de la fonction objet f à partir des valeurs des mesures de projection, ce qui revient à inverser l'opérateur de Radon.

L'adaptation de la méthode de reconstruction pour GPU

Une des méthodes les plus employées pour la reconstruction est la méthode FDK (Feldkamp, Davis, Kress) introduite en 1984. La méthode se décompose en trois étapes :

- L'étape de pondération permettant de compenser les effets de géométrie liés aux différences de distance entre la source et les différents points du détecteur ;
- une étape liée au changement de repère entre le système de coordonnées cartésien et le système de coordonnées cylindriques ;
- l'étape de rétroprojection consistant à calculer les contributions de chaque pixel du détecteur à chaque voxel de l'image.

L'étape de rétroprojection est la plus coûteuse de ces étapes, impliquant une boucle sur l'ensemble des images des détecteurs pour détecter la trace qu'elle occasionne sur les voxels. La figure 86 permet d'illustrer cette construction progressive de l'image à partir de la prise en compte successive des projections.

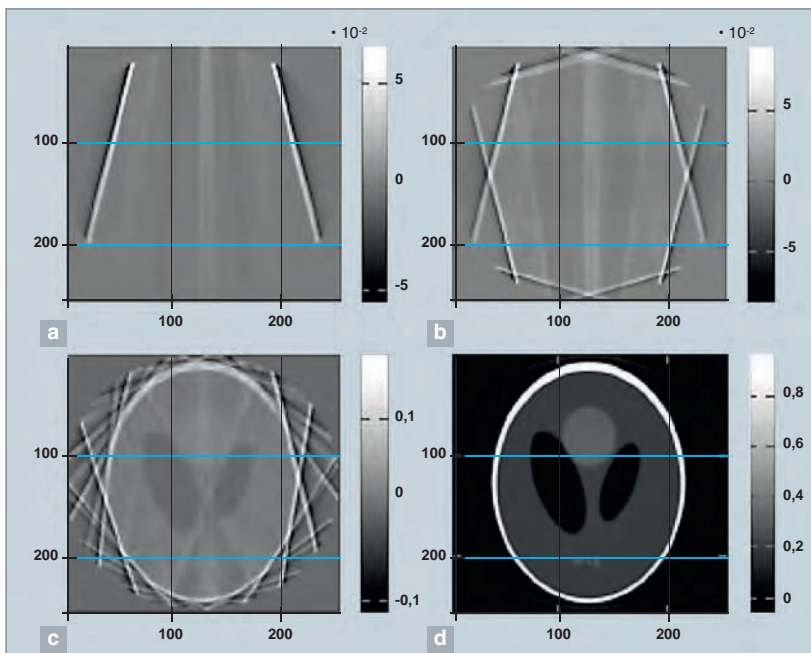


Fig. 86. Illustration du principe de la rétroprojection. Différents nombres de projections filtrées sont rétro-projetées dans le volume à reconstruire pour illustrer le principe de la rétro-projection. Les projections sur le détecteur ont une taille de 256×256 pixels et le volume à reconstruire est de $256 \times 256 \times 256$, et c'est la tranche $i_z = 128$ qui est représentée. a) Une unique projection filtrée est rétro-projetée. Nous voyons que, pour chaque rayon source-pixel détecteur, on attribue aux voxels traversés la valeur de la projection sur le pixel. b) Quatre projections sont utilisées. Les contributions des différents rayons s'accumulent pour chaque position source. c) Seize projections permettent d'entrevoir le profil d'atténuation final. d) La totalité des 180 projections sont utilisées dans la rétroprojection. Le profil d'atténuation du volume reconstruit est très proche du profil réel.

La nature fortement structurée du problème de rétroprojection se prête admirablement à la parallélisation sur cartes graphiques : nous sommes en effet en présence de problèmes impliquant des structures de données régulières (grille cartésienne 3D pour les voxels et grille 2D pour les pixels des détecteurs). De plus, on a ici des volumes de données assez importants qui permettent de tirer le meilleur parti de la carte graphique, laquelle maximise ses performances lorsqu'elle est pleinement occupée. Le CEA a ainsi développé une version GPU de l'algorithme de rétroprojection FDK, version qui a été récemment intégrée à la plateforme CIVA.

Afin de maximiser les performances de l'implémentation, plusieurs caractéristiques des architectures GPU ont été prises en compte.

La localisation des données en mémoire GPU

Deux stratégies sont possibles pour paralléliser la rétroprojection : une parallélisation sur les pixels du détecteur ou sur les voxels de l'objet reconstruit. Dans le premier cas, on boucle sur tous les rayons source-détecteur afin de trouver les voxels interceptés et d'y accumuler l'intensité du pixel. Dans le second cas, on boucle sur l'ensemble des voxels et on le

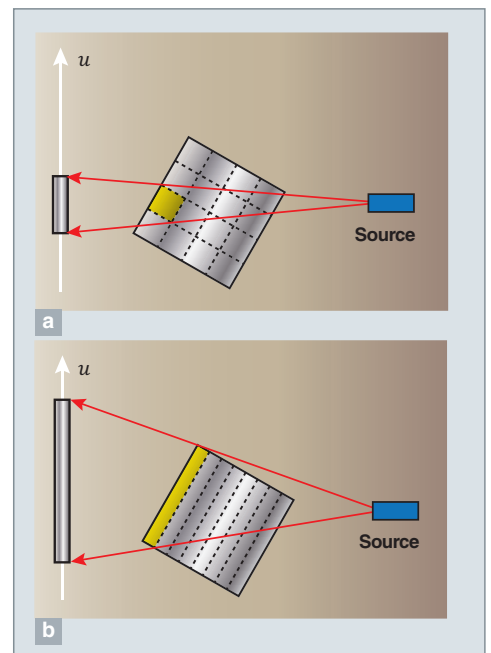


Fig. 87. Impact du choix de segmentation des calculs sur la localisation des données dans la mémoire GPU, extrait de [Okitsu *et al.*, 2008]. (a) Les données qui nécessitent un accès par les threads des blocs sont localisées spatialement, ce qui optimise la parallélisation en limitant les sauts lors des accès mémoire nécessaires. (b) Avec ce découpage par bloc, les données sont beaucoup moins localisées.

projette sur le détecteur pour relever les intensités à accumuler. Afin de favoriser l'utilisation de données proches au sein de la mémoire du GPU, la parallélisation sur les voxels a été choisie. En effet, en prenant soin de grouper les voxels en blocs compact plutôt qu'en structures allongées, est limitée l'étendue de la zone mémoire explorée pour traiter un nombre donné de voxels (fig. 87).

L'utilisation du matériel de texture

Par ailleurs, l'implémentation utilise la mémoire de texture pour stocker les projections. Cela permet de bénéficier d'interpolations bilinéaires encodées au niveau matériel dans les cartes graphiques Nvidia. Ces mémoires sont, par ailleurs, optimisées pour les accès mémoire aléatoires.

Les performances obtenues

Les performances obtenues montrent l'apport de la parallélisation sur une configuration comprenant 180 projections permettant de reconstruire une image 3D de l'objet avec 256 x 256 x 256 voxels.

Les temps obtenus pour différentes configurations sont donnés sur la figure 88. Nous constatons qu'à partir d'un algorithme de reconstruction prenant 76 s sur un processeur Xeon E5, nous obtenons une accélération d'un facteur 80 avec les cartes graphiques récentes (Nvidia Titan). Sur des configurations plus modestes, l'utilisation du *multithreading* offre une alternative intéressante, avec une accélération d'un facteur 4,5 sur 8 *threads*.

En utilisant des configurations de taille plus importantes, est réalisé l'apport des GPUs pour reconstruire des données finement résolues. Le tableau 14 présente les temps nécessaires pour les rétroprojections sur CPU 24 *threads* et sur GPU Titan dans une configuration avec 720 projections 20 482 reconstruites sur 10 243 voxels. La reconstruction

Tableau 14.

Comparaison des performances des implémentations CPU et GPU de l'algorithme FDK		
La reconstruction sur un volume de 10 243 voxels est obtenue à partir de 720 projections d'images de 20 482 pixels. La version CPU utilise 24 <i>threads</i> de calcul, la carte GPU utilisée est une carte Nvidia Titan.		
	GPU	CPU
Lecture des données et prétraitement géométrique	102 s	102 s
Filtrage rampe	185 s	185 s
Rétroprojection	163 s	3 247 s
Écriture image 3D	141 s	172 s

sur carte graphique nécessite quelques minutes au lieu de prendre près d'une heure avec une machine CPU performante (24 *threads*). Il faut observer qu'à ce niveau de rapidité, le temps de rétroprojection devient comparable aux temps nécessaires pour les étapes de lecture/écriture et de prétraitement.

Les perspectives sur la reconstruction tomographique

La méthode FDK présentée ci-dessus appartient à la famille des méthodes analytiques. Les limites de ces méthodes résident dans leur incapacité à reconstruire avec un faible nombre d'images 2D. Pour les applications de CND sur chaîne de production, on cherche à diminuer les temps de contrôle pour permettre l'accélération des cadences. Dans cette perspective, il est intéressant de diminuer le nombre d'images RX nécessaires pour le contrôle d'une pièce donnée, tout en augmentant les résolutions.

D'autres méthodes de reconstruction permettent de faire face à ces nouveaux besoins : les méthodes itératives. Ces méthodes supportent des images plus bruitées et en plus faible nombre, mais, en contrepartie, impliquent une complexité algorithmique importante avec des étapes itératives de projection et rétroprojection, comme présenté dans la figure 89.

Le principe consiste, à partir d'un objet 3D initial, à mettre à jour cet objet de façon à minimiser l'écart entre les projections de cet objet et les projections mesurées (données réelles). Ces étapes de projection et de rétroprojection sont donc les étapes clés pour la durée et l'encombrement mémoire de ces reconstructions itératives. À l'instar de ce qui a été fait sur les algorithmes analytiques, l'accélération sur carte graphique est appelée à jouer un rôle majeur pour l'exploitation de ces nouveaux algorithmes. Cette parallélisation permettra de préserver des temps de reconstruction inférieurs aux temps d'acquisition des images RX. Il sera

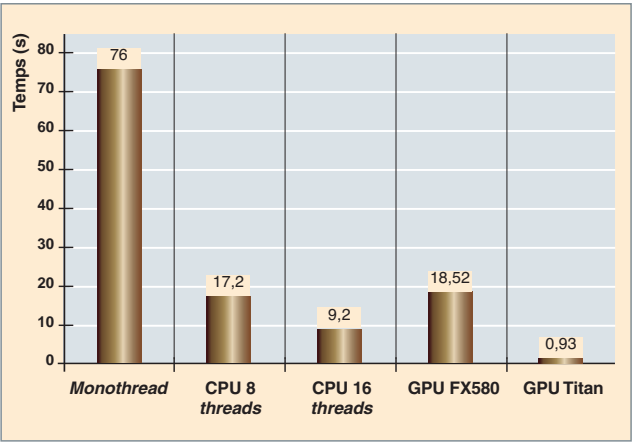


Fig. 88. Temps de calcul obtenu sur une configuration à 180 projections pour une image 3D de l'objet avec 256 x 256 x 256 voxels.

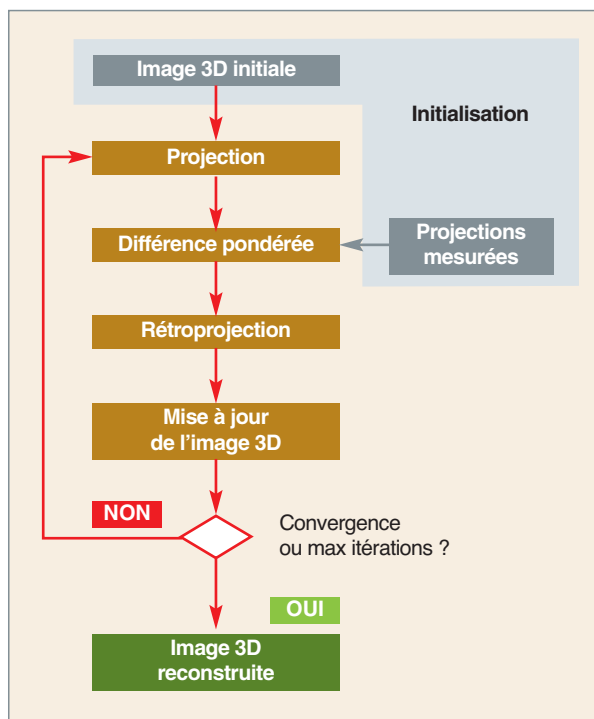


Fig. 89. Schéma des algorithmes de reconstruction tomographiques itératifs.

alors possible de procéder à la construction tomographique de l'objet $n+1$ pendant qu'il sera procédé à la prise d'images RX de l'objet n , ce qui permettra de ne pas impacter la cadence de la chaîne de production.

Conclusion et perspectives

La simulation en contrôle non destructif est utilisée à trois fins principales que sont la conception des méthodes d'inspection et des sondes, la démonstration de performances et l'aide à l'interprétation des données expérimentales. Ces outils de simulation sont déclinés selon les trois grandes techniques utilisées dans le domaine du CND, à savoir les ultrasons, les méthodes électromagnétiques et la radiographie par rayons X ou γ .

De nouveaux besoins émergent, diversifiés et qui dessinent deux lignes de force opposées. D'un côté se profilent des applications exploitant intensivement la simulation via des campagnes massives de calculs. De l'autre, une utilisation de la simulation au plus près de l'acquisition des signaux et visant le temps réel et l'interactivité.

Un exemple emblématique de la première tendance, illustré *supra*, p. 114, concerne les approches dites « POD » (pour *Probability of Detection*) avec la mise en œuvre de la simulation dans des approches probabilistes visant à prendre en

compte la variabilité des paramètres influents du contrôle. Le premier objectif visé est l'estimation de probabilités de détection de défauts critiques.

Relevant de cette même tendance à une exploitation massive de la simulation en aval ou en amont des contrôles on peut évoquer ici la conception et l'optimisation automatisées des dispositifs et des méthodes d'inspection.

À l'opposé, la simulation a un rôle à jouer au cœur même du processus d'acquisition et de traitement des données du contrôle. Ici, le maître mot est l'adaptativité des procédés. Du côté de l'acquisition, la simulation a, par exemple, un rôle à jouer dans le développement de nouvelles solutions robotisées assurant de manière adaptative une couverture et un diagnostic efficient sur l'ensemble des zones critiques. Du côté de l'imagerie et du diagnostic, les algorithmes mis en œuvre doivent pouvoir exploiter en temps réel des modèles d'interaction de plus en plus complets. Cela implique, en particulier, une versatilité des stratégies d'implémentation exploitant au mieux le matériel et les architectures à disposition. Les progrès récents, à la fois sur les modèles directs, les modèles de programmation et les architectures matérielles rendent maintenant envisageables l'exploitation de méthodes inverses. Il s'agit là d'un axe de R&D appelé à monter en puissance dans les dix prochaines années. Cette tendance est illustrée par les exemples donnés *supra*, p. 110 et 116.

En parallèle, l'interactivité de la simulation à laquelle nous commençons aujourd'hui à parvenir sur certains segments, couplée avec les possibilités nouvelles d'instrumentation des capteurs et des opérateurs ouvre de nouvelles perspectives : quantification des incertitudes, prise en compte de l'humain dans la conception et l'évaluation des méthodes, formation des opérateurs.

Enfin, les modèles sont appelés à gagner en précision grâce à l'émergence de solutions multiéchelles couplant un calcul « numérique » (éléments finis, éléments finis de frontière, différences finies...) à un calcul semi-analytique. C'est ainsi, par exemple, le cas en ultrasons où est confié à un modèle rayons la gestion de la propagation de l'onde sur les parcours séparant la sonde de la zone inspectée et aux éléments finis la diffraction de cette onde par le défaut, lorsque cette diffraction fait intervenir des phénomènes non pris en compte par les théories approchées usuelles.

Vincent BERGEAUD et Pierre CALMON
Direction de la recherche technologique

Turbulence et magnétisme dans les plasmas : des tokamaks au soleil

Introduction : certaines caractéristiques physiques communes, des approches numériques analogues

Les *plasmas* sont des gaz totalement ou partiellement ionisés qui représentent plus de 99,9 % de la matière visible dans l'univers. Les plasmas des étoiles telles le soleil, et des machines à fusion par confinement magnétique telles *Iter**, le *tokamak** international en construction à Cadarache, ont la particularité d'être *chauds*, *magnétisés* et *turbulents*. Leur température interne élevée, de plusieurs dizaines (cœur du soleil) à la centaine (cœur des tokamaks) de millions de degrés, et l'existence de champs magnétiques concourent à l'apparition d'instabilités et d'une dynamique riche et non linéaire. En fonction des paramètres physiques, la dynamique de ces plasmas peut être décrite soit par une description cinétique comme dans le cœur chaud et dilué des tokamaks et l'accélération des particules solaires par les éruptions, soit par une approche fluide *via* les équations de la **magnétohydrodynamique (MHD)*** pour la périphérie des tokamaks et pour la dynamique solaire.

Ces milieux, soleil et tokamaks, sont en équilibre thermique et mécanique global, dans le sens où la force d'éclatement liée à la pression du plasma, radiative ou thermique, est compensée par la force de gravitation dans un cas, par la **force de Lorentz*** dans l'autre. Ce sont des systèmes forcés par un flux de chaleur venant des réactions de fusion (et des chauffages additionnels dans les tokamaks) se produisant dans le cœur, et en interaction avec leur environnement externe *via* le **vent solaire*** ou l'interaction plasma-paroi. Le transport de chaleur du cœur chaud vers la périphérie met en jeu la turbulence qui se développe spontanément dans ces plasmas chauds. Cette turbulence, qui naît d'instabilités dues entre autres au gradient de pression, développe des cellules de **convection*** de petite échelle au regard de la taille du système, et provoque un transport de type convectif dans la direction du confinement, du cœur vers la périphérie. Des exemples de cette turbulence, issus de simulations numériques du soleil et des tokamaks, sont illustrés sur la figure 90.

Comprendre comment la turbulence régule le transport de chaleur et de moment cinétique est un des enjeux cruciaux pour appréhender la physique du soleil et des tokamaks.

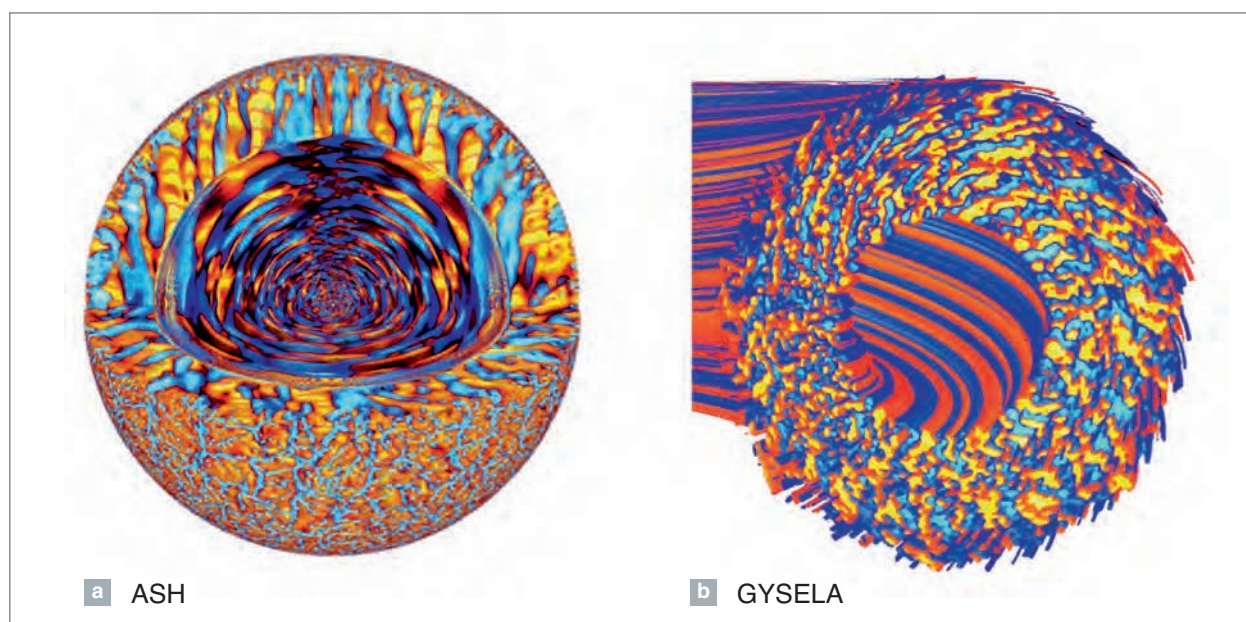


Fig. 90. Cartes instantanées (a) des structures turbulentes dans l'intérieur du soleil (code ASH [1,2]), (b) des cellules de convection du potentiel électrique dans un tokamak (code GYSELA [3,4]).

Deux questions ouvertes sont particulièrement brûlantes : celle de la génération et de la dynamique du champ magnétique dans le soleil, et celle du possible contrôle de la turbulence dans les tokamaks, en vue de réduire les pertes énergétiques et augmenter d'autant les performances fusion (en pratique le rapport entre la puissance dégagée par les réactions de fusion et la puissance injectée pour chauffer le plasma et assurer son équilibre magnétique). Dans les deux cas, les propriétés d'auto-organisation de la turbulence sont supposées jouer un rôle clé. Cette auto-organisation se caractérise par l'interaction non-linéaire des structures turbulentes à petite échelle avec des structures à grande échelle, et en particulier avec des *écoulements macroscopiques*. L'origine de ces derniers peut être multiple, mais ils peuvent entre autres être auto-générés par la turbulence elle-même. Dans ce cas, c'est par un transfert direct d'énergie des petites échelles turbulentes vers les grandes échelles que ces écoulements apparaissent. De par leur nature même, ces écoulements macroscopiques ne produisent aucun transport de chaleur vers l'extérieur ; ils œuvrent de fait en faveur du confinement car ils offrent à la turbulence un réservoir dans lequel elle peut déverser une partie de son énergie. Quelle que soit leur origine, ces écoulements ont en outre la faculté de cisailer les structures turbulentes, réduisant en cela le niveau de transport associé. Cette double propriété – de réservoir et de cisaillement – peut conduire localement à la réduction quasi-totale du transport turbulent. On parle alors de « barrière de transport ». Une telle barrière existe dans le soleil, la tachocline, à la frontière entre la zone interne radiative stable et la zone convective plus externe, turbulente. Elle est soupçonnée de participer de manière décisive à la génération du champ magnétique de l'étoile, et à la dynamique des taches et éruptions solaires

à sa surface. Plusieurs de ces barrières sont également observées dans les tokamaks, dont celle à la frontière entre la région de confinement, aux surfaces magnétiques fermées, et la périphérie où ces surfaces interceptent des éléments de paroi. Cette barrière est à l'origine du mode-H, le régime à confinement amélioré cible sur Iter.

Les codes ASH, GYSELA et JOEKE développés à l'IRFU/SAP et à l'IRFM visent, entre autres, à comprendre et prédire les transports de chaleur, d'énergie et de moment cinétique, en grande partie liés à la turbulence, ainsi que la dynamique de ces barrières de transport. Au-delà de géométries et d'équations différentes, ils reposent sur les mêmes hypothèses, fondamentales pour l'étude de ces processus d'auto-organisation multiéchelles : ils sont globaux, forcés par un flux, et ne supposent aucune séparation d'échelle *a priori* entre les fluctuations turbulentes et l'équilibre macroscopique. Ces caractéristiques requièrent un très grand nombre de points de **maillage*** ainsi que d'itérations temporelles, très au-delà des capacités d'un simple processeur. Elles nécessitent le recours à une parallélisation massive et à des supercalculateurs « **HPC** » (*High Performance Computing*).

L'état de l'art de la physique des tokamaks

Recréer sur terre les conditions de fusion de noyaux légers en vue de la production d'énergie requiert des températures de l'ordre de 150 millions de degrés, environ dix fois supérieures à celle rencontrée au cœur du soleil. À ces températures, le combustible constitué de deutérium et de tritium,

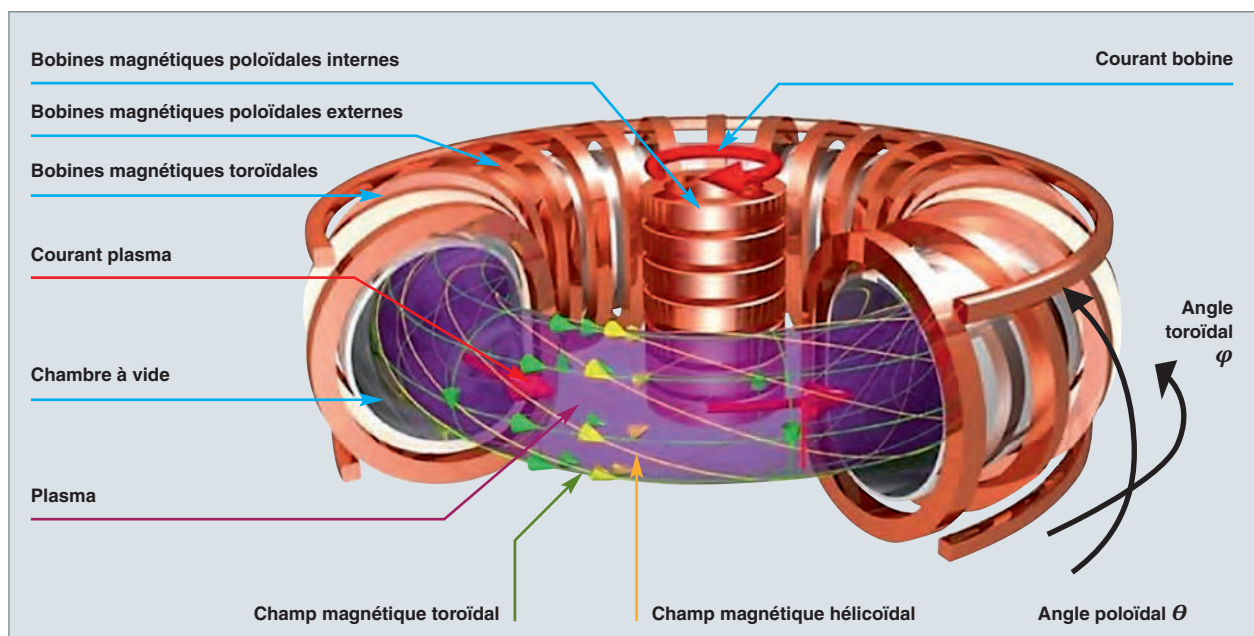


Fig. 91. Schéma d'un tokamak.

deux isotopes de l'hydrogène, est à l'état plasma: les électrons, découplés des noyaux, interagissent avec ceux-ci principalement au travers des champs électrique et magnétique moyens.

Les tokamaks sont les machines actuellement les plus avancées sur la voie de la fusion par confinement magnétique. Elles visent à confiner le plasma dans un tore au moyen de champs magnétiques puissants (quelques Teslas, soit environ 105 fois le champ terrestre). Les lignes de champ (tangentes au champ magnétique, par définition) qui en résultent sont des hélices qui s'enroulent autour de surfaces magnétiques en forme de tores emboîtés. Le taux d'enroulement de ces lignes (nombre de tours toroïdaux – *i.e.* selon l'axe de symétrie du tore – pour un tour poloïdal – *i.e.* à petit rayon constant) varie typiquement de un, au centre, à quelques unités, en périphérie du plasma (voir fig. 91). En première approximation, les grandeurs fluides (telles la densité, le courant ou la température) sont constantes sur les surfaces magnétiques. Il est alors possible de définir leur profil le long de la direction radiale, transverse aux surfaces magnétiques, qui est aussi la direction du confinement.

Le confinement des particules et de la chaleur n'est cependant pas idéal dans les tokamaks. Pour qu'un réacteur à fusion soit économiquement viable, il faudra qu'il soit proche de l'ignition, c'est-à-dire que la puissance d'auto-chauffage fournie au plasma par les particules *alpha* (noyaux d'hélium) issues des réactions de fusion suffise à compenser les pertes énergétiques. Ces dernières résultent principalement d'instabilités MHD macroscopiques et de la *micro-turbulence* qui se développent spontanément dans ces machines, et qui brisent partiellement le confinement assuré par la topologie

magnétique. En support aux expériences, de gros efforts de simulations dites « premiers principes » (*i.e.* basées sur les lois fondamentales de la physique, avec un minimum de paramètres ad-hoc) ont été mis en œuvre pour comprendre et si possible contrôler ces instabilités et la turbulence plasma. Deux codes développés au CEA avec l'aide de collaborations nationales et internationales permettent, en particulier, de traiter ces questions. Ils nécessitent le recours à des calculateurs haute performance (HPC): le code gyrocinétique GYSELA (GYrokinetic SEmi-LAgrangian), à cinq dimensions dans l'espace des phases, et le code JOEKE qui résout les équations de la MHD à trois dimensions. Quelques éléments relatifs à leurs spécificités numériques et performances HPC sont détaillés dans les encadrés.

Comme discuté en introduction, les *écoulements cisailés*, qui correspondent à une rotation (poloïdale ou toroïdale) différentielle du plasma, sont efficaces pour contrôler la turbulence et réduire le niveau du transport associé. Le mécanisme repose principalement sur le cisaillement des cellules de convection turbulentes. Pour un cisaillement suffisant, le transport turbulent de chaleur peut diminuer au point de devenir inférieur à celui résultant des collisions entre particules. Dans ce cas, une barrière de transport se développe localement, caractérisée par un fort gradient radial du profil de pression. Cette configuration est bénéfique au confinement, car elle augmente l'énergie stockée dans le plasma. De telles barrières ont d'ores et déjà été observées expérimentalement. La figure 92a en donne une illustration. Il est typiquement possible de classer ces écoulements cisailés en trois catégories, selon leur fréquence: les écoulements stationnaires moyens gouvernés par l'équilibre des forces et les collisions, les écoulements zonaux à faible fréquence

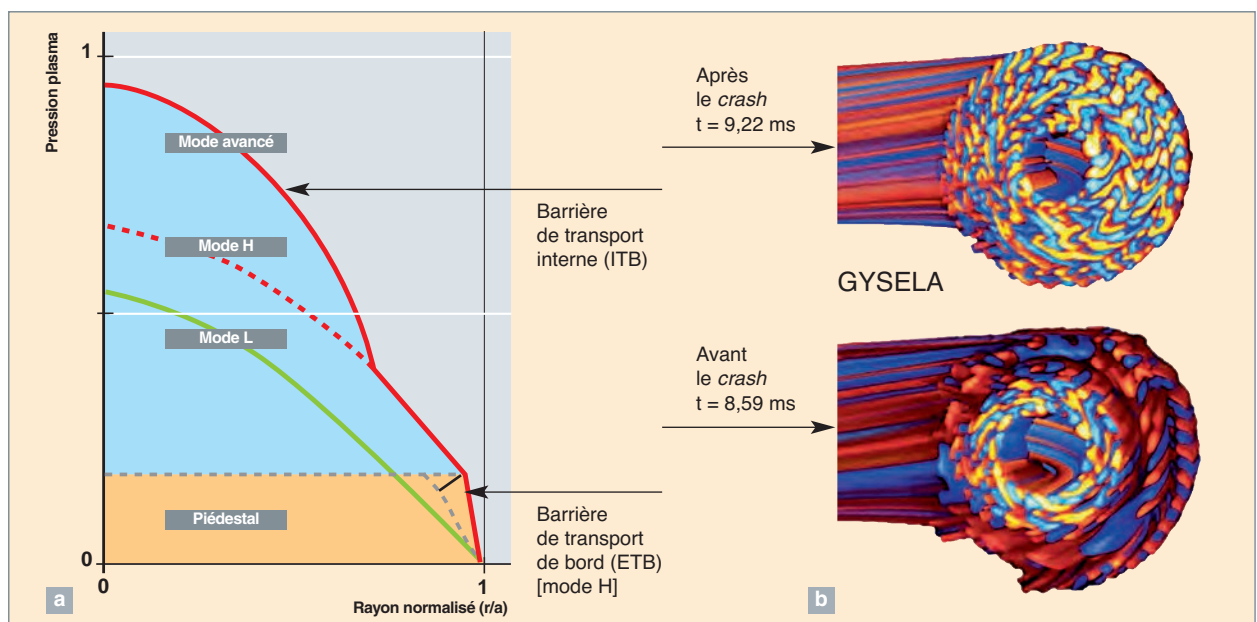


Fig. 92. (a) Sch ma du profil de pression, avec ou sans barri re de transport. (b) Coupes instantan es des fluctuations non axisym triques du potentiel  lectrique en pr sence d'une source de vorticit  [5,6].

produits par la turbulence elle-même, et les modes géodésiques acoustiques (GAMs) à la fréquence acoustique. Des avancées importantes ont récemment été réalisées avec les codes GYSELA et JOEKE autour de la thématique des barrières de transport et de leur dynamique. Elles sont détaillées dans ce qui suit.

Le rôle de chacun des trois types d'écoulements cisailés a été étudié avec GYSELA. En premier lieu, une source de vortécité permet de polariser localement le plasma, et de reproduire ainsi l'effet de certains types de chauffage dans les tokamaks. Le champ électrique radial qui en résulte donne alors lieu à un écoulement poloïdal moyen cisailé. Un cisaillement suffisant se révèle capable de quasiment supprimer la turbulence et de créer une barrière de transport, signature d'un confinement amélioré. Cette barrière de transport présente une dynamique riche bien que la source de polarisation soit constante en temps : elle est détruite de façon quasi périodique (voir fig. 92b). Ces relaxations violentes, qui se traduisent par de forts flux de chaleur sortants, résultent du développement d'une instabilité secondaire, due ici à l'anisotropie en température imposée par la source de vortécité. Les écoulements zonaux produits non linéairement par cette nouvelle instabilité s'opposent alors au champ électrique stationnaire dû à la source, détruisant ainsi transitoirement le cisaillement responsable de la barrière de transport. Ces relaxations quasi périodiques de la barrière de transport rappellent certaines observations expérimentales, auxquelles ces simulations proposent une possible explication.

L'impact des GAMs sur la turbulence a également été étudié. Ces écoulements sont naturellement amortis linéairement par les collisions et *via* les interactions résonantes avec les particules, appelées « résonances Landau ». Ils peuvent recevoir de l'énergie de la turbulence, mais cette excitation non linéaire est difficilement contrôlable. À l'inverse, on peut espérer contrôler leur excitation linéaire par des particules rapides, comme celles issues de certains mécanismes de chauffage du plasma. Il est alors question d'EGAMs, « E » pour *Energetic*. Pour tester la possibilité de contrôler la turbulence *via* ces EGAMs, une source de chauffage non-thermique a été implémentée dans GYSELA, pour modéliser cette population suprathermique. Conformément aux observations expérimentales, elle se révèle efficace pour exciter des EGAMs, *via* une instabilité de type faisceau-plasma. Avec les paramètres utilisés pour ces simulations, il est apparu que les EGAMs excitaient la turbulence, au lieu de l'amortir. Ce résultat inattendu a été conforté par des travaux analytiques. Ce scénario continuera à être étudié, car il est potentiellement dangereux dans un plasma en combustion caractérisé par une riche population de particules suprathermiques (entre autres les particules *alpha* produites par réactions nucléaires).

Les écoulements zonaux provoqués par la turbulence montrent un haut degré d'organisation : ils s'agencent en structures régulières, localisées spatialement et quasi stationnaires, appelées « *staircases* ». Les forts cisaillements locaux qui en résultent sont associés à des micro-barrières

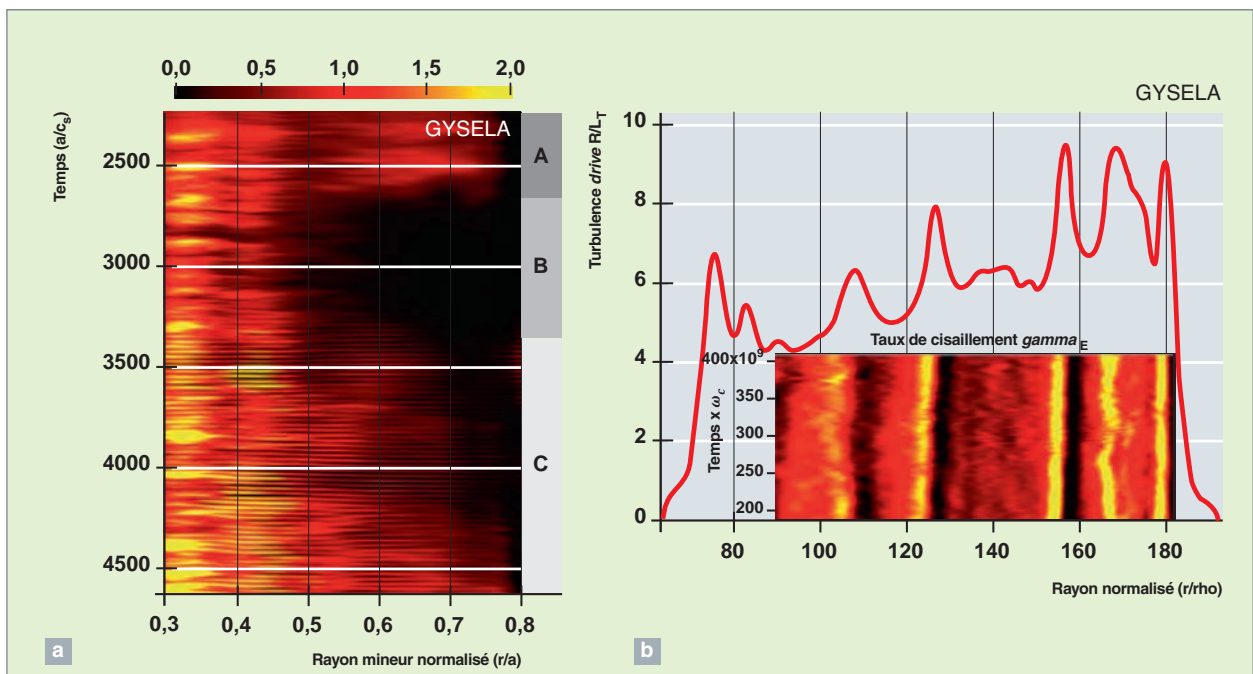


Fig. 93. a) Diffusivité turbulente sans particules énergétiques EP (A), avec EP et barrière de transport (B), et avec EGAMs (C) → la barrière est détruite [7]. b) Profil du gradient de température normalisé. Les pics correspondent à des micro-barrières, associées à de forts écoulements cisailés (insert 2D) [8].

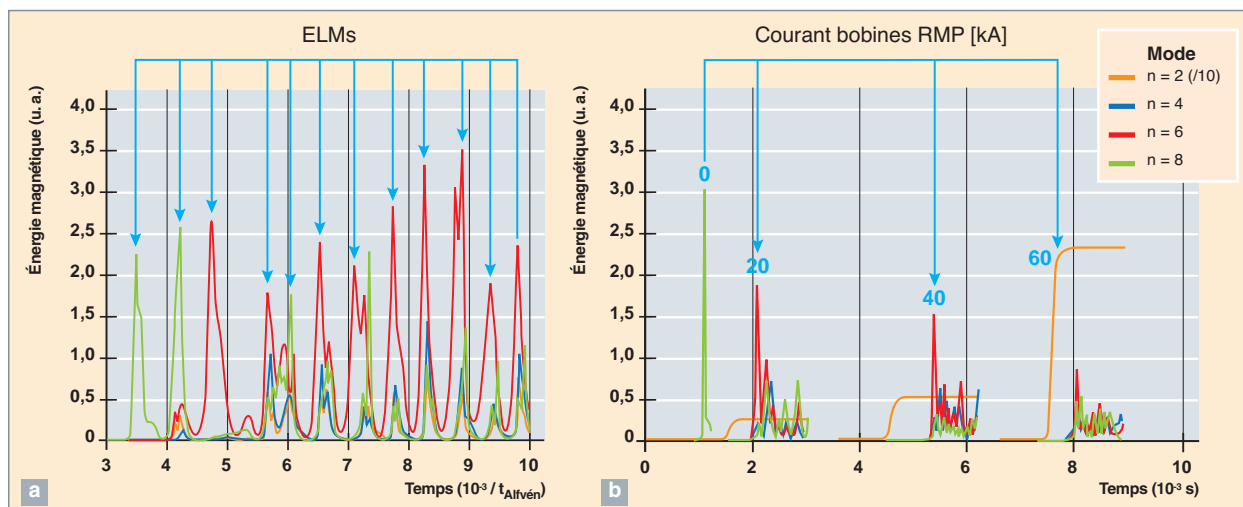


Fig. 94. a) Énergie contenue dans différents modes (repérés par leur nombre d'onde n) lors d'un cycle d'ELMs reproduit avec JOEREK (d'après [9]). b) Confirmation de l'atténuation d'un ELM pour différentes valeurs du courant alimentant les bobines RMPs (d'après [10]).

de transport, poreuses aux flux turbulents les plus intenses qui les frappent (fig. 93b). Ces staircases sont des manifestations de l'auto-organisation non linéaire de la turbulence où des micro-barrières séparent des régions traversées par des avalanches turbulentes. Ils sont robustes en ceci qu'ils semblent ne dépendre que faiblement des paramètres plasma ; par contre, ils disparaissent loin du seuil d'instabilité. Sur la base de ces résultats de simulations, des signatures expérimentales de ces staircases ont été recherchées et trouvées dans des chocs du tokamak Tore Supra de l'IRFM. Ils se manifestent au travers de *minima* locaux de la longueur de corrélation radiale de la turbulence, telle que mesurée par un diagnostic pionnier de réflectométrie à balayage ultra-rapide en mode X. Il est intéressant de noter que ces staircases sont également observés dans d'autres systèmes physiques, comme par exemple l'atmosphère de la planète Jupiter avec ses bandes azimutales si caractéristiques.

La dernière avancée concerne le *mode H*, qui fait partie des scénarios de référence pour ITER. Découvert au début des années 80 sur le tokamak allemand ASDEX, il est caractérisé par une barrière de transport localisée à la périphérie du plasma, dont l'origine et les caractéristiques restent encore mal comprises. En particulier, cette barrière relaxe de façon quasi périodique, à la fréquence de quelques dizaines à quelques centaines de Hertz. Les plus gros de ces événements appelés instabilités de bord ou ELMs (*Edge Localized Modes*) sont supposés résulter d'instabilités MHD associées au profil de courant (mode « Kink ») et au gradient de pression. Les énormes flux de chaleur qui en résultent font peser une menace importante sur la longévité du divertor d'ITER, cet élément de première paroi en charge d'évacuer la puissance et les particules du plasma. JOEREK est parvenu pour la pre-

mière fois à reproduire un cycle d'ELMs (fig. 94a). Le rôle stabilisant de la vitesse de rotation diamagnétique du plasma a été identifié comme un paramètre clé dans le processus de reconstruction du profil de pression après la relaxation brutale. Des expériences conduites sur plusieurs tokamaks sont parvenues à atténuer ces ELMs, voire à les supprimer, au moyen de Perturbations Magnétiques Résonantes (RMP). Ces résultats ont été reproduits avec JOEREK (fig. 94b), où la suppression totale des ELMs n'est observée qu'à très fort courant dans les bobines générant les RMPs. Les simulations suggèrent que le mécanisme de stabilisation est dû à l'excitation non linéaire de modes par les RMPs, modes concurrents de ceux des ELMs, qui produisent de multiples petites relaxations en lieu et place des gros ELMs. Cette confirmation numérique de l'effet bénéfique des RMPs sur les ELMs est rassurante en vue de leur utilisation prévue dans ITER.

La machine électromagnétique solaire

Le soleil est une sphère de gaz très chaud (plasma), auto-gravitante, en rotation et magnétisée. Sa surface convective génère une activité magnétique continue intense et fascinante par sa diversité : taches solaires sombres (concentrations de champ magnétique principalement vertical inhibant la convection localement), faculae brillantes (zones de champ magnétique diffus entourant les taches solaires), boucles coronales (arches magnétiques émergées à grande échelle pouvant atteindre la centaine de milliers de kilomètres), trous coronaux (structures allongées et sombres, sites des lignes de champ magnétique ouvertes vers les milieux interplanétaires)... Un aspect remarquable de ce magnétisme

est qu'il est cyclique, avec une apparition modulée des taches sur une période d'environ onze ans. Ces **taches solaires*** forment un diagramme dit « papillon » qui montre une succession de bandes se propageant au cours du temps vers l'équateur et alternant leurs polarités (orientation du champ magnétique; voir fig. 95).

La conséquence directe d'une telle observation est que l'axe magnétique solaire doit alterner de sens tous les onze ans formant le cycle des vingt-deux ans (+/-/+) caractéristique de l'activité solaire. Accompagnant ces régions actives, des boucles de champ magnétique apparaissent dans la haute atmosphère solaire (**couronne***), se développent et se reconnectent sans cesse, produisant ainsi des éruptions solaires brillantes (voir fig. 95). Parfois, ces éruptions sont beaucoup plus violentes et éjectent du plasma dans le milieu interplanétaire: ce sont des éjections de masse coronale. La régularité de l'émergence des taches solaires contraste avec l'imprévisibilité de la dynamique de surface du soleil. Pourtant, les éruptions et les taches sont intimement liées car lors du **cycle magnétique de onze ans***, plus on s'approche du pic d'activité solaire (quatre à six ans après le précédent renversement des pôles), plus la fréquence et l'intensité des éruptions sont grandes. Ces phénomènes

magnétiques apparaissent dans le soleil car la matière qui le compose (gaz chaud ionisé) est conductrice. La présence de particules chargées (électrons, ions) dans le plasma solaire permet l'induction d'un champ magnétique par les mouvements convectifs et les écoulements à grande échelle contre la dissipation ohmique (effet Joule) : c'est le processus dit « de **dynamo*** fluide ».

En effet, cette dynamo permettant de convertir l'énergie cinétique en énergie magnétique est à l'origine du magnétisme solaire. Elle est hautement turbulente et met en jeu une grande gamme d'échelles spatiales-temporelles. Afin de pouvoir comprendre la diversité des formes que revêt le magnétisme solaire, il est nécessaire de développer un modèle théorique et numérique du soleil et de distinguer les événements réguliers de ceux qui ne le sont pas. La théorie actuelle suppose que la dynamo solaire est séparée en dynamos petites et grandes échelles. L'activité irrégulière et le champ magnétique désordonné (éruptions, points brillants...) sont le résultat de la turbulence présente dans l'enveloppe convective. Le cycle de vingt-deux ans, l'alternance régulière des polarités des taches solaires dite « loi de Hale », l'amplification de larges structures magnétiques parallèles à l'équateur sont reliés à la dynamo grande

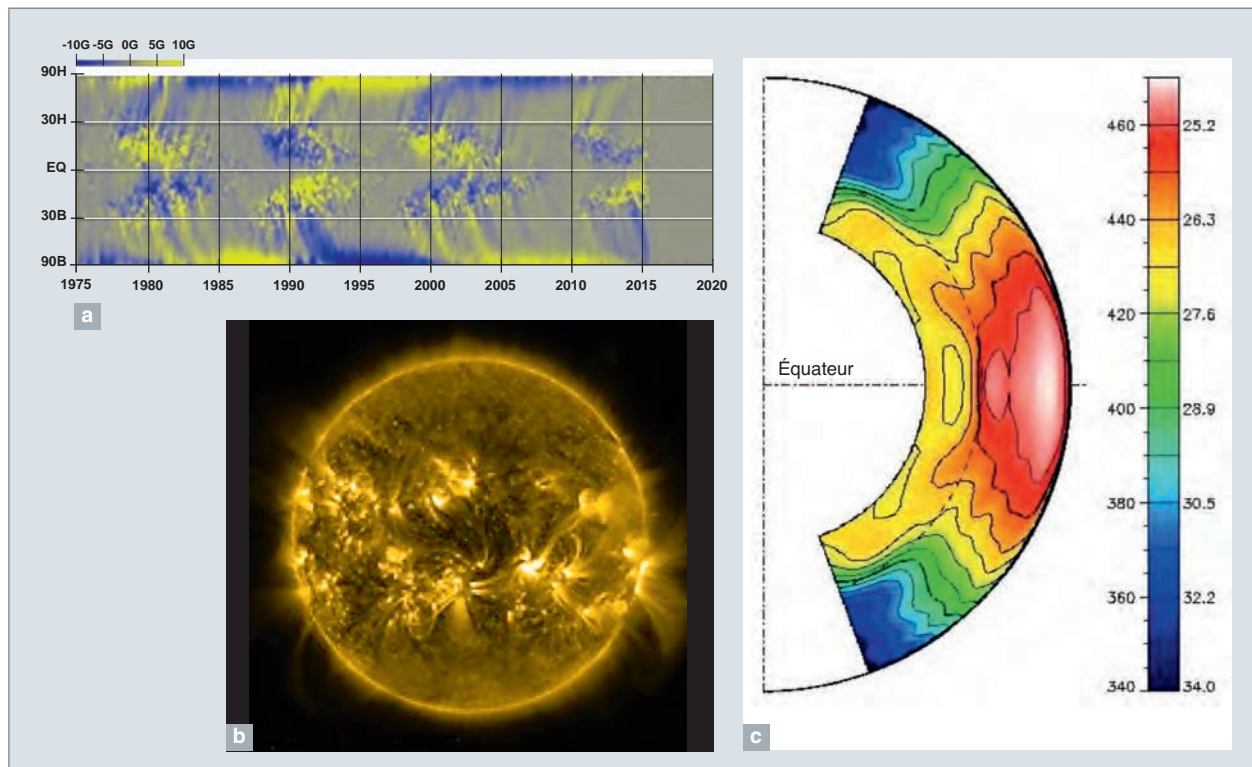


Fig. 95. Observations du soleil ; a) Diagramme papillon (temps-latitude) d'émergence des taches solaires au cours des cycles 21 à 24 (actuel). Les polarités « + » sont représentées en jaune, les polarités « - » en bleu. Les trainées obliques de $\pm 30^\circ$ à ± 90 de latitude marquent le renversement de polarité aux pôles au milieu du cycle. b) Vue en UV (à 171 Å) de la couronne solaire à 1 million de degrés où l'on remarque les régions actives (brillantes) et les trous coronaires (sombres). c) Profil de rotation interne du soleil, différentiel dans la zone convective (équateur rapide [rouge] - pôles lents [bleu]), et uniforme dans l'intérieur radiatif (sous la ligne en tirets noir située à 71 % du rayon solaire); voir [2].

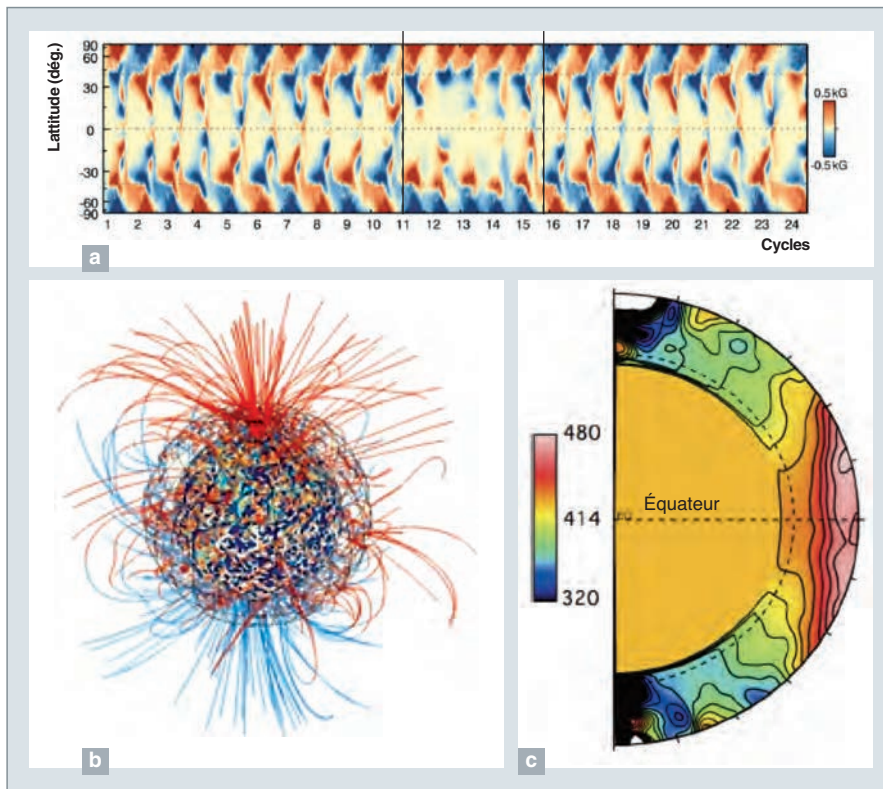


Fig. 96. Simulations du soleil, de sa dynamo, de son profil de rotation interne et des cycles magnétiques. a) Diagramme papillon théorique montrant l'évolution du champ magnétique longitudinal au cours du temps en fonction de la latitude dans le cas d'une dynamo 3D cyclique [11]. On note entre les cycles 11 et 16 l'existence d'un minimum d'activité (similaire au minimum de Maunder du XVII^e siècle). b) Rendu tri-dimensionnel des lignes de champ magnétique (rouge/bleu polarités « + »/« - ») dans une simulation de la dynamo solaire [2]. c) Profil de la rotation interne dans la simulation [15] qui reproduit fidèlement le profil déduit par les observations (voir fig. 95, équateur rapide [rouge] - pôles lents [bleu]).

échelle qui est organisée vraisemblablement à la base de la zone convective, à l'interface avec l'intérieur radiatif.

Il est donc nécessaire d'expliquer à la fois la présence d'une organisation grande échelle (rotation différentielle de l'enveloppe convective, cycle de onze ans, écoulement méridiens ordonnés) et d'une dynamique irrégulière (turbulence de surface, éruptions). Afin de relever ce défi, un modèle du soleil en 3D allant de son centre ($r = 0$) jusqu'à sa surface (entre 97 et 99 % du rayon solaire selon les modèles), ainsi que plus récemment son équivalent pour simuler la couronne et le vent solaire (de 1,05 à 30 rayons solaires), ont été développés au CEA.

Ainsi, des simulations numériques intensives de la magnétohydrodynamique (MHD) du soleil, de son vent, et par extension des étoiles, sont maintenant conduites quotidiennement. Parmi les codes utilisés, un en particulier a été intégralement développé au sein du service d'astrophysique en collaboration avec nos collègues de l'Université du Colorado. C'est le code ASH (*Anelastic Spherical Harmonics*,

voir [1], [12] et encadré *infra*, p. 127). Ce code parallèle MPI en géométrie sphérique pseudo-spectral résout les équations de la MHD anélastique. Il permet d'aborder plusieurs questions clés sur le soleil qui nécessitent une approche numérique poussée. Ces questions sont les suivantes :

- Quels mécanismes sont à l'origine du magnétisme solaire et du cycle de onze ans ?
- Comment le profil interne du soleil et sa tachocline s'établissent et évoluent ?
- Y a-t-il un champ magnétique au sein du soleil distinct de la dynamo en zone convective ? Est-il d'origine fossile ou lié à une dynamo radiative ?

En parallèle l'étude de l'atmosphère étendue du soleil et de son vent de particules repose sur le code parallèle MPI PLUTO de l'université de Turin [13] auquel nous contribuons activement. Grâce à cette expertise sur le magnétisme interne du soleil, des modèles réalistes de la dynamique de surface solaire, exploitant ainsi les résultats des simulations ASH, peuvent être menés à bien. Ces simulations permettent d'aborder les questions suivantes :

- Comment les structures magnétiques torsadées internes émergent-elles ?
- Quels mécanismes sont à l'origine des éruptions et de leur émission en rayons X ?
- Quelle est l'origine du vent solaire et de ses composantes lentes et rapides ?

Chaque question implique une physique des plasmas riche et des problèmes numériquement raides (grande variation de l'amplitude des paramètres et des quantités physiques, grand intervalle d'échelles spatiales et/ou temporelles, évolution temporelle longue, etc.). Nous présentons nos apports à ces grandes questions scientifiques :

- La rotation différentielle conique :

Le profil de rotation interne du soleil est connu avec une grande précision grâce aux techniques d'inversion développées en sismologie solaire. Dans son enveloppe convective

ce profil de rotation est contre-intuitif (voir fig. 95). En effet, la théorie des fluides en rotation prévoit que la dynamique d'un tel système est habituellement invariante le long de l'axe de rotation, c'est-à-dire quasi 2D et cylindrique. Or, la rotation de l'enveloppe convective du soleil est de forme conique, avec un équateur rapide (tournant en vingt-cinq jours), des pôles lents (trente-quatre jours), et une rotation invariante selon la direction radiale à moyenne latitude. Nos simulations numériques 3D globales de convection turbulente en rotation avec le code ASH ont pu mettre en évidence le rôle essentiel de la turbulence (tenseurs de Reynolds) pour accélérer l'équateur et celui clé du transport de chaleur anisotrope en latitude pour incliner les iso-contours de la vitesse angulaire Ω et ainsi reproduire le profil solaire (fig. 96). Ce profil non cylindrique de rotation interne du soleil a imposé de revoir le modèle standard de dynamo solaire développé dans les années 70 (dynamo dite α - Ω) qui supposait l'existence d'un tel profil cylindrique.

- Dynamique de la tachocline et rotation solide du cœur radiatif :

Le profil de rotation du soleil change radicalement à la base de la zone convective et devient uniforme (rotation solide), et ce sur quasiment tout l'intérieur radiatif (en-dessous de 0,2 rayons solaires il est possible qu'il s'accélère). Ce changement de régime de rotation s'opère dans une région appelée « tachocline » sur moins de 5 % du rayon solaire. Nous savons que cette zone de transition, où un fort champ de vitesse cisailé est présent, joue un rôle essentiel dans l'organisation du champ magnétique à grande échelle ainsi que pour la formation de structures magnétiques toroïdales à

l'origine des taches solaires (voir *infra*). Elle joue également un rôle clé dans le transport de moment cinétique en couplant l'intérieur solaire à la perte de masse et de moment cinétique exercée par le vent solaire à sa surface. On n'en comprend cependant pas la finesse ($< 20\,000$ km), à l'âge du soleil elle devrait être environ six fois plus épaisse. Trois candidats sont susceptibles de la contenir sur une si faible épaisseur : un champ magnétique interne primordial, le champ magnétique cyclique de onze ans, ou les ondes de gravité. Nous avons étudié avec des simulations numériques HPC deux de ces possibilités (voir [14,15] et la fig. 97) et travaillons sur la troisième. En couplant l'évolution d'un champ magnétique fossile avec la dynamique de l'enveloppe convective, il apparaît que le champ magnétique se connecte et transporte trop rapidement le moment cinétique, établissant un régime de rotation non-uniforme contrairement aux observations (voir les figures 95 et 97). Dans une autre série de simulations, une étude détaillée de l'excitation et de la propagation des ondes internes de gravité a démontré qu'elles pouvaient contenir une énergie allant jusqu'à 0,1 % de celle rayonnée par le soleil, et transportaient du moment cinétique de manière non locale. Il semble donc que les ondes soient un meilleur candidat, mais il reste à comprendre comment un champ magnétique interne pourrait filtrer ou non celles-ci, ainsi que le rôle d'un champ cyclique dans cette problématique de confinement.

- La dynamo solaire, le cycle de onze ans et les grands minima :

Le profil de rotation conique et la présence d'une tachocline à la base de l'enveloppe convective ont imposé à la commu-

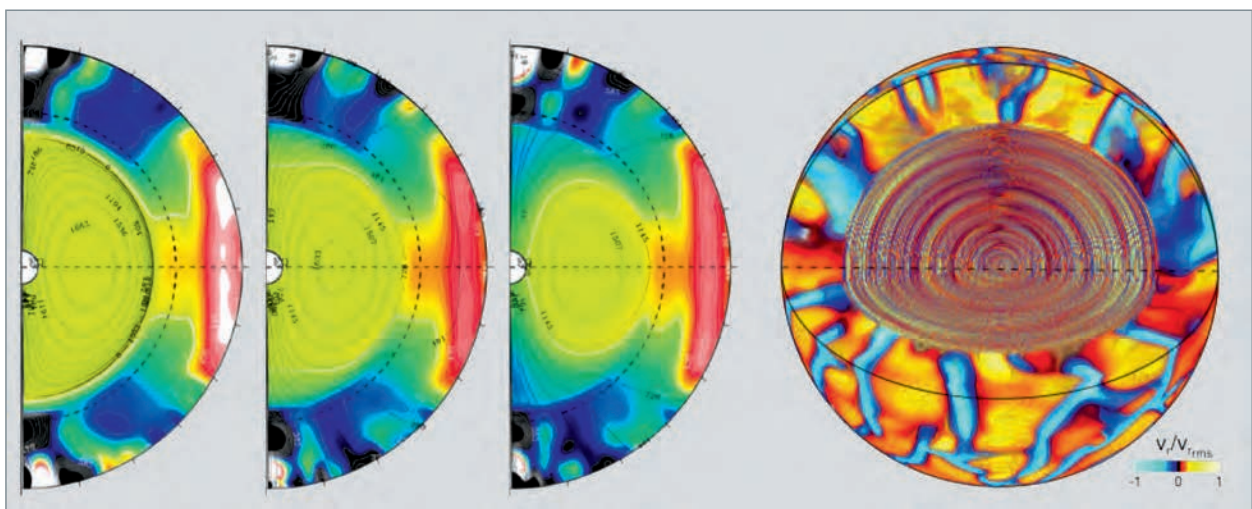


Fig. 97. Simulations numériques de la magnétohydrodynamique de l'intérieur solaire [14] et de la génération d'ondes internes de gravité par la turbulence convective de surface [15]. Dans les trois panneaux de gauche on observe l'évolution d'un hypothétique champ fossile dans l'intérieur solaire, menant à une décélération de la zone radiative (au niveau des pôles) en désaccord avec les observations du profil de rotation interne du soleil. Ces résultats remettent en cause l'existence d'un tel champ magnétique enfoui. À droite, les écoulements convectifs ascendants (en rouge) et descendants (en bleu) excitent des ondes des gravité dans l'intérieur du soleil (motifs d'onde dans la région interne) dont on cherche à observer la trace par des méthodes dites d'« **héliosismologie** ».

nauté de reconsidérer le fonctionnement de la dynamo solaire. Le scénario qui est préféré est celui impliquant à la fois les taches de surface et la circulation méridienne qui permet de transporter le flux magnétique de l'équateur vers les pôles et ensuite en profondeur vers la tachocline (comme un carrousel). Ce processus fonctionne bien dans des modèles 2D de dynamo dite « cinétique » (*i.e.* sans rétroaction non linéaire des forces magnétiques sur l'écoulement). Cependant, confronté à des calculs 3D convectifs, on s'aperçoit que ce flot est très irrégulier et que d'autres mécanismes comme le pompage radial du champ magnétique par la convection ou la diffusion magnétique turbulente sont plus efficaces pour transporter le flux magnétique. Les simulations 3D remettent ainsi en cause le scénario 2D et ont permis de mettre en évidence l'importance de la rétroaction magnétique sur le profil de rotation permettant la génération d'un champ magnétique dynamo [1,2]. En outre, ces simulations 3D *ab initio* produisent un cycle régulier et des inversions de polarité systématiques comme observées (voir [11] et les figures 95 et 96). Par un traitement des échelles irrésolues (sous maille) adéquat, nous avons pu favoriser un régime dynamo avec un faible niveau de viscosité par rapport à la diffusivité magnétique (faible nombre de Prandtl magnétique [Pm]). Dans ce régime, l'apparition de modulation long terme de l'activité magnétique est fréquente, et nous avons pu, en effet, capturer pour la première fois ce régime avec une simulation 3D (voir fig. 96, entre les cycles 11 et 16). Il reste à mieux comprendre ce qui contrôle la période de la dynamo et de ses modulations par une étude systématique de l'espace de paramètres, ce qui est encore aujourd'hui très coûteux en moyens de calculs.

- La dynamo en zone radiative et la configuration relaxée du champ interne :

Il a récemment été proposé qu'une dynamo n'impliquant pas de mouvements convectifs soit possible dans les zones radiatives des étoiles. Nous avons fait une étude théorique et numérique avec le code ASH sur ce concept de dynamo en zone radiative, mécanisme reposant essentiellement sur l'instabilité non axisymétrique (dite « de Tayler ») du champ magnétique toroïdal. Il a été démontré qu'un seul scénario de génération de champ magnétique par cette instabilité permettrait de réaliser une dynamo : une corrélation optimale entre le flot et le champ magnétique non axisymétrique fluctuants est nécessaire. Cependant, cette condition semble être difficile à réaliser car lorsque les effets non linéaires sont pris en compte, la génération du champ rétroagit sur l'écoulement et l'amortit au point de tuer la source de la dynamo. Il est alors possible que seules des situations transitoires de bouffées d'énergie magnétique persistent.

Parallèlement, les topologies magnétiques sous-jacentes au développement de ces instabilités doivent être dans une configuration mixte poloïdale-toroïdale afin d'être stable sur des échelles temps comparables à la vie de l'étoile (séculaires). De telles configurations magnétiques et leur relaxa-

tion sont très similaires à celles trouvées dans les tokamaks. Des outils communs, prenant en compte le rôle joué par l'hélicité magnétique, peuvent être conjointement développés entre les deux communautés.

- L'émergence de flux magnétique et éruptions* et émission X associées :

Bien que les taches solaires aient été observées depuis des siècles, ce n'est que depuis la fin du XIX^e siècle que leur nature magnétique a été mise en évidence. D'où viennent-elles ? Sont-elles essentielles à la dynamo solaire ou juste une manifestation de surface ? Voilà quelques-unes des questions qu'il faut résoudre. Grâce aux simulations numériques, il est maintenant possible d'y répondre. Dans des travaux récents de Nelson *et al.* [16], il a été démontré pour la première fois que des rubans magnétiques créés par processus dynamo à la base de la zone convective (et non introduit artificiellement dans la simulation comme dans d'autres études) pouvaient devenir instables et créer des boucles magnétiques (voir fig. 98). Ces boucles s'élèvent dans la zone convective turbulente jusqu'à émerger à la surface. Une fois à la surface ces structures forment les régions actives au-dessus desquelles se développent des boucles chargées de plasma. Celles-ci peuvent à leur tour être instables, produisant des éruptions énergétiques dans la gamme d'énergie des rayons X [17]. Dans le cadre de nos responsabilités dans l'instrument STIX à bord du satellite de l'ESA Solar Orbiter (lancement prévu en octobre 2018) nous avons développé des simulations numériques de l'émission X de telles boucles (voir fig. 98). Là encore, une analogie avec les tokamaks sur les mécanismes d'avalanche, les processus thermique et non thermique de rayonnement et les instabilités (de type *kink*) peut être faite.

- Le vent solaire* et ses variabilités au cours du cycle :

Le soleil a une haute atmosphère, sa couronne est très dynamique. Celle-ci s'étend sur des milliards de kilomètres, étant prolongée par un vent de particules continu : le vent solaire. Ce vent impacte directement la terre, sa magnétosphère et la forme du cocon magnétique enveloppant le soleil : l'héliosphère. Comprendre comment le vent solaire varie au cours des cycles magnétiques est essentiel car il permet de mieux comprendre comment le soleil contrôle l'environnement spatial autour de lui. Une simulation du vent solaire lors d'un maximum solaire récent après avoir assimilé dans la simulation un magnétogramme solaire est représentée en figure 98. Nous remarquons l'ouverture de certaines lignes de champ d'où émerge la composante rapide du vent (voir trous coronaux en figure 95) et la structure complexe de la surface d'Alfvén (voir la figure 98), cette zone délimitant l'endroit à partir duquel le vent s'échappe de l'emprise magnétique du soleil, évacuant ainsi le moment cinétique [18].

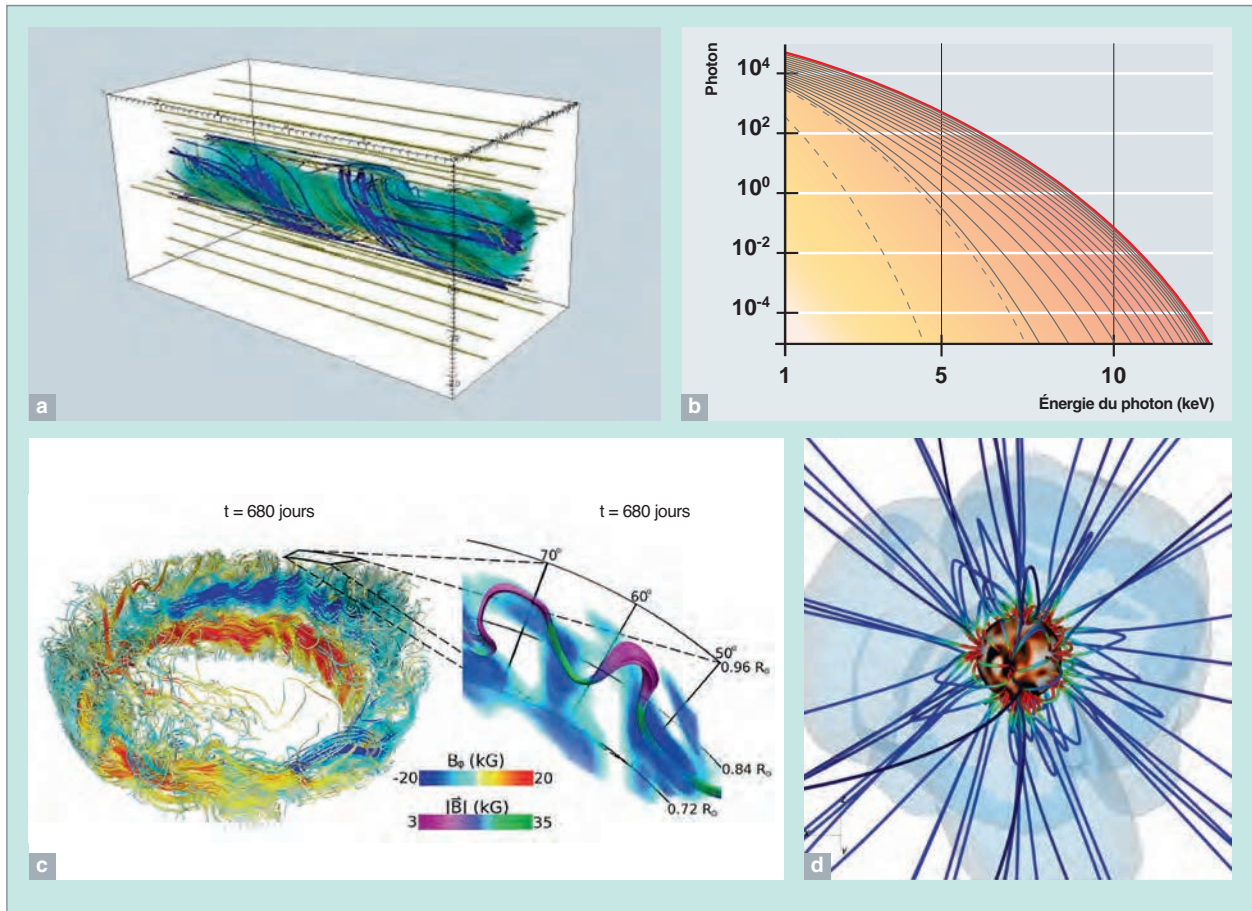


Fig. 98. Simulations de l'émergence de structures magnétiques, de leur éruption et de l'émissivité X associée, et du vent solaire global.

a) Simulations 3D d'une boucle coronale et (b) de l'émissivité entre 1 et 25 keV qu'elle produit après déstabilisation [17].

c) Ruban magnétique toroïdal dans une simulation 3D de dynamo stellaire menant à la génération de boucles magnétiques flottantes à l'origine (vraisemblablement) des taches solaires [16]. d) Structure magnétique du vent solaire en 1999, au maximum d'activité (les lignes colorées représentent les lignes de champ magnétique [18]). La surface translucide représente la transition vers un vent dit « super-Alfvénique » (i.e. au-delà de cette zone, le vent n'est plus en co-rotation avec l'étoile, ce qui implique une perte de moment cinétique nette pour l'étoile).

Les travaux communs sur l'analyse complexe des plasmas simulés

Que cela soit dans les étoiles ou les tokamaks nous avons vu dans les sections précédentes que des processus non linéaires, turbulents étaient présents et dominaient l'évolution dynamique de ces systèmes physiques et leur stabilité. Les questions fondamentales abordées précédemment, nous l'avons vu, mettent en jeu l'interaction de petites échelles turbulentes avec des structures de grande échelle (typiquement de la taille du système lui-même). Les interactions complexes et couplées entre la turbulence, les cisaillements grandes échelles, le magnétisme et la thermodynamique résultent en une auto-organisation du plasma et une redistribution non triviale du moment cinétique et de la chaleur. À la fois pour le soleil et les tokamaks, le mode opératoire des échanges d'énergie entre ces échelles détermine les caractéristiques globales du système. De plus, l'apparition de structures (avalanches, vortex convectif, staircases,

écoulements de grande échelle, barrières de transport) dans ces plasmas *via* ces mécanismes multiéchelles et multiphysiques sont communes aux deux systèmes (même si les paramètres plasma diffèrent), et nécessitent des simulations numériques HPC à la pointe, ainsi que des analyses multidimensionnelles et spectrales pour éclaircir le rôle joué par chacun de ces effets dans la dynamique [6,19].

Au CEA, plusieurs codes (voir encadrés pages suivantes) ont donc été développés dans ce sens et une méthode d'analyse spectrale versatile a été conçue dans le cadre de cette collaboration interdisciplinaire pour être appliquée aux géométries du soleil (sphérique) et des tokamaks (torique). Elle permet de quantifier le rôle de chacune des échelles du système dans les simulations numériques décrites dans les deux parties précédentes :

Dans le soleil, nous cherchons à comprendre comment le champ magnétique dipolaire de grande échelle est saturé

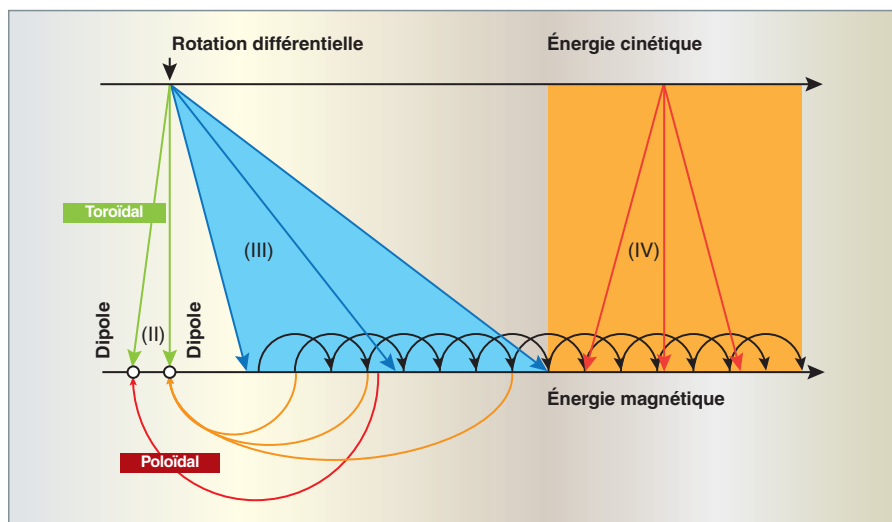


Fig. 99. Scénarios pour la saturation du magnétisme de grande échelle dans le soleil. La cascade d'énergie magnétique vers les petites échelles est assistée soit par la rotation différentielle (RD) du soleil (III), soit par l'ensemble des grandes échelles des fluctuations de vitesse (IV). Pour les modes di- et quadripolaires du champ magnétique, la composante toroïdale est gouvernée par la RD, tandis que la composante poloïdale sature principalement du fait de l'interaction non locale de modes non axisymétriques [19].

dans la zone de convection et comment le cycle de 11 ans et ses modulations s'établissent. Grâce à cette méthode spectrale, il est apparu que cette saturation était due à une faible gamme de petites échelles les plus énergétiques, qui transfèrent leur énergie non localement vers le dipôle. Une analyse plus fine permet, en outre, de quantifier ces transferts à la fois pour l'énergie cinétique et pour l'hélicité magnétique. Les principaux résultats de cette étude sur la dynamo solaire sont synthétisés sur la figure 99, où les transferts d'énergie dominants sont représentés. Ces résultats servent en outre de guide pour développer des modèles de turbulence MHD reproduisant mieux le magnétisme solaire de grande échelle, en indiquant quelles échelles de la turbulence doivent être traitées de façon plus réaliste.

Dans les plasmas de tokamaks, nous cherchons à comprendre comment la turbulence s'organise sous forme d'avalanches qui extraient trop efficacement la chaleur du cœur du plasma. Grâce à cette méthode spectrale, développée dans le cadre de l'approche gyrocinétique (dans le code GYSELA), un mécanisme original à l'origine des avalanches, lié au couplage des modes voisins par le biais de la courbure du champ magnétique, a été mis en lumière. Cette analyse ouvre la voie à une meilleure compréhension des processus susceptibles de bloquer ce transport par avalanches, et à augmenter notre capacité à produire et à contrôler des barrières de transport, et *in fine* améliorer notre contrôle des performances des futurs réacteurs à fusion nucléaire.

En résumé, le développement conjoint de cette méthode d'analyse innovante a permis d'obtenir des avancées significatives sur le transport de chaleur, d'énergie, de moment cinétique et d'hélicité à la fois dans le domaine de la physique solaire et dans la compréhension de la turbulence au sein des tokamaks.

Perspectives : développements propres et communs

En physique solaire, il devient possible de développer un modèle global intégré du soleil et de son magnétisme reposant sur des simulations numériques hautes performances MHD traitant à la fois l'intérieur du soleil à haut plasma *béta* et de son atmosphère étendue à faible *béta*. Cela nécessite des codes numériques pouvant traiter différents régimes selon des critères physiques déduits de la théorie des plasmas. Aujourd'hui, de tels codes hybrides sont en cours de développement et nos simulations avec les codes ASH et PLUTO constituent les briques nécessaires à la mise en place d'un code encore plus général traitant le soleil depuis son intérieur jusqu'à sa couronne et son vent. Que cela soit pour le soleil ou pour la turbulence des tokamaks être capable de décrire le système dans sa globalité tout en capturant la physique et les instabilités à petites échelles est un énorme défi physique et numérique. L'avènement de machines exaflopiques d'ici 2023 devrait nous aider à atteindre ce but : une description de la physique locale turbulente tout en considérant les contraintes globales (géométriques et physiques) et les interactions multiéchelles.

La comparaison entre la physique des plasmas solaire et de tokamak est très riche et fructueuse, elle nous a déjà permis de progresser dans notre description de la physique non linéaire mêlant magnétisme, instabilités, turbulence et cisaillement grandes échelles. En particulier, l'étude des interactions multiéchelles et multiphysiques avec le développement de diagnostics communs et de modèles *ab initio* communs reposant sur une approche statistique de la turbulence des plasmas magnétisés s'est révélée très utile pour progresser dans la caractérisation des mécanismes en jeu dans ces systèmes. Cette approche transverse sera poursuivie

dans les années à venir et repose sur la formation de jeunes chercheurs et le renforcement de cette approche mixte mêlant physique non linéaires, simulations HPC et caractérisation des plasmas solaires et de tokamaks.

Le code GYSELA (GYrokinetic SEmi-LAgrangian)

Le code GYSELA [3,4] modélise dans le cadre cinétique les transports turbulent et collisionnel (dit « néoclassique ») dans le cœur des plasmas de tokamaks.

L'évolution en temps de chaque fonction de distribution $F_s(r, \theta, \varphi, v_{\parallel}, \mu)$ est gouvernée par l'équation gyrocinétique, limite basse fréquence de l'équation de Vlasov, où le moment magnétique μ est un invariant du mouvement : c'est un paramètre. Le code fait évoluer jusqu'à 3 fonctions de distribution F_s , dont les espèces « S » sont de charge e_s et de masse m_s arbitraires (ions D-T, impuretés, électrons), dans un espace des phases à 5 dimensions : 3 dimensions d'espace (r, θ, φ) et 2 de vitesses, parallèle $v_{G\parallel}$ et perpendiculaire v_{\perp} aux lignes de champ (μ est proportionnel à v_{\perp}^2/B , B étant l'intensité du champ magnétique). Ces équations sont couplées de manière auto-consistante à l'équation de quasi-neutralité 3D (limite électrostatique et grande longueur d'onde des équations de Maxwell), qui relie le potentiel électrique ϕ aux densités de charges par une équation de type « Poisson ». Les fluctuations du champ magnétique sont négligées. La réponse électronique est soit adiabatique (les fluctuations de densité électronique sont alors proportionnelles à ϕ), soit cinétique (résolution de la fonction de distribution électronique, option en cours de développement). Ce dernier cas permet d'accéder à la turbulence électronique et au transport de matière.

Les équations (simplifiées) sont données ci-dessous, dans le cas d'une seule espèce ionique avec électrons adiabatiques :

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} + (\mathbf{v}_{Es} + \mathbf{v}_{\nabla B, s} + \mathbf{v}_{G\parallel}) \cdot \nabla F_s + \frac{dv_{G\parallel}}{dt} \frac{\partial F_s}{\partial v_{G\parallel}} = S + C_s(F_s)$$

$$\frac{en_0}{T_e} + (\phi - \langle \phi \rangle) - \nabla \cdot \left(\frac{m_s n_0}{e_s B^2} \nabla \perp \phi \right) = \int d^3 v J_0 \cdot (F_s - F_{0, s})$$

où les vitesses de dérive transverses et l'accélération parallèle sont données par :

$$\mathbf{v}_{Es} \approx \frac{B \times \nabla (J_0 \cdot \phi)}{B^2}$$

$$\mathbf{v}_{\nabla B, s} \approx \frac{m_s v_{G\parallel}^2 + \mu B}{e_s B} \frac{B \times \nabla B}{B^2} + \frac{m_s v_{G\parallel}^2}{e_s B} \frac{\nabla \times B}{B}$$

$$\frac{dv_{G\parallel}}{dt} \approx - \frac{\mu}{m_s} \nabla_{\parallel} B - \frac{e_s}{m_s} \nabla_{\parallel} (J_0 \cdot \phi) + v_{G\parallel} \mathbf{v}_{Es} \cdot \frac{\nabla B}{B}$$

J_0 est l'opérateur de gyro-moyenne, n_0 représente la densité électronique et $F_{0, s}$ la fonction de distribution d'équilibre de l'espèce s . $\langle \phi \rangle$ désigne la moyenne du potentiel sur une surface magnétique. Enfin, S et $C_s(F_s)$ représentent respectivement le terme source et l'opérateur de collisions linéarisé.

Les spécificités du code GYSELA sont d'être global (simulation de l'ensemble du tore), de ne pas faire d'hypothèse de séparation d'échelle entre équilibre et fluctuations (code dit « full F », faisant évoluer l'ensemble de la fonction de distribution) et de forcer la turbulence *via* des sources de particules, de moment et de chaleur. GYSELA est aussi le seul code gyrocinétique 5D au monde basé sur une méthode semi-Lagrangienne (collaboration avec les universités de Nancy et de Strasbourg) [20]. Cette méthode tire avantage des approches Lagrangienne (codes *Particles-In-Cell* ou PIC) et Eulérienne. L'enjeu est de décrire de manière précise l'espace des phases, en particulier les régions où la densité est faible, tout en améliorant la stabilité numérique. Le maillage dans l'espace des phases est fixe (Eulérien), et l'équation gyrocinétique est intégrée le long des trajectoires (Lagrangien) en remontant le temps (*backward* semi-Lagrangien). En utilisant l'invariance de la fonction de distribution le long de ces trajectoires, la valeur à l'instant $t + \Delta t$ est obtenue en interpolant par splines cubiques le pied de la caractéristique à l'instant t . Le schéma en temps traite séparément les différents termes d'advection dans l'espace des phases (splitting de Strang) par une méthode de type prédicteur-correcteur.

L'équation de quasi-neutralité qui est résolue, linéaire dans les deux directions périodiques du tore θ et φ , est quant à elle projetée dans l'espace de Fourier en (θ, φ) et résolue par différences finies d'ordre 2 dans la direction radiale.

La parallélisation du code est basée sur une approche hybride MPI/OpenMP [21]. Chaque espèce est traitée sur un ensemble de processus MPI (communicateur MPI_species). Sur chacun de ces $N_{species}$ communicateurs MPI et pour chaque valeur de μ , la résolution de Vlasov est distribuée à un sous-ensemble de processus MPI (communicateur MPI_mu). Une décomposition de domaine 2D (plan (r, θ) ou (φ, v_{\parallel}) selon les endroits du code) est ensuite appliquée à l'intérieur de chacun de ces MPI_mu communicateurs. Pour finir, le paradigme OpenMP est ajouté dans chaque processus MPI, principalement sur les boucles en φ . La parallélisation du code GYSELA est optimisée. Il a tourné sur une large gamme de plateformes Tier-0 et Tier-1. GYSELA a ainsi atteint en 2012-2013 une effi-

capacité relative de 61 % sur 65 000 cœurs sur des machines Bullx (HELIOS [Japon], et aussi CURIE [France]) lors d'un benchmark de type « *strong scaling* ». Un benchmark de type « *weak scaling* » a aussi été réalisé sur l'intégralité de la machine JUQUEEN (Allemagne) montrant une efficacité de 91 % sur 458 752 cœurs.

Les simulations numériques actuelles tournent typiquement pendant plusieurs semaines sur 2k à 16k cœurs. Avec une consommation moyenne de 50 millions d'heures monoprocesseur en 2014 et 2015, le code massivement parallèle GYSELA utilise de manière intensive les machines pétaflopiques. Nous savons d'ores et déjà que la prise en compte des électrons cinétiques nécessitera les ressources exaflopiques de demain: en effet, il faut dans ce cas résoudre les échelles de temps et d'espace électroniques, qui sont inférieures à celles des ions deutérium dans un rapport $(m_i/m_e)^{1/2} \approx 60$. Dans cette perspective, les efforts sur la scalabilité mémoire et sur la réduction de l'empreinte mémoire se poursuivent. Des travaux sont aussi en cours (collaboration JAEA-Japon) pour utiliser des plateformes à base d'accélérateurs (GPU, Xéon Phi). Le passage à l'échelle (extension à plusieurs millions de cœurs) est un enjeu majeur pour les années à venir. Cela constitue l'objet d'une collaboration étroite entre le CEA/IRFM et la Maison de la Simulation (Saclay).

Le code JOREK

Le code JOREK [22,23] résout les équations 3D non linéaires de la MHD dans les plasmas de tokamaks. Ces équations standards, sont celles de la mécanique des fluides (équations de conservation de la matière, de la charge et du moment, ainsi que de transport de la chaleur) couplées à la loi d'Ohm généralisée. Les principaux paramètres de contrôle sont la viscosité, ainsi que les diffusivités turbulentes parallèle et transverse. Les ressources numériques sont encore insuffisantes pour accéder dans une même simulation à des valeurs réalistes de ces trois paramètres.

JOREK utilise une méthode aux éléments finis d'ordre élevé dans le plan poloidal couplée à une projection dans l'espace de Fourier dans la direction toroïdale. L'utilisation d'éléments de type cubique Bézier permet d'assurer la continuité C1, tout en respectant la contrainte forte d'alignement des structures le long des lignes de champ magnétique [24]. Le schéma d'évolution en temps est implicite d'ordre 2 (Crank-Nicholson ou Gears (BDF)). Cette approche a l'avantage de couvrir avec précision le spectre large d'échelles de temps qui sont en jeu. Elle présente cependant l'inconvénient d'être très coûteuse en temps de calcul et en stockage mémoire. En effet, ce schéma nécessite l'inversion à chaque pas de temps d'un système matriciel non seulement extrêmement volumineux (plusieurs millions d'inconnues) mais aussi très mal conditionné. Ce mauvais conditionnement est en partie lié au caractère fortement anisotrope du transport, dû à la présence du champ magnétique. Le système matriciel est résolu à partir d'une méthode itérative GMRES. L'une des difficultés réside dans le choix d'un préconditionneur efficace. Le préconditionneur actuel, de type Block-Jacobi, est basé sur les harmoniques toroïdaux en ne tenant pas compte de leurs couplages. Il a l'inconvénient d'être gourmand en mémoire, et de perdre en efficacité dans la phase non-linéaire où les couplages entre harmoniques sont importants. Un meilleur préconditionneur basé sur un *splitting* d'opérateurs couplé à une reformulation des équations (permettant d'approcher la Jacobienne par une succession d'opérateurs simples et découplés) est en cours d'étude (collaboration INRIA Strasbourg).

La parallélisation du code repose sur une approche hybride MPI/OpenMP. La construction de la matrice d'éléments finis est parallélisée en répartissant les éléments sur l'ensemble des nœuds de calcul, conduisant à une très grande matrice creuse distribuée A. Les matrices de préconditionnement (sous-matrices de la matrice A) sont inversées en utilisant la bibliothèque de matrice creuse PASTIX [25] (collaboration INRIA Bordeaux). L'essentiel de l'efficacité de la parallélisation du code est donc étroitement liée à l'efficacité de cette bibliothèque massivement parallèle (parallélisation MPI + *threads* POSIX). Les tests de « *strong scaling* » montrent une efficacité du code JOREK de 80 % sur 512 cœurs et de 62,5 % sur 1 024 cœurs. Des améliorations de la parallélisation sont toujours en cours. Les simulations numériques tournent typiquement plusieurs jours sur 512 à 1 024 cœurs en fonction de la mémoire nécessaire. Des stratégies visant à réduire l'empreinte mémoire sont en cours pour accéder à des résolutions supérieures. Le code consomme actuellement 10 à 20 millions d'heures monoprocesseur annuelles sur les supercalculateurs parallèles de type Tier-1 et Tier-0. Il est estimé que ces besoins augmenteront d'un facteur 5 d'ici deux ans.

Le code ASH (Anelastic Spherical Harmonic)

Le code ASH résout les équations de la MHD anélastique dans une sphère en géométrie sphérique (r, θ, φ) autour d'un état de référence thermodynamique à symétrie sphérique (désigné par les quantités avec une barre) déduit d'un modèle stellaire [12] et [1] :

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{v}) = 0 \text{ et } \nabla \cdot \mathbf{B} = 0,$$

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + 2\bar{\Omega}_o \times \mathbf{v} \right) = -\nabla P + \rho \mathbf{g} + \frac{1}{4\mu} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} - \nabla \cdot \mathcal{D} - [\nabla \bar{P} - \bar{\rho} \mathbf{g}]$$

$$\bar{\rho} \bar{T} \frac{\partial S}{\partial t} + \bar{\rho} \bar{T} \mathbf{v} \cdot \nabla (\bar{S} + S) = \nabla \cdot [\kappa_r \bar{\rho} c_p \nabla (\bar{T} + T) + \kappa_r \bar{\rho} \nabla (\bar{S} + S) + \frac{4\pi\eta}{c^2} \mathbf{j}^2 + 2\bar{\rho} \mathbf{v} [e_{ij} e_{ij} - 1/3 (\nabla \cdot \mathbf{v})^2] + \bar{\rho} \varepsilon,$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) - \nabla \times (\eta \nabla \times \mathbf{B})$$

avec ρ , T , S et P respectivement, les fluctuations de densité, température, d'entropie et de pression, $\mathbf{v} = (v_r, v_\theta, v_\phi)$ le champ de vitesse local dans le repère tournant à la vitesse angulaire constante $\bar{\Omega}_o$, \mathbf{g} l'accélération gravitationnelle, $\mathbf{B} = (B_r, B_\theta, B_\phi)$ le champ magnétique, $\mathbf{j} = c/4\pi (\nabla \times \mathbf{B})$ la densité de courant électrique, c_p la chaleur spécifique à pression constante, κ_r , ν , κ , η des diffusivités, e_{ij} le tenseur des déformations, \mathcal{D} le tenseur des contraintes visqueuses et $\bar{\rho} \varepsilon$ un chauffage volumétrique pouvant représenter une production d'énergie par réactions nucléaires.

ASH utilise une décomposition en **harmoniques sphériques*** $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ basées sur une **transformée de Fourier rapide*** (FFT) en longitude et les **polynômes de Legendre*** $P_{l,m}(\theta)$ en colatitude. Dans la direction radiale le choix de **polynômes de Tchebychev*** $T_n(r)$ ou d'un schéma de différences finies sur grille non-uniforme d'ordre 4 ou supérieur est possible. Les équations sont linéarisées pour les variables thermodynamiques et totalement non linéaires pour le champ de vitesse et le champ magnétique. Pour les termes non-linéaires, l'approche dite « pseudo-spectrale » a été adoptée qui consiste à

calculer ces termes dans l'espace physique et à revenir dans l'espace spectral afin d'éviter de coûteuses intégrales de convolution à trois dimensions. Le traitement temporel repose sur un schéma explicite du deuxième ordre Adams-Bashford pour les termes non linéaires, la force de Coriolis et de Lorenz et semi-implicite Crank-Nicolson d'ordre 2 pour les termes linéaires, le gradient de pression et la gravité. Une approche de type **Large Eddy Simulation*** (LES) est adoptée avec un choix de traitement sous-maille allant de simples diffusivités effectives augmentées à des traitements plus avancés type Smagorinsky dynamique [16], *Slope-Limited-Diffusion* (SLD) [11] ou échelles dépendantes [26]. Un large choix de conditions aux limites hydrodynamiques et magnétiques est possible. ASH a participé à un benchmark international et démontre de très bonnes performances [27].

Ce code est particulièrement bien adapté pour traiter les écoulements MHD stratifiés à l'intérieur d'une sphère de gaz auto-gravitante en rotation et a démontré une scalabilité efficace jusqu'à plus de 100 000 cœurs. Parmi les récents développements d'optimisation que nous avons fait il y a :

- Le traitement de la singularité en $r = 0$ par régularisation des variables primaires et filtrage près du centre pour optimiser la contrainte CFL [15] ;
- l'optimisation des transformées directes et inverses par l'utilisation d'un buffer unique qui réduit d'un facteur 10 le nombre de transformées dans le code ;
- en différences finies radiales l'utilisation d'un solveur diagonal optimal pour la matrice implicite et un meilleur conditionnement et dans le cas le cas Tchebychev une réorganisation de la matrice implicite creuse $3Nr \times 3Nr$ en une version diagonale par bloc mieux conditionnée.
- l'implémentation d'un diagnostic spectral en harmoniques sphériques $Y_{l,m}$ traitant l'équation d'énergie cinétique, magnétique et toutes les hélicités et permettant l'étude des interactions triadiques sur la sphère pour les flots turbulents magnétisés [19].

Allan-Sacha BRUN, Virginie GRANDGIRARD
et Antoine STRUGAREK

Direction de la recherche fondamentale

► Références

- [1] A.-S. BRUN, M. S. MIESCH and J. TOOMRE, "Global-Scale Turbulent Convection and Magnetic Dynamo Action in the Solar Envelope", *The Astrophysical Journal*, 614, pp. 1073-1098 (Code Maison ASH), 2004.
- [2] A.-S. BRUN, M. K. BROWNING, M. DIKPATI, H. HOTTA and A. STRUGAREK, "Recent Advances on Solar Global Magnetism and Variability", *Space Science Reviews*, 196, pp. 101-136, 2015.
- [3] V. GRANDGIRARD, M. BRUNETTI, P. BERTRAND, N. BESSE, X. GARBET, P. GHENDRIH, G. MANFREDI, Y. SARAZIN, O. SAUTER, E. SONNENDRÜCKER, J. VACLAVIK and L. VILLARD, "A drift-kinetic Semi-Lagrangian 4D code for ion turbulence simulation", *Journal of Computational Physics*, vol. 217, pp.395-423, 2006.
- [4] V. GRANDGIRARD, J. ABITEBOUL, J. BIGOT, T. CARTIER-MICHAUD, N. CROUSEILLES, G. DIF-PRADALIER, CH. EHRLACHER, D. ESTEVE, X. GARBET, PH. GHENDRIH, G. LATU, M. MEHRENBARGER, C. NORSCINI, CH. PASSERON, F. ROZAR, Y. SARAZIN, E. SONNENDRÜCKER, A. STRUGAREK and D. ZARZOSO, "A 5D gyrokinetic full-f global semi-Lagrangian code for flux-driven ion turbulence simulations", *Computer Physics Communications*, DOI: 10.1016/j.cpc.2016.05.007, 2016.
- [5] Y. SARAZIN, V. GRANDGIRARD et A. STRUGAREK, « La Fusion bientôt sous Contrôle », *La Recherche – Supercalculateurs*, 469, 2012.
- [6] A. STRUGAREK, Y. SARAZIN, D. ZARZOSO, J. ABITEBOUL, A.-S. BRUN, T. CARTIER-MICHAUD, G. DIF-PRADALIER, X. GARBET, PH. GHENDRIH, V. GRANDGIRARD, G. LATU, C. PASSERON and O. THOMINE, "Unraveling Quasiperiodic Relaxations of Transport Barriers with Gyrokinetic Simulations of Tokamak Plasmas", *Physical Review Letters*, 111, 145001, 2013.
- [7] D. ZARZOSO, Y. SARAZIN, X. GARBET, R. DUMONT, A. STRUGAREK, J. ABITEBOUL, T. CARTIER-MICHAUD, G. DIF-PRADALIER, PH. GHENDRIH, V. GRANDGIRARD, G. LATU, C. PASSERON and O. THOMINE, "Impact of Energetic-Particle-Driven Geodesic Acoustic Modes on Turbulence", *Physical Review Letters*, 110, 125002, 2013.
- [8] G. DIF-PRADALIER, P. H. DIAMOND, V. GRANDGIRARD, Y. SARAZIN, J. ABITEBOUL, X. GARBET, PH. GHENDRIH, A. STRUGAREK, S. KU and C.S. CHANG, "On the validity of the local diffusive paradigm in turbulent plasma transport", *Physical Review*, E 82, 025401(R), 2010.
- [9] F. ORAIN, M. BÉCOULET, G. T. A. HUIJSMANS, G. DIF-PRADALIER, M. HOELZL, J. MORALES, X. GARBET, E. NARDON, S. PAMELA, C. PASSERON, G. LATU, A. FIL and P. CAHYNA, "Resistive Reduced MHD Modeling of Multi-Edge-Localized-Mode Cycles in Tokamak X-Point Plasmas", *Physical Review Letters*, 114, 035001, 2015.
- [10] M. BÉCOULET, F. ORAIN, G.T.A. HUIJSMANS, S. PAMELA, P. CAHYNA, M. HOELZL, X. GARBET, E. FRANCK, E. SONNENDRÜCKER, G. DIF-PRADALIER, C. PASSERON, G. LATU, J. MORALES, E. NARDON, A. FIL, B. NKONGA, A. RATNANI and V. GRANDGIRARD, "Mechanism of Edge Localized Mode Mitigation by Resonant Magnetic Perturbations", *Physical Review Letters*, 113, 115001, 2014.
- [11] K. AUGUSTSON, A.-S. BRUN, M. MIESCH and J. TOOMRE, "Grand Minima and Equatorward Propagation in a Cycling Stellar Convective Dynamo", *The Astrophysical Journal*, 809, 149, 2015.
- [12] T.L. CLUNE, J.R. ELLIOTT, G.A. GLATZMAIER, M. S. MIESCH and J. TOOMRE, "Computational aspects of a code to study rotating turbulent convection in spherical shells", *Parallel Computing*, 25, pp. 361-380 (Code Maison ASH), 1999.
- [13] A. MIGNONE, "A simple and accurate Riemann solver for isothermal MHD", *Journal of Computational Physics*, 225, pp. 1427-1441 (Code public PLUTO), 2007.
- [14] A. STRUGAREK, A.-S. BRUN and J.-P. ZAHN, "Magnetic confinement of the solar tachocline: II. Coupling to a convection zone", *Astronomy and Astrophysics*, 532, A34, 2011.
- [15] L. ALVAN, A.-S. BRUN and S. MATHIS, "Theoretical seismology in 3D: nonlinear simulations of internal gravity waves in solar-like stars", *Astronomy and Astrophysics*, 565, A42, 2014.
- [16] N. J. NELSON, B. P. BROWN, A.-S. BRUN, M. S. MIESCH and J. TOOMRE, "Magnetic Wreaths and Cycles in Convective Dynamos", *The Astrophysical Journal*, 762, 73, 2013.
- [17] R. F. PINTO, N. VILMER and A.-S. BRUN, "Soft X-ray emission in kink-unstable coronal loops", *Astronomy & Astrophysics*, 576, A37, 2015.
- [18] V. RÉVILLE, C. FOLSOM, A. STRUGAREK and A.-S. BRUN, "Age Dependence of Wind Properties for Solar Type Stars: A 3D Study", *ApJ*, sous presse, 2016.
- [19] A. STRUGAREK, A.-S. BRUN, S. MATHIS and Y. SARAZIN, "Magnetic Energy Cascade in Spherical Geometry. I. The Stellar Convective Dynamo Case", *The Astrophysical Journal*, 764, 189, 2013.
- [20] E. SONNENDRÜCKER, J. ROCHE, P. BERTRAND and A. GHIZZO, "The Semi-Lagrangian Method for the Numerical Resolution of the Vlasov Equation", *Journal of Computational Physics*, vol. 149, pp. 201-220, 1999.
- [21] G. LATU, N. CROUSEILLES, V. GRANDGIRARD, E. SONNENDRÜCKER, "Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface", *Lecture Notes in Computer Science*, Springer, vol. 4757, pp. 356-364, 2007.
- [22] G. HUYSMANS and O. CZARNY, "MHD stability in X-point geometry: simulation of ELMs", *Nuclear Fusion*, vol. 47, pp. 659-666, 2007.
- [23] J. Haverkort, H.J. de Blank, G.T.A. Huysmans, J. Pratt and B. Koren, "Implementation of the full viscoresistive magnetohydrodynamic equations in a nonlinear finite element code", *Journal of Computational Physics*, vol. 316, pp. 281-302, 2016.
- [24] O. CZARNY and G. HUYSMANS, "Bézier surfaces and finite elements for MHD simulations", *Journal of Computational Physics*, vol. 227, pp. 7423-7445, 2008.
- [25] P. HÉNON, P. RAMET and J. ROMAN, "PaStiX: a high-performance parallel direct solver for sparse symmetric positive definite systems", *Parallel Computing*, vol. 28, pp. 301-321, 2002.
- [26] A. STRUGAREK, P. BEAUDOIN, A.-S. BRUN, P. CHARBONNEAU, S. MATHIS and P.-K. SMOLARKIEWICZ, "Modelling turbulent stellar convection zones: sub-grid scales effects", *Advance in Space Research*, in press, 2016.
- [27] C.A. JONES, P. BORONSKI, A.S. BRUN, G. A. GLATZMAIER, T. GASTINE, M.S. MIESCH and J. WICHT, "Anelastic convection-driven dynamo benchmarks", *Icarus*, 216, pp. 120-135 (Benchmark anélastique), 2011.

Des planètes aux galaxies : comment la simulation numérique aide à comprendre la formation des grandes structures dans l'univers

Introduction

Alors que l'univers à ses débuts, il y a 13 milliards d'années, était extrêmement uniforme, il est à présent profondément structuré, des échelles subatomiques jusqu'aux échelles cosmologiques. Il présente ainsi des contrastes de densités et de températures de plusieurs dizaines d'ordres de grandeur, aussi bien à l'échelle des nuages interstellaires au sein desquels les étoiles et les planètes se forment, qu'à celle des galaxies et des amas de galaxies. Cette organisation hiérarchique complexe s'accompagne d'une complexité chimique remarquable : l'existence de centaines de molécules et la présence de plusieurs types de grains de poussière sont maintenant bien attestées dans le milieu interstellaire ainsi que dans les nébuleuses primordiales. Comprendre comment ce haut niveau de complexité et d'organisation a pu se développer constitue l'un des enjeux majeurs de l'astrophysique contemporaine et l'un des plus grands défis intellectuels auxquels la science a été confrontée. De ce fait, ce champ de recherche fait l'objet d'efforts très importants sur le plan international et l'objet d'une compétition intense entre les équipes. La nature multiéchelle et multiphysique des problèmes rencontrés rendent l'utilisation du calcul haute performance incontournable, et d'une importance toujours croissante pour les théoriciens.

Le service d'astrophysique (SAp) et le service de physique des particules (SPP) du CEA sont impliqués dans l'étude de nombreux aspects de la formation des structures touchant aussi bien à la cosmologie qu'à la formation des galaxies ou encore à celle des étoiles et des planètes. Théoriciens et numériciens collaborent étroitement avec les observateurs qui exploitent les instruments au sol et les observatoires spatiaux. Cette complémentarité, nécessaire à la compréhension profonde des systèmes astronomiques, est l'une des clés permettant une exploitation scientifique optimale des moyens observationnels et conduit à l'élaboration de nouveaux programmes et de nouveaux instruments. À cet égard, les simulations numériques massives se sont révélées des outils d'investigation particulièrement efficaces. Le SAp et le SPP mènent un programme ambitieux de simulations numériques incluant le développement de codes, l'utilisation des super-calculateurs et la comparaison des résultats de simulations avec les observations.

La formation des structures dans l'univers : un problème multiéchelles et multiphysique

La formation des structures en astrophysique met en jeu de nombreuses échelles spatiales et temporelles. Ainsi, les plus grandes échelles conditionnent bien évidemment l'évolution des plus petites : les propriétés des étoiles (masse, rotation, présence de compagnons) dépendent de la structure des nuages de gaz parents plusieurs milliards de fois plus étendus. Mais les petites échelles ont également une influence déterminante sur les grandes. Le rayonnement des étoiles (une galaxie typique comme la Voie lactée en contient plusieurs centaines de milliards), l'émission de vents ainsi que l'explosion des étoiles les plus massives sous la forme de supernovae, détruisent les nuages interstellaires environnants et expulsent du gaz de la galaxie. Ces effets, encore appelés « *feedback* » stellaire, sont probablement à l'origine de la faible efficacité de la formation des étoiles et des galaxies dans l'univers et permettent de contrebalancer les effets de la gravité. Plus quantitativement, il est estimé que seuls 10 % du gaz disponible ont été transformés en étoiles. De ce fait, le rayon stellaire (typiquement quelques centaines de milliers de kilomètres ou encore quelques secondes-lumière) et l'épaisseur du disque galactique (quelques centaines d'**années-lumière***) sont étroitement couplés entre eux.

La formation des structures en astrophysique fait également intervenir un très grand nombre de processus physiques. Si la gravité joue un rôle prépondérant pour la formation et la croissance des structures aussi bien aux échelles cosmologiques (dominées par la **matière noire***) qu'à celles des étoiles et des planètes (dominées par la **matière baryonique***), les processus hydrodynamiques et même **magnéto-hydrodynamiques*** (c'est-à-dire impliquant le champ magnétique ambiant), les processus thermiques (chauffages et refroidissements), le transfert de rayonnement, l'accélération de particules suprathermiques (également appelées « rayons cosmiques ») ou encore la physique nucléaire à l'œuvre dans les étoiles, revêtent tous une importance considérable et sont responsables de la formation des structures de notre univers. Cette complexité et cette richesse ont fait depuis toujours de l'astrophysique une discipline avant-gardiste, aussi bien pour la compréhension des processus que pour l'utilisation et le développement de nouvelles méthodes de simulation aussi bien algorithmiques qu'instrumentales.

Méthodes et ressources

La résolution des nombreuses équations (par exemple, l'équation de **Navier-Stokes*** ou encore celle de **Poisson*** pour le champ gravitationnel) régissant la dynamique des systèmes astrophysiques multiéchelle et multiphysique requièrent l'utilisation des ordinateurs massivement parallèles et, bien entendu, le développement de codes sophistiqués. Depuis environ vingt ans, le Service d'Astrophysique développe et utilise plusieurs codes optimisés et adaptés pour traiter ce type d'équations. Ainsi le code à maillage adaptatif RAMSÈS [1] permet d'adapter la résolution numérique de manière dynamique. Il utilise pour cela une structure de maillage hiérarchique en arbre, composée de groupes de huit cellules (« *octree* »). Développé initialement pour la cosmologie, c'est-à-dire l'étude des grandes échelles de l'univers, RAMSÈS permet de suivre les particules de matière noire auto-gravitante mais aussi l'hydrodynamique radiative. La technique employée est celle dite « des volumes finis » qui consiste à calculer les flux échangés aux interfaces des cellules de calcul, *via* des solveurs dits « de Riemann ». Cette méthode permet notamment de conserver exactement la masse, le moment et l'énergie et s'avère particulièrement efficace pour le traitement des chocs omniprésents dans les écoulements supersoniques. Dans un second temps, le champ magnétique a pu être introduit [2], faisant de RAMSÈS l'un des premiers codes de magnéto-hydrodynamique (MHD) compressible à maillage adaptatif disponible en astrophysique. Afin de maintenir la divergence du champ magnétique à zéro, la technique dite « du transport contraint » est utilisée. Cette dernière consiste à écrire les composantes du champ magnétique, non pas au centre des cellules (comme c'est le cas pour les autres variables telles que la densité) mais sur leurs faces. Il est alors possible de montrer que la divergence du champ magnétique peut-être maintenue à zéro de manière exacte (de la même façon que la masse est conservée). En parallèle, le SAP a développé des algorithmes permettant de traiter simultanément le transfert de rayonnement, c'est-à-dire la propagation de la lumière couplée à la matière. Ainsi, la méthode aux moments dite « M1 » [3] a été implémentée tout d'abord dans le code à grille fixe HERACLÈS puis dans le code RAMSÈS. Précisons que des simulations effectuées avec RAMSÈS ont été effectuées sur un grand nombre de super calculateurs, RAMSÈS a permis de réaliser parmi les plus grosses simulations de cosmologie. Un autre type de codes adapté à la physique stellaire est également développé au SAP. Il s'agit du code ASH [4] qui résout les équations de la MHD incompressible dans une sphère. ASH utilise une décomposition en harmoniques sphériques basées sur une transformée de Fourier rapide en longitude et les polynômes de Legendre en latitude. Dans la direction radiale le choix de polynômes de Tchebyshev ou d'un schéma de différences finies d'ordre élevé sur grille non uniforme est possible. Pour les termes non linéaires, l'approche dite « pseudo-spectrale » est adoptée. Elle consiste à calculer ces termes dans l'espace phy-

sique et à revenir dans l'espace spectral afin d'éviter de coûteuses intégrales de convolution à trois dimensions. Ce code est particulièrement bien adapté pour traiter les écoulements MHD stratifiés à l'intérieur d'une sphère de gaz auto-gravitante en rotation et a démontré une scalabilité efficace jusqu'à plus de 100 000 cœurs de calcul. Précisons que ces codes sont désormais trop complexes pour être développés par un seul groupe et font l'objet de collaborations internationales *via* des consortiums. Enfin, d'autres codes sont utilisés, mais non développés, comme par exemple le code GADGET [5]. Ce dernier est un code Lagrangien qui utilise des particules plutôt qu'une grille.

En termes de ressources, l'ensemble des groupes du Service d'Astrophysique et du Service de Physique des Particules se voit alloué environ 30 à 50 millions d'heures de calcul sur les machines nationales. Par ailleurs, au niveau européen, grâce aux appels à projets PRACE, le groupe reçoit un volume d'heures comparable. Ces allocations sont les plus importantes à l'échelle d'un laboratoire en astrophysique et en France. Actuellement, leur utilisation se répartit de manière approximativement équivalente en cinq thématiques principales, la cosmologie, la formation et l'évolution des galaxies, la formation des étoiles, la dynamique des disques proto-planétaires et, enfin, l'évolution stellaire.

Les très grandes échelles de l'univers

L'évolution des profils de matière noire des amas de galaxies les plus massifs de l'univers

La cosmologie observationnelle a progressé de manière spectaculaire ces dernières années et est entrée dans l'« ère de la cosmologie de précision » : l'univers est dominé par deux composantes dont la nature reste cependant un mystère profond, non seulement pour l'astrophysique, mais aussi pour la physique moderne : la **matière noire*** et l'**énergie noire***. Cela a permis l'élaboration d'un cadre bien défini pour les théories de formation des grandes structures : le modèle standard ou Λ CDM (*Lambda-Cold Dark Matter*), dans lequel l'énergie sombre correspond à une constante cosmologique et la matière noire est froide. Néanmoins, puisque la matière noire n'est, par définition, observable que de manière indirecte, *ce modèle reste largement hypothétique*. Par ailleurs, la compréhension de la formation des galaxies nécessite d'abord de comprendre la formation des halos de matière noire qu'elles occupent. Les simulations numériques de formation des structures prédisent toutes que dans ce modèle standard, les profils de matière noire ont une forme universelle. Ce modèle standard reproduit bien les observations des amas proches, mais sa validité au cours du temps n'a jamais été testée. La détection d'amas massifs jusqu'à des âges reculés où l'univers était très jeune a été rendue possible récemment par les progrès des rele-

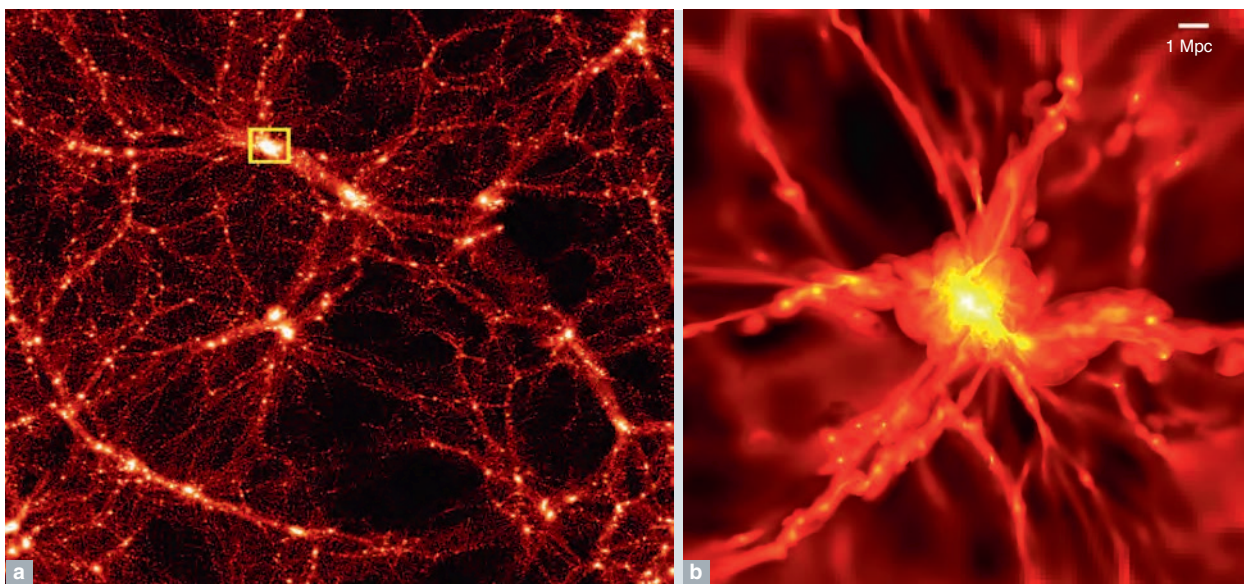


Fig. 100. a) Distribution de la matière noire dans l'univers à grande échelle ; b) Distribution du gaz dans une simulation re-zoomée avec gaz adiabatique d'un amas très massif.

vés tels que ceux effectués par le satellite *Planck*. Il devient maintenant possible de tester le modèle Λ CDM en étudiant l'évolution et les profils de ces amas.

Un tel test ne peut être réalisé qu'en confrontant de façon systématique les observations des amas de galaxies avec des simulations numériques (voir exemple fig. 100) *qui doivent donc être aussi proches que possible de celles de l'échantillon observé.* Cet échantillon est tiré du catalogue d'amas détectés par *Planck* et comprend les amas les plus massifs de l'univers. Des mesures de distribution de masse très précises sont possibles dans ces objets, même pour l'univers jeune, car ils sont très massifs, mais ce sont des objets extrêmes et très rares. Le défi majeur du programme de simulation associé est de construire un échantillon d'amas simulés de même taille que l'échantillon observationnel (environ 90 amas) et ayant la même résolution spatiale (quelques milliers d'années-lumière, indispensable pour pouvoir résoudre leur structure). L'idéal serait, en principe, de simuler tout l'univers à une résolution de quelques milliers d'années-lumière, mais cela est bien évidemment impossible. Ce défi est résolu en effectuant d'abord des simulations cosmologiques de résolution moyenne de plusieurs grandes boîtes d'univers (environ un milliard d'années-lumière de côté) permettant de former ces amas rares dans un environnement à grande échelle réaliste. Puis des simulations « zoom » sur les amas sont réalisées à très haute résolution. Ces simulations sont réalisées à l'aide du code RAMSÈS [1]. Un second défi sera d'introduire le gaz dans ces simulations, les profils de matière noire étant déduits à partir de la distribution du gaz dans le potentiel de la matière noire. Les simulations incluront de façon progressive la physique du gaz, d'abord purement gravitationnelle, puis prendront en compte

la physique complexe liée au refroidissement et à la rétroaction des galaxies. Elles sont donc aussi très pertinentes pour l'étude de l'histoire des baryons. Ces simulations cosmologiques (y compris re-zoomées) représentent un défi particulier en raison de la très grande diversité des échelles et de la physique.

Composition et évolution de l'univers : le rôle des neutrinos

L'une des découvertes majeures en physique des particules au cours des vingt dernières années, récemment récompensée du prix Nobel de physique (KAJITA et McDONALD, 2015), est la confirmation que les **neutrinos*** sont massifs. Leur masse, cependant, demeure inconnue malgré une intense activité de recherche. Dans cette quête, la cosmologie offre l'approche la plus prometteuse à ce jour, permettant d'atteindre une sensibilité à la masse des neutrinos environ un ordre de grandeur meilleure que celle accessible aux expériences en laboratoire. Le Service de physique des particules du CEA est fortement impliqué dans ces études.

En raison de leur masse, les neutrinos laissent une légère empreinte sur la répartition du gaz et des galaxies dans l'univers. Afin de la détecter, les expériences internationales BOSS et eBOSS du SDSS (*Sloan Digital Sky Survey*) ont déjà mesuré les spectres de près de 200 000 **quasars***. Ces astres, parmi les plus éloignés que l'on puisse percevoir, sont de véritables phares cosmiques qui tirent leur luminosité fabuleuse de la matière qui s'engouffre dans le **trou noir*** central de plusieurs millions, voire milliards, de fois la masse du soleil. Voyageant durant plus de dix milliards d'années, la lumière émise par les quasars traverse le milieu

intergalactique et se trouve plus ou moins absorbée sur sa trajectoire par les filaments ténus d'hydrogène, principal composant du milieu intergalactique. Le spectre du quasar, mesuré par SDSS, comporte une succession de pics d'absorption, empreinte de la répartition de la matière dans l'univers. La qualité des données de SDSS permet de cartographier ainsi les structures dans l'univers, à des échelles allant du million d'années-lumières à plusieurs centaines de millions d'années-lumières.

Pour interpréter ces données et en tirer des conclusions sur la masse des neutrinos, des simulations numériques de grande ampleur sont nécessaires. Les neutrinos étant de masse très faible (inférieure à l'électron-volt), ils se déplacent à des vitesses relativistes durant l'essentiel de l'histoire de l'univers. Ils tendent ainsi à diluer les surdensités de matière en cours d'agglomération (voir fig. 101) de deux façons : massifs, les neutrinos contribuent à augmenter le taux d'expansion de l'univers et donc à diminuer les puits gravitationnels dans lesquels la matière s'effondre, mais ne s'agglomérant pas eux-mêmes puisque relativistes, ils ne participent pas à la formation des structures. L'impact des neutrinos sur l'évolution de l'univers est modélisé à l'aide de simulations reposant sur le logiciel public Gadget [5], utilisé avec trois types de particules : des baryons (subissant un traitement hydrodynamique), des particules de matière noire et des neutrinos (ces deux espèces étant traitées en N-body uniquement, c'est-à-dire qu'elles n'interagissent avec leur environnement qu'à travers la gravité). Pour atteindre le degré de précision requis par les données actuelles, ces simulations doivent couvrir des échelles de l'ordre de la centaine de millions d'années-lumière, tout en assurant une résolution meilleure que le pourcent à l'échelle du million d'années-lumière. Le SPP a produit un ensemble d'environ cinquante simulations vérifiant ces caractéristiques pour différentes valeurs de masses des neutrinos et de paramètres cosmologiques [6,7]. Ces simulations ont d'ores et déjà été utilisées pour déterminer le meilleur ajustement cosmologique aux données de l'expérience BOSS. En combinant ces résultats à ceux du projet Planck sur l'étude des anisotropies du fond de **rayonnement cosmologique***, le groupe du SPP a pu établir une limite supérieure de 0,12 électron-volt à la somme des masses des trois espèces de neutrinos actifs, meilleure contrainte mondiale à ce jour [8].

L'aventure ne s'arrête pas là. L'ensemble des simulations réalisées peut encore être complétée afin d'inclure d'autres espèces, tels des neutrinos stériles ou des particules de matière noire tiède qui sont des particules dont l'existence est envisagée et auxquelles la cosmologie s'intéresse particulièrement pour expliquer la matière noire qui constitue l'essentiel de la masse de l'univers. Le SPP s'oriente actuellement dans cette direction (voir fig. 101).

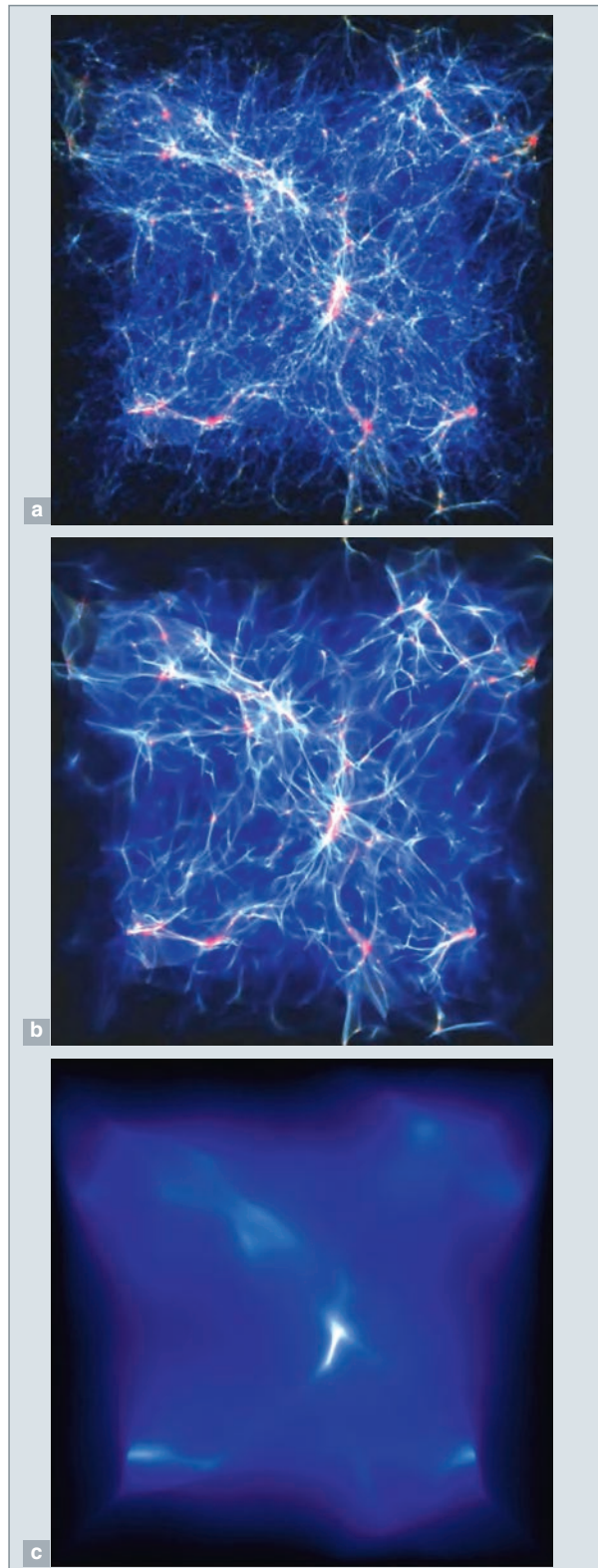


Fig. 101. Images issues de simulations numériques hydrodynamiques au TGGC, illustrant un cube d'univers d'environ 75 millions d'années-lumière de côté, dans lequel l'essentiel de la masse est sous forme de matière noire froide (a), de matière noire tiède (b), ou de neutrinos de faible masse (c). Ce dernier cas, extrême, illustre l'effet de lissage des neutrinos sur les surdensités de matière.

La formation et l'évolution des galaxies

À l'échelle des galaxies, de l'ordre de la dizaine de milliers d'années-lumières, les baryons, qui se trouvent essentiellement sous forme d'étoiles et de gaz diffus, dominent le contenu en masse et en énergie des structures. De nouveaux mécanismes physiques deviennent ainsi déterminants : processus de chauffage et refroidissement du gaz, effondrement gravitationnel au sein des grandes structures de matière noire et dynamique gravitationnelle des galaxies, formation des étoiles, rétroaction des étoiles jeunes sur le gaz environnant (par exemple, lors des explosions de supernovae), accréation de matière par les trous noirs centraux des galaxies et effets à distance sur la matière environnante, etc. Les propriétés fondamentales des galaxies, telles que leur masse, leur structure, l'âge moyen de leurs étoiles, résultent d'un équilibre entre la formation des grandes structures cosmologiques de matière noire et ces processus baryoniques à très petite échelle. La rétroaction des étoiles jeunes et les processus relativistes à proximité immédiate des trous noirs peuvent avoir des impacts majeurs à l'échelle des galaxies entières.

Si la seule dynamique gravitationnelle des galaxies a été un champ de recherche important jusqu'au début des années 2000, il est ensuite devenu essentiel de prendre en compte l'ensemble des processus physiques sous-jacents pour développer une réelle compréhension de la formation et de l'évolution des galaxies et de la formation de leurs étoiles – compréhension encore bien incomplète aujourd'hui. Le problème est donc à la fois multiphysique et multiéchelles. Le recours aux plus grands supercalculateurs est rendu indispensable non seulement par le temps de calcul nécessaire, mais aussi par la très grande quantité de mémoire requise pour traiter l'ensemble des informations physiques nécessaires à la description du problème physique. Les codes à raffinement adaptatifs tels que RAMSÈS [1], parce qu'ils peuvent prendre en compte, non seulement de grandes variations d'échelles caractéristiques à travers l'espace, mais aussi les variations de temps caractéristiques associées, sont particulièrement compétitifs pour les problèmes de ce type, et offrent typiquement un avantage d'un ordre de grandeur en termes d'échelle caractéristique résolue par rapport aux autres codes hydrodynamiques.

Malgré les nombreux progrès réalisés grâce aux simulations numériques, certaines questions fondamentales demeurent. Des données telles que la masse stellaire moyenne des galaxies restent incomprises : en effet, tous les modèles numériques prévoient que les galaxies forment des étoiles en plus grand nombre, et bien plus rapidement, que ce qui est observé. La diversité morphologique des galaxies, des galaxies spirales sous forme d'un disque fin en rotation aux galaxies elliptiques quasi sphériques, reste aussi relativement mystérieuse, les résultats des modèles numériques n'étant que partiellement compatibles avec les données d'observation.

Les liens entre la structure des galaxies et la formation stellaire

La non-universalité de la formation stellaire est l'une des grandes découvertes issues de la dernière génération d'observatoires astronomiques. Si les galaxies d'un même type morphologique tendent à former leurs étoiles au même taux, à masse d'hydrogène moléculaire égale, les galaxies elliptiques forment leurs étoiles dix fois plus lentement que les galaxies spirales (toujours à masse et densité de « combustible » égale), et les groupes de galaxies en interaction jusqu'à plusieurs dizaines de fois plus vite. Les simulations numériques menées au SAP ces dernières années (voir la fig. 102) ont joué un rôle clé dans la compréhension de ce phénomène. En particulier, la comparaison de l'importance relative de plusieurs ingrédients physiques a mis en lumière le rôle clé de la turbulence interstellaire pour déterminer la formation stellaire à l'échelle des galaxies entières (et pas uniquement à l'échelle de quelques étoiles individuelles, pour déterminer leur distribution en masse), et d'autre part le rôle moteur de la gravité à grande échelle dans l'alimentation en énergie de la cascade turbulente (et pas uniquement des processus de rétroaction, explosions de supernovae et autres vents stellaires). Ainsi, lorsque deux galaxies se croisent dans l'univers, les forces de marées gravitationnelles que chacune exerce sur l'autre (initiées en grande partie par la matière noire) modifient les propriétés de la turbulence à toutes les échelles jusqu'à l'échelle de l'année-lumière, amplifiant les modes compressifs aux dépens des modes solénoïdaux (c'est-à-dire des mouvements qui n'amènent

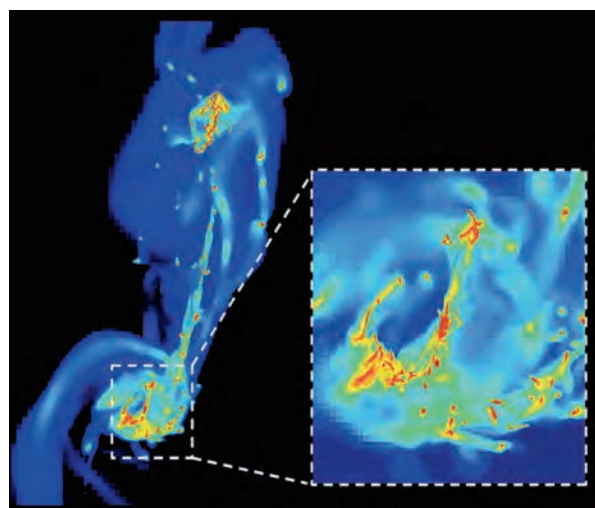


Fig. 102. Simulation de la structure du gaz interstellaire dans une paire de galaxies en interaction. L'interaction gravitationnelle stimule la fragmentation turbulente du gaz interstellaire en nuages denses et froids, au sein desquels de nouvelles étoiles se forment rapidement. Les mêmes galaxies dans des régions isolées de l'univers ont une turbulence interstellaire plus réduite et forment leurs étoiles de manière plus lente, à l'image de notre Voie lactée. Simulation menée sur le supercalculateur allemand SuperMuc dans le cadre d'un projet PRACE.

pas le gaz à se concentrer), ce qui favorise la formation de gaz dense, gravitationnellement instable, se refroidissant rapidement, et apte à s'effondrer en nouvelles étoiles [9]. À l'inverse, les galaxies elliptiques sont gravitationnellement stables à grande échelle, ce qui réduit la turbulence inter-stellaire par rapport aux autres types de galaxies, la rareté des chocs turbulents dans le gaz interstellaire réduisant ainsi la formation de régions denses, nids de nouvelles étoiles [10].

La masse des galaxies régulée par les trous noirs centraux

Hormis la gravité et la turbulence, d'autres processus sont importants pour réguler la croissance en masse des galaxies. Parmi eux, les vents galactiques expulsent de la masse à un taux supérieur au taux de conversion du gaz en étoile au sein des galaxies, surtout dans l'univers jeune. Les mécanismes de rétroaction stellaire ont souvent été évoqués, mais les simulations ont montré qu'ils produisent des vents trop lents, incapables de s'échapper du puits de potentiel de la galaxie. Les trous noirs super massifs rencontrés au centre des galaxies, en accrétant de la matière à des vitesses relativistes (on parle alors de « noyau actif ») peuvent eux aussi expulser le gaz environnant, cette fois bien au-delà de la vitesse d'échappement mais à de trop faibles densités. Les dernières simulations de SAP (voir fig. 103) ont

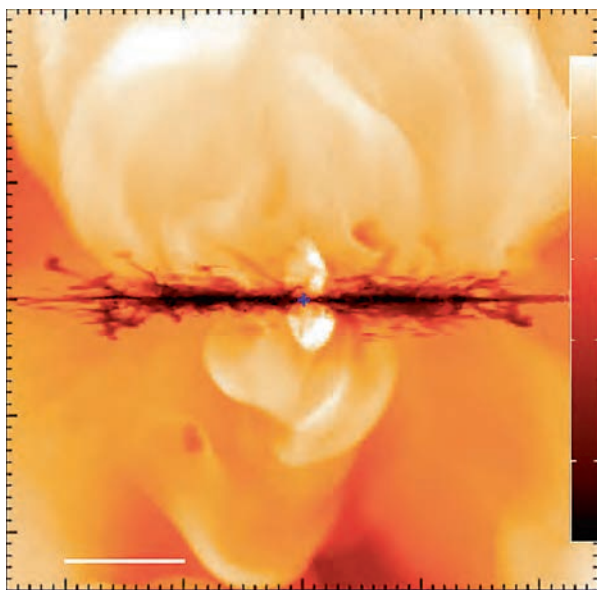


Fig. 103. Simulation d'un vent galactique autour d'une galaxie de l'univers jeune [11]. La couleur code la température : le disque galactique, froid est vu par la tranche et apparaît sombre. Le gaz chaud s'échappe de la galaxie dans les directions polaires. La présence de bulles concentriques dans le vent marque la contribution des épisodes de noyau actif autour du trou noir central. L'asymétrie globale du vent résulte de la structure du gaz galactique, des étoiles qui s'y forment, et de la rétroaction de ces dernières sur le gaz de la galaxie.

démonstré que l'ensemble de ces mécanismes pouvait conduire à des taux d'échappement réalistes, doubles ou triples du taux de formation d'étoiles. Les vents énergétiques issus des noyaux actifs se couplent dans le halo circum-galactique au gaz plus dense, mais de faible vitesse, expulsé par la rétroaction stellaire. L'ensemble donne un vent galactique capable de s'échapper à l'infini, tout en emportant des quantités importantes de masse. Modéliser l'ensemble de ces processus simultanément reste un défi technique : les hautes densités et vents de très grande vitesse rencontrés près des noyaux actifs impliquent de résoudre des temps caractéristiques très courts, alors que la dynamique galactique et la rétroaction stellaire se produisent sur des temps bien plus longs (ce qui, en pratique, conduit à des calculs numériques très coûteux). Il reste ainsi à incorporer ces processus dans des simulations de l'univers à plus grande échelle pour comprendre si la masse observée des galaxies actuelle peut être finalement expliquée par nos modèles physiques.

La formation des étoiles

Comme mentionné ci-dessus, le processus de formation des étoiles est une des étapes clés de l'univers, puisque les étoiles ont un rôle décisif aussi bien à grande échelle pour l'évolution des galaxies qu'à plus petite échelle pour la formation des planètes. Sa compréhension nécessite, d'une part, une bonne connaissance de la dynamique du gaz interstellaire, régie par la turbulence magnéto-hydrodynamique fortement compressible, et, d'autre part, elle requiert également de comprendre les mécanismes qui pilotent la rétroaction (encore appelé « *feedback* ») de la formation des étoiles sur leur environnement. Si ces deux aspects sont également présents à l'échelle des galaxies, il est indispensable de les étudier à plus petite échelle, où ils peuvent être traités avec beaucoup plus de détails. En particulier, cela permettra à terme de constituer des modèles sous-maille pour les simulations de galaxies. Ici, quelques exemples des études qui sont menées au Service d'astrophysique sont présentés.

La turbulence MHD et la formation des filaments interstellaires

Le milieu interstellaire qui remplit le volume des galaxies est un gaz magnétisé, turbulent et fortement compressible. Les nombres de Mach typiques (le rapport de la vitesse du fluide sur la vitesse du son) que l'on y rencontre sont de l'ordre de 10, alors que les nombres de Reynolds caractéristiques sont supérieurs au million. Si la turbulence incompressible, hydrodynamique et magnétisée, a fait l'objet d'une attention très soutenue depuis plus d'un demi-siècle, la turbulence fortement compressible, n'ayant pas d'équivalent terrestre simple, est beaucoup moins connue et un effort important a été entrepris pour en améliorer notre compréhension. Des simulations numériques (utilisant la version MHD de RAMSÈS,

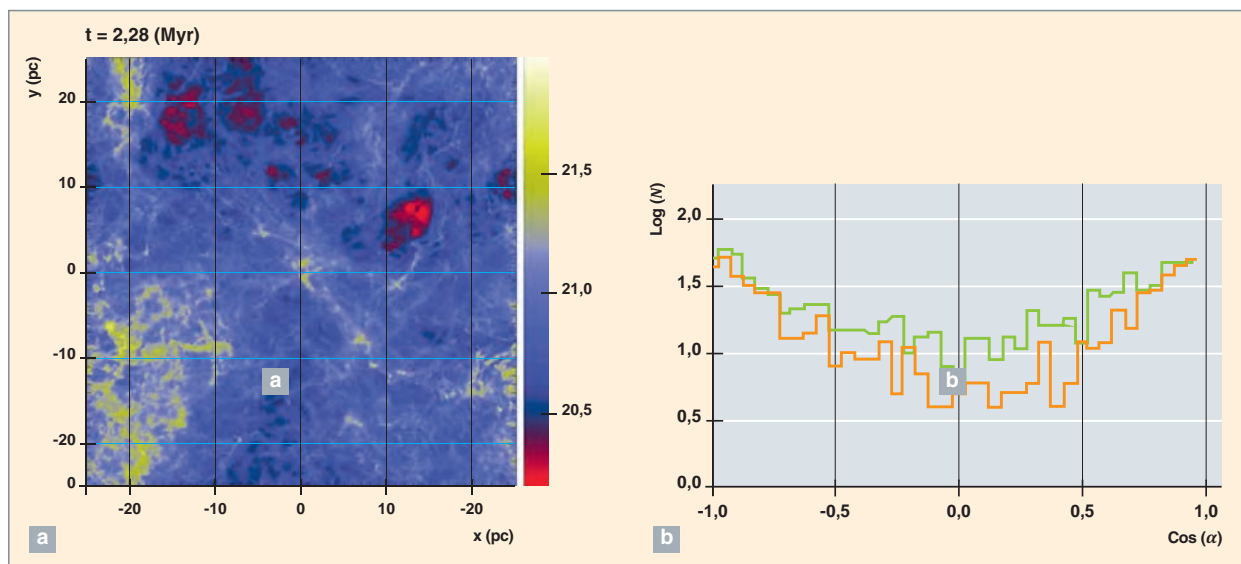


Fig. 104. a) Carte de la densité d'un nuage de gaz interstellaire, intégrée selon l'axe z (densité de colonne). Nous notons la présence d'un grand nombre de surdensités ayant une forme filamentaire. b) Histogramme des angles entre l'axe des filaments et la direction de la déformation locale (le strain), montrant un clair alignement entre les deux quantités (la ligne pointillée correspond à une simulation de résolution double). Extrait de [12].

[2]) à haute résolution sont menées au SAP afin d'étudier ce régime de turbulence [12]. Elles consistent soit à introduire un champ de vitesse artificiel et à laisser ce dernier évoluer librement (turbulence en déclin), soit à forcer le champ de vitesse à l'aide d'une prescription afin d'entretenir la turbulence. L'écoulement est magnétisé (l'intensité magnétique est comparable initialement à la pression thermique) et le nombre de Mach moyen est de l'ordre de 10. La résolution typique est de 512^3 à 1024^3 cellules. L'utilisation du maillage adaptatif permet d'accroître encore la résolution dans les régions denses qui sont d'une toute première importance dans le contexte de la formation des étoiles puisque les surdensités sont les progéniteurs stellaires. Sur la figure 103 (à gauche) est représenté le champ de densité intégré dans une direction. Nous remarquons la présence d'importantes fluctuations de densité, qui sont la conséquence du nombre de Mach élevé, ainsi que leur aspect allongé. La formation de ces filaments de matière est du plus grand intérêt. En effet, le satellite HERSCHEL a mis en lumière la présence de très nombreux filaments qui semblent être le lieu privilégié de la formation des étoiles [13]. Il s'avère donc que la compréhension de l'origine de ces filaments de gaz interstellaire dense est susceptible de constituer une pierre importante de l'édifice. À cette fin, une étude systématique des propriétés des régions denses a été menée. Par exemple, afin de comprendre l'origine de ces filaments, la corrélation entre l'axe de ces derniers et la direction de la déformation locale (le strain) a été étudiée. La distribution de l'angle entre ces deux axes est portée à droite sur la figure 104. L'alignement est bien marqué et illustre le caractère clé jouée par la turbulence. Ces filaments sont le produit direct de cette dernière

qui tend à étirer le flot localement. Cette étude met donc en lumière l'importance des filaments qui sont une conséquence directe de la turbulence magnéto-hydrodynamique compressible et sont donc omniprésents dans le milieu interstellaire.

L'interaction entre une supernova et un nuage moléculaire

Afin de comprendre l'influence du « *feedback* » stellaire et plus particulièrement celle des explosions de supernovae sur leur environnement, des simulations numériques idéalisées ont été réalisées à l'échelle d'un nuage moléculaire. Ces travaux sont complémentaires aux simulations de galaxies présentées à la figure 101, puisqu'elles en constituent le pendant aux petites échelles. Ces simulations consistent simplement à injecter une énergie thermique de 10^{51} ergs (soit 10^{44} joules, correspondant à l'énergie d'une supernova) en un point donné dans un nuage moléculaire turbulent typique du milieu interstellaire (obtenu en laissant relaxer un nuage sphérique soumis à un champ de vitesse stochastique) [14]. Le résultat d'une des simulations réalisées est illustré sur la figure 105 qui montre la température du gaz au cours de trois pas de temps. Tout d'abord (premier pas de temps), la pression du reste de supernova est si élevée qu'un front de choc se propage de manière quasi sphérique, faiblement affecté par le nuage environnant. Ensuite, du fait de son expansion, la pression du reste de supernova diminue et sa propagation devient alors fortement anisotrope (second pas de temps). Le front se propage préférentiellement dans les régions les moins denses du nuage et finale-

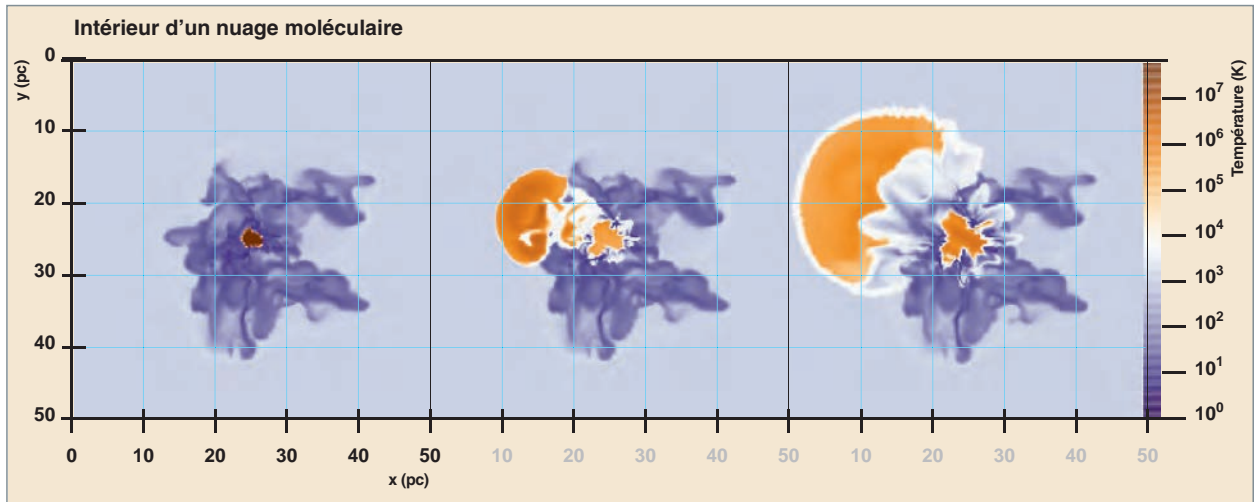


Fig.105. Trois pas de temps (séparés d'environ un million d'années) montrant une explosion de supernova à l'intérieur d'un nuage moléculaire. Une fraction significative du nuage est éjectée, illustrant la capacité des supernovae à limiter la formation des étoiles dans les galaxies.

ment atteint le milieu extérieur où il se propage de manière quasi sphérique. Au cours de ce processus, une fraction substantielle de la masse du nuage est expulsée. Ainsi, dans ce calcul, environ 20 % de la masse ont été entraîné, si bien que la présence de trois ou quatre explosions aux propriétés similaires serait à même de détruire complètement le nuage et donc de limiter la formation des étoiles en cours de formation. Au cours de cette étude, une difficulté importante est néanmoins apparue. L'influence de l'explosion dépend de manière assez sensible de sa position dans le nuage. Or, cette position est le résultat, d'une part, de la formation de l'étoile massive mais également de son évolution dans le nuage avant son explosion. Ces deux aspects, pour être pris en compte de manière cohérente, requièrent une résolution numérique bien supérieure à celle utilisée pour ce calcul ainsi que le traitement d'autres processus physiques impliquant la résolution d'autres équations telles que celles du transfert de rayonnement. Des études sont en cours pour réaliser des calculs pleinement auto-cohérents.

L'évolution des disques protoplanétaires

Les planètes, que nous trouvons en orbite autour des étoiles, naissent aux plus petites échelles de l'univers. Étant donné leur importance pour l'homme en particulier, et pour l'apparition de la vie en général, la question de leur formation, de leur évolution, et plus généralement de leur caractérisation a toujours occupé une place centrale en astrophysique. Récemment, la découverte de milliers de planètes extrasolaires (*i.e.* en orbite autour d'autres étoiles que le soleil) a stimulé encore plus l'intérêt des scientifiques pour cette problématique. De nos jours, comprendre l'origine et la diversité des systèmes planétaires que nous observons est devenu un objectif majeur de la communauté scientifique.

Les planètes se forment autour des étoiles jeunes, quelques millions d'années après la naissance de celles-ci. Ces étoiles jeunes sont alors encore entourées de gaz qui s'organise sous la forme d'un disque, appelé « disque protoplanétaire ». Environ 1 % de la masse de ce disque se présente sous forme solide. Cette composante est constituée de particules de poussières de quelques millimètres, éventuellement recouvertes de glace d'eau et de monoxyde de carbone lorsque la température est suffisamment basse. C'est l'agglomération de ces particules qui va former les planètes telles que nous les connaissons. Évidemment, les mouvements de ces poussières, leurs collisions et leur agglomération, sont fortement influencés par le gaz qui les entoure. Il est donc important de bien connaître et de bien comprendre les propriétés des disques protoplanétaires pour comprendre comment les planètes se forment. Ce travail de caractérisation de l'environnement des jeunes planètes passe par une étude approfondie des processus physico-chimiques qui gouvernent l'évolution des disques protoplanétaires.

Le plus important de ces processus est sans aucun doute le processus de transport de moment cinétique, ou, de manière équivalente, le processus qui redistribue la matière dans les disques. À l'heure actuelle, il semble établi que ces processus sont de nature dynamique et reposent sur une ou des instabilités qui rendent turbulent l'écoulement du gaz dans le disque. Si des recherches sont encore menées à l'heure actuelle pour étudier la possibilité que ces instabilités soient de nature purement hydrodynamique, un consensus a émergé depuis une vingtaine d'années autour d'une instabilité linéaire magnétohydrodynamique, c'est-à-dire reposant sur la présence d'un champ magnétique : il s'agit de l'instabilité magnéto-rotationnelle (ou MRI). Lorsque les conditions sont favorables (c'est-à-dire si le couplage entre le gaz et le champ magnétique est suffisant), il est maintenant claire-

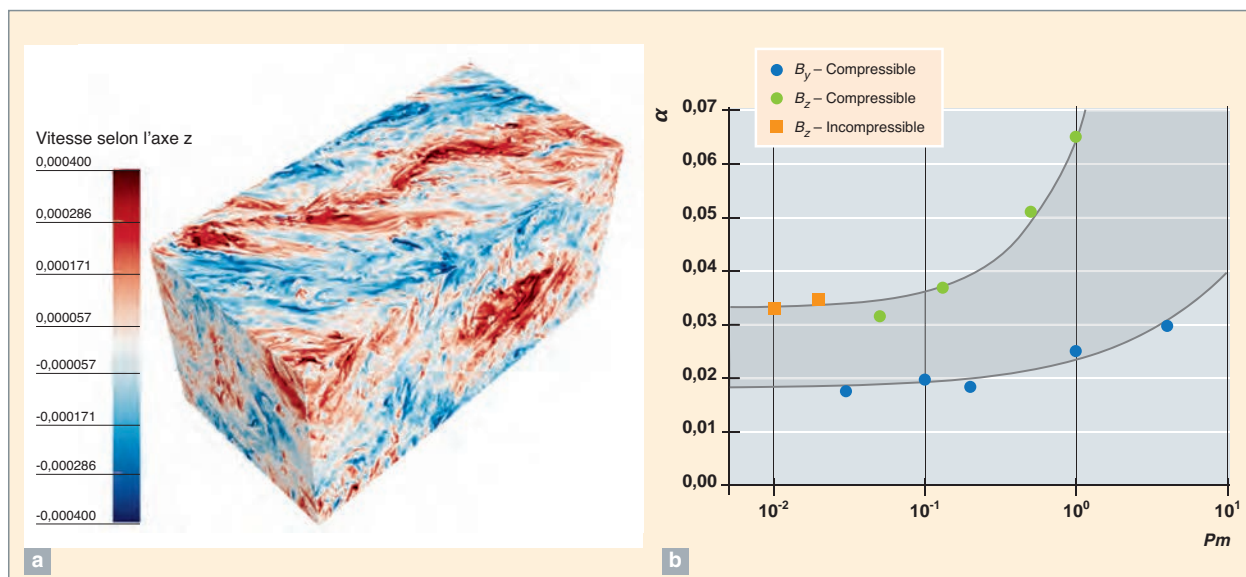


Fig. 106. Distribution 3D de la vitesse dans une simulation locale de turbulence MHD de résolution 10003 dans un disque proto-planétaire (a) et évolution du taux de transport de moment cinétique (paramétré par un nombre sans dimension appelé α) en fonction du nombre de Prandtl magnétique Pm pour un ensemble de simulations (b). Figures extraites de [15].

ment établi que la MRI conduit à un état dans lequel l'écoulement est turbulent et transporte le moment cinétique vers les parties externes du disque, permettant ainsi l'accrétion de matière sur l'étoile centrale comme le montrent les observations.

Les travaux actuels de la communauté scientifique, et en particulier des équipes du SAp, se concentrent sur la caractérisation de cet état turbulent : quel est le niveau de saturation des fluctuations du gaz ? Comment ses propriétés dépendent-elle des nombres sans dimension qui caractérisent le système ? Quelle est l'influence des effets de MHD non idéaux ? Les processus mis en jeu sont là aussi non linéaires et ces études passent par la réalisation de simulations numériques lourdes. Récemment, une équipe du Service d'Astrophysique a effectué la plus grosse simulation jamais réalisée pour ce problème, atteignant une résolution spatiale de 1000^3 . L'objectif était ici d'étudier le taux de transport de moment cinétique (paramétré par un nombre sans dimension appelé α) dans la limite astrophysiquement pertinente où la viscosité cinématique est très petite devant la résistivité ohmique, de sorte que leur rapport, le nombre de Prandtl magnétique Pm , est petit devant 1. La structure de l'écoulement dans cette simulation est illustrée sur la figure 106a. L'étude des propriétés statistiques de cet écoulement a permis de montrer que le paramètre α tend vers une limite finie non nulle dans lorsque Pm tend vers zéro (fig. 106b). Ces résultats démontrent l'efficacité de la MRI pour transporter le moment cinétique dans des systèmes astrophysiques tels que les parties internes des disques protoplanétaires [15].

Ces simulations locales, très idéalisées, souffrent en revanche de nombreuses limitations, liées en particulier à la géométrie très simplifiée qui est utilisée. Ces problèmes peuvent rendre difficiles l'interprétation physique des résultats et en limiter la portée. Pour remédier à ces problèmes, une solution est de réaliser des simulations, dites « globales », du disque protoplanétaire dans son ensemble. La résolution spatiale limitée de ces simulations est alors compensée par un plus grand réalisme qui permet d'aborder un grand nombre de problèmes, comme, par exemple, l'interaction disque/planète dans un disque turbulent [16]. Plus récemment, l'attention de la communauté s'est tournée vers la structure des parties internes des disques protoplanétaires. Si les zones les plus proches de l'étoile centrale sont chaudes et fortement ionisées (et la turbulence MHD vigoureuse, ainsi que décrit plus haut), il n'en est pas de même des régions moins internes. Le couplage entre le gaz et le champ magnétique diminue petit à petit jusqu'à devenir trop faible pour permettre à la MRI d'opérer : l'écoulement devient laminaire, il est question de « zone morte ». L'interface entre une zone turbulente et une zone morte a un comportement dynamique intéressant. Des simulations globales ont ainsi montré qu'un front peut se déplacer radialement dans le disque, à la manière d'un front de réaction/diffusion [17]. Lorsque le front se stabilise à un rayon d'équilibre, il se forme un vortex de gaz qui migre radialement dans le disque de manière cyclique (figure 107a), conduisant à une perturbation périodique de l'interface entre la zone morte et la zone turbulente [18]. Ce mécanisme pourrait avoir des conséquences sur la variabilité de l'émission des disques protoplanétaires, mais aussi

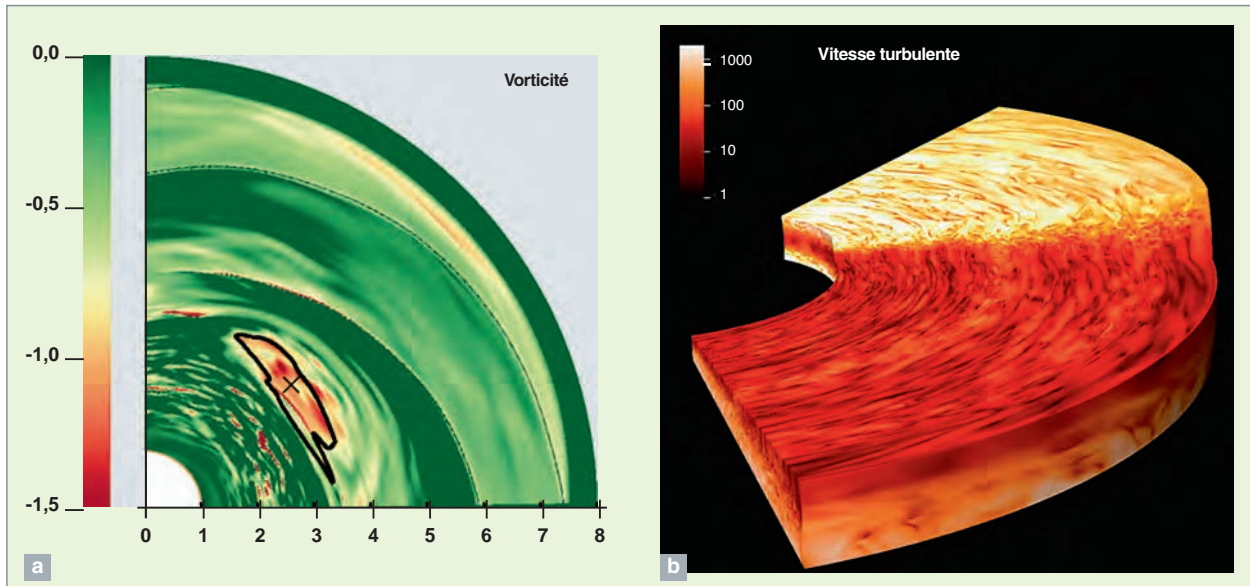


Fig. 107. a) Distribution de la vorticité dans le plan équatorial d'un disque protoplanétaire, montrant l'apparition d'un vortex en trait plein [18]. b) Rendu 3D des fluctuations turbulentes du gaz dans une simulation globale MHD-radiative de disque protoplanétaire [19].

pour les mécanismes d'agglomération des poussières au sein des vortex. Ces résultats encourageants demeurent toutefois limités par le traitement approximatif des effets radiatifs ; une autre équipe du service d'astrophysique a donc développé un module de transfert radiatif adapté à la géométrie particulières des disques protoplanétaires qui permet un traitement réaliste des aspects thermodynamique dans leurs parties internes [19]. Les premières simulations MHD-radiatives globales de disques protoplanétaires ont été réalisées (figure 107b ; voir aussi le film 3D réalisé à cette occasion et disponible à l'URL <http://irfu.cea.fr/Projets/COAST/>) et seront appliquées dans les prochaines années à ce problème afin de relier les résultats théoriques présentés ci-dessus aux observations.

La dynamique des étoiles et de leur environnement

Comme les parties précédentes l'ont montré à plusieurs reprises, les étoiles sont un ingrédient essentiel de l'univers : elles en constituent la brique élémentaire et permettent au cours de leur évolution la transformation de l'hydrogène vers des espèces plus complexes, à la fois *via* les processus de fusion thermonucléaire en leur sein pendant leur vie et *via* d'autres mécanismes nucléaires lors de leur fin cataclysmique en supernovae. Elles sont aussi source de turbulence et de phénomènes dynamiques intenses, notamment *via* leur forte activité magnétique et leur vent de particules énergétiques. Ces éléments ont un impact direct sur les conditions d'habitabilité des planètes.

Il est donc fondamental de comprendre l'évolution et la dynamique interne et externe des étoiles. Au service d'astrophysique, des approches théoriques et numériques sont développées pour attaquer ces problèmes complexes. Des simulations numériques tridimensionnelles ont notamment été réalisées et ont permis de simuler l'état convectif et turbulent ainsi que l'histoire de la rotation et du champ magnétique des étoiles au cours de leur vie et en fonction de leur masse. Une attention particulière a été portée sur la rotation et le champ magnétique car le soleil tourne et possède un cycle d'activité magnétique de onze ans : il est essentiel de comprendre pourquoi et comment ce cycle s'établit car il a un impact direct sur le niveau d'activité du soleil et sur les conditions spatiales dans lesquelles baigne la terre. Il est aussi important de comprendre comment ces cycles magnétiques et l'état de rotation et de mélange interne évoluent dans les étoiles en fonction de leurs paramètres globaux. Le champ magnétique et la rotation sont intimement liés car la rotation – *via* les écoulements aux grandes échelles qu'elle induit – influence l'intensité et la topologie du champ magnétique qui, en retour, modifie la redistribution de moment cinétique interne ainsi qu'externe, ce dernier étant associé à la perte de masse *via* le vent de particules. Les difficultés résident cependant dans l'aspect hautement non linéaire de ces couplages entre ces multiples processus physiques, aux grands contrastes de densité ($\sim 10^{10}$) ainsi qu'aux gammes d'échelles spatio-temporelles présentes au sein des étoiles. Par ailleurs, les mécanismes couplant la dynamique des étoiles à leur environnement jusqu'aux planètes orbitant autour, rendent ces systèmes encore plus difficiles à modéliser. Sur la figure 108a est représentée une vue tridimen-

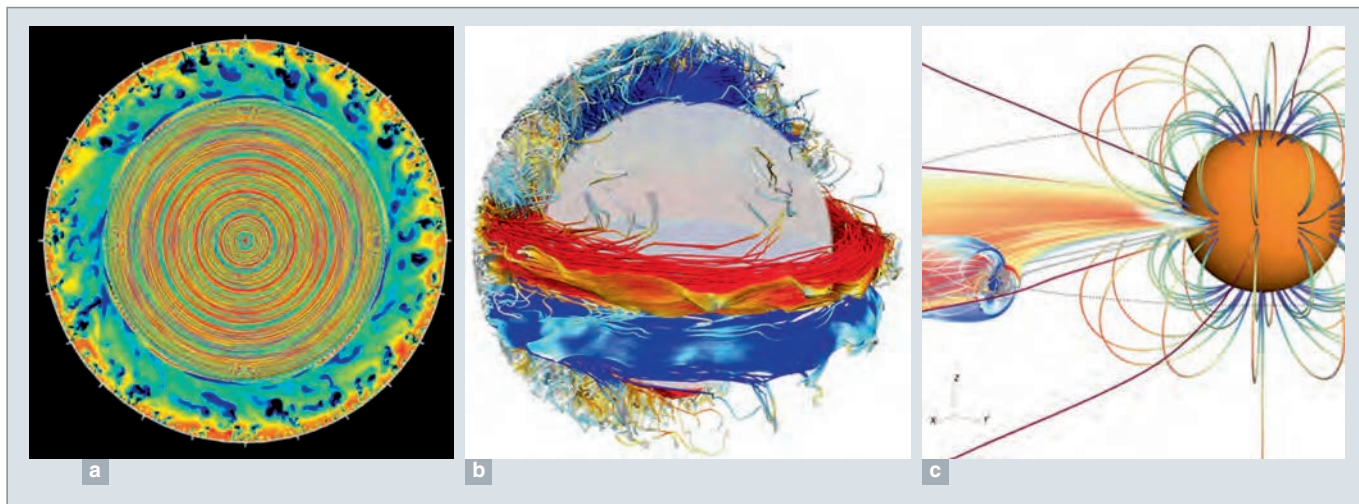


Fig. 108. a) Simulation 4000³ du soleil avec le code ASH montrant *via* une coupe équatoriale le champ d'entropie et le couplage entre la zone turbulente convective de surface et l'intérieur radiatif (ligne pointillée blanche) produisant un spectre riche d'ondes internes [20,21]. b) Rendu tridimensionnel du champ magnétique d'une étoile de type solaire simulée avec le code ASH possédant à la fois un cycle d'activité régulier et des passages par des grands minima [22]. c) Rendu tridimensionnel de l'interaction magnétique entre un vent stellaire quadrupolaire et la magnétosphère d'une exo-planète située à cinq rayons stellaires amenant à la création d'ailes d'Alfvén [24].

sionnelle d'une simulation 4000³ de 99 % du soleil, couplant enveloppe convective et intérieur radiatif et illustrant la richesse de la dynamique avec d'un côté une turbulence très intense et de l'autre un spectre riche d'ondes internes. L'état dynamo fluide (c'est-à-dire le processus physique convertissant l'énergie mécanique en énergie magnétique dans les plasmas) de différents types d'étoiles a été calculé afin d'en comprendre les variations. La figure 108b présente le cas d'une étoile jeune tournant trois fois plus vite que le soleil et possédant à la fois un cycle d'activité magnétique de 3,4 ans et des phases de grands minima d'activité ressemblant ceux du soleil durant la période de 1645 à 1715 (minimum de Maunder). Ce résultat a été obtenu grâce à un traitement sous-maille efficace de la diffusivité dit « *slope-limited diffusion* ». Finalement, fort de cette compréhension de la dynamique stellaire, la modélisation des interactions étoiles-planètes a été entreprise permettant ainsi de caractériser les couples magnétiques que le vent d'une étoile exerce sur un corps céleste proche ainsi que l'impact sur sa magnétosphère. Ces études ouvrent la voie à la généralisation de la météorologie de l'espace aux systèmes exo-planétaires (fig. 108c).

Conclusion

La simulation numérique est devenue un outil essentiel d'exploration et d'investigation de notre univers qui doit être étroitement couplé avec les observations et les modèles théoriques. En particulier, les simulations numériques permettent de mener à bien des études statistiques qu'il est possible de confronter aux statistiques déduites des observations. Du

fait des échelles de temps longues, cette approche apparaît bien souvent comme la seule façon de s'affranchir de l'absence d'évolution temporelle perceptible des systèmes étudiés.

L'astrophysique présente une très vaste gamme d'échelles spatiales et temporelles, ainsi qu'une grande diversité de processus physiques. Cela pose des contraintes et des limites très sévères mais constitue également des défis techniques qui contribuent à repousser les limites de la simulation numérique aussi bien du point de vue de la taille des calculs que des algorithmes développés.

Le service d'astrophysique et le service de physique des particules couvrent un vaste ensemble de thématiques, très complémentaires. Les résultats produits, souvent le fruit d'une utilisation intensive des moyens de calcul nationaux et internationaux, constituent un ensemble dont la valeur dépasse le cadre de l'exploitation individuelle. En particulier, ils peuvent être utilisés par des observateurs afin de préparer de futures observations ou d'interpréter des observations existantes. À cet effet, une base de données de résultats de simulations est en cours de réalisation. Elle permettra une dissémination efficace de ces résultats permettant ainsi une valorisation accrue.

**Patrick HENNEBELLE, Frédéric BOURNAUD,
Allan Sacha BRUN, Sébastien FROMANG,
Amandine LE BRUN, Nathalie PALANQUE-DELABROUILLE
et Monique ARNAUD.**

Direction de la recherche fondamentale

► Références

- [1] R. TEYSSIER, "Cosmological hydrodynamics with adaptive mesh refinement. A new high resolution code called RAMSES", *A&A*, 385, pp. 337-364, 2002.
- [2] S. FROMANG, P. HENNEBELLE and R. TEYSSIER, "A high order Godunov scheme with constrained transport and adaptive mesh refinement for astrophysical magnetohydrodynamics", *A&A*, 457, pp. 371-384, 2006.
- [3] M. GONZALEZ, E. AUDIT and P. HUYNH, "HERACLES: a three-dimensional radiation hydrodynamics code", *A&A*, 464, pp. 429-435, 2007.
- [4] A. BRUN *et al.*, "Global scale turbulent convection and magnetic dynamo action in the solar envelope", *The Astrophysical Journal*, 614, pp. 1073-1098, 2004.
- [5] V. SPRINGEL, "The cosmological simulation code GADGET-2", *MNRAS*, 364, pp. 1105-1134, 2005.
- [6] A. BORDE, N. PALANQUE-DELABROUILLE, G. ROSSI, M. VIEL, J. BOLTON *et al.*, "New approach for precise computation of Lyman-alpha forest power spectrum with hydrodynamical simulations", *JCAP*, 7, 5, 2014.
- [7] G. ROSSI, N. PALANQUE-DELABROUILLE, A. BORDE, M. VIEL, Ch. YÈCHE *et al.*, "Suite of hydrodynamical simulations for the Lyman-alpha forest with massive neutrinos", *A&A*, 567, A79, 2014.
- [8] N. PALANQUE-DELABROUILLE, Ch. YÈCHE, J. LESGOURGUES, G. ROSSI, A. BORDE *et al.*, "Constraint on neutrino masses from SDSS-III/BOSS Ly α forest and other cosmological probes", *JCAP*, 2, 45 et arXiv: 1506.05976, 2015.
- [9] F. RENAUD, F. BOURNAUD, K. KRALJIC and P.-A. DUC, "Starbursts triggered by intergalactic tides and interstellar compressive turbulence", *MNRAS: Letters*, 422, pp. 33-37, 2014.
- [10] M. MARTIG, A.F. CROCKER, F. BOURNAUD *et al.*, "Low-efficiency star formation in early-type galaxies: hydrodynamic models and observations", *MNRAS*, 432, pp. 1914-1927, 2013.
- [11] J. GABOR and F. BOURNAUD, "Active galactic nuclei-driven outflows without immediate quenching in simulations of high-redshift disc galaxies", *MNRAS*, 441, pp. 1615-1627, 2014.
- [12] P. HENNEBELLE, "On the origin of non-self-gravitating filaments in the ISM", *A&A*, 556, pp. 153-171, 2013.
- [13] D. ARZOUMANIAN, Ph. ANDRÉ, P. DIDELON *et al.*, "Characterizing interstellar filaments with Herschel in IC 5146", *A&A*, 529, pp. 6-15, 2011.
- [14] O. IFFRIG, P. HENNEBELLE, "Mutual influence of supernovae and molecular clouds", *A&A*, 576, pp. 95-108, 2013.
- [15] H. MÉHEUT, S. FROMANG, G. LESUR, M. JOOS and P.-Y. LONGARETTI, "Angular momentum transport and large eddy simulations in magnetorotational turbulence: the small Pm limit", *A&A*, 579, p. 117, 128, 2015.
- [16] C. BARUTEAU, S. FROMANG, R.P. NELSON and F. MASSET, "Corotation torques experienced by planets embedded in weakly magnetized turbulent discs", *A&A*, 533, p. 84, 100, 2011.
- [17] J. FAURE, S. FROMANG and H. LATTER, "Thermodynamics of the dead-zone inner edge in protoplanetary disks", *A&A*, 564, p. 22, 37, 2014.
- [18] J. FAURE, S. FROMANG, H. LATTER and H. MÉHEUT, "Vortex cycles at the inner edges of dead zones in protoplanetary disks", *A&A*, 573, pp. 132-144, 2015.
- [19] M. FLOCK, S. FROMANG, M. GONZALEZ and B. COMMERCON, "Radiation magnetohydrodynamics in global simulations of protoplanetary discs", *A&A*, 560, pp. 43-57, 2013.
- [20] L. ALVAN, A. BRUN *et al.*, "Theoretical seismology in 3-D: nonlinear simulations of internal gravity waves in solar-like stars", *Astronomy & Astrophysics*, 565, A42-A64, 2014.
- [21] L. ALVAN, A. STRUGAREK *et al.*, "Characterizing the propagation of gravity waves in 3D nonlinear simulations of solar-like stars", *Astronomy & Astrophysics*, 581, A112-A125, 2015.
- [22] AUGUSTSON, A. BRUN *et al.*, "Grand minima and equatorward propagation in a cycling stellar convective dynamo", *Astrophysical Journal*, 809, pp. 149-174, 2015.
- [23] A. BRUN *et al.*, "Global scale turbulent convection and magnetic dynamo action in the solar envelope", *The Astrophysical Journal*, 614, pp. 1073-1098, 2004.
- [24] A. STRUGAREK, A. BRUN *et al.*, "On the Diversity of Magnetic Interactions in Close-in Star-Planet Systems", *The Astrophysical Journal*, 795, pp. 86-103, 2014.

Résolution de l'équation de Schrödinger pour les molécules et les matériaux : méthodes *ab initio* fondées sur la fonctionnelle de la densité

Introduction

L'utilisation de la mécanique quantique pour simuler les molécules et les matériaux a démarré dès la mise au point des premiers ordinateurs dans les années 60. Au départ, les méthodes de chimie quantique, basées sur la **fonction d'onde*** à N électrons, ont été principalement utilisées, puis le formalisme de la **Théorie de la Fonctionnelle de la Densité*** (DFT) a connu un essor très important à partir des années 90. Les deux articles fondateurs de cette approche ont été publiés en 1964 et 1965. Mais ce n'est qu'au début des années 90 que sa maturité et la puissance des ordinateurs ont été suffisantes pour que les applications commencent réellement. La croissance constante de la puissance de calcul délivrée par les super-ordinateurs ouvre des perspectives toujours nouvelles vers des simulations de plus en plus précises de systèmes de plus en plus complexes.

Le succès de cette méthode ne cesse d'augmenter depuis, avec une croissance quasi linéaire du nombre d'articles publiés chaque année, qui dépasse maintenant les 25 000 par an (fig. 109).

Quelles sont les origines de ce succès, en particulier dans le domaine des matériaux ? La principale est qu'il s'agit d'une méthode sans paramètre ajustable, qui permet de prédire un certain nombre de propriétés structurales, magnétiques, électroniques et optiques des matériaux. Elle est souvent utilisée comme une méthode permettant de calculer les différences d'énergies et les forces sur un ensemble d'atomes

avec un pouvoir prédictif bien supérieur à celui des potentiels interatomiques. Nous avons ainsi, par exemple, accès aux énergies de formation et de migration de défauts dans les matériaux. Il est également possible de faire des simulations de **dynamique moléculaire***, sur des tailles de systèmes et des temps encore limités. Ce succès s'explique aussi par une offre de codes, libres ou commerciaux, conviviaux et fiables, qui ont su s'adapter à l'évolution des machines de calcul, dont le code ABINIT codéveloppé par le CEA, et le code VASP, le plus utilisé dans le domaine de matériaux. Le principal inconvénient de cette méthode est sa lourdeur numérique. L'augmentation continue de la puissance de calcul a donc eu un impact direct sur les tailles de systèmes accessibles, qui restent néanmoins limitées par le fait qu'en première approximation le temps de calcul varie comme le cube du nombre d'atomes simulés. Cette évolution est illustrée sur la figure 110 par les exemples de barrières d'énergie de défauts dans les métaux, de plus en plus complexes, qui ont pu être calculées au CEA au cours de ces vingt dernières années. À noter cependant que des méthodes dites « d'ordre N », c'est-à-dire dont le temps de calcul varie linéairement avec le nombre d'atomes, ont été développées, dont celle dans le code BigDFT codéveloppé au CEA. Dans ce contexte, il n'est pas étonnant que les calculs de structure électronique représentent la très large majorité de la consommation du temps de calcul consacré aux matériaux sur les centres de calcul. L'augmentation de la puissance de calcul peut également permettre, à taille de système simulé constante, d'effectuer un très grand nombre de calculs (approche dite « *high throughput* ») par exemple pour trouver des nouvelles compositions d'alliages [2].

La DFT connaît cependant plusieurs limitations importantes. La première est qu'il s'agit d'une méthode limitée à l'état fondamental, qui est donc mal adaptée pour écrire les propriétés spectroscopiques des matériaux. Le gap dans les semi-conducteurs est ainsi typiquement sous-estimé d'un facteur deux. Les améliorations qui ont été développées pour y remédier sont décrites ci-dessous. La seconde limitation concerne les systèmes à électrons fortement corrélés, dont les matériaux à base d'**actinides***. Les approches pour y remédier vont de la DFT+U au champ moyen dynamique (ou DMFT pour *Dynamical Mean Field Theory*). La troisième limitation concerne les effets de la température autres que ceux liés aux excitations électroniques qui sont faciles à prendre en compte en DFT. Ceux liés aux vibrations atomiques peu-

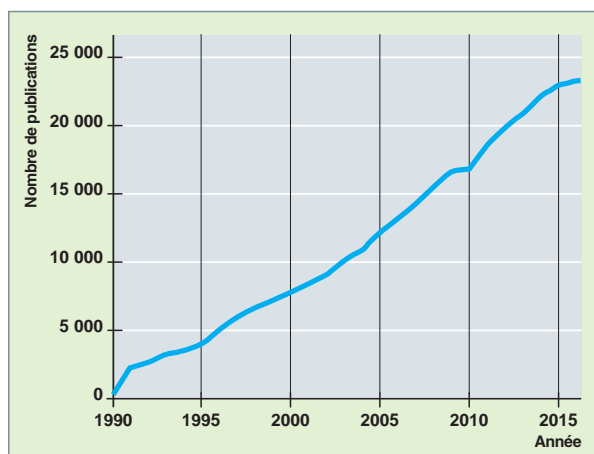


Fig. 109. Nombre annuel d'articles publiés utilisant la DFT [1].

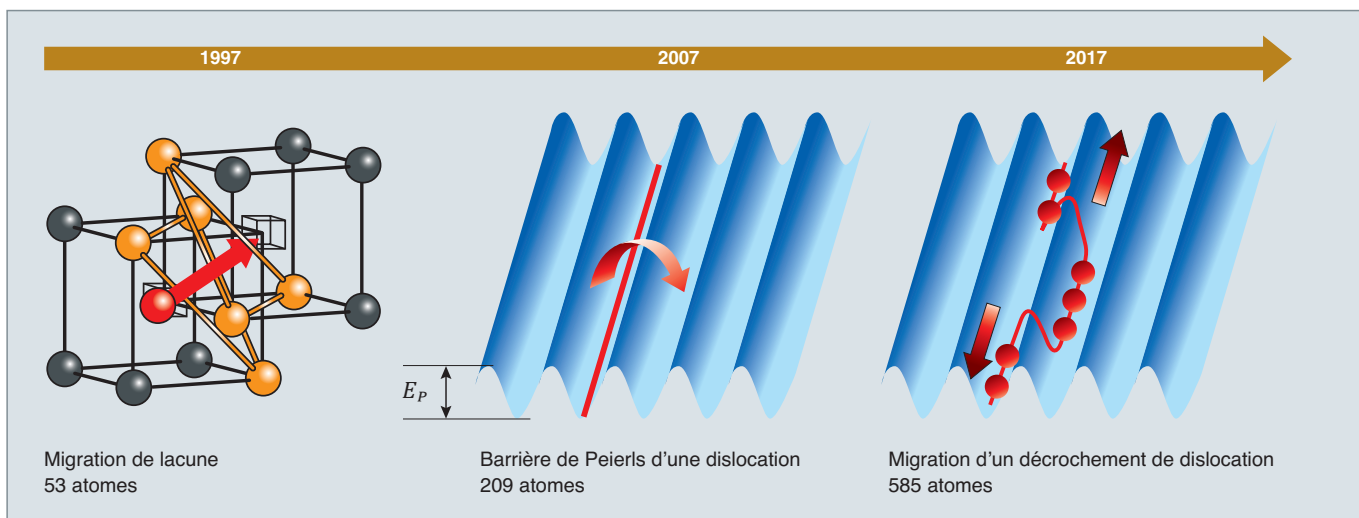


Fig. 110. Illustration de l'évolution de la complexité des défauts dans les matériaux qui ont pu être étudiés en DFT grâce à l'augmentation de la puissance de calcul. Ces trois exemples de barrières d'énergies calculées dans des métaux montrent comment nous sommes passés en deux décennies du défaut ponctuel le plus simple (la **lacune***), au défaut linéaire (**dislocation***), puis à un défaut ponctuel (décrochement) sur cette ligne de dislocation décorée d'atomes de solutés.

vent être pris en compte soit dans l'approximation quasi harmonique, soit par des simulations de dynamique moléculaire, mais au prix de calculs très lourds. Ceux liés aux excitations magnétiques commencent à être pris en compte dans des approximations de type « moments locaux désordonnés » (DLM).

Le début du chapitre est consacré à une description du formalisme mathématique de la théorie de la fonctionnelle de la densité. La suite est consacrée à la présentation de quelques exemples de calculs de structure électronique *ab initio* effectués au CEA dans trois domaines. Le premier concerne la modélisation *ab initio* des propriétés de transport électronique dans un nanofil de silicium. Le second porte sur les défauts d'irradiation dans les combustibles nucléaires effectués avec la méthode DFT+U. Enfin, le troisième montre, dans le cas des actinides, l'apport, d'une part, de la dynamique moléculaire *ab initio*, et, d'autre part, de la DMFT.

Le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité

Les méthodes dites « **ab initio*** » permettent de calculer la structure électronique et les propriétés des matériaux ou des molécules. Elles se fondent sur l'**équation de Schrödinger*** de la mécanique quantique, notamment sa version stationnaire

$$H_N \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N),$$

pour un système constitué de N électrons où $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ est une fonction d'onde antisymétrique et normalisée à 1. Le

Hamiltonien* H_N et l'énergie totale E sont donnés par

$$H_N = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \sum_{i=1}^N v_{ext}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|},$$

$$E = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) H_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N).$$

Le premier terme du Hamiltonien correspond à l'opérateur cinétique, $v_{ext}(\mathbf{r})$ est le potentiel extérieur appliqué aux électrons principalement par les noyaux atomiques et le dernier terme correspond à l'interaction électrostatique entre électrons.

L'objectif est de chercher la fonction d'onde anti-symétrique de l'état fondamental du système c'est-à-dire de plus basse énergie. L'anti-symétrie de la fonction d'onde vient du principe de Pauli qui interdit à deux électrons d'être dans le même état électronique. C'est la principale difficulté pour résoudre cette équation avec le fait qu'on doit manipuler une fonction à $3N$ coordonnées.

La majorité des méthodes de chimie quantique vont travailler dans une base anti-symétrique de fonctions d'onde formées de déterminants dit « de Slater » de N fonctions orthonormées à un électron $\{\phi_i(\mathbf{r})\}_{i=1, \dots, N}$ appelées « orbitales choisies » parmi n . La taille de cette base, c'est-à-dire le nombre de déterminants, est alors de $\binom{n}{N}$ soit un nombre variant exponentiellement en fonction du nombre d'électrons, ce qui limite les calculs à quelques dizaines d'électrons.

Le théorème d'Hohenberg-Kohn

Pour éviter de travailler avec la fonction d'onde qui contient beaucoup d'informations redondantes de par son caractère anti-symétrique, HOHENBERG et KOHN en 1964, démontrèrent que l'énergie totale de l'état fondamental est déterminée uniquement par la densité électronique et qu'il existe une relation univoque entre le potentiel extérieur $v_{ext}(\mathbf{r})$ et la densité électronique $\rho(\mathbf{r})$. Pour un potentiel extérieur, il n'existe qu'une seule densité solution et surtout pour une densité provenant d'une fonction d'onde anti-symétrique, il n'existe au plus qu'un potentiel extérieur la déterminant.

Ce qui a permis vraiment de pouvoir faire des calculs pratiques est l'idée de Kohn et Sham de considérer que la densité électronique de l'état fondamental du système interagissant peut être considérée aussi comme la densité d'un système non interagissant dans un potentiel effectif local non connu.

Nous montrons comment faire le lien avec les méthodes de chimie quantique, ce qui passe par l'identification des termes liés aux potentiels dans les équations correspondantes au cas de la fonction d'onde et de la DFT.

La construction de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

Les équations d'Euler-Lagrange pour une fonction d'onde

L'énergie totale d'un système de N électrons interagissant peut s'écrire

$$E = \sum_{ij} \gamma_{ij} \langle \phi_j | \hat{h} | \phi_i \rangle + \sum_{ijkl} \Gamma_{ijkl} \langle \phi_j \phi_l | r_{12}^{-1} | \phi_i \phi_k \rangle,$$

où $\hat{h} = -\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{ext}(\mathbf{r})$ est la partie du Hamiltonien à un électron, γ_{ij} les éléments de la matrice densité à un corps et Γ_{ijkl} sont les composantes de la matrice densité à deux corps

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= N \int d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \psi^*(\mathbf{r}, \dots, \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}', \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \sum_{ij} \gamma_{ij} \phi_i(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) &= \binom{N}{2} \int d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \sum_{ijkl} \Gamma_{ijkl} \phi_j^*(\mathbf{r}'_1) \phi_i^*(\mathbf{r}'_2) \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_k(\mathbf{r}_2), \end{aligned}$$

avec

$$\langle \phi_j | \hat{h} | \phi_i \rangle = \int d\mathbf{r} \hat{h}(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}),$$

$$\langle \phi_j \phi_l | r_{12}^{-1} | \phi_i \phi_k \rangle = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\phi_j^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}) \phi_k(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

En minimisant l'équation [E-tot] en fonction des orbitales $\{\phi_i\}$, sous la contrainte d'orthonormalisation $\langle \phi_j | \phi_i \rangle = \delta_{ij}$ et en gardant γ_{ij} et Γ_{ijkl} fixes, on obtient l'équation d'Euler-Lagrange correspondante :

$$\frac{\partial E}{\partial \phi_j^*(\mathbf{r})} = \sum_i \lambda_{ij} \phi_i(\mathbf{r})$$

où λ_{ij} sont des multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes d'orthonormalisation. En multipliant par $\phi_j^*(\mathbf{r}')$ et en sommant ensuite sur toutes les orbitales, on obtient :

$$\hat{h}(\mathbf{r}) \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + 2 \int d\mathbf{r}_2 \frac{\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}', \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} = \sum_{ij} \lambda_{ij} \phi_i(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}').$$

Les multiplicateurs de Lagrange λ_{ij} sont égaux à $\langle \phi_i | \hat{G} | \phi_j \rangle$ avec l'opérateur $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ défini par le terme gauche de l'équation [eq-G]. Pour construire l'équation qui nous intéresse, il suffit de considérer la partie diagonale $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$

$$\frac{\tau_L^{WF}(\mathbf{r})}{\rho^{WF}(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) + \frac{2}{\rho^{WF}(\mathbf{r})} \int d\mathbf{r}_2 \frac{P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} = \bar{\epsilon}^{WF}(\mathbf{r})$$

où $\rho^{WF}(\mathbf{r}) = \gamma(\mathbf{r})$ est la densité électronique et

$$\tau_L^{WF}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} |\nabla_{\mathbf{r}}^2 \gamma(\mathbf{r})|$$
 est la densité d'énergie cinétique,

$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) = \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}, \mathbf{r}_2)$ est la densité de paires

et $\bar{\epsilon}^{WF}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\rho^{WF}(\mathbf{r})} \sum_{ij} \lambda_{ij} \phi_i(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r})$ est l'énergie locale moyenne d'ionisation.

On peut toujours décomposer la densité de paires comme

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2} \rho^{WF}(\mathbf{r}) [\rho^{WF}(\mathbf{r}_2) + \rho^{WF}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2)],$$

ce qui définit la densité du trou d'échange-corrélation $\rho_{XC}^{WF}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2)$ et fait apparaître le potentiel électrostatique

$$\text{dit « de Hartree » } v_H^{WF}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}_2 \frac{\rho^{WF}(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|}$$

$$\frac{\tau_L^{WF}(\mathbf{r})}{\rho^{WF}(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) + v_H^{WF}(\mathbf{r}) + v_S^{WF}(\mathbf{r}) = \bar{\epsilon}^{WF}(\mathbf{r}),$$

avec $v_S^{WF}(\mathbf{r})$ le potentiel d'échange-corrélation de Slater.

$$v_S^{WF}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}_2 \frac{\rho_{XC}^{WF}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|}.$$

L'équation de Kohn-Sham

Dans le cas de la méthode de Kohn-Sham, l'idée fondamentale est de postuler qu'il existe un système de N électrons non-interagissant donnant la même densité $\rho^{KS}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2$ égale par hypothèse à la densité électronique du système interagissant $\rho^{WF}(\mathbf{r})$, et dont l'état fondamental a la même énergie

$$E_{KS}[\rho] = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi_i(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} v_{ext}(\mathbf{r}) \rho^{KS}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} v_H(\mathbf{r}) \rho^{KS}(\mathbf{r}) + E_{xc}[\rho].$$

Le terme $E_{xc}[\rho]$ est inconnu et correspond à l'énergie d'échange-corrélation qu'on cherche à déterminer. L'équation d'Euler-Lagrange correspondante (voir l'équation [Euler-Lagrange] pour le cas de la fonction d'onde) est appelée équation de Kohn-Sham :

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{ext}(\mathbf{r}) + v_H^{KS}(\mathbf{r}) + v_{xc}[\rho^{KS}](\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r})$$

où $v_H^{KS}(\mathbf{r}) = v_H^{WS}(\mathbf{r})$ est le potentiel électrostatique associé à la densité électronique $\rho^{KS}(\mathbf{r})$ et $v_{xc}[\rho^{KS}](\mathbf{r}) = \partial E_{xc}[\rho^{KS}] / \partial \rho^{KS}(\mathbf{r})$ est le potentiel d'échange-corrélation dépendant de la densité $\rho^{KS}(\mathbf{r})$. Si on multiplie par $\phi_i^*(\mathbf{r})$, on somme sur i puis on divise par $\rho^{KS}(\mathbf{r})$, on obtient alors

$$\frac{\tau_L^{KS}(\mathbf{r})}{\rho^{KS}(\mathbf{r})} + v_{ext}(\mathbf{r}) + v_H^{KS}(\mathbf{r}) + v_{xc}[\rho^{KS}](\mathbf{r}) = \bar{\epsilon}^{KS}(\mathbf{r}),$$

où $\tau_L^{KS}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_i \phi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi_i(\mathbf{r})$ est la densité d'énergie cinétique de Kohn-Sham et $\bar{\epsilon}^{KS}(\mathbf{r}) = (\sum_i n_i \epsilon_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2) / \rho^{KS}(\mathbf{r})$ est l'énergie locale des orbitales de Kohn-Sham.

En identifiant les termes des équations [EL-WF] et [EL-KS], le potentiel d'échange-corrélation est alors défini comme

$$v_{xc}(\mathbf{r}) = v_s^{WF}(\mathbf{r}) + \bar{\epsilon}^{KS}(\mathbf{r}) - \bar{\epsilon}^{WF}(\mathbf{r}) + \frac{\tau^{WF}(\mathbf{r})}{\rho^{WF}(\mathbf{r})} - \frac{\tau^{KS}(\mathbf{r})}{\rho^{KS}(\mathbf{r})}.$$

Il est à noter que cette procédure permet d'obtenir la même densité électronique mais ne définit que la dérivée fonctionnelle du terme d'énergie d'échange-corrélation. Le très grand avantage de l'équation de Kohn-Sham est qu'on ne calcule que les valeurs propres d'une équation locale sans dépendance entre les orbitales, ce qui en fait une méthode peu coûteuse numériquement.

Les fonctionnelles pratiques d'échange-corrélation

La procédure de construction ci-dessous n'est pas pratique, car elle requiert un calcul de fonction d'onde complet.

L'approximation la plus utilisée est l'approximation locale de la densité (LDA) où en chaque point de l'espace \mathbf{r} , l'énergie d'échange-corrélation est prise égale à celle d'un gaz homogène d'électrons de densité équivalente $\rho^{KS}(\mathbf{r})$. Cette énergie a été calculée et tabulée par des calculs de Monte-Carlo quantique.

Comme ce modèle est exact pour un gaz homogène d'électrons, des compensations d'erreurs permettent à cette approximation d'être déjà très précise. De nombreuses autres fonctionnelles existent qui tiennent compte du gradient de la densité ou d'autres paramètres.

Les codes de calcul DFT

De très nombreux codes de DFT existent différant principalement sur le type de fonctions de base utilisées pour représenter les orbitales et la densité électroniques. Les codes de chimie quantique utilisent majoritairement des fonctions gaussiennes centrées sur les atomes, car elles sont adaptées pour les systèmes isolés comme les molécules ; les codes de physique du solide, traitant de système périodique, utilisent plutôt des ondes planes. Ces deux types de fonction ont des propriétés analytiques simplifiant leur implémentation et leur utilisation. Ainsi, ABINIT co-développé au CEA utilise des ondes planes ; il est capable de simuler des systèmes de plusieurs centaines d'atomes sur des ordinateurs massivement parallèles composée de dizaines de milliers de cœurs interconnectés via un réseau rapide de type Infiniband. Le challenge est d'avoir une efficacité importante pour diminuer le temps de rendu des calculs au maximum. Comme l'équation [Kohn-Sham], dans une base de fonctions, se transforme en un ensemble d'équations linéaires, les codes diffèrent par l'efficacité en parallèle de la résolution itérative des équations linéaires, de la transformée de Fourier rapide et de la résolution de l'équation de Poisson pour déterminer le potentiel de Hartree.

L'algorithme auto-cohérent pour le calcul des densités électroniques

Pour construire la densité électronique de l'état fondamental, il faut déterminer les orbitales via l'équation 16. Or, les potentiels électrostatique et d'échange-corrélation dépendent de cette même densité. Pour résoudre ce système, un cycle auto-cohérent est utilisé sur la densité électronique. La figure 111 montre les différentes opérations nécessaires.

En raison de la nécessité de considérer des orbitales orthonormées, l'orthonormalisation des orbitales est l'étape limitante, puisque le temps de calcul augmente comme le cube de la taille du système. Des méthodes dites « ordre N », variant linéairement en fonction du nombre d'atomes, ont été développées qui utilisent des fonctions localisées comme les ondelettes (code BigDFT développé au CEA) permettant

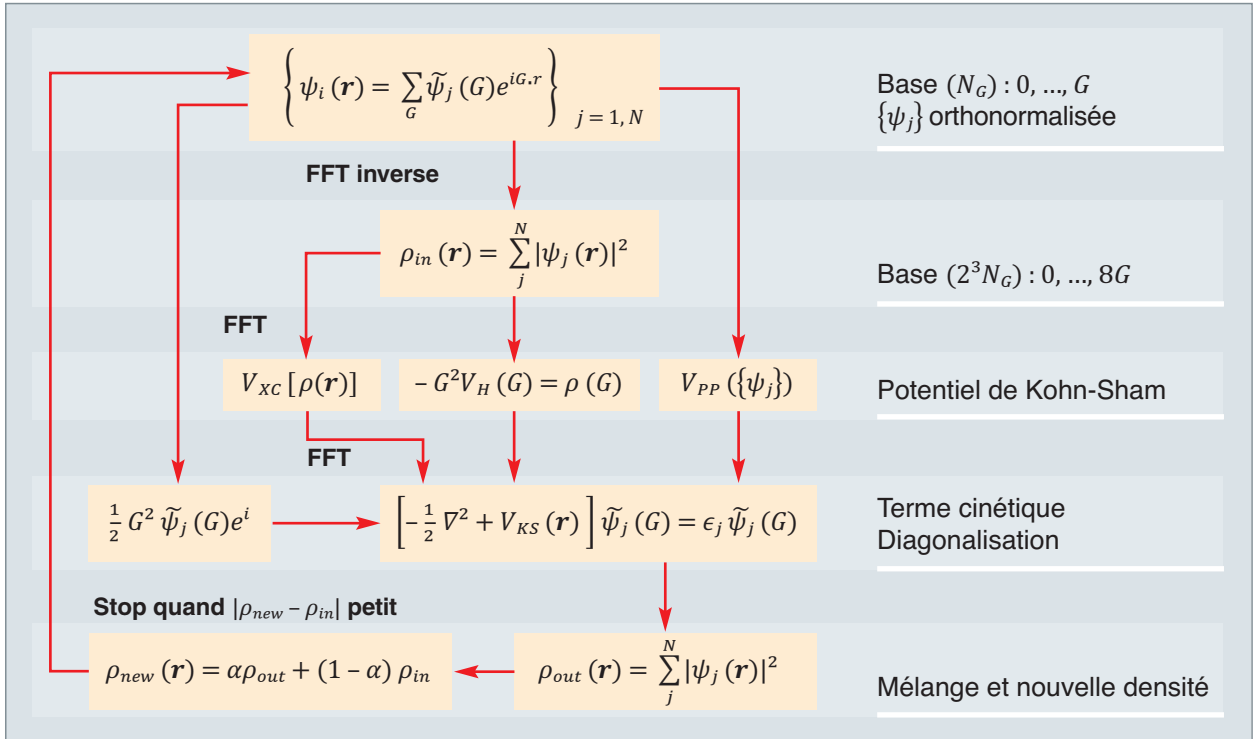


Fig. 111. Algorithme pour la résolution auto-cohérente de l'équation de Kohn-Sham avec utilisation d'ondes planes. Le Hamiltonien est considéré comme une somme d'opérateurs dans les espaces directs et réciproques. La transformée de Fourier rapide (FFT) est fortement utilisée.

d'atteindre des taille de plusieurs dizaines de milliers d'atomes sans sacrifier à la précision avec une excellente parallélisation. Il est alors possible d'associer un temps de calcul par atome permettant d'envisager de très grandes simulations, principalement dans un but de mise au point de modèles aux échelles plus grandes.

Les propriétés électroniques de la matière et des molécules

Le but principal des méthodes DFT est de pouvoir prédire de manière fine la structure électronique et surtout la structure atomique, c'est-à-dire de trouver les configurations atomiques de plus basse énergie. Ces méthodes sont transférables à de grandes classes de matériaux et sont très peu chères numériquement, par rapport aux méthodes de chimie quantique. Elles sont donc utilisées, en complément de la caractérisation, pour trouver les phases cristallines ou les configurations moléculaires les plus stables, mais aussi l'énergie de formation et de migration des défauts ponctuels ou étendus présents dans les matériaux. Pour cela, des milliers de calculs sont nécessaires pour optimiser les positions atomiques, c'est-à-dire trouver les minima en énergie, mais aussi les points cols de la surface d'énergie potentielle afin de remonter à des énergies de barrières pour la cinétique des matériaux. C'est pour cette raison qu'un calcul seul d'un

très grand système ne suffit pas si on ne peut fournir d'informations sur sa stabilité ou sa cinétique.

Ce sont les propriétés électroniques de la matière ou des molécules qui sont sondées par les expériences et impliquées dans le comportement de nombreux systèmes physiques. Une fois la structure atomique déterminée, il est donc important de pouvoir calculer de manière précise ses propriétés afin de les comparer.

La réponse linéaire (DFPT)

Une première classe de méthodes étend la DFT pour calculer les propriétés électroniques de l'état fondamental, c'est-à-dire sa réponse linéaire $\Delta\rho(\mathbf{r};\omega)$ à une faible perturbation extérieure $\Delta v_{ext}(\mathbf{r}';\omega)$.

$$\Delta\rho(\mathbf{r};\omega) = \int d\mathbf{r}' \chi(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) \Delta v_{ext}(\mathbf{r}';\omega),$$

où $\chi(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$ est, par définition, la susceptibilité électronique du système, déterminant la réponse linéaire du système à une perturbation quelconque. Via le formalisme de Kohn-Sham qui considère un Hamiltonien effectif non interagissant dans un potentiel effectif $v_{KS}(\mathbf{r})$, il est plus facile de calculer la susceptibilité électronique $\chi_0(\omega)$, définie par

$$\Delta\rho(\mathbf{r};\omega) = \int d\mathbf{r}' \chi_0(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) \Delta v_{KS}(\mathbf{r}';\omega),$$

où $\Delta v_{KS}(\mathbf{r})$ est la variation du potentiel total vu par le système et non seulement celle du potentiel extérieur uniquement. En effet, en utilisant les orbitales de Kohn-Sham occupées (ϵ_o, ϕ_o) et non occupées appelées aussi « virtuelles » (ϵ_v, ϕ_v), nous obtenons une expression simple de $\chi_o(\omega)$

$$\chi_o(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \sum_o \sum_v \frac{\phi_o(\mathbf{r}) \phi_v^*(\mathbf{r}) \phi_o^*(\mathbf{r}') \phi_v(\mathbf{r}')}{\omega - \Delta \epsilon_{v,o} + i\eta} - \frac{\phi_o^*(\mathbf{r}) \phi_v(\mathbf{r}) \phi_o(\mathbf{r}') \phi_v^*(\mathbf{r}')}{\omega + \Delta \epsilon_{v,o} + i\eta}$$

où $\Delta \epsilon_{v,o} = \epsilon_v - \epsilon_o$ et $\Delta \epsilon_{v,o} > 0$ par définition. $\eta > 0$ est une quantité infinitésimale constante afin de garder l'équation [chi0] bien définie pour tout ω .

Pour obtenir la susceptibilité électronique $\chi(\omega)$, nous construisons l'équation de Dyson en considérant plusieurs termes perturbatifs et leurs réponses aux systèmes

$$\begin{aligned} \chi &= \chi_o + \chi_o v (\chi_o + \chi_o v (\chi_o \dots \\ \chi &= \chi_o + \chi_o v \chi \end{aligned}$$

où v est le potentiel de Coulomb à deux corps. La réponse linéaire a fait l'objet de nombreux développements au cours de ces dernières années, notamment dans le code ABINIT permettant de calculer avec succès de nombreuses propriétés des solides thermiques, électriques, magnétiques et aussi couplées entre elles telle que la magnéto-électricité linéaire.

Le transport électronique dans les matériaux

La nature ondulatoire des électrons est prépondérante dans les propriétés de transport électronique des matériaux. Cependant, la théorie dite « semi-classique » suffit à décrire la plupart des dispositifs électroniques de grande taille (\geq nm). Cette théorie consiste à considérer les paquets d'onde électroniques comme des particules ponctuelles. Elle est valable si la longueur d'onde typique des électrons (qui dépend des énergies en jeu et est de l'ordre du nanomètre dans les transistors) est très inférieure aux dimensions du système. En revanche, pour des systèmes de dimensions nanométriques, ou en présence d'effets quantiques tels que l'effet tunnel, une description quantique du transport est nécessaire. De plus, même à plus grande échelle, seule la physique quantique est capable de décrire la diffusion des électrons par les imperfections du système (défauts, impuretés) et par les vibrations du réseau cristallin (**phonons***).

La fonction de Green $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ est naturellement pertinente pour étudier le transport quantique, puisqu'elle décrit la propagation d'un porteur d'un point \mathbf{r} à un temps t à un autre point \mathbf{r}' à un temps t' . Cependant, le formalisme doit être généralisé aux systèmes ouverts (connectés à des électrodes métalliques jouant le rôle de réservoirs d'électrons) et hors équilibre (différence de potentiel entre les élec-

trodes). Il s'agit du formalisme des fonctions de Green hors-équilibre (NEGF), qui est le plus utilisé pour étudier le transport à l'échelle nanométrique. Le problème à N corps étant insoluble numériquement, la méthode NEGF se base sur un Hamiltonien à un électron (par exemple, celui de Kohn-Sham). Les effets à N corps, tels que le couplage électron-phonon et le couplage électron-électron, peuvent ensuite être ajoutés de façon perturbative.

Le formalisme NEGF

À l'équilibre thermodynamique, la fonction de Green à un corps est définie par :

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \langle T[a(\mathbf{r}, t) a^\dagger(\mathbf{r}', t')] \rangle$$

où (...) désigne la moyenne thermodynamique sur les états à N corps du système, $a^\dagger(\mathbf{r}', t')$ est l'opérateur création d'un électron au point \mathbf{r}' à l'instant t' , et $a(\mathbf{r}, t)$ l'opérateur annihilation d'un électron au point \mathbf{r} à l'instant t . $T[\dots]$ est l'opérateur d'ordre temporel. Si $t > t'$, l'ordre des opérateurs est inchangé et G décrit la propagation d'un électron ajouté au système entre les instants t' et t . Si $t < t'$, l'ordre des opérateurs est inversé (ainsi que le signe de G) et G décrit la propagation d'un trou entre les instants t et t' .

Cette fonction de Green n'est pas calculable exactement pour un système d'électrons en interaction, car l'évolution temporelle des opérateurs $a^\dagger(\mathbf{r}', t')$ et $a(\mathbf{r}, t)$ est reliée au Hamiltonien à N corps. Cependant, la théorie de perturbation à N corps permet d'exprimer G en fonction de la fonction de Green G_o d'électrons indépendants (Hamiltonien h_o) et du Hamiltonien d'interaction H_I . G s'exprime comme un développement en série dont chaque terme est symbolisé par un diagramme de Feynman. L'équation du mouvement de G s'exprime de façon très concise par l'équation de Dyson :

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - h_o(\mathbf{r}) \right] G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') + dt'' d^3 \mathbf{r}'' \Sigma(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}'', t'') G(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t')$$

Si nous annulons le second membre, nous retrouvons l'équation de Schrödinger dépendant du temps à un corps. Le premier terme du second membre est un terme source correspondant à l'injection d'une particule en \mathbf{r}' à l'instant t' . Le second terme contient les interactions électroniques via la self-énergie Σ . Pour un Hamiltonien indépendant du temps (pas de perturbation extérieure transitoire), toutes les grandeurs ne dépendent que de $t - t'$; il est alors utilisé la transformée de Fourier temporelle. L'équation de Dyson s'écrit ainsi :

$$\hat{G}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \hat{h}_o - \hat{\Sigma}(\epsilon)}$$

où ϵ est l'énergie et où ont été exprimées les grandeurs sous forme d'opérateurs de façon à s'affranchir des variables spa-

tiales. Nous voyons que l'opérateur de self-énergie $\hat{\Sigma}(\epsilon)$ agit comme une correction du Hamiltonien \hat{h}_0 et modifie donc le spectre énergétique, d'où le nom de « self-énergie ». Il existe diverses approximations pour $\hat{\Sigma}(\epsilon)$, faisant intervenir des sous-classes de diagrammes de Feynman.

La validité de l'équation de Dyson repose sur l'opérateur d'ordre temporel et sur un calcul perturbatif où l'Hamiltonien d'interaction H_I est branché progressivement (« adiabatiquement ») aux temps $t \rightarrow -\infty$ et débranché aux temps $t \rightarrow +\infty$, afin que l'état final soit identique à l'état initial. Ce n'est plus vrai pour un système hors équilibre : si on couple progressivement un système à deux électrodes ayant des potentiels électrochimiques différents, on passe d'un état initial avec un système isolé à un état final où un courant électrique permanent traverse le système. Le formalisme ci-dessus peut néanmoins être appliqué en étendant le domaine de la variable temporelle au « contour » $C = C_1 + C_2$ représenté sur la figure 112, et en redéfinissant l'opérateur d'ordre temporel $T[\dots]$ de la fonction de Green sur ce contour. Ainsi, un état parcourant tout le contour revient à son état initial à $t = -\infty$.

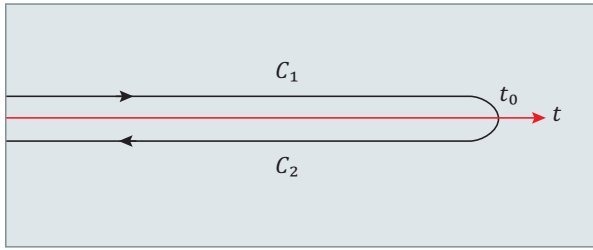


Fig. 112. Contour temporel $C = C_1 + C_2$ du formalisme NEGF. La portion C_1 va de $t = -\infty$ à t_0 et la portion C_2 de t_0 à $-\infty$. À la fin des calculs, nous passons à la limite $t_0 \rightarrow +\infty$.

Nous intégrons alors l'équation (24) selon ce contour.

Cependant, pour calculer des grandeurs physiques ou effectuer la transformée de Fourier, il est nécessaire de revenir à la variable temporelle habituelle. Pour cela, sont définies plusieurs fonctions de Green dépendant de variables temporelles standard t et t' mais munies d'un label indiquant l'appartenance de t et t' à C_1 ou C_2 . On définit par exemple les fonctions de Green dites « lesser » et « greater » :

$$G^<(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \equiv i\langle a^\dagger(\mathbf{r}', t')a(\mathbf{r}, t) \rangle$$

$$G^>(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \equiv -i\langle a(\mathbf{r}, t)a^\dagger(\mathbf{r}', t') \rangle$$

qui correspondent respectivement, dans l'équation ([eq:Gt]), au cas $t \in C_1, t' \in C_2$ ($\tau < \tau'$ sur le contour) et $t \in C_2, t' \in C_1$ ($\tau > \tau'$). Les deux autres cas donnent la fonction de Green ordonnée dans le temps $G^T(t, t' \in C_1)$ et son analogue anti-ordonnée $G^T(t, t' \in C_2)$. Mais il est plus pratique d'utiliser les fonctions de Green retardées ($G^r = G^T - G^<$) et avancées ($G^a = G^< - G^T$) :

$$G^r(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \equiv -i\theta(t - t')\langle a(\mathbf{r}, t)a^\dagger(\mathbf{r}', t') + a^\dagger(\mathbf{r}', t')a(\mathbf{r}, t) \rangle$$

$$G^a(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \equiv i\theta(t' - t)\langle a(\mathbf{r}, t)a^\dagger(\mathbf{r}', t') + a^\dagger(\mathbf{r}', t')a(\mathbf{r}, t) \rangle$$

Muni de ces définitions, nous obtenons une équation de Dyson pour G^r et G^a , et une équation un peu plus compliquée pour $G^<$:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - h_0(\mathbf{r}) \right] G^<(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' d^3\mathbf{r}'' \Sigma^r(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}'', t'') G^<(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t')$$

$$+ \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' d^3\mathbf{r}'' \Sigma^<(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}'', t'') G^a(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t')$$

Pour un système en régime permanent, il est possible d'effectuer la transformée de Fourier temporelle par rapport à $t - t'$. Après quelques manipulations, les équations de Dyson s'écrivent :

$$\hat{G}^r(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - h_0 - \hat{\Sigma}^r(\epsilon)}$$

$$\hat{G}^<(\epsilon) = \hat{G}^r(\epsilon) \hat{\Sigma}^<(\epsilon) \hat{G}^a(\epsilon).$$

La partie imaginaire de $G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \epsilon)$ donne la densité d'états locale au point \mathbf{r} et à l'énergie ϵ . Celle de $G^<(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \epsilon)$ donne la densité d'états locale occupée. Cette dernière est une quantité non triviale pour un système hors équilibre car l'occupation des états ne suit pas une distribution de Fermi-Dirac.

Le cas du transport élastique sans interactions

On considère un système fini décrit par un Hamiltonien \hat{h}_0 dans l'approximation des électrons indépendants, couplé à deux électrodes notées « L » et « R ». Ce couplage peut être décrit par des self-énergies $\hat{\Sigma}_L(\epsilon)$ et $\hat{\Sigma}_R(\epsilon)$ que nous savons calculer de façon exacte. Dans l'approximation à un corps, le formalisme NEGF se simplifie et il suffit de calculer la fonction de Green retardée. Sont obtenus les coefficients de transmission et de réflexion des fonctions d'onde électroniques arrivant de chaque électrode. La figure 113 montre l'exemple de la diffusion sur une impureté dans un gaz d'électrons 2D confiné sur un ruban de largeur $W = 5$ nm (par exemple, un nano-ruban de graphène). Pour illustrer la complexité des phénomènes ondulatoires en jeu, nous montrons l'évolution d'un paquet d'onde obtenue par résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps, équivalente à l'équation du mouvement de la fonction de Green temporelle. Puis sont tracés les coefficients de transmission issus de la fonction de Green spectrale .

Ici, le potentiel d'impureté est inclus dans le Hamiltonien \hat{h}_0 du système. La fonction de Green décrit la diffusion élastique des électrons sur l'impureté sans autre approximation que celle des électrons indépendants. Il n'est pas fait d'approxi-

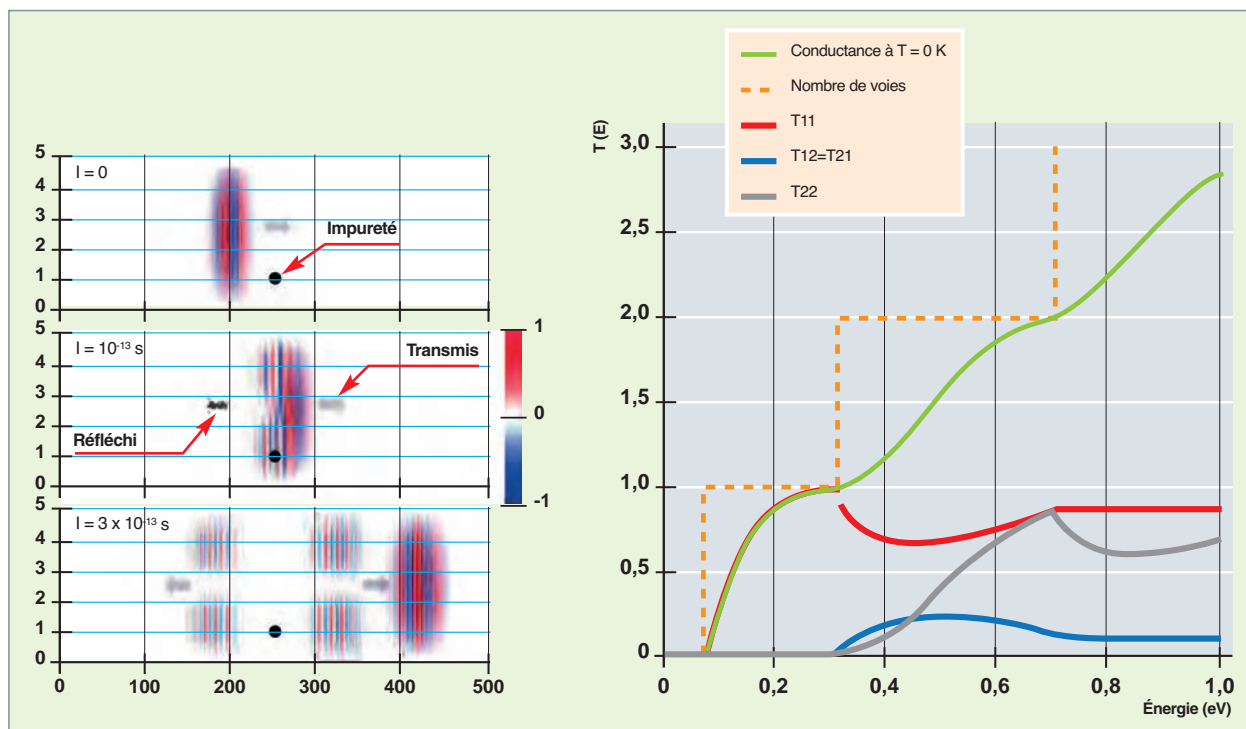


Fig. 113 Figure de gauche: diffusion d'un paquet d'onde d'électron d'énergie E 0,4 eV sur une impureté dans un ruban de largeur $W = 5$ nm. Figure de droite : coefficients de transmission des différents modes transverses en fonction de l'énergie, obtenus avec la fonction de Green (31). Vers 0,4 eV, le mode 1 est partiellement transmis vers les modes 1 et 2, reconnaissables sur la figure de gauche d'après leur nombre d'oscillations transverses.

mation perturbative au premier ordre du potentiel d'impureté. C'est l'un des gros avantages de la méthode NEGF : les défauts du système (impuretés, rugosité d'interface...) sont inclus explicitement et la diffusion des électrons par ces défauts est traitée de façon exacte.

Le coût numérique vient essentiellement de l'inversion de l'opérateur dans l'équation de Dyson, pour chaque énergie ϵ . Pour des gros systèmes, il est nécessaire d'utiliser des Hamiltoniens sur base localisée afin d'obtenir des matrices creuses. Par ailleurs, le calcul se prête bien au parallélisme massif sur la grille des énergies.

Effet de la température : la prise en compte du couplage électron-phonon

Afin de calculer une densité ou un courant à une température donnée, il faut inclure le couplage électron-phonon c'est-à-dire, ajouter à la self-énergie la contribution des phonons :

$$\hat{\Sigma}(\epsilon) = \hat{\Sigma}_L(\epsilon) + \hat{\Sigma}_R(\epsilon) + \hat{\Sigma}_{ph}(\epsilon)$$

On résout alors les équations de Dyson. Le couplage électron-phonon rend nécessaire le formalisme à N corps car la diffusion d'un électron par un phonon dépend de l'occupation

des états finals par les autres électrons. Nous ne savons pas calculer exactement $\hat{\Sigma}_{ph}(\epsilon)$ et nous avons le plus souvent recours à l'approximation de Born du premier ordre, faisant intervenir le produit $D_0 G$, où D_0 est la fonction de Green non-perturbée des phonons. Même dans cette approximation, la self-énergie $\Sigma_{ph}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \epsilon)$ est non locale, et les équations de Dyson font donc intervenir des matrices pleines, même si le Hamiltonien est creux. Le calcul n'est possible que pour des systèmes de dimensions nanométriques. Pour de plus gros systèmes, nous avons recours à une approximation locale.

La figure 114 montre l'exemple d'une simulation NEGF sur un transistor à effet de champ dont le canal est constitué d'un nanofil de silicium. La diffusion élastique des électrons par la rugosité de surface et la diffusion inélastique par les phonons sont prises en compte. Cette simulation réalisée avec le code TB_Sim développé au sein du CEA ne nécessite que quelques minutes de calcul sur un CPU, car nous avons considéré un nanofil de petit diamètre et utilisé l'approximation de la masse effective pour les électrons. Le coût numérique croît très rapidement avec la section du canal et avec la complexité du Hamiltonien ($k\mathbf{p}$ multibandes ou liaisons fortes). Le recours au calcul massivement parallèle est nécessaire pour simuler les transistors actuellement fabriqués par l'industrie ou par les laboratoires de recherche en nanoélectronique. Le parallélisme sur la grille en énergie et

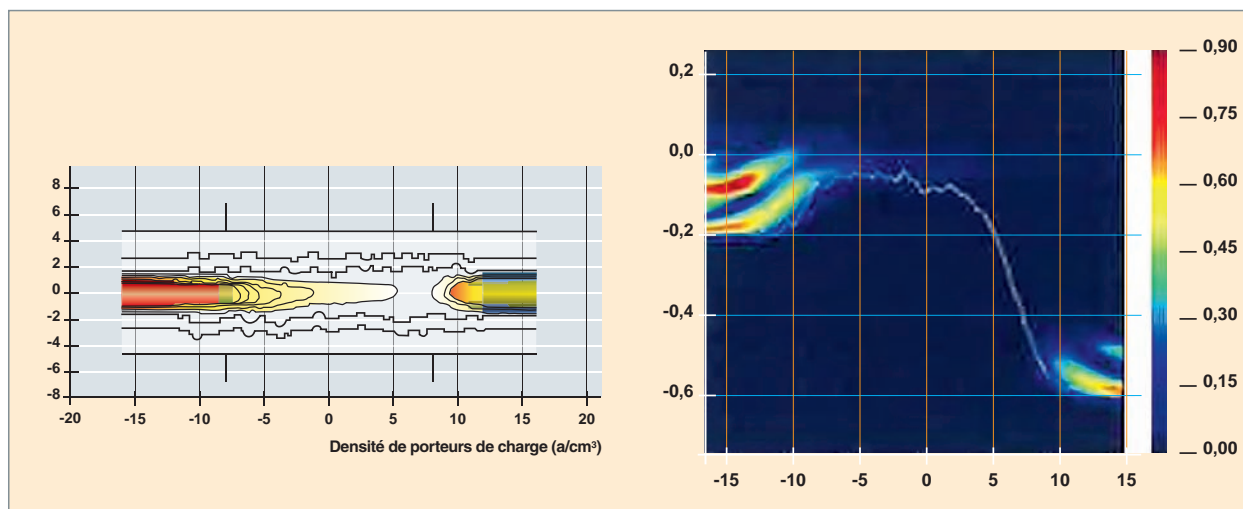


Fig. 114. Figure de gauche : densité électronique calculée en NEGF dans un transistor à nanofil de silicium avec une interface Si/SiO₂ rugueuse. Figure de droite : densité d'états locale occupée en fonction de l'abscisse le long du canal et de l'énergie.

sur les points k (pour les systèmes périodiques selon une direction transverse), offre de très bonnes performances jusqu'à plusieurs milliers de cœurs de calcul.

La modélisation *ab initio* des actinides

Les travaux menés au CEA ces dernières années dans le domaine de la matière condensée visent à mieux connaître et mieux comprendre ses propriétés dans un large domaine thermodynamique, en particulier dans des domaines extrêmes de pression (jusqu'à plusieurs Mbars) et de température (jusqu'à plusieurs eV). Les grandeurs physiques recherchées concernent, par exemple, les équations d'état, les énergies de défauts ou les propriétés magnétiques des matériaux d'intérêt.

La nécessité d'obtenir des données physiques fiables dans un large domaine thermodynamique, souvent inaccessible à l'expérience, rend incontournable la détermination théorique de ces données, sans paramètre ajustable. Les calculs de structure électronique *ab initio* se révèlent ainsi comme le moyen privilégié de les obtenir. Le développement continu des calculateurs massivement parallèles permet d'utiliser ces techniques *ab initio* pour une simulation systématique des propriétés des matériaux purs, et de leurs composés comme les oxydes et les alliages.

Les matériaux d'intérêt vont des matériaux légers comme l'hydrogène, aux éléments lourds comme les **actinides***, leurs oxydes et leurs alliages, en passant par des molécules organiques et des métaux simples. Ils présentent comme caractéristique commune d'avoir des structures cristallines

et des diagrammes de phase complexes, et il est souvent nécessaire pour calculer leurs propriétés physiques de sortir du cadre des théories standards mises habituellement en œuvre dans le domaine de la physique de la matière condensée.

Nous présentons ici deux exemples de calculs de structure électronique ayant conduit à des avancées importantes dans la description et la compréhension du comportement des actinides.

Propriétés thermodynamiques des composés d'actinides par dynamique moléculaire *ab initio*

Comparer des énergies de surface, de configurations, des enthalpies de mélanges afin d'évaluer la stabilité de différentes structures est très souvent la première application d'un calcul *ab initio*. Cependant, ces comparaisons se limitent bien souvent aux énergies totales, ce qui n'est valable que quand les effets de la température peuvent être négligés. Or, pour de nombreux phénomènes physiques en science des matériaux, ces effets sont loin d'être négligeables, et il devient nécessaire d'utiliser l'énergie libre de Gibbs.

L'effet généralement dominant de la température vient des vibrations atomiques. L'approximation quasi harmonique permet de les prendre en compte en calculant les fréquences des modes propres de vibration (phonons) en fonction des paramètres de maille et de déterminer, par exemple, la dilatation thermique. Il existe cependant des cas où cette approximation est mise en défaut. En particulier, celle-ci décrit mal les systèmes fortement anharmoniques, et elle ne permet pas de calculer l'énergie libre de Gibbs dans les sys-

tèmes dynamiquement instables comme, par exemple, la phase cubique centrée des actinides à basse température.

O. HELLMAN *et al.* [3,4] ont développé une méthode qui permet de prendre explicitement en compte les effets anharmoniques dans le calcul des fréquences de phonon, et donc dans l'énergie libre associée. Celle-ci est fondée sur le calcul des constantes de forces interatomiques par dynamique moléculaire *ab initio* (TDEP pour *Temperature Dependent Effective Potential*). En dynamique moléculaire, les forces F agissant sur chaque atome i , dues aux déplacements u des atomes j , sont données au second ordre par :

$$F_i = \sum_j D_{ij} u_j$$

où D est la matrice des constantes de forces interatomiques à déterminer. Les fréquences de phonons sont données par les valeurs propres de la matrice dynamique, qui est la transformée de Fourier des matrices élémentaires de constantes de forces. Pour un système de 128 atomes, la matrice D comporte $(128 \times 3)^2$, soit 14 7456 éléments. En imposant que la forme de la matrice D respecte les symétries du réseau il est possible de réduire spectaculairement le nombre de coefficients indépendants à rechercher. Par exemple, pour un système cubique faces centrées, les symétries permettent de réduire le nombre d'inconnues typiquement à 11.

Concrètement la matrice D est obtenue par une méthode d'ajustement de moindre carré (pseudo-inverse de Moore-Penrose) :

$$D = (F_1 \dots F_{N_t})(u_1 \dots u_{N_t})^*$$

où N_t est le nombre de pas de temps de dynamique moléculaire. Nous avons développé un code qui nous permet de réaliser l'ensemble de ces étapes (équations ci-dessus, prise en compte des symétries...).

Cette méthode a été appliquée au calcul du spectre de phonon de l'uranium qui présente une anomalie (mode mou) dont l'évolution en température n'est pas bien reproduite par les calculs quasi harmoniques effectués en DFT aux paramètres de maille expérimentaux. La stabilisation de ce mode mou à température ambiante a, au contraire, pu être reproduite avec succès avec la méthode TDEP, soulignant la nécessité d'aller au-delà de l'approximation quasi harmonique pour rendre compte des propriétés vibrationnelles de l'uranium [5], voir fig. 115. Les simulations de dynamique moléculaire *ab initio* ainsi que les calculs quasi harmoniques ont été réalisés en DFT standard avec le code de structure électronique ABINIT [6]. Ces travaux se sont poursuivis par l'obtention du diagramme de phase de l'uranium en pression et température [7].

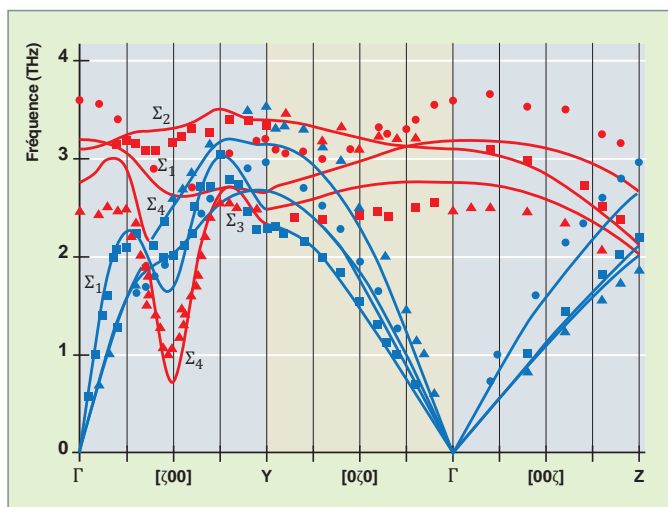


Fig. 115. Courbes de dispersion de phonon dans *a-U* à 300 K. Les traits représentent les valeurs extraites de simulations de dynamique moléculaire *ab initio* en utilisant la méthode TDEP, avec en bleu les modes principalement acoustiques et en rouge les modes principalement optiques. L'accord avec les points expérimentaux est très bon en particulier pour le mode de la branche notée Σ_4 à mi-chemin entre les points Γ et Y . Ce mode est, en effet, instable dans une approche quasi harmonique standard.

Cette méthode ouvre de nombreuses perspectives et permet d'envisager l'étude de problématiques physiques jusqu'ici difficile à aborder : calcul des **diagrammes de phase*** hautes températures et haute pression de différents matériaux ; développement des forces à l'ordre 3 pour accéder à la conductivité thermique ionique et au paramètre de Grüneisen.

Notons que ces calculs sont tout de même coûteux en temps de calcul : ainsi, pour un cas simple comme l'aluminium, le calcul d'un spectre de phonons (à une température donnée) requiert l'utilisation de 6 000 processeurs pendant dix heures.

Les corrélations électroniques dans les actinides

La compréhension et le calcul de l'équation d'état froide des actinides corrélés comme les actinides lourds restent encore un défi, malgré l'effort produit lors de ces dernières années. En effet, la complexité des diagrammes de phase, les effets de corrélations électroniques et la rareté des résultats expérimentaux rendent difficile la modélisation *ab initio* de ces éléments. En particulier, l'échec des méthodes standard comme la DFT (*Density Functional Theory*) nous a conduits à développer des modèles « au-delà de la DFT » (LDA+U, DMFT) qui sont potentiellement très consommateurs en temps de calcul : la correction dite « LDA+U » tient compte des fluctuations du nombre d'occupations entre la valeur réelle et la valeur moyenne des orbitales. Il reste néanmoins que la valeur de U est un paramètre et que dans les acti-

nides la densité d'état calculée par cette méthode est très faible au niveau de Fermi, contrairement aux résultats expérimentaux. De plus, elle a tendance à localiser exagérément les électrons.

Pour aller plus loin, il faut traiter les corrélations électroniques entre électrons 5f au-delà de la méthode LDA+U. Une voie explorée depuis quelques années est d'utiliser la méthode de champ moyen dynamique (DMFT) qui permet de prendre en compte exactement les effets de corrélations entre électrons d'un même atome, qui sont les plus importantes dans les systèmes à électrons *f*. Cette description plus précise des effets physiques doit permettre d'étudier aussi bien une phase dans laquelle les électrons sont localisés sur chaque atome du fait des corrélations, phase δ du plutonium, par exemple, que la phase α , du plutonium dans laquelle les électrons sont délocalisés même si les interactions demeurent importantes. La méthode DMFT a été implémentée dans le code ABINIT [5,8] et appliquée aux actinides afin d'obtenir une compréhension détaillée du rôle des corrélations électroniques dans leurs équations d'état. Les calculs effectués en 2016 [9] ont permis, grâce à un calcul *ab initio* de l'interaction écrantée, et la prise en compte du couplage spin orbite, de reproduire à la fois la stabilité des phases localisées et délocalisées (fig. 116). La méthode DFT+DMFT constitue donc un modèle unifié qui reproduit correctement les différences de volumes entre les phases à basse température.

À moyen terme, ces résultats ouvrent la voie à des études en température ainsi qu'à l'étude des alliages. En particulier, le calcul de grandeurs énergétiques ainsi que des forces permettront à la méthode LDA+DMFT d'étudier, dans les

années à venir, la stabilité énergétique des phases et les relaxations atomiques au sein d'un modèle unifié, valide à la fois pour des électrons délocalisés et localisés.

Numériquement, la méthode utilisée pour le calcul DMFT est la méthode Monte-Carlo quantique. Le coût du calcul DMFT est linéaire en nombre d'atomes, mais domine largement le coût du calcul DFT (qui varie comme le cube de nombre d'électrons). Le calcul DMFT se prête très bien à la parallélisation massive. À titre d'exemple, le calcul des paramètres structuraux de la phase *delta* du plutonium nécessite environ vingt heures de calcul sur 1 000 processeurs.

L'étude des défauts d'irradiation dans les combustibles nucléaires par calculs de structure électronique *ab initio*

Les codes de performance combustibles sont des outils indispensables pour la qualification de combustibles innovants pour les réacteurs nucléaires actuels et pour les réacteurs de génération IV. Pour améliorer la prédictivité des codes et réduire leurs marges d'erreur, une compréhension fine des phénomènes gouvernant le comportement des combustibles en réacteur et leurs conséquences notamment sur les propriétés mécaniques, microstructurales et thermiques est nécessaire, en complément des caractérisations de combustibles irradiés. Pour progresser dans cette compréhension, une approche de recherche amont combinant modélisation multiéchelle et expériences à effets séparés est mise en œuvre au CEA sur les combustibles.

Parmi les propriétés d'intérêt pour décrire le comportement des combustibles sous irradiation qui peuvent être obtenues à partir de simulation à l'échelle atomique, citons :

- Les propriétés des défauts élémentaires créés sous irradiation pour lesquels il faut déterminer les énergies de formation et de migration en fonction de leur état de charge ;
- les propriétés d'incorporation des **produits de fission*** (notamment les gaz de fission) et de l'hélium produit par désintégration *alpha* dans le matériau et, en particulier, dans ces défauts élémentaires : localisation, énergies d'incorporation et de migration ;
- diverses propriétés thermodynamiques des combustibles telles que la dilatation thermique, la conductivité thermique ou bien encore la température de fusion.

Les combustibles nucléaires sont des composés à base d'actinides (uranium et plutonium) qui présentent des spécificités rendant leur description délicate par les calculs de structure électronique. D'une part, l'uranium et le plutonium comportent des électrons 5f parmi leurs électrons de

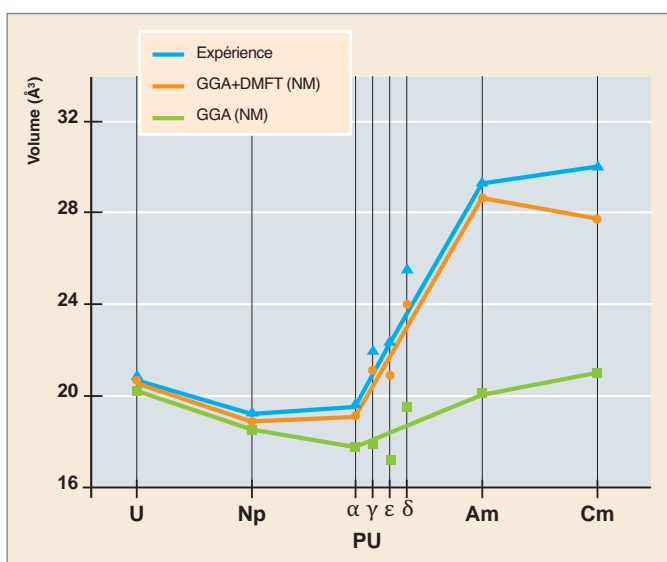


Fig. 116. Volume d'équilibre des actinides (\AA^3). Les points noirs sont les résultats expérimentaux ; les points orange correspondent à un calcul DFT standard et les points rouges à un calcul DMFT.

valence et ces derniers, du fait de leur localisation proche des noyaux dans de nombreux composés, sont fortement corrélés. Ils sont donc très mal décrits par la théorie standard de la fonctionnelle de la densité et nécessitent un traitement adéquat. D'autre part, les oxydes d'actinides sont des composés iono-covalents et possèdent des ordres magnétiques et des diagrammes de phases complexes. En particulier, les cations peuvent présenter, dans ces composés, divers états d'oxydation (+III, +IV, +V et +VI pour l'uranium, +III et +IV pour le plutonium) en fonction de la stœchiométrie, ce qui influe notablement sur les propriétés des composés. En outre, les gaz de fission et l'hélium (produits dans le combustible lors de l'irradiation en réacteur) sont des gaz rares et nécessitent eux aussi un traitement particulier en raison des interactions spécifiques qu'ils forment. Toutes ces contraintes conduisent à des simulations extrêmement coûteuses en ressources de calcul. Plusieurs millions d'heures de calculs sont actuellement nécessaires pour déterminer les énergies de formation des défauts ponctuels dans un composé donné.

Sur la base de notre expérience en calcul de structure électronique, nous avons depuis une dizaine d'années fait le choix d'utiliser la méthode DFT+ U pour étudier les propriétés d'intérêt pour le comportement des oxydes d'actinides sous irradiation. Cette dernière permet notamment de capter le caractère isolant de ce matériau, contrairement à la DFT standard. Le dioxyde d'uranium est, en effet, un isolant de Mott, sa densité d'états électroniques présentant une bande interdite (gap) qui sépare les bandes 5*f* de l'uranium. Ce gap est directement lié aux fortes corrélations qui existent entre les électrons 5*f* des atomes d'uranium et qui conduisent à leur localisation spatiale. La méthode DFT+ U (correction de Hubbard) permet un meilleur traitement de ces corrélations par l'ajout d'un terme d'interaction coulombien U qui augmente les corrélations électroniques et la localisation des électrons corrélés autour des noyaux. Dans le cadre de la DFT standard, les occupations des orbitales électroniques sont figées et réparties sur toutes les orbitales

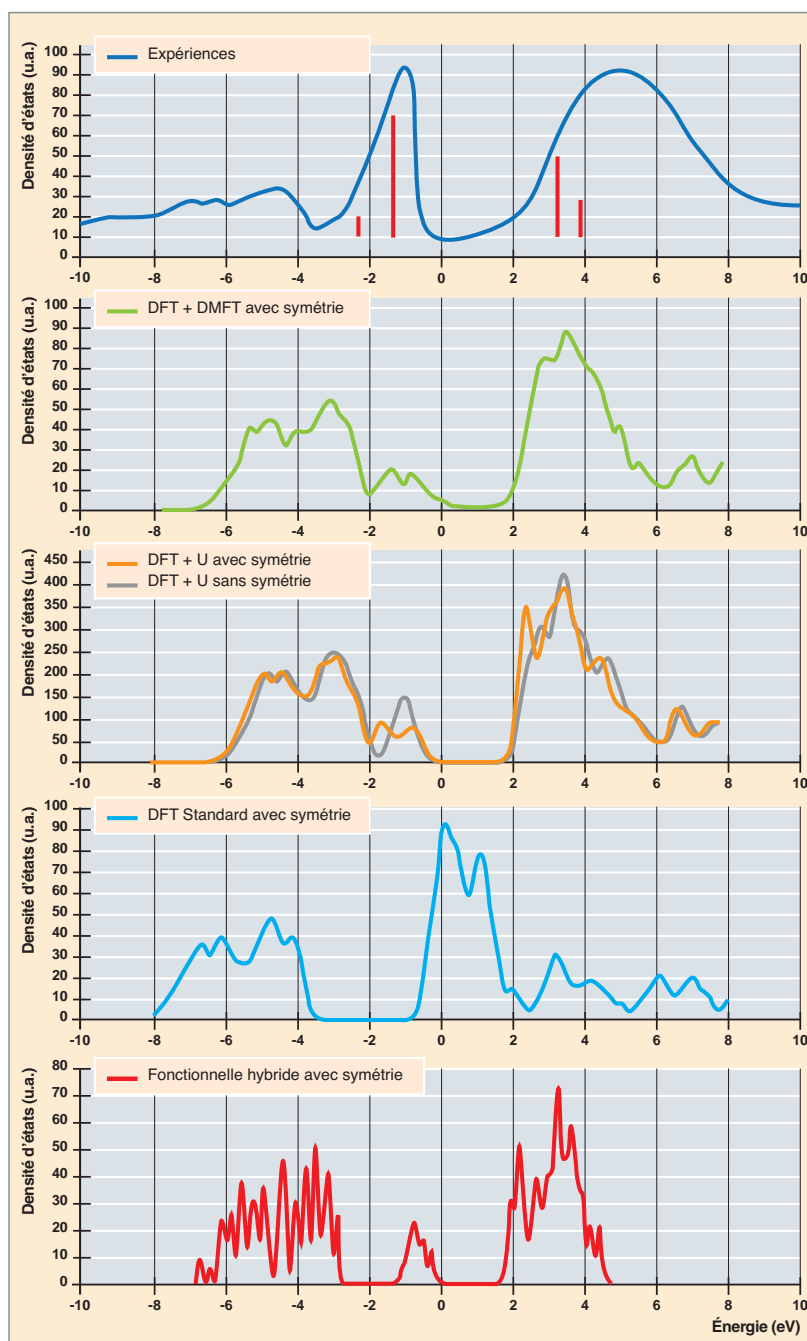


Fig. 117. Comparaison des densités d'états du dioxyde d'uranium obtenues par calcul *ab initio* dans l'ordre AFM (DFT standard : bleu, DFT+ U : orange et gris, DFT+DMFT : vert) avec les spectres obtenus expérimentalement (température ambiante, ordre paramagnétique) (bleu foncé) [36] et par fonctionnelle hybride (rouge).

f de l'uranium, ce qui conduit à un état métallique comme nous pouvons le constater sur la densité d'états électroniques de la figure 117. Lorsque nous appliquons la correction de Hubbard, en revanche, une occupation entière des orbitales est favorisée et un gap apparaît entre les orbitales 5*f* occupées et vides. Par conséquent, l'état fondamental de l' UO_2 est alors bien isolant avec un gap de l'ordre de 2 eV très proche de la valeur expérimentale de 2,1 eV.

La méthode DFT+ U qui est une méthode de champ moyen statique n'est pas bien adaptée au traitement du paramagnétisme, état magnétique de l' UO_2 au-dessus de la température de Néel (32,4 K). Pour cela, il est nécessaire d'avoir recours à une méthode de champ moyen dynamique telle que la DMFT (*Dynamical Mean Field Theory*). Cette dernière permet de modéliser le caractère paramagnétique des matériaux en incluant les fluctuations dynamiques de spin propres au magnétisme de CURIE. Bien qu'elle constitue la méthode la plus précise actuellement pour traiter les systèmes à électrons fortement corrélés, son utilisation reste encore limitée, du fait des ressources numériques qu'elle exige. Nous l'avons tout de même appliquée récemment à l' UO_2 afin de démontrer que la DFT+ U offre un compromis acceptable entre description physique et coût numérique [10]. Pour cela, nous nous sommes notamment focalisés sur les propriétés électroniques en comparant les densités d'états obtenues avec la DFT, la DFT+ U , les fonctionnelles hybrides et la DFT+DMFT (voir la figure 117) dans l'approximation Hubbard 1. Pour cette comparaison, nous avons fait le choix de ne considérer que l'ordre antiferromagnétique quelle que soit la méthode de calcul utilisée. Dans ce cas, nous voyons clairement sur la figure 117 que les méthodes DFT+ U et DFT+DMFT conduisent à des densités d'états très voisines. Même si le gap obtenu en DFT+DMFT, 1,66 eV, est plus faible que celui obtenu en DFT+ U , la structure de bandes est similaire.

Cette intercomparaison valide le choix que nous avons fait depuis une dizaine d'années de rechercher les propriétés de l' UO_2 , et notamment des défauts d'irradiations, avec la méthode DFT+ U . Signalons qu'en parallèle nous avons également profité de l'émergence des fonctionnelles d'échange-corrélation non locales permettant de décrire les interactions de Van der Waals (VdW-DF) pour améliorer le traitement des produits de fission tels que les gaz rares dans l' UO_2 .

Si la méthode DFT+ U est bien adaptée à la description des matériaux combustibles, son utilisation requiert toutefois beaucoup de soin pour en garantir les résultats. La méthode DFT+ U permet de rendre compte du caractère isolant des oxydes d'actinides en levant la dégénérescence des orbitales 5f. Cette levée de dégénérescence a pour conséquence directe d'autoriser plusieurs façons de remplir ces orbitales selon le degré d'oxydation de l'actinide. Par exemple dans le composé UO_2 , l'uranium est très majoritairement présent sous forme d'uranium 4+, de structure électronique $[\text{Rn}]5f^2$. Il y a 21 possibilités de remplissage des sept orbitales 5f avec deux électrons (sans compter les dégénérescences liées à la symétrie du cristal), donc 21 états possibles et des barrières significatives entre les différents états. La résolution du problème électronique en DFT+ U ne permet pas toujours, de ce fait, de converger vers l'état fondamental, c'est-à-dire celui de plus basse énergie. Pour contourner ce problème, nous avons mis au point une procédure baptisée OMC (*Occupation Matrix Control*) qui consiste à conditionner

les simulations de manière à s'assurer qu'elles convergent vers l'état fondamental. Sans cette procédure, des erreurs de plusieurs électron-volts sont couramment obtenues sur les énergies de formation des défauts ponctuels [11].

L'application de la DFT+ U combinée à la méthode OMC permet d'obtenir des propriétés fiables pour l'ensemble des défauts ponctuels de composés tels que l' UO_2 [12] ou les MOX (oxydes mixtes d'uranium et de plutonium). Afin d'illustrer les succès de notre démarche, nous présentons ci-dessous les résultats d'une étude récente qui nous a permis, sur la base d'une comparaison entre résultats de calculs de structure électronique et de spectroscopie d'annihilation de positons, de déterminer la nature des défauts créés sous irradiation dans l' UO_2 [13].

Des échantillons de dioxyde d'uranium préalablement irradiés par des particules α de 45 MeV à une fluence de $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ afin de simuler l'endommagement sous irradiation ont été caractérisés par spectroscopie d'annihilation de positons. Le temps de vie des positons dans ces échantillons a été mesuré en fonction de la température entre 15 et 300 K. Deux composantes de temps de vie ont pu être mises en évidence, quelle que soit la température de mesure, $\tau_1 = 170 \pm 5 \text{ ps}$, très proche du temps de vie des positons dans le réseau, et $\tau_2 = 310 \pm 5 \text{ ps}$. L'observation de ces deux composantes signifie que les positons s'annihilent dans des défauts lacunaires et autour de défauts non lacunaires, qui sont de plus neutres ou chargés négativement pour être « vus » par les positons chargés positivement. Nous avons utilisé un modèle de piégeage de positon pour simuler l'évolution des caractéristiques d'annihilation des positons observée en fonction de la température (voir la figure 118). Trois types de pièges doivent être considérés pour reproduire l'ensemble des caractéristiques observées : majoritairement des défauts lacunaires neutres, mais également des défauts lacunaires chargés négativement et des défauts non lacunaires également chargés négativement.

Ces résultats expérimentaux ont été confrontés aux résultats de calculs de structure électronique sur un ensemble de défauts interstitiels et lacunaires dans UO_2 : des mono et di-interstitiels d'oxygène, des monolacunes (oxygène, uranium et mixtes oxygène-uranium) jusqu'à des amas de six lacunes. La théorie de la fonctionnelle de la densité à deux composantes (une pour les électrons et l'autre pour le positon) basée sur l'imbrication de deux schémas DFT complètement auto-cohérents a été mise en œuvre pour déterminer les temps de vie de positon associés à chacun de ces défauts. Chaque défaut a, de plus, été relaxé en prenant en compte les forces dues à la présence du défaut et à celle du positon localisé dans le défaut lacunaire. L'interprétation des observations expérimentales sur la base des résultats de nos simulations DFT+ U et du modèle de piégeage de positon associé nous a permis de montrer que la trilacune neutre composée d'une lacune uranium associée à deux lacunes

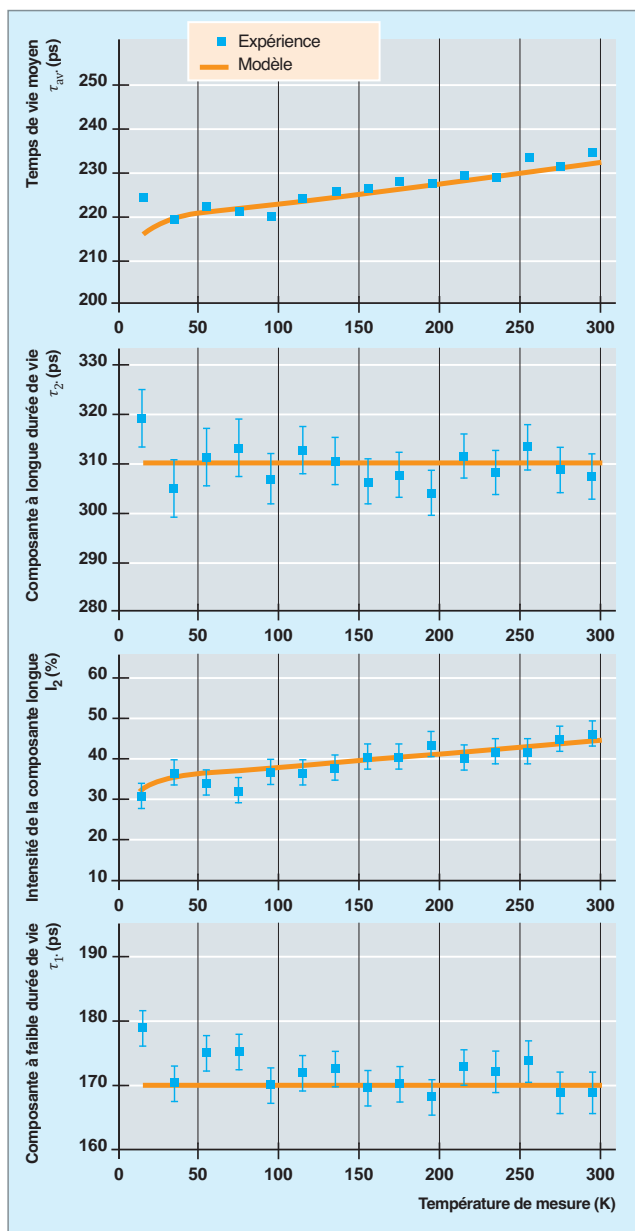


Fig. 118. Évolution du temps de vie de positron moyen τ_{av} , des composantes courtes et longues (τ_1 et τ_2) et de l'intensité de la composante longue I_2 , détectées dans des échantillons d' UO_2 irradiés avec des α de 45 MeV à une fluence de $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, en fonction de la température de mesure. Les lignes pleines représentent les fits des données expérimentales obtenus par un modèle de piégeage de positon.

oxygène ($V_U + 2V_O$), encore appelée « défaut de Schottky », est le défaut prédominant détecté dans les échantillons irradiés aux α de 45 MeV. Dans ce défaut, le positon se piège préférentiellement dans la lacune uranium comme nous pouvons le voir sur la figure 119. Les défauts lacunaires chargés négativement sont probablement un mélange de bilacunes $V_U + V_O$ et tetralacunes $2V_U + 2V_O$. Les défauts non lacunaires sont supposés être des mono-interstitiels et/ou des

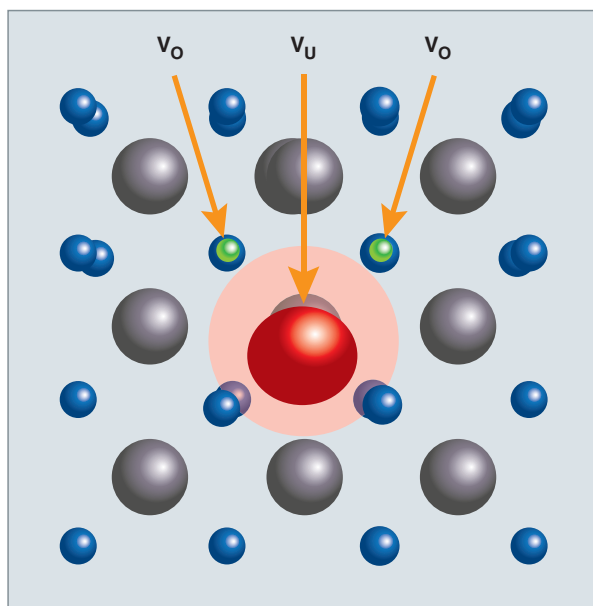


Fig. 119. Isodensités calculées pour un positon piégé dans le défaut de Schottky ($V_U + 2V_O$)^o(110) [en rouge foncé l'isodensité à 70 % de la densité maximale et en rouge clair à 30 % de la densité maximale]. Les atomes d'uranium sont représentés en gris et les atomes d'oxygène en bleu. Les sphères vertes correspondent aux lacunes oxygène.

clusters d'interstitiels oxygène, qui sont préférentiellement chargés négativement dans un composé ionique tel que l' UO_2 .

Ce résultat montre que le couplage d'un travail expérimental précis et de calculs réalisés avec soin est un moyen efficace pour obtenir des informations de premier ordre sur les défauts induits par l'irradiation dans l' UO_2 .

Conclusions et perspectives

Les exemples ci-dessus illustrent les capacités de la théorie de la fonctionnelle de la densité à simuler principalement la structure des matériaux. Celle-ci reste une théorie de l'état fondamental, mais, depuis quelques années, les formalismes basés sur la théorie de perturbation à N corps notamment les méthodes GW et Bethe-Salpeter ont permis d'aller au-delà de la DFT et décrivent les processus d'excitations tels que la photoémission, directe ou inverse. Ainsi, le code Fiesta, développé au CEA, a permis de simuler des spectres d'absorption et d'émission des molécules organiques utilisées dans les diodes électro-luminescentes organiques (OLED) en utilisant des fonctions gaussiennes. Ces théories continuent à être développées pour permettre de simuler des molécules dans un solvant, par exemple. Grâce à la puissance des ordinateurs, il devient possible de prédire la structure et la propriété des matériaux. Ces méthodes

seront de plus en plus utilisées à l'avenir pour définir des classes de matériaux possédant une propriété spécifique, en vue de leur sélection pour une application donnée. C'est parce que ces méthodes se fondent sur l'équation de Schrödinger qu'elles sont très transférables d'un matériau à un autre et sont de plus en plus utilisées dans le milieu académique, mais aussi au sein des entreprises. L'expertise accumulée au sein du CEA permet d'aborder les nombreux défis matériaux, que ce soit dans le domaine de l'énergie, de l'électronique mais aussi de la santé.

Thierry DEUTSCH, Yann-Michel NIQUET, Ivan DUCHEMIN,

Direction de la recherche fondamentale

François JOLLET, Bernard AMADON,

Direction des applications militaires

François WILLAIME, Fabien BRUNEVAL, Gérald JOMARD,

Direction des énergies

François TRIOZON et Jean-Charles BARBE

Direction de la recherche technologique

► Références

[1] P. MAVROPOULOS et P. DEDERICHS, *Psik Highlight*, 135, 1, 2017.

[2] S. CURTAROLO, G.L.W. HART, M. BUONGIORNO NARDELLI, N. MINGO, S. SANVITO and O. LEVY, "The high-throughput highway to computational materials design", *Nature Materials*, 12, p. 191, 2013.

[3] O. HELLMAN, I.A. ABRIKOSOV et S.I. SIMAK, *Phys. Rev. B*, 84, 180301, 2011.

[4] O. HELLMAN, P. STENETEG, I.A. ABRIKOSOV et S.I. SIMAK, *Phys. Rev. B*, 87, 104111, 2013.

[5] J. BOUCHET et F. BOTTIN, *Phys. Rev. B*, 92, 174108, 2015.

[6] X. GONZE, F. JOLLET, F. ARUJO *et al.*, *Computer Physics Communications*, 205, pp. 106-131, 2016.

[7] J. BOUCHET et F. BOTTIN, *Phys. Rev. B*, 95, 054113, 2017.

[8] B. AMADON, *J. Phys.: Condens. Matter*, 24, 075604, 2012.

[9] B. AMADON, *Phys. Rev. B*, 94, 115148, 2016.

[10] E. VATHONE, *Étude par calcul de structure électronique des dégâts d'irradiation dans le combustible nucléaire UO₂ : comportement des défauts ponctuels et gaz de fission*, Thèse, Aix-Marseille université, 2014.

[11] B. DORADO *et al.*, "Advances in first-principles modelling of point defects in UO₂: f electron correlations and the issue of local energy minima", *J. Phys. Cond. Mat.*, vol. 25, issue 33, 2013.

[12] M. BERTOLUS, M. FREYSS, M. KRACK and R. DEVANATHAN, "Assessment of current atomic scale modelling methods for the investigation of nuclear fuels under irradiation: Example of uranium dioxide (NEA-NSC-R-2015-5)", Nuclear Energy Agency of the OECD (NEA), 2015.

[13] J. WIKTOR *et al.*, "Coupled experimental and DFT plus U investigation of positron lifetimes in UO₂", *Phys. Rev. B*, vol. 90, issue 18, 2014.

► Bibliographie

BLASE (X.), ATTACALITE (C.) and OLEVANO (V.), "First-principles GW calculations for fullerenes, porphyrins, phthalocyanine, and other molecules of interest for organic photovoltaic applications", *Phys. Rev. B*, 83 :115103, Mar 2011. [BA011]

BULAT (F.A.), HEATON-BURGESS (T.), COHEN (A.J.) and Yang (W.), "Optimized effective potentials from electron densities in finite basis sets", *The Journal of Chemical Physics*, 127(17) :174101, 2007. [BHBCY07]

CASIDA (M.E.), *Time-dependent density functional response theory for molecules*, in D. P. Chong, editor, *Recent Advances in Density Functional Methods*, Part. I, p. 155, World Scientific, Singapore, 1995. [Cas95]

CAROLI (C.), COMBESCOT (R.), NOZIERES (P.) and SAINT-JAMES (D.), "Direct calculation of the tunneling current", *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 4(8) :916, 1971. [CCNSJ71]

CAROLI (C.), COMBESCOT (R.), NOZIERES (P.) and SAINT-JAMES (D.), "A direct calculation of the tunnelling current : Iv. electron-phonon interaction effects", *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5(1) :21, 1972. [CCNSJ72]

JOLIET (F.), TORRENT (M.) and HOLZWARTH (N.), "Generation of projector augmented-wave atomic data : A 71 element validated table in the xml format", *Computer Physics Communications*, 185(4), pp. 1246-1254, April 2014. [cJTH14]

DUNLAP (B.I.), CONNOLLY (J.W.D.) and SABIN (J.R.), "On some approximations in applications of xa theory", *The Journal of Chemical Physics*, 71(8), pp. 3396-3402, 1979. [DCS79]

FABER (C.), ATTACALITE (C.), OLEVANO (V.), RUNGE (E.) and BLASE (X.), "First-principles GW calculations for dna and rna nucleobases", *Phys. Rev. B*, 83 :115123, Mar 2011. [FA0+11]

GONZE (X.), AMADON (B.), ANGLADE (P.-M.), BEUKEN (J.-M.), BOTTIN (F.), BOULANGER (P.), BRUNEVAL (F.), CALISTE (D.), CARACAS (R.), COTE (M.), DEUTSCH (T.), GENOVESE (L.), GHOSEZ (Ph.), GIANTOMASSI (M.), GOEDECKER (S.), HAMANN (D.R.), HERMET (P.), JOLIET (F.), JOMARD (G.), LEROUX (S.), (M.) MANCINI, (S.) MAZEVET, OLIVEIRA (M.J.T.), ONIDA (G.), POUILLON (Y.), RANGE (T.), RIGNANESE (G.-M.), SANGALII (D.), SHALTAF (R.), TORRENT (M.), VERSTRAETE (M.J.), ZERAH (G.) and ZWANZIGER (J.W.), "Abinit : First-principles approach to material and nanosystem properties", *Computer Physics Communications*, 2009. [GAA+09]

GOEDECKER (S.), TETER (M.) and HUTTER (J.), "Separable dual-space Gaussian pseudopotentials", *Physical Review B*, 54(3) p. 1703, 1996. [GTH96]

HOHENBERG (P.) and KOHN (W.), "Inhomogeneous electron gas", *Physical Review*, 136(3B), B864, 1964. [HK64]

KADANOFF (L.P.) and BAYM (G.), *Quantum Statistical Mechanics*, Westview Press, 1994. [KB94]

KELDYSH (L.V.), "Diagram Technique for Nonequilibrium Processes", *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 20(4), pp. 1018, 1965. [Kel65]

KOHN (W.) and SHAM (L.J.), "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", *Physical Review A*, 140, pp. 1133-1138, 1965. [KS65]

LEJAEGERE (K.), BIHLMAYER (G.), BLAHA (P.), BI (S.), BLUM (V.), CALISTE (D.), CASTELLI (I.E.), CLARK (S.J.), DAI CORSO (A.), DE GIRONCOLI (S.), DEUTSCH (T.), DEWHURST (J.K.), DI MARCO (I.), DRAXL (C.), DULAK (M.), ERIKSSON (O.), GARRITY (K.F.), GENOVESE (L.), GIANNOZZI (P.), GIANOMASSI (M.), GOEDECKER (S.), GONZE (X.), GR (O.), HAMANN (D.R.), HASNIP (P.J.), HOLZWARTH (N.A.W.), LUS (D.), JOCHYM (D.B.), JONES (D.), KRESSE (G.), KOEPERNIK (K.), EMINE (K.), LOCHT (I.L.M.), LUBECK (S.), MARSMAN (M.), MARZARI (N.), NITZSCHE (U.), NORDSTR (L.), OZAKI (T.), PAULATTO (L.), PICKARD (C.J.), POELMANS (W.) and MATT (I.J.), "Reproducibility in density-functional theory calculations of solids", 351(6280), p. 1415, 2016. [LBB+16]

MOHR (S.), RATCLIFF (L.E.), BOULANGER (P.), GENOVESE (L.), CALISTE (D.), DEUTSCH (T.) and GOEDECKER (S.), "Daubechies wavelets for linear scaling density functional theory", *The Journal of chemical physics*, 140(20), p. 204110, may 2014. [MRB+14]

MOHR (S.), RATCLIFF (L.E.), GENOVESE (L.), CALISTE (D.), BOULANGER (P.), GOEDECKER (S.) and DEUTSCH (T.), "Accurate and efficient linear scaling DFT calculations with universal applicability", *Physical chemistry chemical physics : PCCP*, 17, pp. 31360-31370, 2015. [MRG+15]

PAYNE (M.C.), TETER (M.P.), ALLAN (D.C.), ARIAS (T.A.) and JOANNOPOULOS (J.D.), "Iterative minimization techniques for *ab initio* total energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients", *Reviews of Modern Physics*, 64(4), pp. 1045-1097, 1992. [PTA + 92]

RYABINKIN (I.G.), KOHUT (S.V.) and STAROVEROV (V.N.), "Reduction of Electronic Wave Functions to Kohn-Sham Effective Potentials", *Physical Review Letters*, 115(8), p. 083001, 2015. [RKS15]

SCHREIBER (M.), SILVA-JUNIOR (M.R.), SAUER (S.P.A.) and THIEL (W.), "Benchmarks for electronically excited states: Caspt2, cc2, ccSD, and cc3", *The Journal of Chemical Physics*, 128(13), 2008. [SSJST08]

(J.L.) WHITTEN, "Coulombic potential energy integrals and approximations", *The Journal of Chemical Physics*, 58(10), pp. 4496-4501, 1973. [Whi73]

WEIGEND (F.), HUISER (M.), PATZELT (H.) and AHLRICHS (R.), "Rimp2: optimized auxiliary basis sets and demonstration of efficiency", *Chemical Physics Letters*, 294(1-3), pp. 143-152, 1998. [WHPA98]

Dynamique moléculaire : principes et applications aux éléments f en solution

Introduction

L'utilisation de l'informatique pour calculer les phénomènes macroscopiques à partir d'une description au niveau atomique est très ancienne. Dès les premières études numériques, dans les années 50 [1], on a cherché à représenter la matière en simulant les atomes la constituant grâce aux premiers ordinateurs disponibles dans le but de dégager des lois générales macroscopiques. Dans un premier temps, les modèles étaient, bien sûr, très grossiers. Les premiers travaux modélisaient, par exemple, les atomes comme des palets de formes circulaires s'entrechoquant sans rotations sur une surface, mais assez rapidement il est apparu que la puissance des machines pourrait à terme espérer déduire les propriétés et les lois macroscopiques directement à partir d'une représentation numérique de la matière atomique. C'est cette tentative, au moins en partie réussie, que nous allons décrire ici en présentant des exemples souvent tirés de la modélisation des solutions, en particulier d'**éléments f** , particulièrement importants pour l'amont et l'aval du cycle électronucléaire.

Le principe des simulations moléculaires

La difficulté des représentations atomiques

Sans les ordinateurs, le lien entre le monde microscopique et les lois macroscopiques (à l'échelle humaine) est, en effet, très délicat à réaliser. C'est le but d'une discipline appelée « thermodynamique statistique ». Longtemps, celle-ci en a été réduite à s'intéresser à des modèles idéalisés de la matière, qui permettent une réelle compréhension physique des phénomènes mis en jeu, mais rarement une description quantitative précise, sans paramètres ajustables, validée par des comparaisons extensives avec des mesures expérimentales. La thermodynamique statistique nécessite, en effet, de faire le calcul de moyennes sur de nombreuses variables microscopiques (position et quantités de mouvements de chaque atome pour les modèles classiques, par exemple) et ce calcul n'est pas possible exactement pour les systèmes réels. Sans outil numérique performant, la modélisation est donc amenée à faire deux types d'approximations :

- *D'une part, des approximations de type physique* simplifiant la description atomistique de la matière. Ne sont pas prises en compte les forces entre atomes microscopiques de

façon précise, comme il serait possible de le faire à partir de la mécanique quantique. Le système est plutôt défini par une représentation phénoménologique beaucoup plus simple. Cela peut être, par exemple, une représentation de sphères dures. Celle-ci ne peut alors prétendre à une description quantitative. Cette première approximation physique consiste ainsi, en pratique, à définir un modèle atomistique du système ;

- *d'autre part, des approximations de type mathématique* incontournables pour calculer les propriétés macroscopiques de la matière. Sont par exemple résolues les équations dans le cas des basses densités ou des faibles concentrations, où nous faisons une approximation de champ moyen dans laquelle chaque atome voit un effet moyen de ses atomes environnants.

Ces deux types d'approximations, physique et mathématique, limitent ainsi, sans l'utilisation de l'ordinateur, l'utilisation des modèles microscopiques à des descriptions semi-qualitatives valides dans des cas restreints. Par exemple, dans le domaine des solutions d'électrolytes, Debye, Hückel, Falkenhagen et Onsager avaient pu dans les années 1920-1930 (voir, par exemple, la référence [2]) prédire les lois de l'équilibre (coefficients d'activités) et du transport (conductivité, diffusion et viscosité), mais seulement dans le cas des solutions très diluées (10^{-1} mol.L⁻¹ dans le meilleur des cas), ce qui est d'un intérêt évident pour la chimie analytique, mais peu pertinent pour la description de dispositifs industriels où les concentrations sont plusieurs fois molaires.

Les simulations moléculaires développées ces cinquante dernières années ont totalement révolutionné cela, en permettant de s'affranchir de l'une, puis même parfois de l'autre de ces deux types d'approximations.

L'intérêt des simulations moléculaires

Grâce à l'ordinateur, il est en effet possible de résoudre numériquement les équations fondamentales de la physique. Pour la mécanique classique, il s'agit de la loi de Newton $\mathbf{F} = m \cdot \mathbf{a}$ prédisant les trajectoires des atomes. La méthode de simulation moléculaire la plus utilisée est ainsi la **dynamique moléculaire*** qui résout cela pour un ensemble représentatif d'atomes (typiquement quelques milliers, mais des simulations de plusieurs centaines de milliards

d'atomes peuvent être réalisées). Cette résolution se fait par des approximations numériques pour lesquelles la trajectoire continue de chaque particule est représentée par une succession de positions discrètes séparées par de faibles intervalles de temps.

Les approximations mathématiques sont ainsi remplacées par des approximations purement numériques. Celles-ci pouvant être plus facilement contrôlées, il est possible de prédire l'évolution des atomes en résolvant le modèle considéré de façon pratiquement exacte, aux erreurs numériques près. La dynamique moléculaire présente ainsi plusieurs intérêts majeurs pour prédire les comportements de la matière :

- Il s'agit tout d'abord d'effectuer de véritables expériences moléculaires en déterminant par une simulation numérique comment un système évolue. Nous pouvons ainsi comprendre les phénomènes atomiques intervenant dans un processus ou même en prédire de nouveaux en les décrivant précisément par un modèle atomique. La compréhension des changements de phases a, par exemple, été révolutionnée par l'outil numérique, puisque des transitions de phase « en direct », avec tout le détail moléculaire connu ont pu être simulées. Ces expériences numériques sont aussi particulièrement intéressantes lorsque les expériences « réelles » sont délicates ou impossibles. La matière sous très forte pression, supérieure au GPa, présente au cœur des étoiles ou des planètes peut se simuler par dynamique moléculaire. Dans le domaine nucléaire, la simulation de solutions concentrées d'actinides est possible, alors que l'expérimentation est parfois rendue en pratique impossible en raison de la radioactivité ;
- la dynamique moléculaire peut aussi aider la modélisation en validant ou infirmant les théories. Une théorie mélange le plus souvent, comme indiqué précédemment, des approximations physiques (définissant le modèle utilisé) et des approximations mathématiques. Il est ainsi parfois difficile de distinguer leur importance dans le résultat final. Par comparaison avec des simulations moléculaires nous sommes ainsi à même de valider les approximations mathématiques, et ensuite, la comparaison avec les expériences permet de valider le modèle lui-même. Si une théorie est en accord à la fois avec les simulations et les expériences, il est ainsi probable qu'elle soit valide à la fois sur le plan physique et sur le plan mathématique. Loin de concurrencer les théories, la simulation permet d'en préciser la validité. À l'inverse, si une théorie est infirmée, il est possible de connaître plus précisément l'élément qu'il convient de modifier ;
- enfin, comme cette solution est numérique, il est possible, en pratique, de considérer des modèles moléculaires réalistes et donc de réaliser des réelles prédictions moléculaires. Il devient alors possible de s'attendre à un accord quantitatif avec les expériences. La dynamique moléculaire

est utilisée pour calculer les paramètres ou les lois macroscopiques du système. Est ainsi atteinte une véritable description multiéchelle de la matière dans laquelle les lois macroscopiques ne sont plus postulées mais directement déduites des descriptions microscopiques.

Cette troisième catégorie de simulations moléculaire est tout particulièrement mise en œuvre dans les simulations ***ab initio****. Dans ce cas, le modèle atomique donnant les forces entre atomes est calculé à chaque pas de temps par la mécanique quantique en résolvant l'**équation de Schrödinger***. Ces simulations sont, en quelque sorte, le saint Graal des simulations moléculaires, puisque nous nous affranchissons à la fois des approximations mathématiques mais aussi des approximations physiques, le modèle simulé étant non pas prédéfini mais calculé à partir des principes premiers de la physique. Néanmoins, cela n'est en pratique pas le cas, car la résolution de l'équation de Schrödinger ne peut être qu'approximative, ce qui revient à réintroduire des approximations. Un autre problème est aussi que le calcul des simulations *ab initio* est très long, ce qui limite la méthode aux systèmes de petite taille (nanométrique) sur des temps très courts.

Les simulations de type Monte-Carlo et la dynamique moléculaire

D'une façon générale, les simulations moléculaires se répartissent en deux catégories. En plus de la dynamique moléculaire précédemment décrites, il y a les méthodes de **Monte-Carlo*** où l'on ne calcule pas une « vraie » trajectoire du système, mais une succession de position des atomes formant une **chaîne de Markov***. Celle-ci n'est pas représentative du mouvement des particules, mais elle est représentative du système si on fait des moyennes. Cette chaîne de Markov est calculée en produisant au hasard des déplacements de particules (d'où le nom de Monte-Carlo). Parmi ceux-ci, seuls certains sont retenus afin de vérifier les probabilités d'ensemble (canonique, ou grand-canonique) de la thermodynamique statistique, grâce à un algorithme initialement proposé par Metropolis.

Dans le cas où les simulations sont longues et bien thermalisées (systèmes ergodiques), méthode de Monte-Carlo et dynamique moléculaire donnent les mêmes résultats (en moyenne pour les grandeurs thermodynamiques). Néanmoins, comme le temps n'apparaît pas dans les simulations de Monte-Carlo, elles ne donnent aucune information sur la dynamique du système. Leur intérêt vient du fait que ces méthodes permettent de simuler des états difficilement atteignables par dynamique moléculaire. Il est possible, par exemple, de réaliser des simulations à potentiel chimique constant, ce qui est particulièrement intéressant pour la chimie où cette grandeur est souvent contrôlée. En outre, ces simulations de Monte-Carlo sont souvent efficaces pour échantillonner les configurations et équilibrer les systèmes.

La mise en œuvre des simulations de dynamique moléculaire

Toute simulation moléculaire se déroule en trois étapes. Dans la première, est défini le système qui va être décrit en calculant un état initial et en définissant les forces d'interaction. Il est question de boîte de simulation. Dans la deuxième, les trajectoires et les configurations des particules proprement dites sont réalisées. Enfin, le traitement final permet d'en déduire à partir de la trajectoire les grandeurs physiques d'intérêt.

Avant la simulation : création du système simulé, boîte de simulation initiale et potentiel d'interaction

La première étape consiste à définir une boîte de simulation du système suffisamment grande pour qu'elle soit représentative des phénomènes étudiés et suffisamment petite pour que les calculs ne soient pas trop longs. Généralement, elles ont une forme parallélépipédique comme représenté sur la figure 120. Sont couramment utilisées des conditions aux limites périodiques. Dans ce cas, nous supposons que la boîte est reproduite dans toutes les directions de l'espace, ce qui sort d'un côté de la boîte rentrant, en fait, par le côté opposé. L'intérêt des conditions aux limites périodiques, qui introduisent une périodicité non physique dans le système, est de supprimer les effets de bords. En effet, à trois dimensions, le nombre d'atomes sur les bords est important : si nous considérons un ensemble de $N = 1000$ atomes situés dans une matrice de $10 \times 10 \times 10$ atomes, il y a en tout $6 \times 10 \times 10^{12} \times 10^{-3} \times 8 = 456$ atomes, soit presque la moitié, qui sont sur les bords. Pour un réseau de 10^6 atomes, c'est encore presque 6 % qui sont dans ce cas. Les conditions aux limites permettent de s'en affranchir.

Le nombre d'atomes N que l'on peut simuler a beaucoup augmenté grâce au développement de la puissance informatique, mais les tailles caractéristiques que l'on peut simuler n'ont en pratique gagné qu'un ou deux ordres de grandeurs. En effet, les temps de calcul de forces entre atomes sont typiquement proportionnels à N^2 . Cela est dû au fait que les forces se décomposent sur les couples de particules et ceux-ci sont en nombre N^2 . Par des méthodes d'optimisation, il est possible de les rendre proportionnels à $N \ln N$ ou même à N , mais comme la taille d'un système à trois dimensions est proportionnelle à $N^{1/3}$, celle-ci augmente beaucoup plus lentement que la puissance disponible. Si nous considérons une loi de Moore où la puissance de calcul est multipliée par deux tous les deux ans, elle ne double ainsi que tous les six ans au mieux. En outre, les simulations de grands systèmes nécessitent des trajectoires plus longues pour être thermalisées et le gain en taille est plus long à obtenir. Les plus gros systèmes au niveau atomique simulés à trois dimensions ont actuellement une taille de l'ordre de quelques centaines de nanomètres. Nous comprenons ainsi

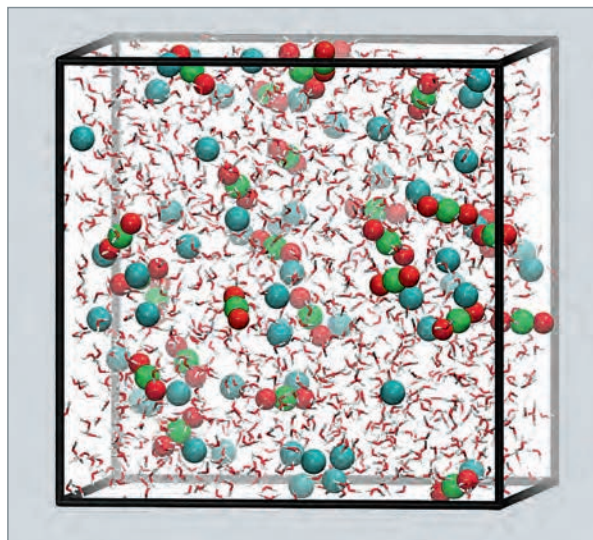


Fig. 120. Exemple de boîte de simulation. Il s'agit d'une solution aqueuse de chlorure d'uranyle. Les molécules d'eau sont les bâtonnets blancs et rouges. Les ions chlorure Cl^- sont les boules bleues. Les ions uranyle UO_2^{2+} sont composés des atomes d'oxygène (boules rouges) et d'uranium (boule verte). La molalité est de 1 mol. kg^{-1} . La boîte comporte 27 ions uranyle, 54 ions chlorure et 1 400 molécules d'eau. (Image : N. Nguyen)

que la simulation moléculaire est très coûteuse en temps de calcul, surtout si l'on cherche à décrire des systèmes réels en lien avec des applications qui sont souvent de grande taille. Sa mise en œuvre nécessite de recourir au calcul haute performance.

Cette limitation en taille confine la simulation moléculaire à la description non seulement de petits systèmes, mais aussi de phénomènes ayant lieu aux petites échelles. Typiquement, il faut que la taille de la boîte soit supérieure à la grandeur caractéristique de ce que l'on cherche à étudier. Une interface eau/huile est, par exemple, modélisable car l'épaisseur d'une telle interface est nanométrique, et il est possible d'y décrire de nombreux phénomènes, mais pas directement par exemple des ondes capillaires dont la longueur d'onde serait supérieure à la taille de la boîte. Dans le même ordre d'idée, la rugosité des interfaces est modélisable mais limitée à l'échelle nanométrique. Pour l'étude des transitions de phase, il n'est pas possible de simuler un point critique car des corrélations à toutes les échelles apparaissent, ce qui n'est pas modélisable par une méthode utilisant des boîtes de simulation de taille finie.

Le choix des champs de force, traduisant les potentiels d'interaction entre les particules, est fondamental.

Historiquement, des potentiels de paires entre les atomes, comme le potentiel de Lennard-Jones 12-6

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

ont été utilisés. Celui-ci représente l'énergie potentielle entre deux atomes à une distance r (la force étant la dérivée par rapport à r). Les contributions de chaque paire d'atomes s'additionnent. Il comporte un terme répulsif en $1/r^{12}$ représentant la taille des atomes (due au principe de Pauli) et un terme en $1/r^6$ représentant l'attraction de Van der Waals. La puissance 12 n'est retenue que pour accélérer le calcul numérique (puisque $12 = 2 \times 6$, le premier terme n'est que le carré du second). Ces potentiels de première génération peuvent se généraliser aux molécules en rajoutant des termes harmoniques ou des contraintes pour les forces internes. Pour les milieux polaires et ioniques, un terme coulombien est également ajouté. Les paramètres du modèle, comme ici σ ou ε sont tabulés à partir de mesures expérimentales et de calculs quantiques. Ceux-ci peuvent, en pratique, reproduire avec un accord acceptable les propriétés du système, mais leur utilisation est fondamentalement limitée parce que les potentiels ne sont pas de paires, les orbitales de deux atomes en interactions étant modifiées par la présence d'un troisième. Ils sont donc valables sur une plage limitée de température et de densité et ces effets à N corps sont traités de façon effective.

Plus récemment, sont apparus des potentiels plus complexes à N corps où, pour un temps de calcul plus long, certains effets de couplage, comme la polarisation, sont représentés. L'intérêt de ceux-ci est qu'ils représentent mieux les forces puisque l'effet de l'environnement est présent. Ils peuvent donc être plus facilement calibrés à partir de simulations quantiques. L'étude des champs de force moléculaires est une activité importante de la chimie théorique. Dans le cas des **actinides***, le calcul est particulièrement ardu en raison des effets relativistes affectant le mouvement des électrons de cœur. Si le paramétrage *ab initio* des champs de forces a fait de réels progrès ces dernières années, le recours à des données expérimentales reste néanmoins très souvent nécessaire.

Enfin, les champs de forces *ab initio* directement calculés à chaque pas de temps à partir de la chimie quantique peuvent être utilisés, mais les calculs sont bien plus longs. Ils utilisent généralement la théorie de la fonctionnelle de la densité électronique (voir *supra*, p. 149). Ils dépendent ainsi de la fonctionnelle utilisée. La longueur des calculs oblige à restreindre les applications à des systèmes bien plus petits. Ces méthodes *ab initio* ont un intérêt particulier, car elles peuvent traiter la rupture des liaisons chimiques et ainsi modéliser l'acidité ou l'oxydo-réduction, ce que ne permettent pas de faire les champs de forces classiques.

Pendant la simulation : le calcul de la trajectoire

Lors de la simulation, les mouvements des atomes i sont calculés en résolvant l'équation de Newton $m_i \mathbf{a}_i = \mathbf{f}_i$, avec m_i , \mathbf{a}_i , et \mathbf{f}_i respectivement la masse l'accélération et la force (créée par les autres particules) sur i . De nombreux algorithmes d'intégration existent, mais depuis qu'il a été proposé en 1967 [3], l'algorithme de Loup Verlet est très largement majoritaire. Pour l'établir, on introduit un développement de Taylor au troisième ordre sur les positions $\mathbf{r}_i(t)$:

$$\mathbf{r}_i(t+h) = \mathbf{r}_i(t) + h \times \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{h^2}{2} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{h^3}{6} \dddot{\mathbf{r}}_i(t) + O(h^4)$$

avec h le pas de temps. En additionnant cette égalité avec sa symétrique donnant $\mathbf{r}_i(t-h)$ et en utilisant la loi de Newton $\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \mathbf{f}_i/m$, nous arrivons finalement à l'algorithme de Verlet

$$\mathbf{r}_i(t+h) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t-h) + \frac{h^2}{m} \mathbf{f}_i(t) + O(h^4)$$

qui permet de calculer la position à l'instant suivant $t+h$ connaissant les positions des particules aux deux instants précédents t et $t-h$. Par construction cet algorithme est précis jusqu'à l'ordre 4, ce qui est bon sans être exceptionnel pour un algorithme. Il a en effet d'autres avantages. Il est exactement réversible, en accord avec la loi de Newton. Cela implique que la trajectoire numériquement calculée est exactement la trajectoire qui serait produite par un champ de force (on parle, en pratique d'« Hamiltonien ») qui ne différerait du vrai champ de force que par un terme petit en h^2 . La conservation de l'énergie pour cet algorithme est donc exactement assurée (aux erreurs numériques près) pour ce champ de force corrigé. En pratique, cela signifie que la conservation de l'énergie, propriété fondamentale pour la modélisation moléculaire car elle assure la stabilité thermique du système, est remarquablement conservée, même aux temps longs par l'algorithme de Verlet. Il n'y a pas de dérive, ce qui justifie sa très large utilisation.

La simulation a lieu pour une température donnée. Pour imposer cette température, la méthode la plus simple consiste à renormaliser directement les vitesses des atomes v_i pour imposer l'équipartition de l'énergie $v_i^2 = 3k_B T/m$, en moyenne en début de simulation pendant l'équilibrage, mais cette méthode est peu utilisée car il est délicat d'imposer ainsi une température précise. L'utilisation de la méthode des thermostats est préférable (comme ceux proposés par Berendsen ou Nosé). Ceux-ci modifient légèrement et continûment les trajectoires des particules pour assurer la bonne température. Pour assurer une pression particulière, sont utilisés de même des barostats qui modifient continûment la taille de la boîte de simulation pour assurer la pression désirée.

Après la simulation : calcul des grandeurs recherchées

La trajectoire du système étant calculée, les grandeurs macroscopiques sont obtenues par des procédures diverses. Les plus faciles à obtenir sont les grandeurs qui sont directement des moyennes sur la trajectoire. Si T est imposé, nous calculons l'énergie interne E à partir du champ de force. Si, au contraire, E est imposé, nous calculons la température à partir des vitesses quadratiques moyennes des particules $v_i^2 = 3k_B T/m$. La pression se calcule par le théorème du Viriel. Il est ainsi très facile d'obtenir les **équations d'état*** et les grandeurs calorimétriques par simulation moléculaire. Il est même possible d'en déduire de la même façon certains équilibres chimiques s'il est possible de les dénombrer dans la simulation comme présenté sur la figure 121.

La structure du système est aussi directement obtenue par les simulations. Cela permet de prédire les espèces chimiques présentes et l'organisation du milieu en lien avec les expériences. Dans ce cadre, la grandeur calculée est la fonction de corrélation spatiale traduisant la probabilité de trouver deux atomes à une distance donnée. Elle peut se mesurer par diffusion de rayonnement (rayons X ou neutrons). Comme représenté sur l'exemple de la figure 122, il est ainsi possible de prédire cette structure de façon assez détaillée en accord avec les expériences. L'intérêt est ici soit de valider les simulations, soit de mieux comprendre et exploiter les expériences afin de préciser la structure qu'elles mesurent. Des méthodes inverses (reverse Monte-Carlo, par exemple) permettent à partir d'un spectre expérimental de retrouver au mieux la structure et la localisation des atomes par inversion et ajustement numérique. Dans ce cadre, la simulation enrichit les expériences en permettant d'en déduire des grandeurs qu'elles ne peuvent donner directement.

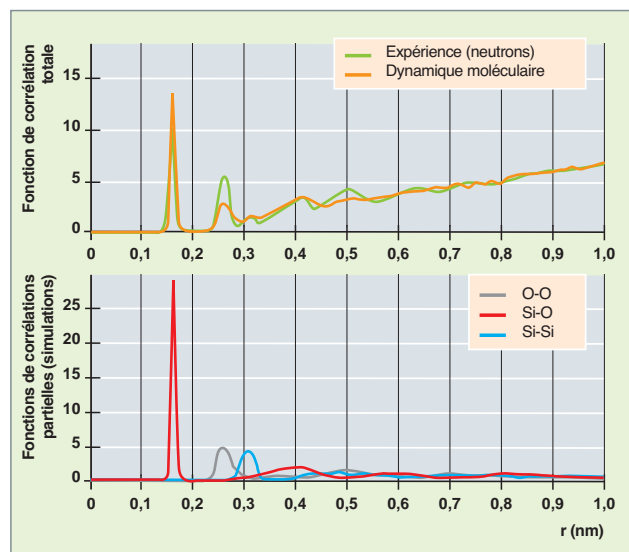


Fig. 122. Fonctions de corrélation spatiale d'une surface de verre. En haut, le résultat des simulations est comparé aux expériences de diffusion de neutron pour la fonction totale comprenant tous les types d'atomes. En bas, les facteurs partiels obtenus par simulation sont tracés. Cela permet de comprendre à quels types d'atomes sont dus les pics expérimentaux et de proposer une structure du verre. Image d'après B. Siboulet.

Le problème principal des simulations d'équilibre est le calcul des grandeurs thermodynamiques faisant intervenir l'entropie, comme l'énergie libre ou le potentiel chimique. Celles-ci sont beaucoup plus difficilement calculables, car une seule simulation ne peut suffire. L'entropie n'est pas une moyenne simple de grandeurs microscopiques, mais au contraire un décompte d'états. Il faut alors, pour la calculer, utiliser une intégration thermodynamique : sont réalisées plusieurs simu-

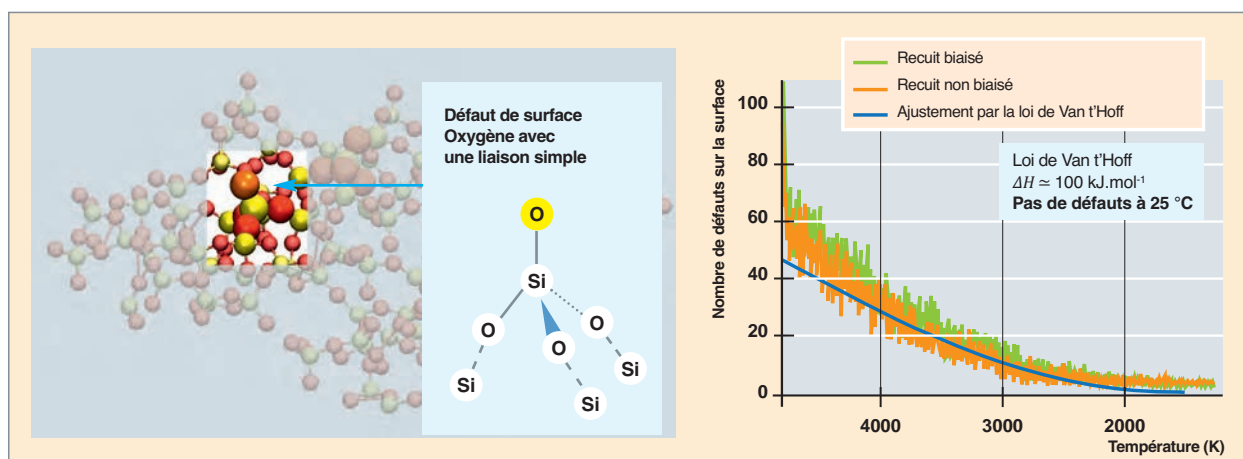


Fig. 121. Simulation de dynamique moléculaire d'une surface de verre (silice SiO_2) en fonction de la température. Est calculé le nombre de défauts (oxygènes en simple liaison) en fonction de la température T en simulant un recuit (très lente diminution de la température). Nous constatons que le nombre de défauts diminue avec la température avec une enthalpie de réaction que nous pouvons ainsi calculer. D'après la référence [4]. Image réalisée grâce au concours de B. SIBOULET.

lations et l'utilisation d'une formule d'intégration permet ensuite d'en déduire la grandeur recherchée. Il est, par exemple, possible d'utiliser la relation de Gibbs-Helmholtz

$$\left(\frac{\partial F/T}{\partial T}\right)_V = -\frac{E}{T^2}$$

pour en déduire l'énergie libre F en fonction de la température en intégrant l'énergie interne E calculée pour plusieurs températures différentes. Le résultat est obtenu à une constante (dépendant du volume) près. De très nombreux schémas d'intégration ont été proposés. Souvent l'intégration conduit à simuler des systèmes imaginaires. Il est ainsi possible de calculer des différences d'enthalpie libre entre espèces chimiques en transformant progressivement une espèce en une autre.

Dans ce cadre, les méthodes d'« *umbrella sampling* » (« échantillonnage par parapluies ») sont particulièrement intéressantes, comme représentées sur la figure 123. Nous ajoutons une force de contrainte harmonique forçant la distance entre deux atomes à osciller autour d'une certaine valeur. Les distributions de probabilité de distance prennent ainsi la forme d'un petit parapluie. En faisant ce calcul pour plusieurs distances d'équilibre, si les parapluies se recouvrent, nous pouvons montrer qu'il est alors possible d'en déduire la force moyenne entre les particules. Le potentiel de force moyenne obtenu prend en compte les effets moyens des autres atomes. Il est particulièrement intéressant pour la chimie, car s'il est calculé à dilution importante, il permet d'en déduire les constantes d'équilibre. Par exemple, lors de la réaction d'association entre deux solutés (ponctuels) A et B



la constante d'équilibre K^0 est une intégrale simple du potentiel de force moyenne $V(r)$ entre A et B :

$$K^0 = \int_0^d \exp[-\beta V(r)] 4\pi r^2 dr$$

avec $\beta = 1/k_B T$ et d une distance définissant la paire C. Le potentiel de force moyenne donne également la cinétique chimique s'il est tracé en fonction d'une bonne coordonnée de réaction, ainsi que les coefficients d'activité [5].

Comme représenté sur la figure 124 dans l'exemple du nitrate d'uranyle, le potentiel d'interaction moyen peut être complexe si le paysage énergétique l'est également. La chimie consiste à passer de minimum en minimum, chacun pouvant être assimilé à une espèce différente. Ces calculs permettent également de préciser le rôle du solvant, les oscillations traduisant, en fait, le caractère moléculaire de celui-ci.

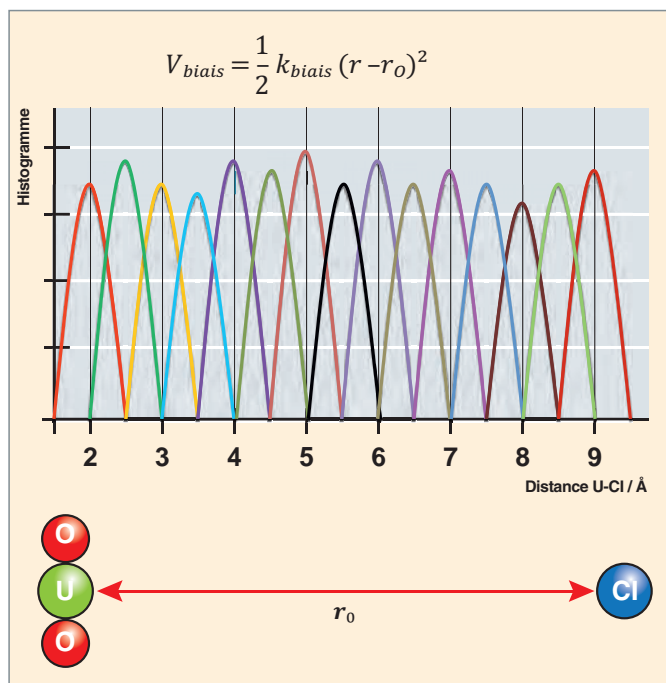


Fig. 123. Principe de la méthode d'*umbrella sampling* pour le calcul des interactions entre les ions uranyles UO_2^{2+} et chlorures Cl^- . Est rajoutée une force de biais harmonique qui force la distance entre l'atome d'uranium et celui du chlore à rester autour d'une distance donnée r_0 . Est ainsi obtenue une succession d'histogrammes en fonction de la distance qui se recouvrent, ce qui permet d'en déduire les forces entre ces deux ions et donc leur association. Image réalisée grâce au concours de N. Nguyen.

Enfin, la dynamique moléculaire permet la simulation et la prédiction des propriétés dynamiques et du transport. Deux types de méthodes sont mises en œuvre. Dans les méthodes d'équilibre, sont calculés les différents coefficients de transport à partir de la théorie de la réponse linéaire de Kubo. Dans ce cadre, chaque grandeur dynamique (coefficients de diffusions, conductivité électrique, thermique, viscosité, etc.) peut, en effet, s'écrire comme une intégrale de fonction d'autocorrélation calculable à partir de la trajectoire simulée. Il est ainsi possible, en principe, de calculer n'importe quel coefficient de transport. Malheureusement, les calculs sont souvent extrêmement longs en raison du bruit numérique. Des simulations hors équilibre sont alors préférables. Dans ces simulations NEMD (*Non-Equilibrium Molecular Dynamics*), il est ajouté une force extérieure (comme un champ électrique) pour forcer le transport, ce qui permet ensuite directement d'obtenir par identification aux lois macroscopiques les grandeurs dynamiques. La figure 125 représente le cas de verres poreux (type Vycor®). Sont ainsi compréhensibles les phénomènes électrocinétiques aux interfaces pilotant la dynamique des milieux poreux chargés.

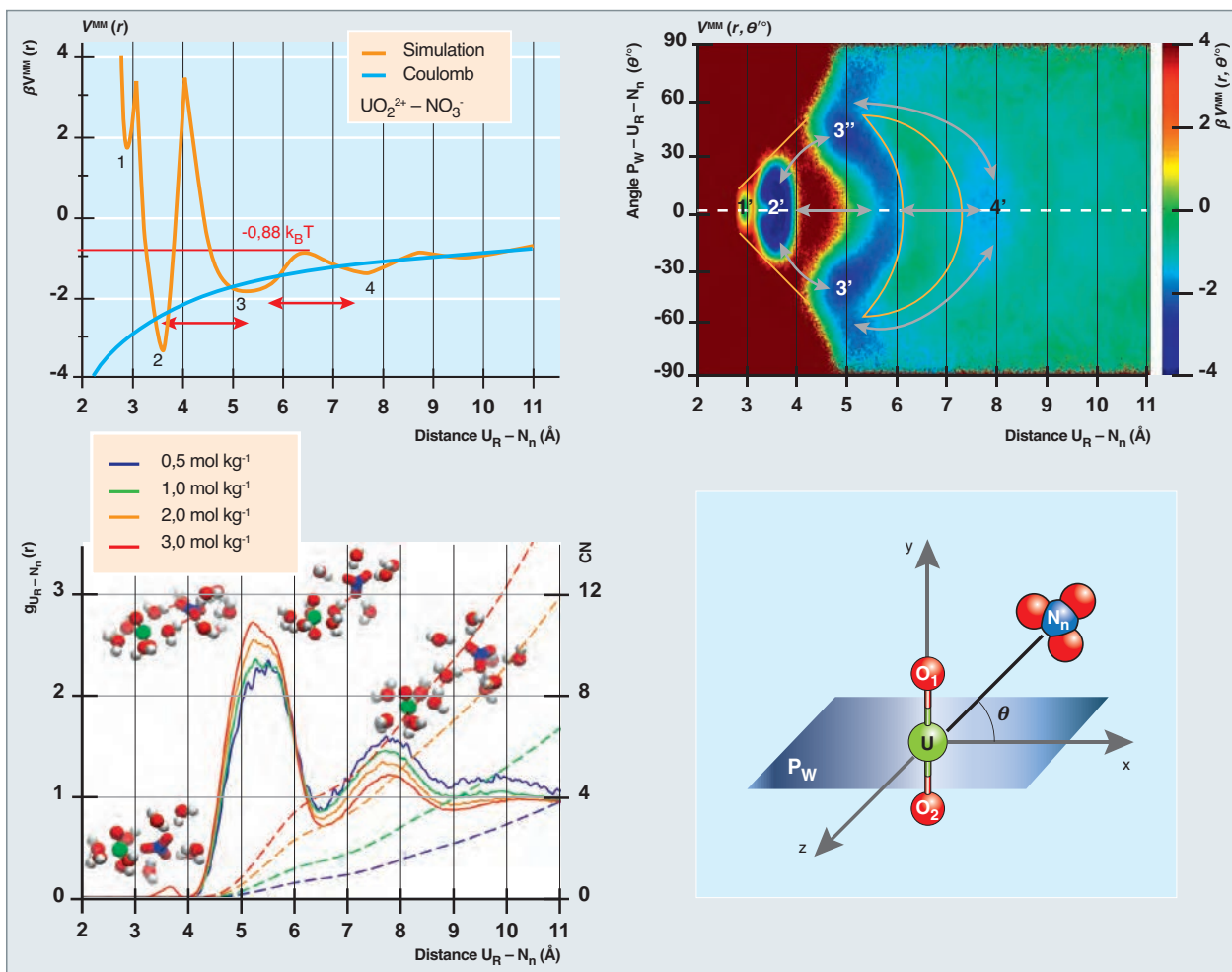


Fig. 124. Interactions entre les ions nitrates et les ions uranyles en solution [6]. Haut : potentiel de force moyenne calculé par *umbrella sampling* en fonction de la distance (gauche) et de la distance et de l'angle (droite). En bas : structure (fonction de corrélation de paire) résultante pour différentes concentrations. Images : d'après N. Nguyen.

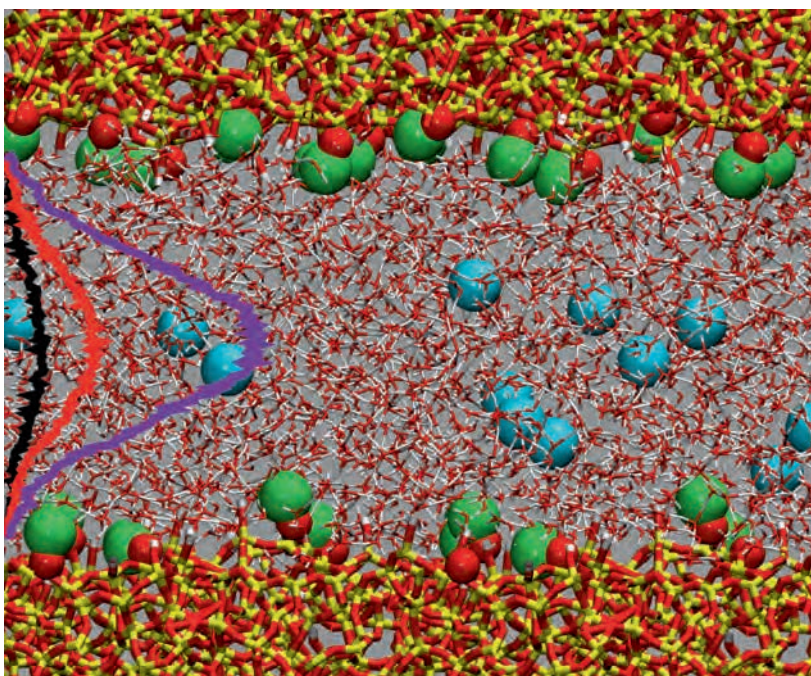


Fig. 125. Simulation en Dynamique Moléculaire Hors d'Équilibre (NEMD) de la migration d'une solution aqueuse dans un pore de verre sous champ électrique. Le verre de silice est en haut et en bas de l'image (bâtonnets rouges et jaunes). La solution aqueuse constituée d'eau (bâtonnets rouges et blancs), de cations césium (boules vertes), et d'anions chlorures (boules bleues) est au milieu. Nous appliquons un champ électrique vers la droite, ce qui permet d'en déduire les profils de vitesses des différentes espèces (courbes représentées) en fonction du champ électrique. La comparaison de ces profils permet de tester la validité des lois macroscopiques (lois de Fick ou de Navier-Stokes, par exemple) et de déterminer les coefficients de transport. Image : B. Siboulet

La modélisation multiéchelle

La simulation moléculaire au service des sciences de l'ingénieur

La simulation moléculaire, classique ou *ab initio*, est ainsi un moyen pertinent pour décrire la matière de façon microscopique, et elle complète et précise les approches théoriques situées, comme représenté sur la figure 126, à d'autres échelles de description :

- Au niveau le plus fondamental, la mécanique quantique, où les électrons (et parfois les noyaux) sont modélisés par des fonctions d'ondes est la représentation la plus précise, mais son coût en temps de calcul la limite à des systèmes de petite taille. Elle est, en particulier, étudiée pour déterminer la complexation moléculaire, les liaisons covalentes, ainsi que les propriétés d'acidité ou d'électro-réduction qui nécessitent un traitement quantique ;
- à une échelle un peu plus grande (atomique) se situe ensuite la simulation moléculaire où tous les atomes sont considérés comme des particules ponctuelles interagissant par des forces. Pour des raisons de temps de calcul, elle est limitée à des échelles de temps et de tailles inférieures au micromètre et à la microseconde ;
- à l'extrême opposé, il y a les modélisations macroscopiques utilisées par exemple dans le génie chimique ou les sciences de l'ingénieur. Dans ce cas, la description repose sur des lois macroscopiques continues (comme, par exemple, les lois de Fourier, Fick, ou Navier-Stokes) appliquées aux conditions macroscopiques imposées.

Ces modèles macroscopiques nécessitent de nombreux coefficients numériques dépendant du système étudié (coefficients de diffusion, viscosité, conductivités, constantes d'équilibre, coefficients d'activité, etc.) qui doivent souvent être mesurés expérimentalement. L'un des apports les plus importants de la simulation moléculaire est de pouvoir les calculer, ce qui peut être d'un grand intérêt quand les mesures expérimentales ne sont pas possibles. Dans certains cas, la simulation moléculaire peut donner non seulement ces coefficients mais également modifier les lois macroscopiques, si nécessaire. En chimie, par exemple, on peut être conduit à considérer de nouvelles espèces. Dans le domaine des interfaces, les conditions aux limites (glissement ou non-glissement en hydrodynamique, etc.) peuvent également être déterminées grâce aux simulations. Il s'agit ainsi de réaliser de véritables modélisations multiéchelles où le passage d'échelle est explicitement réalisé.

Les dynamiques browniennes

Malheureusement, de nombreux processus naturels ou industriels sont pilotés par des phénomènes aux échelles intermédiaires (échelle mésoscopique) et ils ne peuvent pas être modélisés directement par des simulations moléculaires. D'autres méthodes valables aux échelles intermédiaires sont alors mises en œuvre. Il s'agit, dans ce cas, de ne modéliser précisément qu'une partie du système. Par exemple, il sera possible de ne considérer que les solutés et de s'affranchir du solvant, où alors ne seront considérées dans le cas de solutions colloïdales que les plus grosses particules présentes. Si les molécules sont trop grandes, il est possible de réaliser des simulations à gros grain (*coarse-grained*) qui regroupent les atomes par paquets appelés « blob ». Ces procédures sont, en principe, valides pour les grandeurs d'équilibre, car on peut toujours calculer les moyennes thermodynamiques en plusieurs étapes. En revanche, pour les grandeurs dynamiques, elles sont valides si les particules décrites sont lentes par rapport à celles qui ne sont pas décrites. Dans ce cas, en effet, il est possible de traiter indépendamment ces particules qui suivent une loi dynamique généralisant les lois du mouvement brownien. Pour cette raison, les simulations réalisées par ces modèles mésoscopiques sont souvent regroupées par les termes génériques de « dynamique brownienne », comme dans la figure 126.

À titre d'exemple, nous pouvons prendre le cas de la modélisation des solutions. Si le mouvement du solvant est rapide par rapport à celui des ions, nous pouvons décrire la dynamique des solutés par la dynamique brownienne, comme représenté sur la figure 127.

Le mouvement des ions i est ainsi donné par l'équation de Langevin qui s'écrit ici :

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_i - \zeta v_i + f_i(t).$$

Cette équation est semblable à la relation de Newton mais la force sur les ions s'écrit désormais comme la somme de trois termes traduisant l'effet moyen du solvant. Le premier représente les forces entre les solutés (interaction électrostatique, etc.) moyennées sur le solvant. Le deuxième représente le frottement hydrodynamique de celui-ci (l'écriture proposée ici est valide seulement pour une solution diluée). Le troisième terme compense l'effet dissipatif du deuxième (qui finirait par arrêter les ions) en modélisant une force fluctuante de chocs aléatoires du solvant sur l'ion. Ce terme est nul en moyenne et son expression est reliée au deuxième terme dissipatif. Il est remplaçable par un terme stochastique judicieusement choisi. Comme le solvant n'apparaît plus explicitement, les calculs sont bien plus rapides et on peut simuler de plus grands systèmes sur de plus longs temps. Cela est particulièrement intéressant pour les

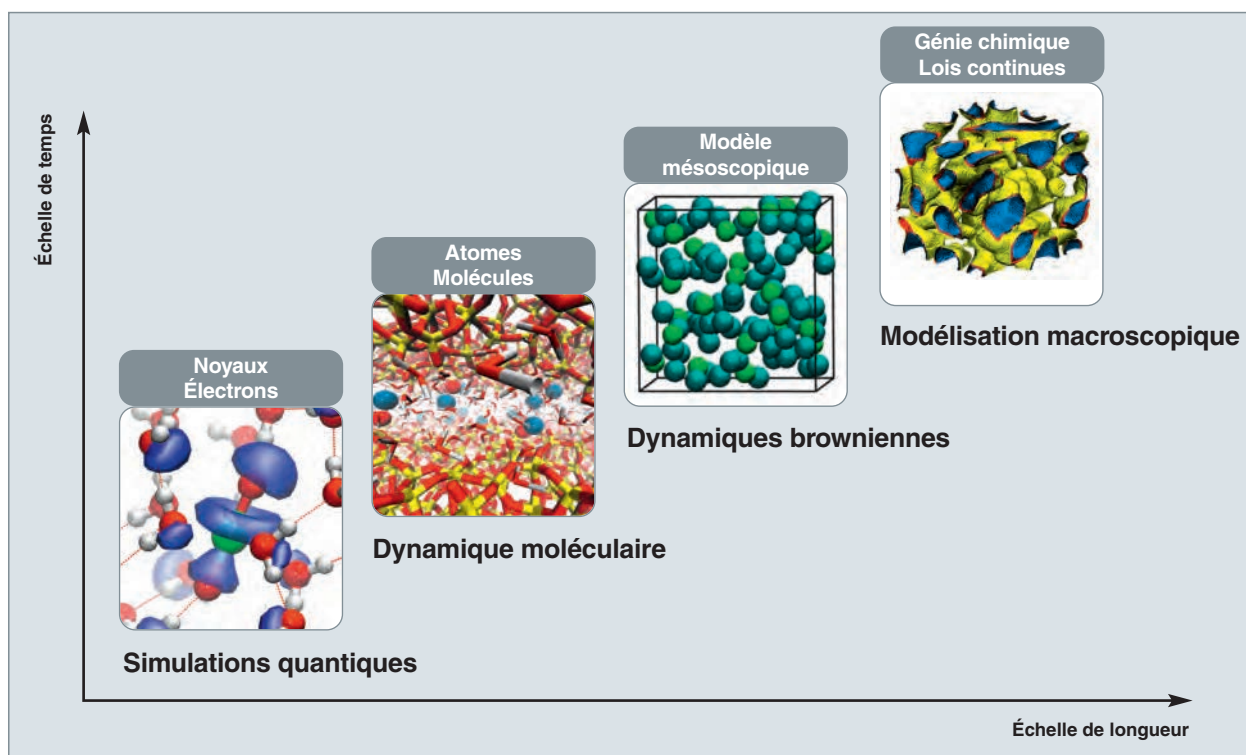


Fig. 126. Quelques échelles de modélisation. Image réalisée grâce au concours de M. Duvail.

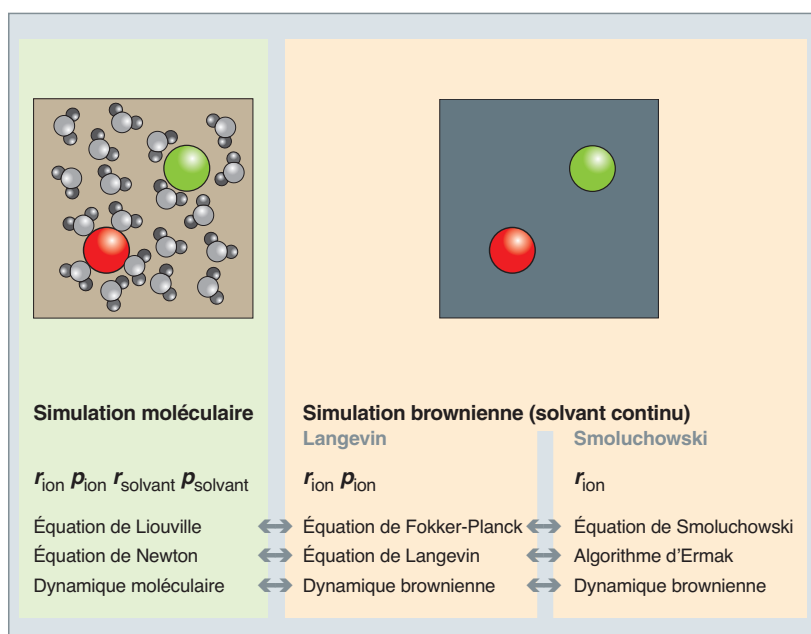


Fig. 127. Principe des simulations browniennes comparées aux simulations moléculaires dans le cas des solutions aqueuses d'électrolytes. En dynamique moléculaire, sont représentés explicitement les ions et le solvant. Positions r et quantités de mouvement p de toutes les espèces sont donc connues. Dans le cas des simulations browniennes, seuls les ions sont simulés, le solvant étant considéré comme un continuum diélectrique et visqueux. Les équations de Newton (pour les trajectoires des atomes) et de Liouville (dans l'espace des phases) sont remplacées par les équations de Langevin et de Fokker-Planck. Cela n'est possible que si les ions sont beaucoup plus lents que les molécules de solvant. Dans le cas où, en outre, les vitesses des ions relaxent rapidement, il est possible de réaliser des simulations browniennes encore plus simples où seules les positions (mais pas les quantités de mouvement) des ions sont décrites. L'évolution du système est alors donnée par l'équation de Smoluchowski.

électrolytes car la force électrique, présente aux grandes distances, nécessite des très grandes boîtes si la solution est diluée. Bien sûr, nous perdons le détail moléculaire du solvant, mais pas son rôle sur les ions. Rigoureusement, une telle équation est valable si la masse de l'ion m_i est très supérieure à celle du solvant, ce qui est rarement le cas, sauf pour des ions très lourds comme les actinides, mais nous sommes en pratique aidés par le phénomène de solva-

tation qui lie rigidement chaque ion aux molécules de solvant l'entourant, ce qui augmente, en quelque sorte, sa masse effective.

Si la relaxation des vitesses est rapide, il est même possible de simplifier encore cette équation en ne considérant plus que les positions des ions. Dans ce cas, le système évolue suivant l'équation de Smoluchowski et les simulations peu-

vent atteindre des temps encore plus longs. Ces simulations browniennes sont particulièrement utilisées pour représenter les suspensions colloïdales. Leur difficulté numérique principale est la prise en compte des interactions hydrodynamiques entre les solutés.

Les simulations browniennes, stochastiques sont particulièrement intéressantes car elles sont en fait applicables [7] à n'importe quelle variable du système (et pas seulement aux positions et vitesses des solutés). Il faut simplement que cette variable soit lente devant les autres variables microscopiques. On montre en effet d'une façon très générale que tout ensemble de variables lentes a aux temps longs une évolution qui suit une loi de type Langevin formellement équivalente à l'équation précédente. Cet ensemble de variables lentes peut donc être simulé par dynamique brownienne. La cinétique de la réaction chimique peut ainsi se décrire par la théorie de l'état de transition (*transition state theory*, TST) qui exprime l'évolution des coordonnées de réaction. Dans le domaine des polymères, les méthodes de dynamique dissipative de particules (*dissipative particle dynamics*, DPD) peuvent atteindre des dimensions micro-métriques et des échelles de temps de plusieurs microsecondes.

La variété des méthodes à cette échelle intermédiaire est ainsi très large car elles dépendent des systèmes étudiés. Les méthodes de Monte-Carlo cinétique (KMC) simulent les transitions entre états discrets du système. Elles sont ainsi, en quelque sorte, le pendant discontinu des simulations browniennes.

Des simulations moléculaires grossières peuvent mener à des modélisations hydrodynamiques précises

Les simulations de dynamique moléculaire permettent de retrouver les lois macroscopiques continues elles-mêmes (comme, par exemple, les lois de Fourier, Fick, ou de Navier-Stokes) utilisées dans les sciences de l'ingénieur. Ces lois existent car elles modélisent l'évolution de variables lentes, comme nous pouvons le comprendre aisément sur l'exemple de la diffusion. La loi de Fick décrit l'évolution de la concentration d'un soluté qui s'écrit microscopiquement

$$c(\mathbf{r}, t) = \sum_i \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)]$$

avec $\mathbf{r}_i(t)$ la position de la molécule de soluté i au temps t et $\delta(\mathbf{r})$ la distribution de Dirac. *A priori*, en raison de l'agitation moléculaire des trajectoires atomiques, cette fonction évolue très rapidement. Néanmoins, si nous calculons sa transformée de Fourier

$$\tilde{c}(\mathbf{k}, t) = \int \sum_i \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)] e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i(t)}$$

nous comprenons que dans la limite où nous nous intéressons aux phénomènes à grandes distances (limite hydrodynamique $k \rightarrow 0$) la concentration devient une variable lente, puisque $c(\mathbf{k}, t)$ tend vers la valeur constante N (nombre total de solutés). Il est donc possible de traiter indépendamment l'évolution des concentrations pour les grandes distances afin d'accéder aux grands temps. Est ainsi obtenue une loi de Langevin qui finalement peut s'écrire, si on néglige le terme stochastique – nul en moyenne – comme la loi de Fick sur la diffusion. C'est donc la conservation des particules qui implique la loi de Fick. De la même façon, nous pouvons montrer que la conservation de la quantité de mouvement implique l'équation de Navier-Stokes et que la conservation de l'énergie implique l'équation de la chaleur (loi de Fourier) pour les phénomènes se déroulant sur de grandes distances car quantité de mouvement et énergie deviennent des variables lentes dans cette limite.

Ces concepts issus de la simulation moléculaire et de la thermodynamique statistique sont mis en œuvre dans des techniques hybrides dont le but est de résoudre ces lois macroscopiques utilisées par l'ingénieur. Dans la MPC (*Multi-Particle Collision dynamics*) ou la SRD (*Stochastic Rotation Dynamics*), est simulé un pseudo-fluide moléculaire très grossier, pas du tout représentatif de « vraies » molécules, mais qui a l'avantage d'être assez rapidement calculable. Son équation d'évolution n'est pas pertinente pour les trajectoires atomiques, mais comme elle conserve les bonnes grandeurs physiques (nombre de particules, énergie, et quantité de mouvement) dans la limite des grandes distances, nous savons que le pseudo-fluide satisfera les bonnes équations macroscopiques. Il est ainsi possible de réaliser des solveurs moléculaires pour ces lois macroscopiques qui sont mathématiquement des équations aux dérivées partielles souvent très délicates à résoudre. Les applications sont, en particulier, très importantes pour les systèmes de grande taille très couplés, comme les milieux poreux (stockage géologique des radioéléments, par exemple) ou la dynamique des colloïdes. Ces méthodes très performantes souffrent néanmoins d'être difficilement paramétrables : il n'est pas facile de trouver un jeu de paramètres du pseudo-fluide qui redonne les paramètres du modèle macroscopique (coefficient de diffusion, viscosité, etc.) que l'on cherche à simuler.

Une alternative similaire est de réaliser des simulations d'automate cellulaires, par exemple de type Lattice-Boltzmann ou Lattice-Fokker-Planck. Ici, ce sont des fonctions de distributions définies sur des cellules qui vont être résolues. Comme elles évoluent par des lois qui, comme l'équation de Boltzmann pour les gaz, vérifient les bonnes relations de conservation, elles redonnent pour les grandes distances les lois macroscopiques.

Les modélisations à gros grain et le passage d'échelle

Dans les meilleurs cas, nous cherchons à réaliser une véritable photographie à toutes les échelles des phénomènes, chaque niveau de modélisation étant obtenu rigoureusement à partir du niveau immédiatement plus microscopique. Malheureusement, ce passage d'échelle rigoureux (« *coarse-graining* » ou modélisation à gros grain), n'est pas toujours faisable, car il peut conduire à des modèles mésoscopiques trop complexes pour être simulés numériquement. Dans le domaine des suspensions, il est souvent réalisable si les macroparticules sont à géométrie simple (sphérique) et nous pouvons ainsi prédire des effets complexes collectifs entre constituants, comme les phénomènes de dépression ou des séparation de phase.

En pratique, nous sommes amenés à simplifier les modèles à gros grain pour pouvoir ensuite les résoudre. Un exemple de telles modélisations multiéchelles est représenté sur la figure 128 dans le cas de solutions aqueuses. Les solutés peuvent rigoureusement être traités indépendamment du solvant pour l'équilibre. Dans ce cas, le modèle à solvant continu obtenu donne la même structure (rigoureusement) que les simulations moléculaires d'où il est issu. Le problème est que ce modèle mésoscopique est complexe et difficilement implémentable pour traiter des grandes échelles. Il faut donc le simplifier pour ne garder que les parties pertinentes et nous obtenons un modèle mésoscopique qui n'est pas capable de décrire toute la structure moléculaire oscillante due au solvant mais qui garde les effets moléculaires quand ils sont réellement importants, c'est-à-dire quand ils ont une énergie supérieure à $k_B T$.

Les simulations moléculaires, et plus généralement les techniques de modélisation multiéchelles sont ainsi capables, en principe, de décrire précisément la matière à partir d'une description microscopique. Cela dit, la limitation des puissances de calcul ne permet pas d'utiliser cette stratégie dans tous les cas, en particulier pour les systèmes complexes mettant en jeu de nombreuses échelles. Les phénomènes chimiques nécessitent une attention particulière, car ils peuvent avoir lieu à toutes les échelles de temps.



Fig. 128. Structure (fonctions de corrélations de paires) des solutions aqueuses de bromure de potassium. Les simulations de dynamique moléculaire où tous les atomes sont considérés explicitement sont en points verts. Le modèle mésoscopique est en bleu.

En conclusion, la diversité des approches en modélisation est très féconde, car elle permet une compréhension profonde des phénomènes mis en jeu. Cela est particulièrement important dans le domaine de la sûreté nucléaire qui est d'autant plus assurée que les dispositifs expérimentaux sont compris. Il serait ainsi bien malheureux de s'en passer et de ne rester qu'à une échelle moléculaire. Comme nous le trouvons écrit parfois, quand on ne dispose que d'un marteau dans sa boîte à outils, tous les problèmes ressemblent à des clous...

Jean-François DUFRÈCHE,
Institut de chimie séparative de Marcoule

► Références

- [1] N. METROPOLIS, A.W. ROSENBLUTH, M.N. ROSENBLUTH, A.H. TELLER and E. TELLER, "Equation of state calculation by fast computing machines", *J. Chem. Phys.*, **21**, 1087, 1953.
- [2] L. ONSAGER and R. M. FUOSS, "Irreversible processes in electrolytes", *J. Phys. Chem.*, **36**, 2689, 1932.
- [3] L. VERLET, "Computer, 'Experiments' on Classical Fluids", *Phys. Rev.*, **159**, 98, 1967.
- [4] B. SIBOULET, B. COASNE, J.-F. DUFRÉCHE and P. TURQ, "Hydrophobic Transition in Porous Amorphous Silica", *J. Phys. Chem. B*, **115**, 7881, 2011.
- [5] J.J. MOLINA, J.-F. DUFRÉCHE, M. SALANNE, O. BERNARD and P. TURQ "Primitive models of ions in solution from molecular descriptions: A perturbation approach", *J. Chem. Phys.*, **135**, 2011.
- [6] T.N. NGUYEN, M. DUVAIL, A. VILLARD, J.J. MOLINA, Ph. GUILBAUD and J.-F. DUFRÉCHE, « Multi-scale modelling of uranyl chloride solutions » *J. Chem. Phys.*, **142**, 024501, 2015.
- [7] R. ZWANZIG, *Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Oxford University Press, 2001.

► Bibliographie

- GERSCHEL (A.), *Liaisons intermoléculaires*, EDP Sciences / CNRS Éditions, 1995.
- ALLEN (M.P.), TILDESLEY (D.J.), *Computer simulations of liquids*, Oxford University Press, 1987.
- FRENKEL (D.), SMIT (B.), *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, New York, 2002.
- KRAUTH (W.), *Statistical Mechanics Algorithms and computations*, Oxford University Press, 2006.

Champs de force évolués, couplage multiéchelle et protéines

Le présent chapitre traite principalement de dynamique moléculaire appliquée aux protéines. Ces grosses molécules qui participent à la structure et au fonctionnement des êtres vivants ont des propriétés et une activité chimique qui dépendent de la façon dont elles sont repliées. L'ambition est ici d'utiliser les techniques de la modélisation moléculaire pour calculer ces conformations. Le problème est rendu difficile par la grande taille de la molécule, et par le fait qu'il faut tenir compte de son environnement, en particulier l'eau dans laquelle la protéine se trouve en solution. Les méthodes classiques de dynamique moléculaire sont fondées sur des approches où les interactions microscopiques ne sont pas hiérarchisées. Toutes ces interactions sont ainsi traitées au même niveau de précision (méthodes dites « *all-atom* »), et elles sont modélisées par des termes d'énergie potentielle (champ de force) de nature additive. Or, les interactions microscopiques peuvent être marquées par un fort caractère non additif. Par ailleurs, l'absence de hiérarchisation des approches « *all-atom* » peut être très pénalisante en termes d'efficacité calculatoire pour certaines applications. Par exemple, dans le cas de l'étude d'une molécule en solution (le **soluté***), l'essentiel de l'effort d'une approche « *all-atom* » portera sur l'évaluation des interactions entre molécules de **solvant*** et non sur le traitement du soluté lui-même. Dans ce chapitre, seront présentés des exemples de méthodes qui permettent de pallier aux défauts des champs de force classiques et à l'absence de hiérarchisation des approches « *all-atom* ». Nous verrons, dans un second temps, comment ces méthodes permettent d'aborder la simulation de systèmes protéiques. L'ensemble des simulations discutées ici ont été réalisées à l'aide du code de dynamique moléculaire POLARIS (MD) [<http://biodev.cea.fr/polaris/>] développé au sein de notre laboratoire.

Les champs de force évolués

La prise en compte des phénomènes de polarisation

Dans les champs de force classiques de nature additive, les propriétés électrostatiques d'une molécule sont modélisées à l'aide d'une distribution de charges électriques q_i localisées sur les différents centres atomiques. Ces charges ne varient pas lors des simulations. Or, elles sont introduites pour modéliser les propriétés du nuage électronique d'une molécule, nuage qui est très sensible à l'influence du milieu extérieur (phénomènes de **polarisation***). Les champs de force

classiques peuvent donc être considérés comme une approximation de champ moyen. Ils ne sont *a priori* adaptés qu'à la description d'une molécule simple plongée dans un milieu homogène et isotrope.

Dès la fin des années 70, plusieurs approches « polarisables » ont été proposées afin de remédier à ce défaut des champs de force classiques : principalement la méthode des charges fluctuantes (**CF**), des oscillateurs de Drude (**OD**) et des moments dipolaires induits (**MDI**) [1]. Les deux premières ne considèrent que des charges q_i interagissant par un terme Coulombien (pour **CF**, ces charges peuvent varier alors que pour **OD**, un atome est décrit à l'aide d'un jeu de charges statiques pouvant se déplacer autour de celui-ci). Elles ne nécessitent donc que peu de modifications dans les codes classiques de dynamique moléculaire. L'approche MDI nécessite plus d'efforts de développement, car elle est fondée sur l'introduction d'un nouveau jeu de degrés de liberté, les **moments dipolaires*** induits. Ces trois approches nécessitent la résolution d'un ensemble d'équations auto-cohérentes concernant les valeurs des charges q_i (**CF**), de leurs positions (**OD**) ou des moments dipolaires (**MDI**). Du fait de la taille des systèmes moléculaires considérés, ces équations sont résolues de manière itérative, ce qui induit un surcoût important en temps de calcul par rapport aux champs de force classiques. Cela explique le retard pris dans le développement des approches polarisables et le recours encore systématique à des champs de force classiques pour simuler des macromolécules en phase aqueuse.

Aujourd'hui, l'approche **CF** est pratiquement abandonnée du fait des faiblesses de son fondement théorique. La méthode **OD** est sujette à des limitations importantes résultant des faibles pas de temps d'intégration envisageables pour la résolution des équations du mouvement lors d'une simulation de dynamique (au plus 0,5 femtosecondes). La méthode **MDI** est considérée actuellement comme étant la plus robuste. Elle permet des pas de temps allant jusqu'à 2 fs, voire l'emploi d'algorithmes à pas de temps multiples [2]. La méthode **MDI** est fondée sur l'introduction de moments dipolaires induits $\vec{\mu}_i$, localisés sur des centres atomiques i (dont la position est notée \vec{r}_i) et obéissant à la relation fondamentale :

$$\vec{\mu}_i = \alpha_i \cdot (\vec{E}_i^q + \vec{E}_i^\mu) \quad (1),$$

où α_i désigne le tenseur de polarisabilité du centre atomique i (réduit à une simple grandeur scalaire). \vec{E}_i^q est le

champ électrique « statique » produit par les charges q_j identiques en nature à celles des champs de force classiques et entourant le centre atomique i :

$$\vec{E}_i^q = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \frac{q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (2).$$

\vec{E}_i^μ est le champ électrique généré par les autres moments dipolaires induits $\vec{\mu}_j$:

$$\vec{E}_i^\mu = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \left(\frac{3(\vec{r}_i - \vec{r}_j)[(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{\mu}_j]}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^5} - \frac{\vec{\mu}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} \right) \quad (3).$$

La forme la plus courante de l'énergie de polarisation microscopique U_{pol} associée à ces moments dipolaires est :

$$U_{pol} = \sum_i \frac{\vec{\mu}_i^2}{2\alpha_i} - \vec{\mu}_i \cdot (\vec{E}_i^q + \frac{1}{2} \vec{E}_i^\mu) \quad (4).$$

Le premier terme de l'énergie de polarisation U_{pol} est interprété comme l'énergie nécessaire à la création d'un dipôle $\vec{\mu}_i$ sous l'effet d'un champ électrique extérieur. Le second terme correspond à l'énergie d'interaction de ce dipôle avec ce champ électrique extérieur. L'énergie de polarisation est donc une fonction des positions atomiques \vec{r}_i et des moments dipolaires induits $\vec{\mu}_i$. Les forces de polarisation atomiques \vec{F}_i associées à l'énergie U_{pol} doivent donc s'écrire en fonction des gradients analytiques de cette énergie par rapport à ces positions et à ces moments dipolaires :

$$\vec{F}_i = \vec{\nabla}_i U_{pol} = - \left(\frac{\partial U_{pol}}{\partial \vec{r}_i} + \frac{\partial U_{pol}}{\partial \vec{\mu}_i} \cdot \frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial \vec{r}_i} \right) \quad (5).$$

Si l'équation (1) est vérifiée, on montre alors que $\partial U_{pol} / \partial \vec{\mu}_i = 0$, ce qui permet d'écrire les forces \vec{F}_i sous une forme simplifiée :

$$\vec{F}_i = \vec{\nabla}_i U_{pol} = \vec{\mu}_i \cdot \left(\frac{\partial \vec{E}_i^q}{\partial \vec{r}_i} + \frac{\partial \vec{E}_i^\mu}{\partial \vec{r}_i} \right) \quad (6).$$

De par la forme analytique des champs électriques \vec{E}_i^q et \vec{E}_i^μ , les équations (1) régissant les moments dipolaires induits sont des équations auto-cohérentes qui peuvent être résolues itérativement. Pour des raisons d'efficacité calculatoire, ce processus itératif n'est pas poussé jusqu'à obtenir des moments dipolaires vérifiant les équations (1) à la précision numérique d'un processeur. Généralement, ce processus est poursuivi jusqu'à atteindre une différence de la norme moyenne des moments dipolaires entre deux itérations inférieure à 10^{-6} **Debye***. Un tel critère permet généralement de faire converger les moments dipolaires en moins de dix itérations, mais il induit encore des erreurs numériques assez fortes. Cela se traduit, par exemple, par la non-conservation de l'énergie totale d'un système moléculaire lors d'une simulation de type dynamique moléculaire. Toutefois, avec un cri-

tère de 10^{-6} Debye, la dérive de l'énergie totale le long d'une trajectoire de dynamique moléculaire est raisonnable. Elle représente au plus 0,1 % de cette énergie à l'échelle de la nanoseconde simulée avec un pas d'intégration de 1 femtoseconde.

Si nous souhaitons réaliser une simulation de type dynamique moléculaire, une alternative plus efficace à la méthode itérative est fondée sur l'affectation d'une masse virtuelle m_μ aux moments $\vec{\mu}_i$. En tenant compte de l'énergie cinétique $\frac{1}{2} m_\mu \dot{\vec{\mu}}_i^2$ [2] dans le Lagrangien du système, on est déduite l'équation suivante d'évolution temporelle des moments dipolaires induits :

$$m_\mu \frac{\partial^2 \vec{\mu}_i}{\partial t^2} = - \frac{\vec{\mu}_i}{\alpha_i} + (\vec{E}_i^q + \vec{E}_i^\mu) \quad (7).$$

À la différence de la méthode itérative, l'approche Lagrangienne nécessite simplement la résolution de deux jeux d'équations temporelles couplées régissant les positions atomiques et les moments dipolaires induits. Toutefois, la grande difficulté ici est de définir de manière empirique un jeu de masses m_μ garantissant la stabilité des simulations de dynamique moléculaire. Cela explique qu'elle soit de moins en moins employée aujourd'hui.

Les champs de force polarisables (**OD** ou **MDI**) sont reconnus pour leur capacité à bien reproduire les propriétés de l'eau liquide sur des plages de température et de pression bien plus étendues que dans le cas des champs de force classiques (du point de fusion au point critique de l'eau par exemple [3]). Ils sont également mieux adaptés à l'étude du comportement d'espèces chargées aux interfaces ou à la surface de protéines. Par exemple, seul ce type de champs de force est capable de prédire la forte affinité d'ions fortement polarisables pour l'interface vapeur/eau liquide [4]. Ils sont donc bien adaptés à l'étude des comportements d'espèces ioniques en phase aqueuse dans des conditions extrêmes de température et de pression (par exemple, celles prévalant dans les réacteurs nucléaires). Plus généralement, ils sont considérés comme très prometteurs pour aborder le problème du repliement des **protéines*** [5] ou l'étude des interactions microscopiques impliquant l'ADN [6]. Toutefois, pour certaines applications, il convient encore d'aller plus loin dans les développements des champs de force, en particulier pour prendre en compte les phénomènes de transfert de charge.

Au-delà de la polarisation : le transfert de charge

Les phénomènes de polarisation correspondent aux déformations du nuage électronique d'une molécule sous l'action d'un milieu extérieur. Certaines interactions microscopiques font intervenir des phénomènes de redistribution de la densité électronique encore plus poussés entre deux entités chimiques. Par exemple, dans le cas de l'interaction d'un ion

lourd, comme Cm(III), avec une molécule d'eau, une partie de la densité électronique des paires libres de la molécule d'eau est transférée vers le centre ionique. Ce phénomène, dit « de transfert de charge », est de nature non additive car modulé par l'environnement du centre ionique. En effet, plus les molécules d'eau qui interagissent avec ce centre sont nombreuses, plus forte est la densité électronique qui peut *a priori* y être transférée, ce qui en retour défavorise ce transfert. Autrement dit, le phénomène de transfert de charge au niveau d'un ion monoatomique comme Cm(III) est anti-coopératif (plus il y a de molécules d'eau entourant cet ion, plus le phénomène s'affaiblit). Il existe des phénomènes de transfert de charge coopératifs, qui sont donc renforcés par la présence de nombreuses molécules. Par exemple, les propriétés du réseau de liaisons hydrogène entre molécules d'eau peuvent être interprétées comme résultant de phénomènes de transfert de charge coopératifs entre les paires libres de molécules d'eau et les orbitales anti-liantes des liaisons OH des molécules d'eau les entourant (cette interprétation permet d'expliquer le fort déplacement vers le rouge des fréquences associées au mode de vibration des liaisons OH de l'eau en phase condensée). Une autre particularité des phénomènes de transfert de charge est leur faible portée. Généralement, ils n'apparaissent qu'entre des entités chimiques séparées par moins de quelques dixièmes de nm. Les phénomènes de transfert de charge peuvent être décrits de manière simple à l'aide d'un terme d'énergie potentielle de la forme :

$$U_{tc} = \sum_{j \neq i} D_{ij}^e e^{-\beta r_{ij}} \quad (8),$$

où β est ici une constante et r_{ij} la distance entre deux entités chimiques i et j . En première approximation, il est possible de considérer D_{ij}^e comme une fonction linéaire de la densité locale $n_i(j)$ de l'espèce de type j au voisinage de l'espèce i : $D_{ij}^e = 1 + \zeta_i \times n_i(j)$ (le signe ζ_i permet de garantir le caractère coopératif ou anti-coopératif du terme U_{tc}). La densité locale $n_i(j)$ au voisinage de l'espèce i peut être estimée à l'aide d'un filtre gaussien appliqué aux distances interatomiques de la forme :

$$n_i(j) = \sum_{l \neq j} \exp \left(-\frac{(r_{il} - r_{il}^e)^2}{\gamma_r} \right) \quad (9).$$

Dans cette équation, les entités chimiques notées l sont du même type que j mais sont individuellement toutes différentes de j (et de i si i et j sont de même type). Les deux paramètres r_{il}^e et γ_r sont définis afin de ne faire jouer un rôle notable dans la définition de $n_i(j)$ qu'aux entités chimiques l situées à proximité de l'entité i (quelques dixième de nm au plus).

Les méthodes théoriques les plus précises permettant de traiter des systèmes chimiques à l'échelle moléculaire sont fondées sur un formalisme quantique et consistent en la résolution de l'équation de Schrödinger (méthode dite « de

chimie quantique *ab initio* »). Couplé à un terme de polarisation **MDI** et avec un jeu de paramètres adéquat, ce terme U_{tc} permet, par exemple, de reproduire les énergies d'interaction entre un ion lourd et des molécules d'eau à moins de 0,1 % près en moyenne [7, 8], par rapport à celles obtenues à l'aide des méthodes de chimie quantique *ab initio* les plus précises et ce, quel que soit le nombre de molécules d'eau considérées. Sans ce terme U_{tc} , ces énergies ne peuvent être reproduites au mieux qu'à 10-15 % près, ce qui représente une erreur de l'ordre de 150 kBT à température ambiante. En incluant une dépendance angulaire au terme U_{tc} , nous avons pu montrer qu'il est possible d'améliorer très nettement la qualité des champs de force polarisables pour décrire des réseaux de liaisons hydrogène (comme ceux présents dans l'eau liquide) ou encore les interactions entre l'eau et des anions mono atomiques (F/Cl/Br) [9] ou organiques comme les ions carboxylates [10]. En particulier, la prise en compte d'un terme U_{tc} permet même de réduire le nombre de centres polarisables à considérer pour un système moléculaire (par exemple, en ne considérant que l'oxygène comme centre polarisable pour l'eau) sans nuire à la qualité du champ de force, ce qui améliore très sensiblement son efficacité calculatoire [3].

La faible portée des phénomènes de transfert de charge implique que le terme U_{tc} est un terme d'ordre $O(N)$, où N est la taille atomique du système moléculaire considéré. Cela s'explique par le fait que le nombre de proches voisins d'un atome quelconque est une grandeur bornée. Cet aspect local du terme U_{tc} le rend particulièrement intéressant dans le cas de calculs réalisés en parallèle sur un grand nombre de processeurs. En effet, le facteur limitant de ce type de calcul est la mise à jour des données contenues dans la mémoire physique de ces processeurs (par exemple, les positions atomiques). Le terme U_{tc} ne nécessite donc que de mettre à jour la mémoire physique qu'entre les processeurs gérant les mêmes groupes d'atomes et non pas les mémoires de l'ensemble des processeurs.

La dynamique moléculaire et les approches multiéchelles

Les approches classiques « *all-atom* » de dynamique moléculaire sont caractérisées par une absence de hiérarchisation des interactions microscopiques qui sont toutes traitées au même niveau de précision. Par exemple, si nous souhaitons étudier le comportement d'une protéine en phase aqueuse, celle-ci sera simulée plongée dans une boîte contenant un nombre suffisant de molécules de solvant pour obtenir la densité souhaitée (cette boîte sera alors répliquée périodiquement pour modéliser une phase condensée). Généralement, un tel système (la boîte répliquée) contient dix fois plus d'atomes de solvant que d'atomes de la protéine (voir fig. 129). En conséquence, ce type d'approche conduit à faire porter l'essentiel de l'effort sur le traitement des inter-

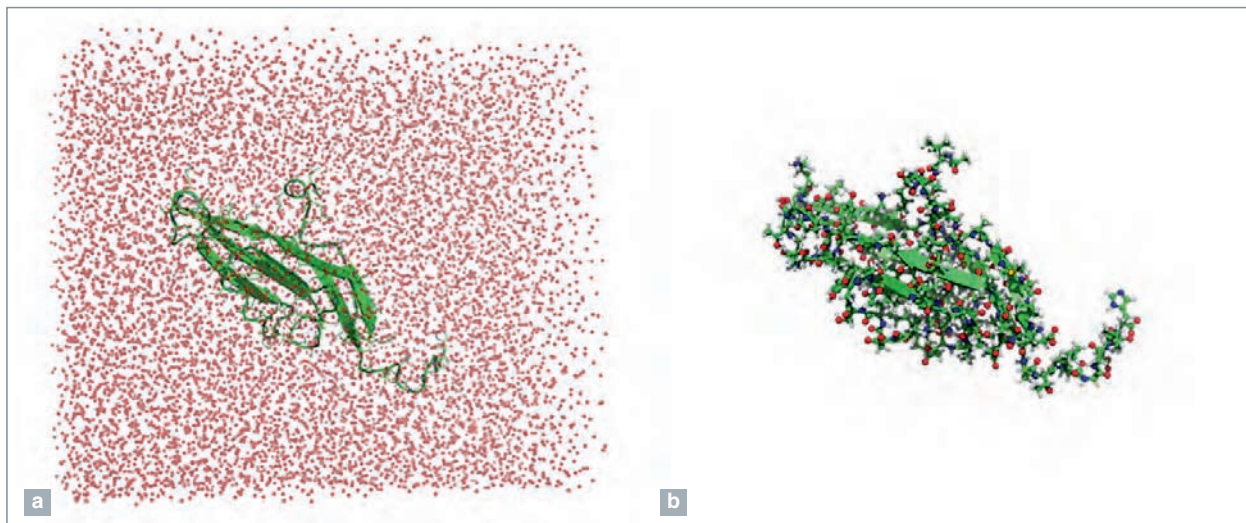


Fig. 129. a) Une protéine (en vert) plongée dans une boîte cubique de solvant eau (en rouge) dans une simulation « *all-atom* ». Afin de garantir une bonne description de la solvation de la protéine, il faut considérer de l'ordre de dix fois plus de molécules d'eau que d'atomes de la protéine. b) Détail de la structure de la protéine solvatée au niveau atomique.

actions entre molécules de solvant et non sur les interactions au sein de la protéine ou entre la protéine et un partenaire (une autre protéine ou une molécule synthétique, comme celles à vocation thérapeutique développées par l'industrie pharmaceutique). Ce constat est à l'origine du développement d'approches multiéchelle où la représentation de certaines parties d'un système microscopique est simplifiée. La question qui se pose alors est d'évaluer jusqu'où il est possible de pousser cette simplification sans nuire à la qualité prédictive des simulations ainsi réalisées.

Les premières approches multiéchelles proposées pour traiter efficacement un solvant consistent à le considérer comme un milieu continu, discrétisé sous la forme d'une grille régulière aux nœuds de laquelle des équations macroscopiques de type Poisson-Boltzmann sont résolues. Parmi celles-ci, certaines sont toujours très populaires, en particulier la méthode Generalized-Born/Surface Area (GB-SA) [11]. Ces approches, qui ne prennent pas en compte la nature particulière de la matière à l'échelle microscopique, ne permettent pas de prendre en compte des phénomènes de réorganisation du solvant autour du soluté, phénomènes à l'origine des effets hydrophobes dans le cas du solvant eau. En conséquence, de nouvelles classes d'approche multiéchelle ont été proposées dans lesquelles la nature particulière du solvant est préservée comme dans la méthode suivante développée au sein de notre laboratoire.

Un solvant peut être considéré comme un milieu continu polarisable. Dans ce cas, la composante « électrostatique » F_e de l'énergie libre de solvation d'un soluté peut s'écrire

$$F_e = \frac{1}{2} \int \frac{\varepsilon(\vec{r}) \vec{P}(\vec{r})}{\chi(\vec{r})} d\vec{r} - \int [\vec{P}(\vec{r}) \cdot \vec{E}_s(\vec{r})] d\vec{r} \quad (10),$$

où $\varepsilon(\vec{r})$ et $\chi(\vec{r})$ sont respectivement la constante diélectrique et la susceptibilité du milieu dans un élément de volume dv du solvant centré en \vec{r} , $\vec{E}_s(\vec{r})$ le champ électrique microscopique produit par le soluté et $\vec{P}(\vec{r})$ la densité de polarisation dans dv . Ici, les interactions entre les densités $\vec{P}(\vec{r})$ des différents éléments de volume du solvant sont négligées (approximation « locale » [12]). L'équilibre thermodynamique correspond à des valeurs de $\vec{P}(\vec{r})$ qui minimisent F_e :

$$\vec{P}(\vec{r}) = \frac{\varepsilon(\vec{r})}{\chi(\vec{r})} \vec{E}_s(\vec{r}) \quad (11).$$

Si nous discrétisons un milieu continu polarisable à l'aide de pseudo-particules polarisables (**PPP**) de volume $\Delta v = 1/\rho$ (ρ étant la densité du milieu) et portant un moment dipolaire induit vérifiant $\vec{\mu} = \vec{P}(\vec{r})\Delta v$, nous pouvons alors définir une énergie de polarisation soluté/solvant identique à celle des champs de force polarisables **MDI** [12]. Techniquement, il est donc possible de modéliser un milieu continu en considérant des particules qui sont traitées de manière identique à des atomes polarisables dans un code de dynamique moléculaire. Le développement de ce type d'approches n'implique donc qu'une réécriture très limitée d'un tel code. Par contre, il n'existe pas encore de théorie capable de définir la polarisabilité microscopique effective α_s de ces pseudo-particules. À la suite de nombreux tests numériques [13], une relation de type Clausius-Mossotti, reliant cette polarisabilité à des grandeurs macroscopiques, apparaît comme pertinente :

$$\alpha_s = \frac{\varepsilon_s - 1}{4\pi\varepsilon_s\rho} \quad (12),$$

avec ε_s la constante diélectrique du solvant pur. Il est à remarquer que la polarisabilité des pseudo-particules α_s est ici proportionnelle à leur volume. Il est donc *a priori* possible

de moduler la taille des pseudo-particules afin qu'elles modélisent des portions plus ou moins étendues d'un milieu. Cette propriété permet de proposer une approche multi-échelle particulièrement efficace pour modéliser des milieux très étendus. Considérons l'approche hiérarchisée **PPPⁿ** présenté fig. 130, approche qui peut se traduire par plus on s'éloigne d'un soluté, plus la taille des particules considérées est grande. Avec un tel schéma, il est possible de réduire la complexité calculatoire pour évaluer les interactions impliquant un soluté plongé dans un volume de solvant sphérique de rayon R_c , de $O(R_c^3)$ à $O(R_c)$ [14]. Cette propriété est particulièrement utile pour modéliser le comportement d'espèces chargées en solution, ce qui nécessite de considérer les interactions entre ces espèces et des portions très étendues du solvant [15].

Un autre avantage de l'approche multi-échelle **PPPⁿ** est de préserver la nature particulière d'un milieu à l'échelle microscopique. Dans le cas du solvant eau, il est alors possible de reproduire l'impact des effets hydrophobes sur un soluté en considérant un potentiel *ad hoc* d'interaction entre ces pseudo-particules qui reproduise certaines propriétés intrinsèques du solvant (comme l'énergie de création d'une cavité en son sein [16]). Pour des raisons d'efficacité, ce potentiel est défini comme étant à courte portée (au plus 1 nm) d'où une complexité algorithmique en $O(N)$. Enfin, ces pseudo-particules peuvent également être considérées pour évaluer la densité locale d'un solvant autour de certains atomes, ce qui est particulièrement utile pour quantifier les effets coopératifs lors de l'emploi d'un terme de transfert de charge de type U_{tc} .

Simuler efficacement une protéine en phase aqueuse

Stabilité structurale d'une protéine et couplage multi-échelle

L'emploi d'une approche hiérarchisée, comme l'approche **PPPⁿ** décrite précédemment, permet de réduire considérablement les temps de calcul nécessaires pour traiter un solvant et, par conséquent, pour simuler une macromolécule plongée dans un milieu continu, comme une protéine en phase aqueuse. Cette propriété des approches hiérarchisées est particulièrement intéressante lorsque l'on souhaite simuler une macromolécule ou un ensemble de macromolécules plongé dans un milieu continu à l'aide d'un champ de force évolué, comme un champ de force polarisable, *a priori* plus précis mais également plus coûteux en temps de calcul qu'un champ de force standard de type additif.

Prenons le cas d'un champ de force polarisable de type **MDI** comme celui que nous développons. Son emploi induit un surcoût important (au minimum un facteur deux) par rapport à l'emploi d'un champ de force classique du fait de l'introduction d'un nouveau jeu de degrés de liberté, les moments dipolaires induits $\vec{\mu}_i$, qui sont associés à de nouveaux termes d'énergie potentielle dont la complexité algorithmique est identique à celle des termes usuellement employés dans un champ de force classique non polarisable, [2], [3] et [4]. Simuler avec ce champ de force **MDI** une protéine d'environ 1 000 atomes à l'échelle de 10 ns et plongée dans une boîte de 6 000 pseudo-particules polarisables de type **PPPⁿ** ne nécessite qu'une douzaine d'heures en n'employant qu'un

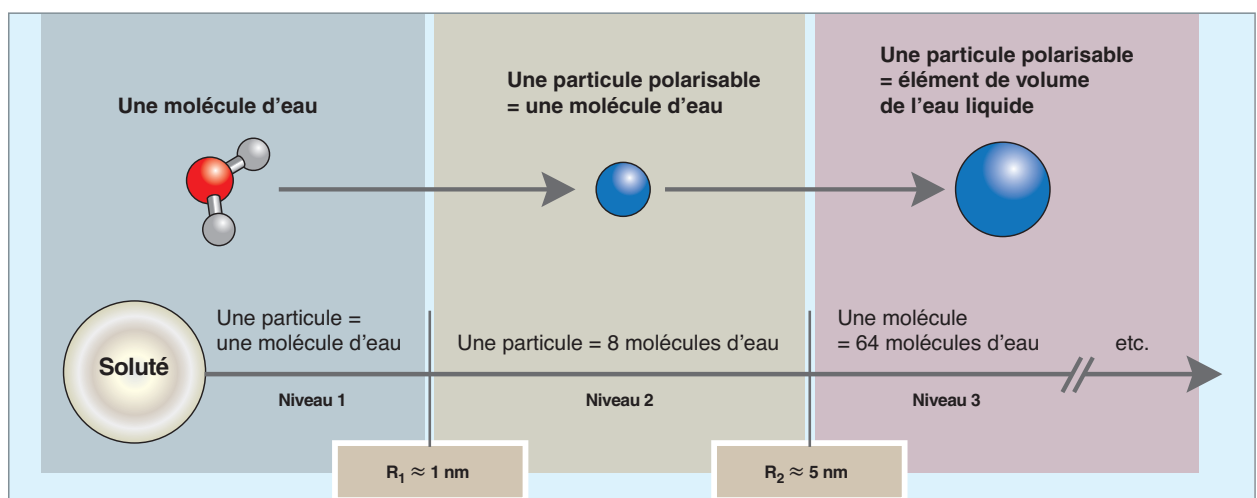


Fig. 130. Approche multi-échelle **PPPⁿ** pour modéliser un soluté dans un solvant étendu. Une molécule d'eau est modélisée par une pseudo-particule de même volume si cette molécule interagit à faible distance du soluté (typiquement moins de 1 nm), puis un groupe de molécules d'eau est modélisé par une pseudo-particule de volume plus large, etc. Pour chaque type de pseudo-particule, les interactions avec le soluté ne sont prises en compte qu'entre deux distances $R_1 < R_2$ (aux bornes de ce domaine, ces interactions sont progressivement annulées à l'aide d'une fonction de type B-spline). À la différence des approches classiques « *all-atom* », des conditions périodiques ne sont considérées dans ce schéma que pour traiter les interactions entre pseudo-particules (afin de maintenir la densité du solvant) et non pour traiter le soluté.

seul processeur x86 octo cœurs. À titre de comparaison, simuler cette protéine avec une approche « *all-atom* », à l'aide d'un champ de force classique, de conditions périodiques et d'une méthode numérique efficace comme la méthode « *Particle Mesh Ewald* » nécessite autant d'heures de calcul mais plus de ressources informatiques (entre 16 et 32 cœurs suivant le code utilisé [17]). En notant N la taille atomique de la protéine, il convient de remarquer ici que la complexité algorithmique de l'approche « *Particle Mesh Ewald* » varie en $O(N \log N)$, alors que toutes les interactions en sein de la protéine sont explicitement évaluées avec le champ de force **MDI**, d'où une complexité algorithmique variant en $O(N^2)$ pour l'approche multiéchelle polarisable.

Si les approches multiéchelles se révèlent très efficaces, elles sont fondées sur une simplification de la description des interactions au niveau microscopique. Leur légitimité repose donc *a minima* sur leur capacité à bien décrire les grandeurs physiques moyennes d'un système microscopique (autrement dit, à bien décrire les propriétés à l'équilibre d'un tel système). La figure 131 permet d'évaluer la pertinence de l'approche **PPPⁿ** couplée à un champ de force **MDI** pour modéliser le comportement d'une protéine en milieu aqueux. Cette figure présente les fluctuations temporelles sur 10 ns de la structure d'une protéine (connue pour être expérimentalement très stable en phase aqueuse) lors de simulations réalisées avec l'approche couplée **PPPⁿ/MDI**. Comme nous pouvons l'observer, le solvant gros grains, malgré sa simplicité, permet bien de reproduire la grande stabilité structurale de cette protéine sur des temps longs. Certes, il peut y avoir des compensations d'erreur impor-

tantes entre la description du solvant et des interactions soluté/solvant (approche **PPPⁿ**), et la description des interactions internes au soluté (champ de force **MDI**). Toutefois, une des particularités de notre champ de force **MDI** est de reposer sur des paramètres définis pour reproduire les propriétés des interactions en phase gaz entre de petites molécules modèles (et correspondant à l'ensemble des groupements chimiques présents au sein d'une protéine). Cela garantit donc que l'approche **PPPⁿ** modélise de manière réaliste les interactions impliquant le solvant.

Le repliement d'un peptide à l'aide de simulations couplées

Les phénomènes de **repliement*** de protéine (ou de **peptide***) sont des phénomènes de transition structurale dont les temps caractéristiques varient de la μ s à la ms. Les techniques de dynamique moléculaire sont fondées sur la résolution d'équation du mouvement dont les pas de temps d'intégration sont de l'ordre de la fs. *A priori*, même en employant des champs de force classiques, nous ne pouvons simuler avec des temps de restitution raisonnables (au plus quelques semaines) une protéine en phase aqueuse par des approches « *all-atom* » qu'à l'échelle de la μ s au mieux en employant des processeurs courant de type x86 ou GPU. Seuls des processeurs dédiés, comme la machine ANTON [18], permettent d'accéder à des temps de simulation à l'échelle de la ms. Toutefois, la disponibilité de ce type de processeurs est encore très réduite et ceux-ci ne permettent pas d'employer des champs de force évolués, comme les champs de force polarisables.

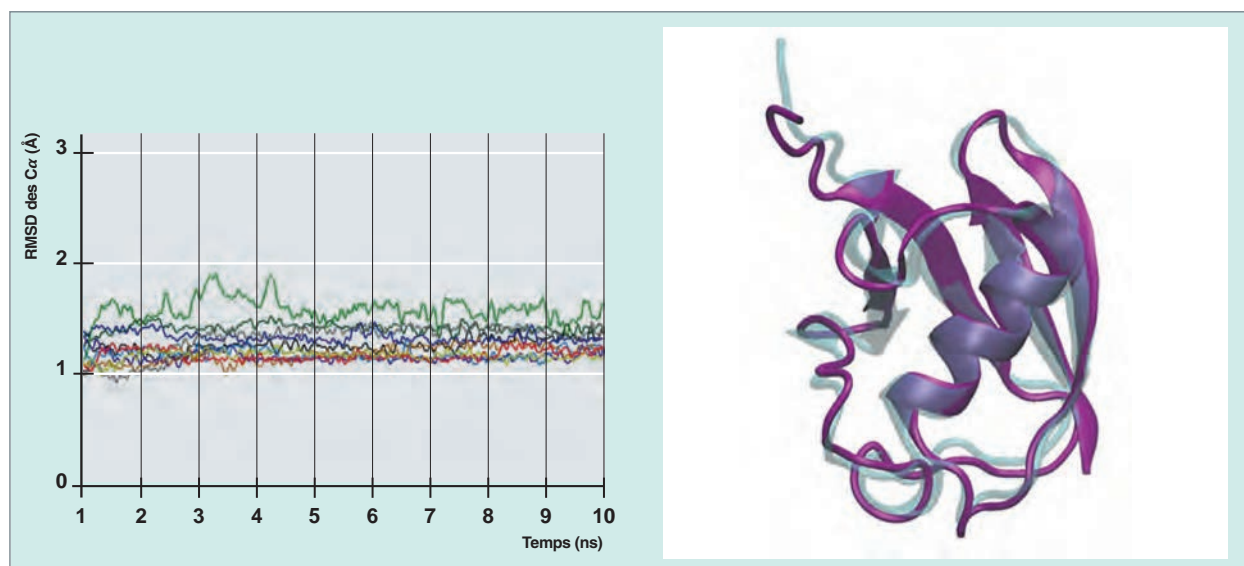


Fig. 131. Évolution de l'écart type des positions des carbones α définissant le squelette de la protéine ubiquitine 1UBQ le long de dix simulations de dynamique moléculaire à l'échelle de 10 ns par rapport aux positions dans la structure expérimentale cristallographique. Ces dix simulations correspondent à différentes conditions initiales pour les vitesses atomiques. À droite, une représentation en 3D de la superposition des squelettes de 1UBQ entre la structure expérimentale (en bleu clair) et une structure obtenue après 10 ns de simulation (en violet).

Récemment, de nouvelles approches fondées sur des techniques usuelles de dynamique moléculaire ont été proposées pour aborder le problème du repliement de protéines à l'aide de simulation à l'échelle de quelques centaines de ns. Parmi les plus prometteuses, nous pouvons citer les approches « *replica exchange* » (**RE**) [19]. Celles-ci sont fondées sur des simulations réalisées en parallèle d'un même système moléculaire à des températures de plus en plus élevées et/ou avec un champ de force de plus en plus atténué (ce qui amène, dans les deux cas, à favoriser le passage de barrières d'énergie potentielle auxquelles ce système moléculaire peut être confronté). Par exemple, en regroupant dans un seul terme U_{nl} tous les termes d'un champ de force qui décrivent les interactions entre atomes non liés chimiquement, chaque simulation (*replica* de rang $p \geq 1$) considérera ce terme sous la forme

$$U_{nl}(\vec{r}, p) = U_{nl}^0(\vec{r})/p + Wp \quad (13),$$

où U_{nl}^0 est le terme non altéré du champ de force de référence et Wp est une grandeur scalaire. L'objectif est de permettre au *replica* de rang p le plus élevé de sonder le plus exhaustivement possible la surface d'énergie potentielle du système moléculaire considéré à l'échelle de quelques dizaines de ns. À des intervalles réguliers Δt (quelques ps) le long des différentes simulations, la possibilité d'échanger de structures est évaluée en considérant un critère de type Metropolis. Considérons deux *replica* de rang p et q . La probabilité d'échange est évaluée suivant la relation

$$P_{\text{échange}}(p|q) = \begin{cases} 1 & \text{si } \Delta(p, q) \leq 0 \\ \exp[-\Delta(p, q)/k_B T] & \text{si } \Delta(p, q) > 0 \end{cases} \quad (14),$$

avec $\Delta(p, q) = U_{nl}(\vec{r}_q, p) + U_{nl}(\vec{r}_p, q) - U_{nl}(\vec{r}_q, q) - U_{nl}(\vec{r}_p, p)$ (15).

Ici, \vec{r}_p est le jeu de coordonnées atomiques du système moléculaire pour le *replica* de rang p . Si l'échange est validé, alors les coordonnées des *replica* de rang p et q sont échangées. Un taux d'échange moyen de l'ordre de 40 % à chaque intervalle Δt garantit l'efficacité de ce type d'approche. Cela n'est possible que si les distributions des énergies $U_{nl}(\vec{r}_p, p)$ le long des simulations se recouvrent notablement, ce qui implique de considérer *a priori* un nombre de *replica* qui croît avec la taille du système considéré. Toutefois, les énergies potentielles $U_{nl}(\vec{r}, p)$ étant définies à une grandeur scalaire près Wp , il suffit alors de moduler celle-ci de manière dynamique le long des simulations pour garantir un bon taux d'échange, même avec un faible nombre de *replica* [20].

Pour évaluer l'intérêt des approches **RE**, considérons le déca peptide « *chignoline* ». En partant de sa structure linéaire plongée dans une boîte de pseudo-particules de type **PPPⁿ**, il nous a été possible d'atteindre sa forme « repliée » à l'aide de six *replica* simulés à l'échelle de 100 ns (voir fig. 132). Ces simulations, fondées sur un champ de force polarisable de type **MDI**, n'ont nécessité que trois jours de calcul en employant six processeurs x86 octo cœurs. Ce repliement peut être aussi observé le long d'une unique simulation standard de dynamique moléculaire de 100 ns, mais avec une probabilité si faible qu'il faudrait répéter des centaines de fois une telle simulation pour pouvoir l'observer au moins une fois [21]. Si les simulations de type **RE** sont également sujettes aux effets chaotiques inhérents aux approches de dynamique moléculaire (qui ne sont qu'une forme particulière du problème à N-corps), la reproductibilité d'un phénomène de repliement sur des temps courts par une technique apparentée à **RE** a pu être montrée [22].

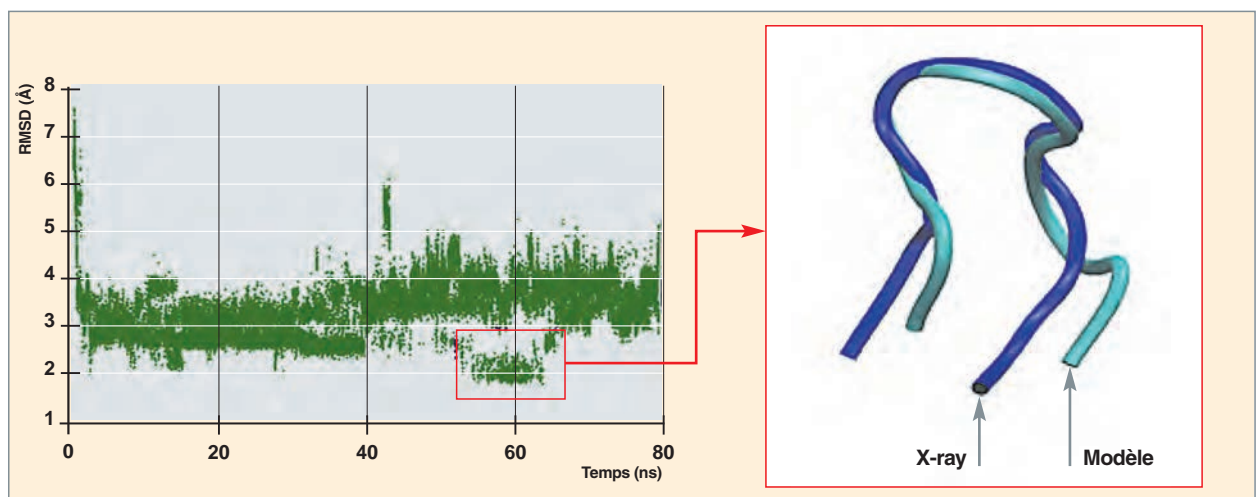


Fig. 132. Application de l'approche « *replica exchange* » au cas du repliement du déca peptide « *chignoline* ». RMSD : écart type des positions des carbones α définissant le squelette du peptide le long de la simulation de référence à celles de la structure expérimentale RMN. À droite, structure repliée du peptide obtenue après 60 ns de simulation et comparaison à la structure expérimentale (en bleu foncé).

Les systèmes de grande taille et le parallélisme

L'absence de hiérarchisation des interactions dans les approches « *all-atom* » et l'emploi de conditions périodiques pour simuler un système à l'état condensé expliquent la popularité des méthodes sommes d'Ewald de type « *lattice* », comme la méthode « *Particle Mesh Ewald* » déjà citée (**PME**) ou « *Particle-Particle-Particle-Mesh* » (**P3M**) [23]. La complexité algorithmique de ces méthodes varie en $O(N \log N)$, mais elles sont *a priori* mal adaptées aux architectures de calcul massivement parallèles car fondées sur un emploi massif de transformées de Fourier. Malgré ce défaut, elles ont été employées pour réaliser les plus grandes simulations reportées à ce jour dans le domaine des protéines, à l'échelle de 10 à 100 millions d'atomes, concernant par exemple des capsides de virus (une structure protéique enfermant le code génétique d'un virus) en phase aqueuse, comme la capside du virus HIV-1 [24].

La hiérarchisation des interactions dans l'approche multi-échelle décrite précédemment n'implique pas d'avoir à prendre en compte les interactions entre les images périodiques d'un soluté pour le simuler en phase condensée. Il est donc possible d'évaluer les interactions en son sein à l'aide d'une méthode numérique efficace sur des architectures de calcul massivement parallèles et très en vogue en astrophysique, à savoir l'approche « *Fast Multipole Method* » (**FMM**) dont la complexité algorithmique de ses implémentations les plus récentes varie en $O(N)$. L'approche **FMM** est fondée sur une décomposition spatiale où les particules contenues dans un sous-domaine sont traitées sous la forme d'un développe-

ment multipolaire de la grandeur physique les caractérisant (masse où charge électrostatique, par exemple). Toutefois, à la différence des calculs astrophysiques de dynamique d'un grand nombre d'astres en interaction gravitationnelle (où ne sont considérés que des objets avec une masse toujours positive), en modélisation moléculaire, nous considérons des atomes avec une charge électrostatique dont la somme peut être nulle. Pour des raisons de précision numérique, il convient donc de pousser plus avant les développements multipolaires en modélisation moléculaire qu'en astrophysique (respectivement à l'ordre 7 et 5).

L'adaptation d'une méthode **FMM** au cas des champs de force polarisable de type **MDI** est relativement aisée si nous considérons les moments induits $\vec{\mu}_i$ réécrits sous la forme [25] :

$$\vec{\mu}_i = q_\mu (\delta \vec{l}_i^+ + \delta \vec{l}_i^-) \quad (16).$$

Autrement dit, uniquement pour les calculs inhérents à la méthode **FMM** impliquant un centre polarisable i , nous introduisons deux nouvelles charges q_μ positionnées en $\delta \vec{l}_i^+ = -\delta \vec{l}_i^-$ de ce centre atomique, ce qui rappelle l'approche des oscillateurs de Drude (**OD**) pour traiter les phénomènes de polarisation.

Les données représentées sur la figure 133 permettent de vérifier le caractère $O(N)$ de cette approche **FMM** pour traiter des protéines, ainsi que sa bonne efficacité sur des architectures de calcul parallèle actuelles. En particulier, si l'emploi de développements multipolaires à l'ordre 7 induit un surcoût notable par rapport à des développements à l'or-

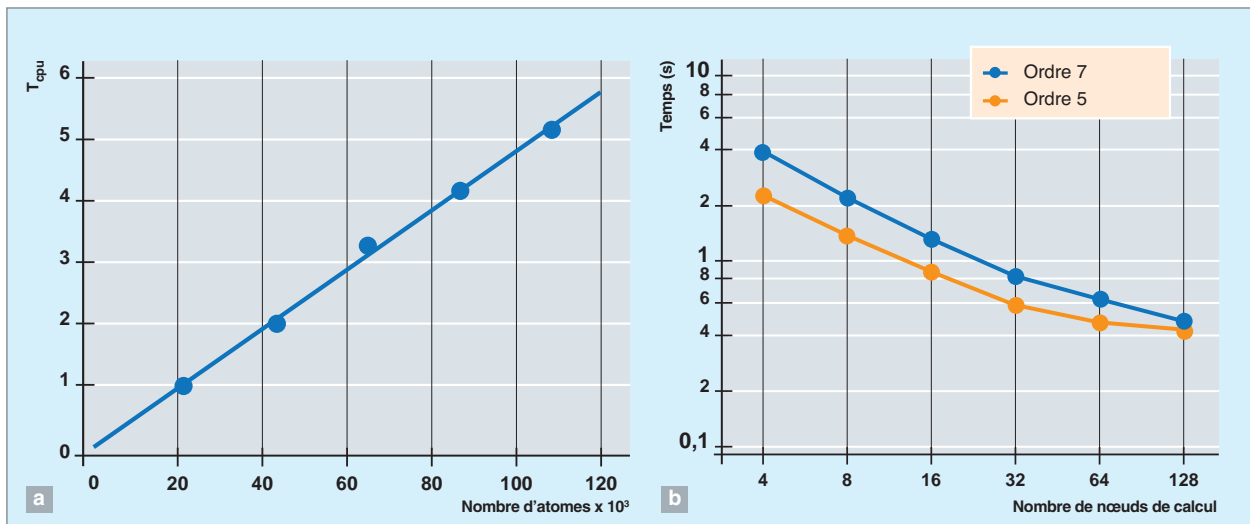


Fig. 133. Efficacité de la méthode « *Fast Multiple Method* » (**FMM**) pour traiter des systèmes atomiques polarisables de taille variable (à gauche, ces systèmes sont ici considérés isolés en phase gaz), et pour traiter un système protéique de 0,5 M d'atomes plongé dans une boîte de 2 M de pseudo-particules de solvant **PPP** en fonction du nombre de processeurs (à droite). a) Le temps Tcpu correspond temps de calcul normalisé (le temps unitaire de référence correspond à un système de $2 \cdot 10^4$ atomes). b) le temps correspond au calcul de l'énergie potentielle totale du système en considérant des développements multipolaires à l'ordre 5 et 7 (un nœud de calcul est constitué de 2 processeurs x86 à 12 cœurs, donc 128 nœuds correspondent à 3 072 cœurs).

dre 5, ce surcoût est progressivement absorbé en utilisant un très grand nombre de cœurs de calcul. Lorsqu'un grand nombre de processeurs en parallèle est employé, le facteur limitant est la mise à jour des mémoires de ces processeurs (temps de communication). Plus les calculs réalisés sur chaque processeur sont lourds, moins les temps de communication sont pénalisants, d'où la meilleure efficacité en parallèle des développements multipolaires à l'ordre 7 sur un grand nombre de cœurs de calcul.

Si la méthode **FMM** discutée ici est d'ordre $O(N)$, cela ne signifie pas qu'elle soit plus efficace que l'approche classique en $O(N^2)$ consistant à traiter explicitement toutes les interactions entre paires d'atomes dans un système moléculaire quelle que soit la taille de ce dernier. En général, les approches de type **FMM**, mais aussi **PME** ou **P3M**, sont moins efficaces pour des systèmes de petite taille (quelques centaines d'atomes). Sur la figure 134, le temps de calcul en mode séquentiel (c'est-à-dire en mode non parallèle) pour des systèmes moléculaires de taille variable correspondant à la méthode **FMM** avec des développements multipolaires à l'ordre 7 sont comparés à l'approche classique en $O(N^2)$. Dans ce cas particulier, l'approche **FMM** devient plus efficace pour des systèmes dont la taille atomique est supérieure à 5 000 atomes. Si nous considérons une approche **FMM** moins précise (développements multipolaires à l'ordre 5), celle-ci devient alors plus efficace dès 2 000 atomes. Ces

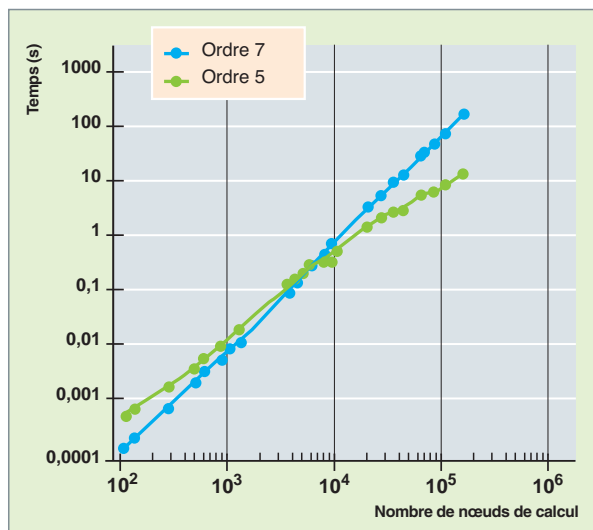


Fig. 134. Efficacité de la méthode **FMM** (avec des développements multipolaires à l'ordre 7) pour traiter des systèmes atomiques polarisables de taille variable par rapport à l'approche standard où toutes les interactions entre paires d'atomes sont traitées explicitement [approche $O(N^2)$] en fonction du nombre d'atomes du système moléculaire considéré. Les temps correspondent au calcul de l'énergie potentielle totale d'un système moléculaire sur un seul cœur de calcul de type x86. Le comportement non idéal observé ici pour la méthode **FMM** a pour origine la nature géométrique des systèmes moléculaires considérés. En fonction de leur structure tridimensionnelle, les décompositions en sous-domaine de l'approche **FMM** peuvent être plus ou moins optimales.

tailles sont à comparer à la taille atomique moyenne des protéines dont la structure tridimensionnelle a été résolue expérimentalement par des équipes académiques, environ 6 500 atomes [26].

L'approche de type **FMM** présentée ici est donc très efficace pour traiter des systèmes moléculaires de très grande taille sur les architectures modernes de calcul parallèle. Couplée avec une approche gros grains comme l'approche **PPP**ⁿ présentée plus haut, elle se révèle très prometteuse pour traiter des systèmes moléculaires de très grande taille en phase aqueuse. Par exemple, si nous considérons la capsid du virus MOSAIC PANICUM (contenant 0,5 M d'atomes et traitée par une approche **FMM**) plongée dans une boîte de solvant contenant 2 M de pseudo-particules de type **PPP** (voir fig. 135), le surcoût induit par le solvant est négligeable (il représente moins de 1 % du temps de calcul), alors que ces pseudo-particules représentent l'équivalent de 6 M d'atomes. Par ailleurs, l'approche **FMM** permet d'envisager des approches gros grains efficaces et précises pour traiter également certains fragments d'un soluté en considérant le développement multipolaire propre à un sous-domaine **FMM** comme constant le long de segments d'une trajectoire de dynamique moléculaire et non pas comme une grandeur dynamique à réévaluer à chaque pas d'une telle trajectoire. Cette idée est à la base d'approche très en vogue actuellement, comme le champ du champ de force MARTINI. Toutefois, dans ce type d'approche, les développements multipolaires considérés modélisent de petits fragments d'un système moléculaire (contenant au plus une trentaine d'atomes) et ils sont considérés comme figés le long d'une simulation. Les approches **FMM** permettent d'envisager une méthode favorisant la modélisation de portions très larges d'un soluté à l'aide d'un simple développement multipolaire. Toutefois, la difficulté sera de mettre au point un algorithme

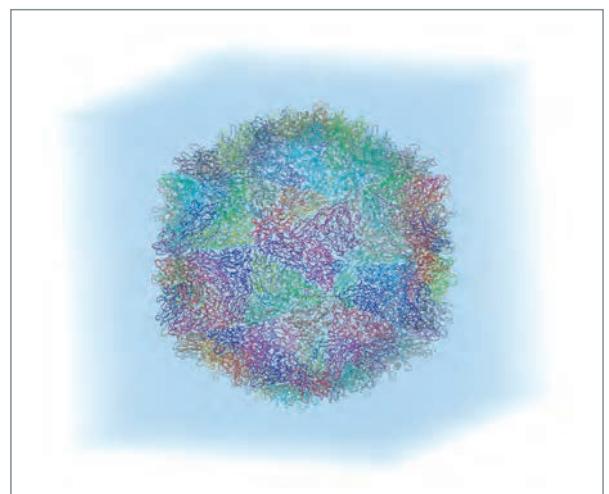


Fig. 135. Capsid du virus MOSAIC PANICUM (0,475 millions d'atomes) plongé dans une boîte de solvant de 1,95 millions de pseudo-particules de type **PPP** (représentées en bleu).

« *on the fly* » permettant de choisir s'il faut traiter de manière explicite ou sous la forme de développements multipolaires ces différentes portions du soluté en fonction du problème que l'on souhaite étudier (problème local comme l'interaction d'une protéine avec une petite molécule, ou problème de réorganisation structurale au niveau global d'une protéine en fonction des conditions physico-chimiques imposés par son environnement, par exemple).

Michel MASELLA

Direction de la recherche fondamentale

► Références

- [1] P. CIEPLAK *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter*, **21**, 333102, 2009.
- [2] M. MASELLA, *Mol. Phys.*, **104**, 415, 2006.
- [3] F. RÉAL *et al.*, *J. Chem. Phys.*, **139**, 114502, 2013.
- [4] P. JUNGWIRTH and D.J. TOBIAS, *Chem. Rev.*, **106**, 1259, 2006.
- [5] D. SCARPAZZA *et al.*, IEEE 27th International Symposium on Parallel and Distributed Processing (IEEE), vol. 35, p. 933, 2013.
- [6] J.A. LEMKUL *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, **5**, 2077, 2014.
- [7] F. RÉAL *et al.*, *J. Phys. Chem. B*, **114**, 15913, 2010.
- [8] F. RÉAL *et al.*, *J. Comput. Chem.*, **34** (2013) 707
- [9] M. TRUMM *et al.*, *J. Chem. Phys.*, **136**, 044509, 2012.
- [10] C. HOURIEZ *et al.*, *J. Phys. Chem. B*, **119**, 12094, 2015.
- [11] D. BASHFORD et D. CASE, *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **51**, 129, 2000 ; P. KOLLMAN *et al.*, *Acc. Chem. Res.*, **33**, 889, 2000.
- [12] T. HADUONG, *J. Chem. Phys.*, **117**, 541, 2002.
- [13] T. HADUONG, S. PHAN, M. MARCHI. and D. BORGIS, *J. Chem. Phys.*, **117**, 541, 2002.
- [14] M. MASELLA *et al.*, *J. Comput. Chem.*, **34**, 1112, 2013.
- [15] J.S. BADER and D. CHANDLER, *J. Phys. Chem.*, **96**, 6423, 1992.
- [16] D. CHANDLER, *Nature*, **437**, 640, 2005.
- [17] A-P. HYNINEN and M.F. CROWLEY, *J. Comput. Chem.*, **35**, 406, 2014.
- [18] K. LINDORFF-LARSEN *et al.*, *Science*, **334**, 517, 2011.
- [19] Y. SUGITA and Y. OKAMATA, *Chem. Phys. Lett.*, **314**, 141, 1999.
- [20] S. PARK and V.S. PANDE, *Phys. Rev. E*, **76**, 016703, 2007.
- [21] C.D. SNOW *et al.*, *Nature*, **420**, 102, 2002.
- [22] U. DOSHI and D. HAMELBERG, *J. Phys. Chem. Lett.*, **5**, 1217, 2014.
- [23] C. SAGUI and T. DARDEN, *AIP Conference Proceedings*, **492**, 104, 1998.
- [24] G. ZHAO *et al.*, *Nature*, **497**, 643, 2013.
- [25] J. COLES and M. MASELLA, *J. Chem. Phys.*, **142**, 024109, 2015.
- [26] Données issues de la Protein Data Bank, voir : <https://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

Neutronique et calcul intensif

Introduction

La neutronique étudie le cheminement des **neutrons*** dans la matière. Du fait des réactions nucléaires qu'ils induisent, ces derniers modifient la composition isotopique du milieu traversé. La population neutronique dans un **cœur*** de réacteur nucléaire est gouvernée par les équations suivantes (voir l'encadré « Les équations de la neutronique », p. 188), formant un système couplé :

- L'équation de Boltzmann (ou équation du transport) qui régit la propagation des particules (ici neutrons, et **gamma*** le cas échéant) dans la matière ; sa résolution fournit le flux des neutrons qui règne dans le cœur du réacteur ;

- les équations généralisées de Bateman (ou équations d'évolution) qui gouvernent la **transmutation*** des nucléides constituant le milieu irradié (combustible nucléaire, en particulier) par les neutrons ; sa résolution fournit les concentrations isotopiques du combustible nucléaire en fonction du temps (voir l'encadré *Les équations bilan de la neutronique*, p. 188).

En résolvant ces équations on détermine la réactivité* du cœur, caractérisant le comportement de la réaction en chaîne, la puissance (ou le flux neutronique) délivrée par les réactions nucléaires de fission pour être convertie *in fine* en puissance électrique (voir fig. 136), la composition du com-

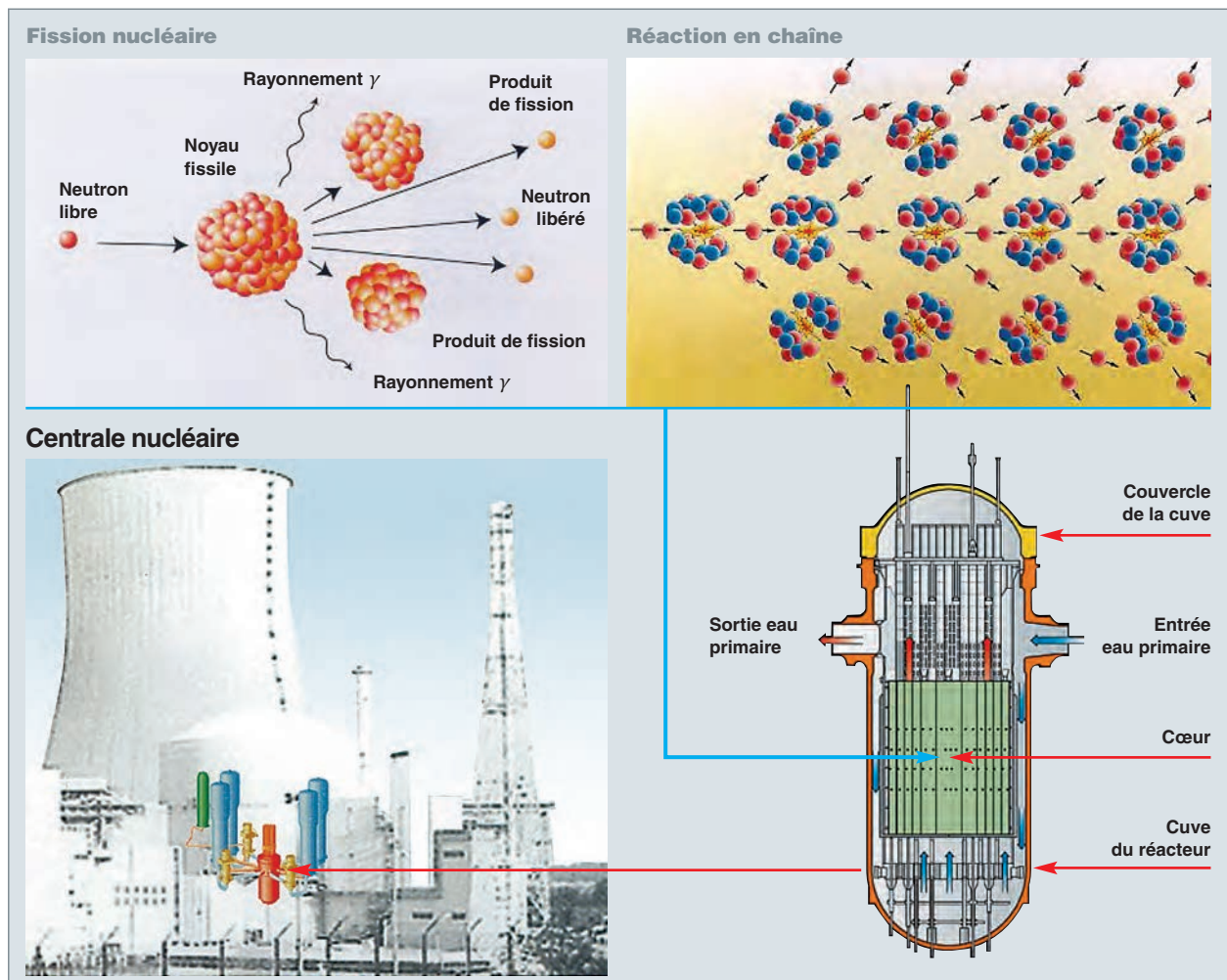


Fig. 136. De la fission élémentaire induite par neutron à la production d'énergie électrique dans une centrale nucléaire.

bustible nucléaire, en tout point du cœur du réacteur et à tout instant, en toute situation de fonctionnement, normal, incidentel et accidentel.

En pratique, ces grandeurs physiques d'intérêt sont obtenues en exécutant un calcul de neutronique dénommé « **calcul de cœur** ». Leur connaissance permet alors d'accéder aux paramètres clés de **sûreté**, à savoir les **facteurs de point chaud*** correspondant aux pics de puissance dans le cœur, les coefficients de réactivité qui traduisent la sensibilité de la réaction en chaîne à la variation de paramètres physiques tels que la température du combustible et celle du modérateur, et la marge d'**antiréactivité*** qui indique l'amplitude de la réduction de la réactivité du cœur (ou niveau de sous-criticité) du cœur lors d'un **arrêt automatique*** du réacteur.

Nous savons depuis le milieu du siècle dernier « **calculer un réacteur nucléaire** » de sorte que l'on peut s'interroger sur les motivations qui poussent à se tourner vers le **calcul intensif** – ou **High Performance Computing** (HPC) – pour continuer à étudier le cheminement des neutrons dans le cœur d'un réacteur et pour en prédire le comportement.

En se référant aux échelles physiques couvertes (voir l'encadré *Échelles physiques impliquées en neutronique*, p. 189) par les études neutroniques des systèmes nucléaires en général – réacteurs à fission, réacteurs à fusion, systèmes hybrides... – nous comprenons que pour parfaire le caractère prédictif de la simulation numérique et appréhender toujours plus finement les phénomènes physiques à l'œuvre, un tel recours soit utile, voire nécessaire.

La R&D en neutronique est aussi étroitement associée à l'enjeu de la *sûreté des installations nucléaires* pour laquelle

Les équations bilan de la neutronique (pour plus de détails, voir [1], p. 45 à 49)

L'équation de Boltzmann (linéaire) à laquelle satisfait le flux angulaire, ψ , des neutrons, s'établit, dans sa forme intégral-différentielle, en effectuant, au temps t , un bilan de la population de neutrons dans un volume élémentaire $d\vec{r}$, dE , $d\vec{\Omega}$ de l'espace de phases autour du point \vec{r} , de l'énergie E et de la direction $\vec{\Omega}$, en considérant, d'une part leur production (sources, réactions de diffusion) et, d'autre part, leur disparition (collisions et fuites hors de la cellule élémentaire) :

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) + \sum_i N_i(\vec{r}, t) \sigma_{ti}(E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\ = \sum_i N_i(\vec{r}, t) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sum_j \sigma_{sij}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$$

où $N_i(\vec{r}, t)$ est la concentration de nucléides de type i dans le milieu de propagation de neutrons considéré, v représente la vitesse des neutrons, $\sigma_{ti}(E)$ leur **section efficace*** microscopique totale relative au nucléide de type i , $\sigma_{sij}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ leur section efficace différentielle microscopique de diffusion (*scattering*) relative à une réaction de diffusion de type j sur le nucléide de type i , et $S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ le terme de source incluant les neutrons produits par une source externe et par fission.

La grandeur $\Sigma_{ti}(\vec{r}, E, t) = N_i(\vec{r}, t) \sigma_{ti}(E)$ est par définition la section efficace macroscopique totale des neutrons d'énergie E .

Les **équations généralisées de Bateman** ou « **équations d'évolution** » auxquelles obéissent les concentrations des radionucléides, $N(\vec{r}, t)$, s'écrivent de manière compacte comme :

$$\frac{dN(\vec{r}, t)}{dt} = A(\vec{r}, t, \phi) N(\vec{r}, t)$$

où $A(\vec{r}, t)$ est l'opérateur matriciel représentant la production des radionucléides par réactions nucléaires et par désintégrations radioactives, en un point \vec{r} de l'espace et à l'instant t .

Notations et unités :

- Flux angulaire ou flux en phase de neutrons : $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ neutrons.cm⁻². Mev⁻¹. sr⁻¹. s⁻¹
- Flux scalaire de neutrons obtenu par intégration sur $\vec{\Omega}$ du flux angulaire : $\phi(\vec{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\vec{\Omega}$ neutrons.cm⁻². Mev⁻¹. s⁻¹
- Source de neutrons : $S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ neutrons.cm⁻³. Mev⁻¹. sr⁻¹. s⁻¹
- Concentration des nucléides ou concentration isotopique : $N(\vec{r}, t)$ noyaux atomiques.cm⁻³
- Section efficace microscopique (scalaire) : $\sigma(E)$ cm²
- Section efficace microscopique de diffusion différentielle : $\sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ cm². Mev⁻¹. sr⁻¹
- Section efficace macroscopique : $\Sigma(\vec{r}, E, t) = N(\vec{r}, t) \sigma(E)$ cm⁻¹
- Taux de réaction, nombre de réactions nucléaires par unité de volume et par unité de temps : $\tau(\vec{r}, t) = \int N(\vec{r}, t) \sigma(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE = \int \Sigma(\vec{r}, E, t) \phi(\vec{r}, E, t) dE$ réactions nucléaires.cm⁻³. s⁻¹
- Le taux de réaction (fission, capture, etc.) est une grandeur physique très importante en neutronique : c'est celle que doivent s'efforcer de préserver les modélisations.

Échelles physiques impliquées en neutronique

- **Espace** : 10^{-15} m : distance d'interaction neutron-noyau ; 10^{-3} à 10^{-1} m : libre parcours moyen des neutrons avant interaction ; 10^{-1} à 1 m : libre parcours moyen des neutrons avant absorption ; 1 à plusieurs dizaines de mètres : dimension d'un réacteur nucléaire.
- **Temps** : 10^{-23} – 10^{-14} s : Interaction neutron-noyau ; 10^{-6} à 10^{-3} s : temps de vie des neutrons dans les réacteurs ; 10^{-2} s : transitoire dans un accident de criticité ; 10 s : retard à l'émission des neutrons retardés ; 100 s : transitoire dans une mise à l'équilibre thermique ; 1 jour : transitoire dû au xénon 135 ; 1 à 4 ans : irradiation d'un combustible nucléaire ; 50 ans : ordre de grandeur de la durée de vie d'une centrale nucléaire ; 300 ans : « extinction radioactive » des produits de fission (quelques exceptions) ; 10^3 à 10^9 ans : nucléides à vie longue.
- **Énergie** : 20 MeV – 10^{-5} eV (voire qq 10^{-7} eV pour les neutrons ultra-froids). Pour les systèmes à **spallation*** : quelques GeV à 10^{-5} eV.

les exigences sont toujours plus fortes en termes de capacité prédictive des outils de calcul et corrélativement de quantification des incertitudes associées aux grandeurs physiques d'intérêt. De plus, à l'instar d'autres domaines, la simulation numérique doit permettre d'explorer des situations extrêmes et inaccessibles par l'expérience.

Cette R&D neutronique est également pleinement concernée par un enjeu économique, notamment dans le cadre industriel. Pour les outils de simulation numérique, il s'agit d'améliorer la qualité des résultats de manière à réduire des marges inutilement pénalisantes. Par ailleurs, les études de « routine » se doivent d'être réalisées en une durée limitée. Le couple {précision, temps de calcul} est donc soumis à des contraintes industrielles sévères : par exemple, l'optimisation d'un plan de chargement des assemblages combustibles dans le cœur d'un réacteur nécessite l'exécution de plusieurs milliers de calculs en quelques heures ou dizaines d'heures, impliquant qu'un calcul de cœur doit pouvoir être effectué en quelques secondes.

Dans la suite, sont successivement abordées les approches modélisatrices et calculatoires adoptées en neutronique et la mise en œuvre du parallélisme dans les solveurs déterministes et probabilistes de l'équation de Boltzmann, en exploitant le calcul intensif. La dernière section présente quelques-unes des premières utilisations du *calcul intensif* pour étudier les cœurs des réacteurs nucléaires.

Modélisation, approches calculatoires

La neutronique considère au départ deux échelles :

- L'**échelle microscopique** à laquelle se situent les interactions neutron-matière, décrites par des grandeurs appelées sections efficaces microscopiques ; celles-ci caractérisent l'occurrence des réactions nucléaires et interviennent explicitement dans les équations de Boltzmann et/ou de Bateman précitées. Ces sections efficaces, pour un noyau atomique cible donné varient en fonction de l'énergie du neutron et de la température du milieu comme l'indique l'encadré *Sections efficaces et effet Doppler*, ci-après (fig. 137) ;
- l'**échelle macroscopique** à laquelle on décrit les compositions des différentes structures du cœur du réacteur nucléaire et de son environnement. Ces compositions sont prises en compte dans les équations de Boltzmann et/ou de Bateman par l'intermédiaire des sections efficaces macroscopiques (voir l'encadré *Les équations bilan de la neutronique*, p. 188). C'est aussi l'échelle à laquelle, *in fine*, sont déterminées les grandeurs physiques d'intérêt mentionnées dans l'introduction.

Sections efficaces et effet Doppler*

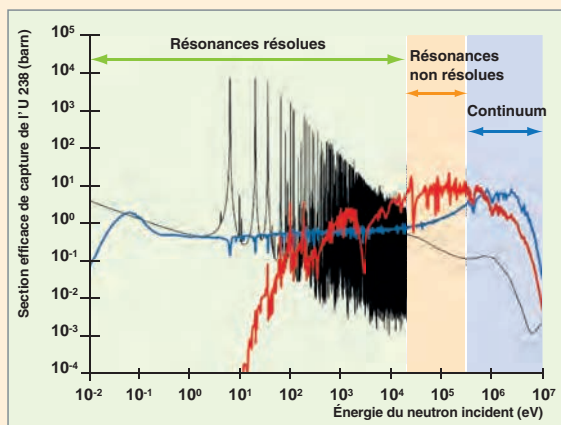


Fig. 137. Représentation de la section efficace de capture de l'U 238 (évaluation JEFF-3.1.1) et des flux de neutrons représentatifs d'un Réacteur à Neutrons Rapides (RNR) refroidi au sodium (courbe rouge) ou d'un Réacteur à Eau sous Pression (REP) [courbe bleue]. Les trois grands domaines en énergie (résonances résolues, résonances non résolues et continuum) sont également représentés. Les résonances sont des variations significatives de la section efficace sur des intervalles d'énergie étroits [1].

L'effet Doppler en neutronique correspond à une modification de la largeur (en énergie) des résonances de sections efficaces neutroniques « vue » par les neutrons sous l'effet d'un changement de la température du milieu de propagation qui impacte l'agitation thermique des noyaux atomiques-cibles. C'est ce qu'illustre la figure 138 qui représente,

pour différentes température du milieu de propagation des neutrons, l'« élargissement Doppler » d'une des résonances de l'uranium 238 dont le pic est situé à 6,67 eV :

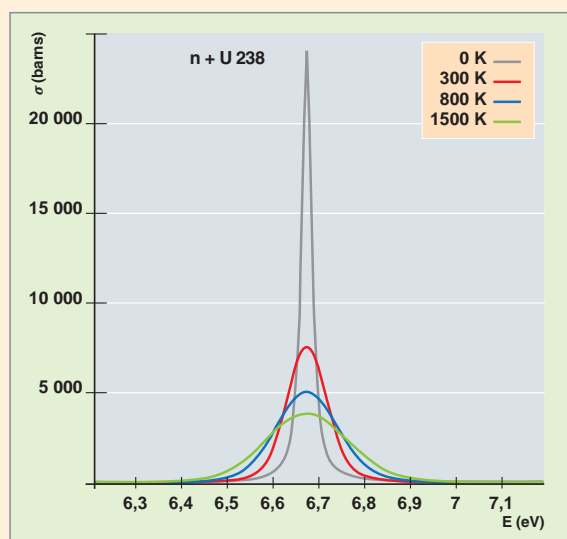


Fig. 138. Section efficace ponctuelle totale de l'uranium 238 à différentes températures.

La section efficace à la température T , dite « section efficace élargie », est obtenue par la convolution suivante :

$$v\sigma(v, T) = \int d\vec{v}' |\vec{v} - \vec{v}'| \sigma(|\vec{v} - \vec{v}'|) P(\vec{v}', T)$$

où $P(\vec{v}', T)$ est la distribution des vitesses v' du noyau-cible, à la température T et v la vitesse du neutron incident. Au-delà d'une énergie de 1 MeV du neutron, cet effet devient négligeable.

L'effet Doppler, fait partie de la famille des **contre-réactions neutroniques***. Il favorise la stabilité du cœur d'un réacteur nucléaire, en diminuant sa réactivité lors d'une élévation de sa température, car il augmente la probabilité pour un neutron d'être capturé avant d'atteindre le domaine des énergies thermiques ($< 1\text{ eV}$) dans lequel se produisent la majeure partie des réactions de fission.

Dans la suite nous nous focalisons principalement sur l'équation de Boltzmann, car c'est elle qui « dimensionne » véritablement, par son traitement, la difficulté du problème à résoudre.

Deux voies de calcul sont usuellement empruntées pour résoudre l'équation de Boltzmann.

La voie déterministe

Elle repose sur une discrétisation de l'espace des phases – espace, direction, énergie – en volumes de tailles plus ou moins petites, conduisant ainsi à un système d'équations linéaires dont les inconnues sont les flux de neutrons dans chacun de ces volumes. Son emploi trouve sa justification dans le compromis acceptable qu'elle permet d'établir entre précision du calcul et temps de calcul, vis-à-vis des besoins industriels d'exploitation des réacteurs nucléaires ou ceux des études de conception. Pour que soit possible un calcul de cœur complet à 3D, répondant à l'impératif industriel d'une durée de quelques secondes indiqué plus haut pour une précision de l'ordre de 1 % sur le pic de puissance, on introduit différentes échelles de modélisation spatiale et énergétique. C'est ainsi qu'en espace on distingue l'échelle du millimètre avec la cellule combustible, l'échelle *centimétrique* avec l'assemblage combustible et enfin l'échelle du mètre avec le cœur (voir fig. 139). En effet, une résolution numérique avec une discrétisation fine de l'espace des phases exigerait de traiter de l'ordre de *plusieurs centaines de millions de milliards d'inconnues* [10^9 ($10^3 \times 10^3 \times 10^3$ mailles spatiales à $3D \times 10^3$ directions angulaires $\times 10^5$ sous-domaines d'énergie = 10^{17} mailles de l'espace des phases)], ce qui est hors de portée des machines actuelles.

S'agissant de la dimension temporelle, nous traitons séparément les différentes échelles de temps sur lesquelles les phénomènes physiques se déroulent au sein du cœur du réacteur.

Les variations lentes du flux des neutrons au cours de l'évolution temporelle de la composition isotopique du combustible (résultant de l'irradiation de ce dernier en cœur) sur des périodes de l'ordre de quelques jours ou dizaines de jours avec un comportement quasi stable, permettent de faire l'hypothèse d'un réacteur en état stationnaire sur des plages temporelles judicieusement choisies. Les variations lentes des conditions de fonctionnement (puissance, température) sont alors prises en compte *via* le couplage avec un *calcul thermohydraulique* souvent simplifié et intégré dans le code de neutronique lui-même.

Les situations caractérisées par une variation rapide de la puissance, sur une durée allant de la fraction de seconde à plusieurs minutes, doivent être décrites avec l'équation de transport instationnaire impliquant la prise en compte d'une population spécifique de neutrons, les **neutrons retardés*** émis par les **produits de fission*** formés dans le cœur du réacteur au cours de l'irradiation. C'est en particulier le cas de l'étude des situations accidentelles qui exige d'introduire ici aussi différentes échelles temporelles de modélisation. Par exemple, il faut être en mesure de déterminer la variation spatiale et temporelle de la puissance dans le cœur du réacteur suite à une insertion subite de réactivité provoquée par l'éjection accidentelle d'une **barre de contrôle***. Dans de

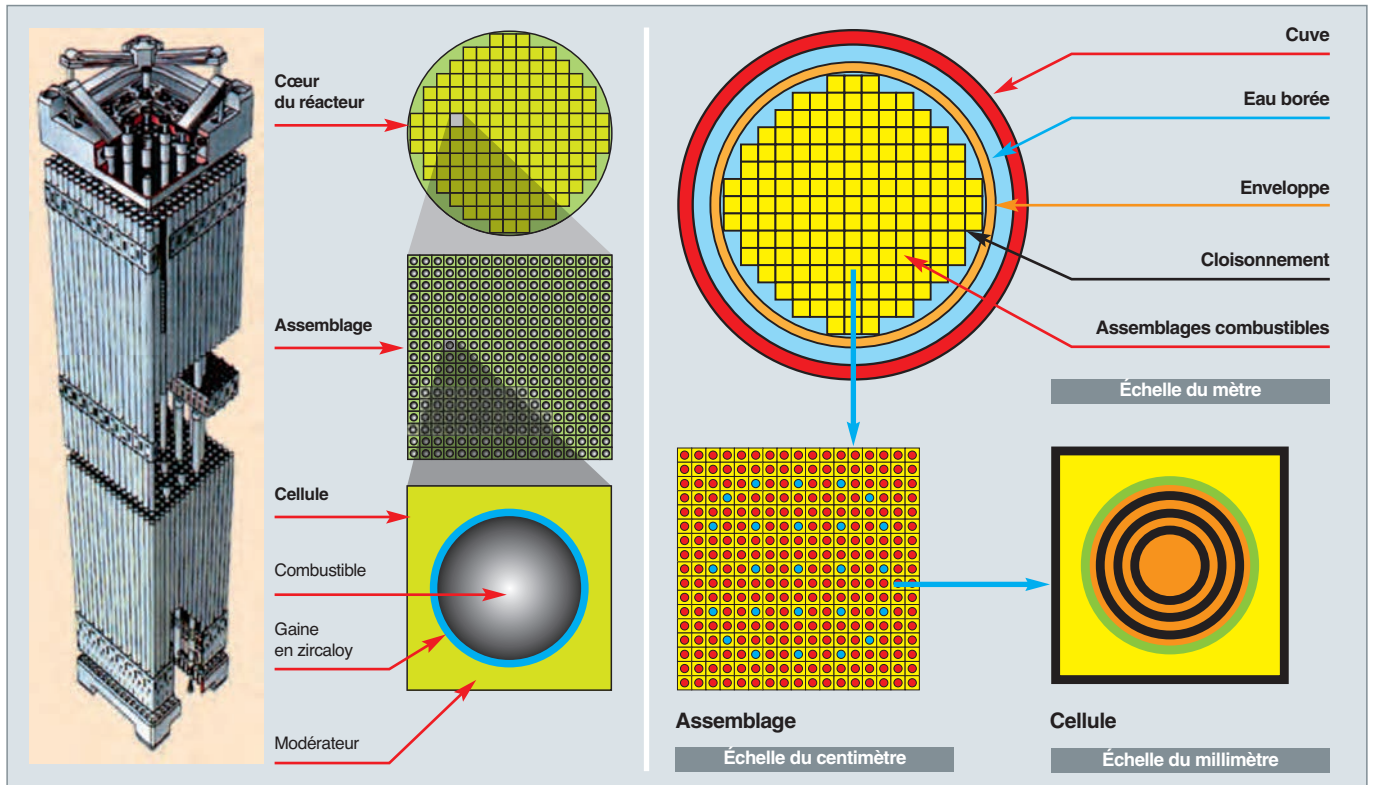


Fig. 139. Géométrie et échelles spatiales, du crayon combustible au cœur dans un réacteur à eau sous pression.

telles situations aussi, un couplage avec le calcul thermohydraulique, et éventuellement avec le *calcul thermomécanique*, est nécessaire.

La résolution numérique des équations d'évolution* ou de la **cinétique*** concernées induit des discrétisations temporelles se déclinant en plusieurs dizaines ou milliers de pas de temps.

Dans ces deux cas de figure, la dépendance du flux en espace, angle et énergie reste toujours assez complexe et le calcul du flux requiert toute une série d'approximations.

L'encadré *Exemple de discrétisation de l'équation de Boltzmann en régime stationnaire* fournit une illustration de la discrétisation opérée de l'équation de Boltzmann qui régit le flux neutronique recherché. La discrétisation de la variable énergétique est effectuée à l'aide du **formalisme multi-groupe** : le domaine en énergie est subdivisé en sous-domaines appelés « **groupes d'énergie** » ou tout simplement « **groupes** », les sections efficaces sont moyennées sur ces différentes plages d'énergie justifiant leur appellation de « **sections efficaces multigroupes** ». Dans le domaine des résonances où les sections efficaces présentent de très fortes variations (voir l'encadré *Sections efficaces et effet Doppler*, p. 189), il faut modéliser de manière anticipée la variation forte corrélative du flux des neutrons au droit de

ces résonances – phénomène physique dit d'« **autoprotection*** » des résonances – afin que la **section efficace*** moyennée la prenne en compte. Le qualificatif additionnel « **autoprotégées** » est alors affecté à ces sections efficaces multigroupes (voir référence [1, pp. 65-72]. Les équations issues de l'application du formalisme multigroupe sont dénommées « **équations multigroupes** ».

Les ordres de grandeur précédemment évoqués conduisent à une taille jusqu'ici prohibitive du système algébrique formé par les équations multigroupes étendues à l'ensemble du cœur du réacteur.

Afin de réduire drastiquement le nombre d'inconnues du problème à traiter, les méthodes usuelles reposent sur une approche multiéchelle qui s'efforce de préserver au mieux la « physique », c'est-à-dire ici, les taux de réaction (voir l'encadré *Les équations bilan de la neutronique*, p. 188). Cette réduction du volume des données est obtenue grâce à la mise au point et à l'emploi de techniques dites « d'**homogénéisation** » qui substituent à la *configuration réelle hétérogène* (en termes de géométrie et de matériaux) une configuration faite d'une « *pâte* » *homogène équivalente* vis-à-vis de grandeurs neutroniques à préserver [2]. Nous opérons de manière similaire sur la variable énergie comme l'indique la figure 140 (partie gauche).

Exemple de discrétisation de l'équation de Boltzmann en régime stationnaire

Avec les mêmes notations que celles de l'encadré *Les équations bilan de la neutronique*, p. 188, l'équation du transport sous sa forme intégral-différentielle en régime stationnaire (indépendant du temps) s'écrit :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \sum_k N_k(\vec{r}) \sigma_{t,k}(E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \sum_k N_k(\vec{r}) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{s,k}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$$

Discrétisation en énergie, équations multigroupes :

Le domaine en énergie est subdivisé en NG groupes repérés par l'indice $g : g = 1, NG$. En intégrant l'équation précédente sur le groupe g défini par les bornes E_g et E_{g+1} nous avons :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_k N_k(\vec{r}) \sigma_{t,k,g}(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_k N_k(\vec{r}) \sum_{g'} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{s,k}(g' \rightarrow g, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}') + S_g(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

où nous avons posé :

$$\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g+1}} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE \quad S_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{E_g} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) dE$$

Pour un groupe g donné nous réécrivons l'équation du transport comme :

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_k N_k(\vec{r}) \sigma_{t,k,g}(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_k N_k(\vec{r}) \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{s,k}(g' \rightarrow g, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}') + S_g^{eff}(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

en ayant regroupé dans un même terme $S_g^{eff}(\vec{r}, \vec{\Omega})$ les neutrons qui naissent dans le groupe g et ceux qui proviennent des autres groupes d'énergie :

$$S_g^{eff}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = S_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_k N_k(\vec{r}) \sum_{g' \neq g} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{s,k}(g' \rightarrow g, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}')$$

Nous procédons à présent à la discrétisation angulaire et spatiale de cette équation monogroupe.

Discrétisation et quadrature angulaires (méthode aux ordonnées discrètes dite « \mathbf{S}_N^* ») :

$$\{\vec{\Omega}_m, w_m\}_{m=1} ; w_m = \int_{\Delta\vec{\Omega}_m} d\vec{\Omega}_m$$

$$\vec{\Omega}_m \cdot \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}_m) + \sum_k N_k(\vec{r}) \sigma_{t,k,g}(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}_m) = \sum_k N_k(\vec{r}) \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{s,k}(g \rightarrow g, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}_m) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}') + S_g^{eff}(\vec{r}, \vec{\Omega}_m)$$

$$= \sum_k N_k(\vec{r}) \sum_{n=1, M} w_n \sigma_{s,k}(g \rightarrow g, \vec{\Omega}'_n \rightarrow \vec{\Omega}_m) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}'_n) + S_g^{eff}(\vec{r}, \vec{\Omega}_m)$$

Discrétisation spatiale (écriture simplifiée) :

$$\vec{\Omega}_m \cdot \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}_m) |_{\vec{r}=\vec{r}_{i-1}, \vec{r}_{i+1}} + \sum_k N_k(\vec{r}_i) \sigma_{t,k,g}(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}_i, \vec{\Omega}_m) = \sum_k N_k(\vec{r}_i) \sum_{n=1, M} w_n \sigma_{s,k}(g \rightarrow g, \vec{\Omega}'_n \rightarrow \vec{\Omega}_m) \phi_g(\vec{r}_i, \vec{\Omega}'_n) + S_g^{eff}(\vec{r}_i, \vec{\Omega}_m) \quad i = 1, I$$

Nous obtenons un système d'équations linéaires en $\phi_g(\vec{r}_i, \vec{\Omega}_m)$ de la forme : $\mathbf{A}\phi = \mathbf{C}\phi + \mathbf{S}$

où \mathbf{A} et \mathbf{C} désignent respectivement les opérateurs « disparition » et « diffusion » des neutrons.

En adjoignant les conditions aux limites appropriées ainsi qu'une relation reliant le flux au centre d'une maille spatiale et les flux aux extrémités de celle-ci, nous résolvons ce système algébrique. En raison de sa grande taille, $NG \times M \times I$, cette résolution est effectuée par itération à partir d'une distribution de source initiale arbitraire :

$$\phi^{(j)} = A^{-1}(C\phi^{(j-1)} + S).$$

Les approximations introduites dans cette résolution portent sur :

- La représentation des sections efficaces multigroupes $\sigma_{t,k,g}$ et $\sigma_{s,k}(g' \rightarrow g, \vec{\Omega}'_n \rightarrow \vec{\Omega}_m)$: approximation multigroupe qui doit prendre en compte le *phénomène d'autoprotection** des résonances ;
- la représentation de la dépendance en angle de la section efficace différentielle de diffusion $\sigma_{s,k}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$: par exemple, elle peut être décomposée en série (tronquée) sur les harmoniques sphériques ;
- la quadrature angulaire.

Ces approximations renvoient à différentes méthodes numériques présentées sur la figure 142.

Le code APOLLO3® développé au CEA abrite plusieurs solveurs déterministes de l'équation du transport dont des solveurs de type S_N [1, p. 138].

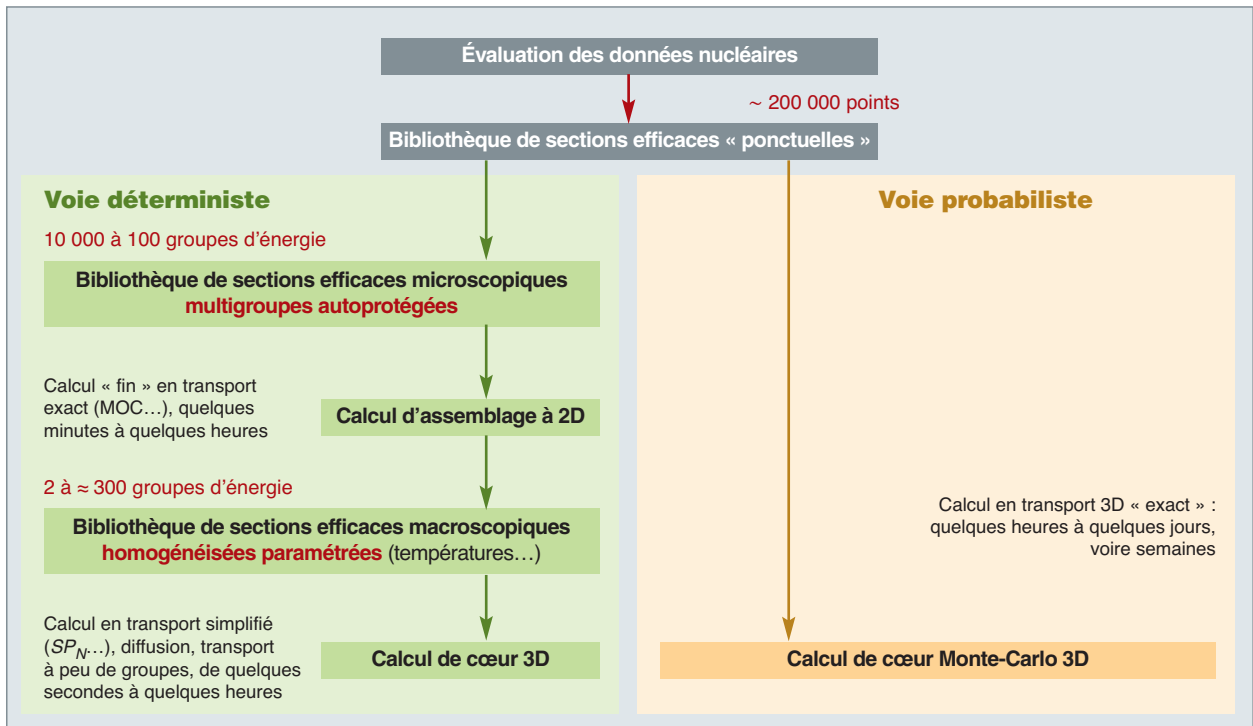


Fig. 140. **Voies de calcul probabiliste et déterministe d'un réacteur nucléaire.** Une évaluation de données nucléaires rassemble les données nucléaires (sections efficaces, spectres d'émission de particules secondaires...) relatives aux interactions des neutrons avec différents types de nucléides, recommandées par des spécialistes (les évaluateurs). Différentes institutions dans le monde distribuent des évaluations : à titre d'exemple, l'évaluation de données nucléaires élaborée en Europe, JEFF-3, est diffusée par l'agence de l'énergie nucléaire de l'OCDE. Le qualificatif « ponctuelle » renvoie à des valeurs de données nucléaires déterminées à des valeurs ponctuelles (discrètes) des variables énergie et angle.

Le calcul de cœur est donc réalisé en deux principales étapes, la première qui prépare les « *sections efficaces homogénéisées* », et la seconde qui résout l'équation de propagation des neutrons à l'échelle du cœur du réacteur en utilisant ces sections efficaces homogénéisées. Le calcul de cœur en deux étapes est exposé pages 196, 197 et illustré par la figure 140.

La voie probabiliste Monte-Carlo

Dans son principe, cette voie de calcul est censée reproduire sur ordinateur la réalité, car elle consiste à simuler telle quelle la propagation des neutrons dans la matière. De cette manière, elle « résout » l'équation de Boltzmann sans approximation (presque) : prise en considération de la géométrie 3D réelle ainsi que des caractéristiques (sections efficaces, lois de renvoi énergétique et angulaire) exactes des interactions neutron-noyau atome-cible (voir figure 140, partie droite).

Les événements auxquels donne lieu un neutron au cours de son histoire – diffusion, capture, fission, sortie du système physique considéré, etc. – sont aléatoirement choisis à l'aide de densités de probabilité ou de probabilités discrètes construites à partir des sections efficaces d'interaction du neutron avec le noyau atome-cible.

Chaque événement simulé fournit un « quantum d'information » sur le système étudié dont le traitement statistique étendu à toutes les histoires des neutrons simulées permet de reconstituer les grandeurs physiques macroscopiques

d'intérêt comme le flux des neutrons, la puissance produite par les fissions, etc. (voir encadré *Transport des neutrons dans la matière par la méthode de Monte-Carlo*, ci-contre).

Autrement dit, l'intérêt de la méthode de Monte-Carlo est ici d'offrir le moyen de produire un calcul de propagation des neutrons de référence auquel se compare, pour être validé, le calcul déterministe.

Le talon d'Achille de cette méthode de Monte-Carlo est qu'elle est très consommatrice en temps de calcul, typiquement de plusieurs heures à plusieurs semaines, voire mois, requis pour un seul calcul. À titre illustratif, l'obtention de la puissance par assemblage d'un REP, en situation stationnaire, à 1 % d'incertitude a nécessité la simulation de plus d'1 milliard d'histoires de neutrons pendant 24 heures sur 20 processeurs de 3 GHz, en parallèle. Plusieurs dizaines d'années de simulation dans les mêmes conditions seraient nécessaires pour obtenir la même précision à l'échelle fine d'une maille axiale de quelques centimètres de hauteur du crayon combustible (d'environ quatre mètres), pour la quarantaine de milliers de crayons présents dans le cœur du réacteur.

La figure 142 donne une vue d'ensemble des méthodes numériques mises en œuvre en neutronique pour résoudre l'équation de Boltzmann. S'agissant des méthodes déterministes le choix de la technique numérique dépend, entre autres, de l'échelle de modélisation concernée, comme cela sera précisé *supra*, p. 190.

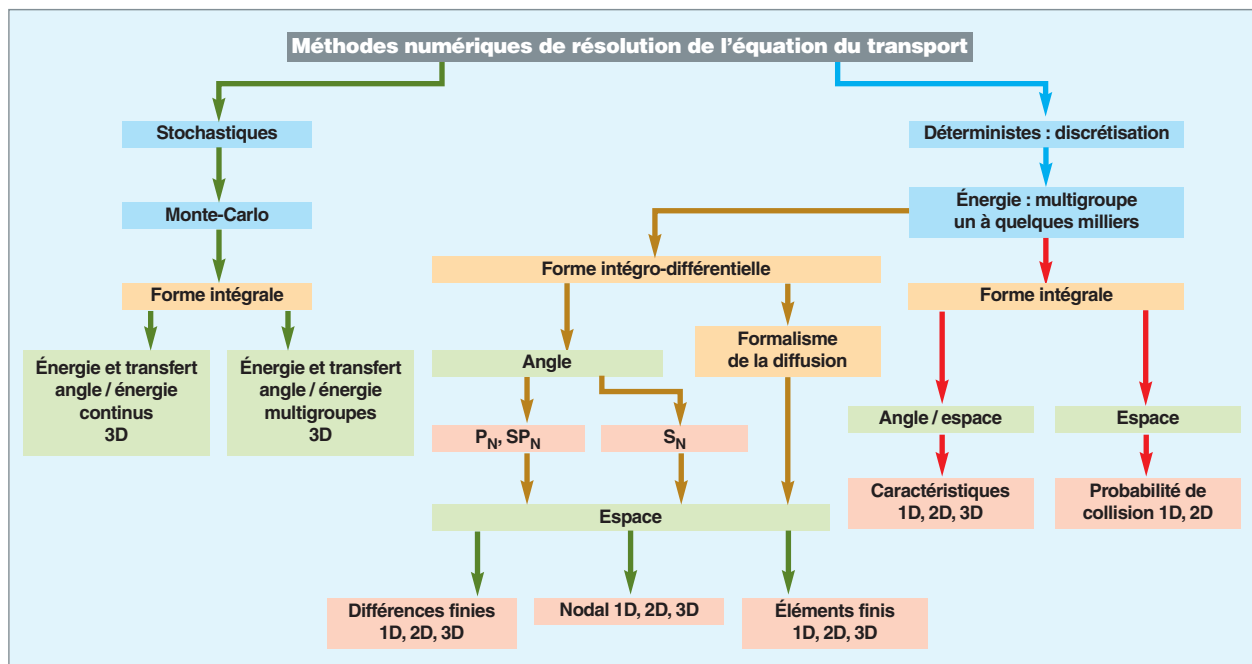


Fig. 142. Synoptique des différentes méthodes numériques de résolution de l'équation du transport des neutrons ([1], p. 63).

La figure 141 indique que dans l'approche Monte-Carlo du traitement de l'équation de Boltzmann, la grandeur recherchée dans la « zone de résultat » se construit par sommation de l'information portée par chaque neutron pénétrant dans cette zone, après avoir subi un certain nombre de collisions. Cette approche calculatoire peut être formalisée mathématiquement de la manière suivante (en faisant abstraction de la variable temps) :

Désignons par $\zeta(P) = N(\vec{r}, t) \sigma_t(E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ la densité des neutrons entrant en collision en un point P de l'espace des phases (r, E, Ω) (voir l'encadré 1 pour les notations). En considérant la forme intégrale de l'équation de Boltzmann, nous montrons que $\zeta(P)$ est donnée par l'expression suivante, appelée décomposition en série de Neumann (fig. 141) :

$$\zeta(P) = \sum_n \zeta_n(P)$$

où :

- n représente la longueur d'une chaîne d'événements subis par les neutrons, c'est-à-dire le nombre d'événements subis (diffusion élastique, diffusion inélastique...) avant de disparaître soit par **capture stérile*** soit par sortie du domaine physique étudié.
- $\zeta_n(P)$ représente la contribution à la densité de collision totale $\zeta(P)$, de l'ensemble des neutrons dont l'histoire a pour longueur n .

Cette densité partielle $\zeta_n(P)$ s'écrit comme l'intégrale multidimensionnelle :

$$\zeta_n(P) = \int_{DS} \dots \int_{D_0} S(P_0) T(P_0 \rightarrow P_1) \left[\prod_{k=1}^{n-1} K(P_k \rightarrow P_{k+1}) \right] K(P_n \rightarrow P) dP_0 dP_1 \dots dP_n \quad n \geq 1$$

où $S(P_0)$ est la source de neutrons émis dans le domaine spatial DS , $T(P_0 \rightarrow P_1)$ est l'opérateur de déplacement d'un neutron d'un point P_0 à un point P_1 et $K(P_k \rightarrow P_{k+1})$ l'opérateur de

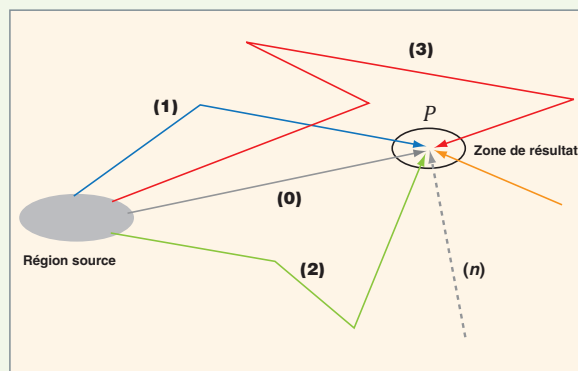


Fig. 141. Illustration de la décomposition en série de Neumann. P désigne un point de la zone de résultat.

transport combinant à la fois le déplacement des neutrons et leur collision, les amenant d'un point P_k à un point P_{k+1} de l'espace des phases. Ces deux opérateurs contiennent les sections efficaces d'interaction des neutrons avec un noyau atomique-cible. Ils sont utilisés pour construire les densités de probabilité et probabilités discrètes requises pour la simulation Monte-Carlo de la propagation des neutrons. Cette simulation fournit une estimation statistique des contributions $\zeta_n(P)$. Compte tenu de la définition de la densité de collision, en est déduit aisément le flux des neutrons au point P ou moyenné dans des zones de calcul définies.

Le code TRIPOLI-4® développé au CEA et dédié aux études de neutronique et de radioprotection est fondé sur la méthode Monte-Carlo [20].

L'ambition multiphysique pour la simulation des cœurs de réacteurs

L'un des objectifs majeurs de la simulation numérique dans le domaine de la neutronique est de s'acheminer vers la réalisation d'un « cœur/réacteur numérique » selon une *approche multiphysique* couplant à minima la neutronique, la *thermohydraulique* et la *thermomécanique* (voir figure 143) et avec des incertitudes de calcul maîtrisées, utilisables dans le cadre des démonstrations de sûreté. L'élaboration de la plateforme logicielle CORPUS [3] s'inscrit dans cette dynamique.

Un tel objectif ne peut être envisagé qu'avec le recours au *calcul intensif* en raison de la complexité et de l'imbrication des phénomènes physiques à traiter, de la taille de l'objet physique considéré, de la finesse et de la précision des résultats recherchée. Dans cette perspective, deux défis neutroniques relatifs à la faisabilité d'un calcul de cœur tridimensionnel doivent être relevés, l'un concernant le transport déterministe, l'autre le transport probabiliste Monte-Carlo.

• **Le défi du calcul de transport neutronique déterministe « en 1 étape ».** Le schéma de calcul couramment utilisé aujourd'hui par l'industriel, et qui repose sur les échelles

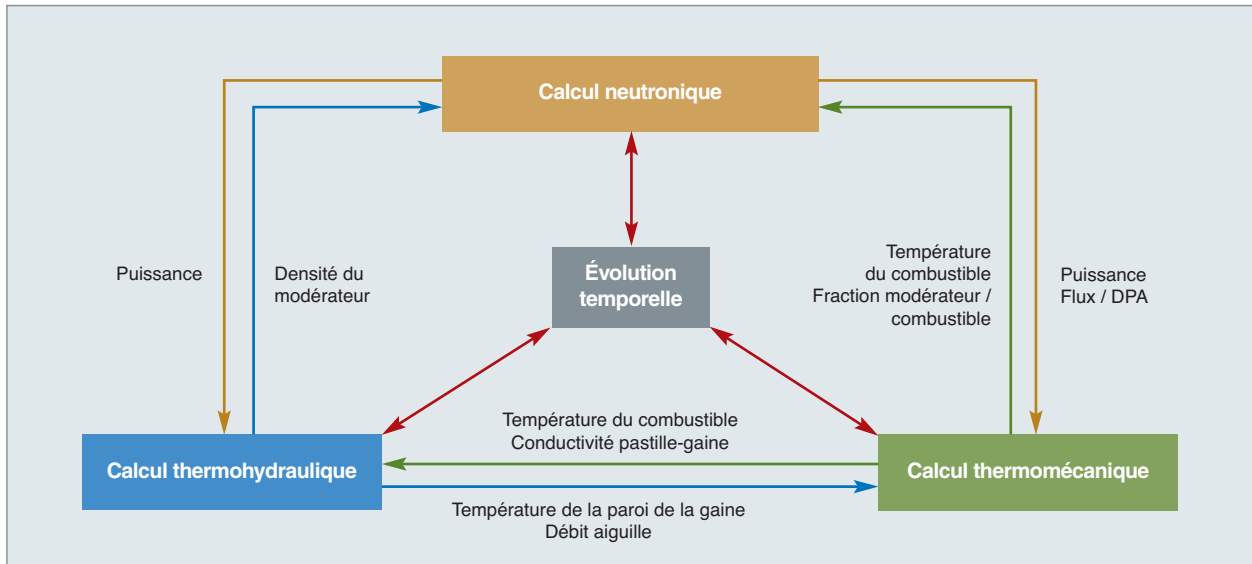


Fig. 143. Schéma de principe du couplage multiphysique dans le domaine de la physique des réacteurs nucléaires, d'après [4], p. 14).

de modélisation évoquées plus haut, n'est pas exempt de biais de modélisation, induits :

- par la non prise en compte de toutes les hétérogénéités présentes au sein des assemblages combustibles et dans son environnement dans le cœur du réacteur ;
- par l'emploi d'une forme dégradée/simplifiée de l'équation de Boltzmann.

Le problème consiste ici à lever ces deux verrous en exploitant le calcul intensif, ce qui permettrait de disposer d'un outil de calcul déterministe 3D « de référence » susceptible même d'être une alternative à l'outil de calcul Monte-Carlo non toujours utilisable dans toutes les situations, même avec le recours au calcul intensif.

- **Le défi de la simulation numérique probabiliste de référence en neutronique.** Si le caractère référence d'un code de transport des neutrons par la méthode Monte-Carlo peut être considéré comme acquis dans le cas d'une situation stationnaire, la faisabilité d'un tel calcul n'est plus assurée dans le cadre d'une approche multiphysique où la dimension temporelle des phénomènes physiques intervient, avec une variation associée de paramètres physiques tels que la température, les compositions isotopiques, la dimension des matériaux comme précédemment évoqué. Le problème consiste donc à trouver les algorithmes qui permettent au calcul de Monte-Carlo de prendre en compte ce caractère dynamique (« *Dynamic Monte-Carlo* ») que rend envisageable le calcul intensif.

Ajoutons que la quantification des incertitudes associées aux grandeurs physiques calculées dans le cadre multiphysique

est un objectif partagé par les deux challenges de calcul de cœur exposés ci-dessus, et qui fait tout autant appel au calcul intensif.

Calcul intensif et transport déterministe

Pour appréhender l'apport du calcul intensif à la résolution du transport déterministe, il est utile d'exposer plus en détail quelques-uns des grands principes de la démarche numérique usuelle adoptée pour aboutir à la détermination de ce flux de neutrons.

Une vue d'ensemble de la méthodologie des calculs de cœur 3D de grande taille est présentée dans la référence [5].

Le schéma de calcul en deux étapes

Le procédé usuel, qui est à la base de tous les schémas de calcul de réacteurs dans le monde, est le calcul dit « **en deux étapes** » tel qu'il est représenté sur les figures 140, 144 et 145.

Une première étape, appelée communément « **calcul réseau** », consiste à calculer séparément des sous domaines représentatifs du cœur, comme les assemblages de type différents (combustible, éléments de contrôle), éléments du réflecteur, etc. Ces motifs sont calculés en résolvant l'équation du transport en *approximation multigroupe*, en 2D, couplée avec les équations de Bateman et un *modèle de fuites neutroniques* approprié, en supposant que le motif traité est étendu à l'infini.

Au cours de cette étape, un grand nombre de calculs sont effectués pour différentes conditions de fonctionnement du réacteur (on fait varier les températures, la densité du caloporteur etc.) en situation normale ou accidentelle. Chacun de ces calculs utilise des sections efficaces microscopiques multigroupes dites « **autoprotégées*** » pré-calculées et résout de manière précise en angle et espace l'équation du transport. Les flux neutroniques issus de cette première étape sont exploités pour construire le jeu des sections efficaces macroscopiques requises pour la modélisation du cœur à 3D, constituée de mailles homogènes larges comme le schématise la figure 144.

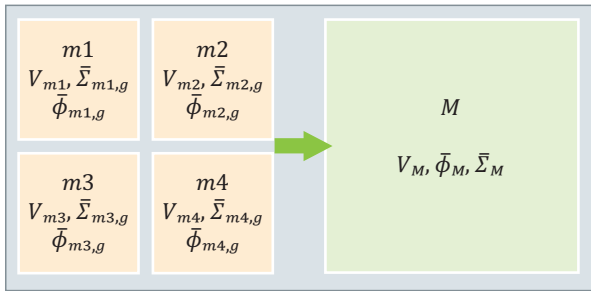


Fig. 144. **Exemple d'homogénéisation** : réduction du nombre de zones physiques de 4 mailles de volume respectifs $V_{mi}(i = 1,4)$ à une seule maille homogène M « neutroniquement équivalente » de volume V_M . Les grandeurs $\bar{\Sigma}_{mi,g}(i = 1,4)$ et $\bar{\Sigma}_{M,G}$ sont les sections efficaces macroscopiques des différents milieux considérés, relatives respectivement au groupe d'énergie fin g et au groupe large (ou macrogroupe d'énergie) G . Les grandeurs $\bar{\phi}_{mi,g}(i = 1,4)$ et $\bar{\phi}_{M,G}$ sont les flux neutroniques, relatifs respectivement au groupe d'énergie fin g et au groupe large G . Les flux neutroniques fins $\bar{\phi}_{mi,g}(i = 1,4)$ sont calculés en résolvant les équations multigroupes à groupes fins à 2D, utilisant les sections efficaces microscopiques multigroupes autoprotégées calculées en amont (voir la figure 140).

L'algorithme d'obtention de ces sections efficaces homogénéisées est illustré par la figure 145.

Dans la pratique, les sections efficaces homogénéisées se présentent sous la forme de tables d'interpolation paramétrées en fonction de paramètres physiques déjà cités : la température du combustible, la température du modérateur, le **taux de combustion***, etc.) ; elles sont stockées selon un format informatique prédéfini au sein de ce qu'il est convenu d'appeler une « *bibliothèque paramétrée* ».

La deuxième étape est communément appelée « **calcul cœur** ». Elle est réalisée sur le cœur entier 3D, homogénéisé par zones, en exploitant les sections efficaces macroscopiques des bibliothèques paramétrées. Le calcul de cœur qui inclut le couplage au *calcul de thermohydraulique* permet d'obtenir les grandeurs physiques d'intérêt importantes pour le fonctionnement et la sûreté du réacteur : la distribution de puissance dégagée dans le cœur du réacteur, les coefficients de réactivité, etc. (voir introduction).

En fait, pour atteindre l'objectif d'une exécution d'un calcul de cœur complet d'un réacteur nucléaire en quelques secondes, il ne suffit pas de réduire significativement le nombre d'inconnues du problème mathématique à résoudre. Il faut conjointement simplifier l'équation de Boltzmann à résoudre et faire appel à des techniques d'accélération du processus itératif de résolution du système d'équations discrétisées établi. Ce sont ces aspects dont il est question dans le paragraphe suivant. Sont exposées ensuite les diverses techniques de parallélisation développées et mises en œuvre pour accroître les performances du calcul de cœur d'un réacteur nucléaire.

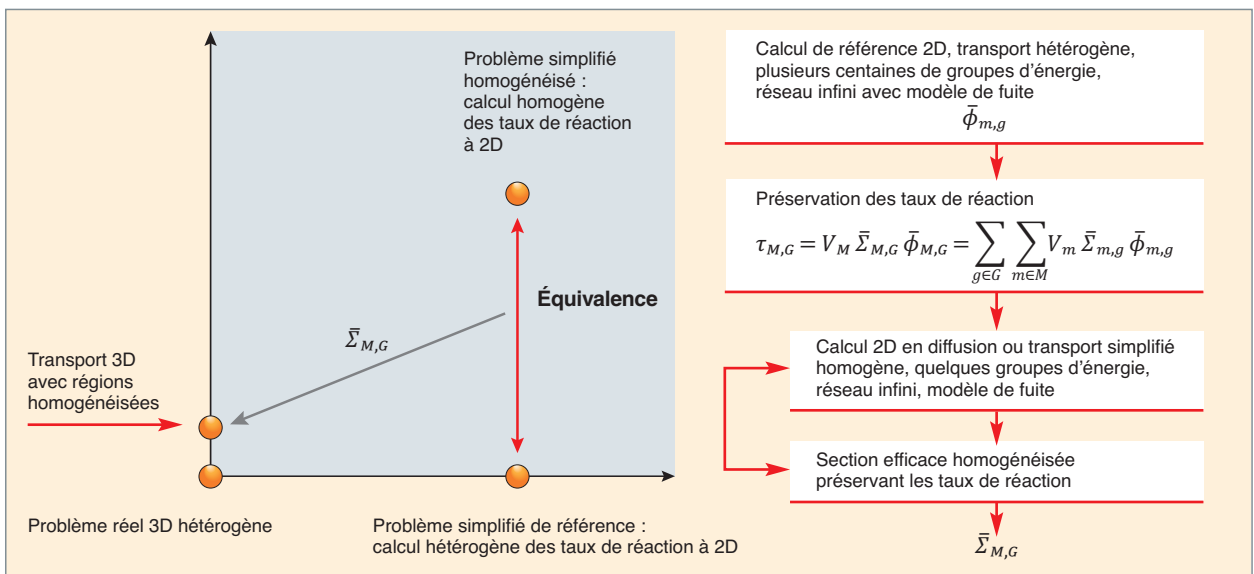


Fig. 145. Étape d'homogénéisation : les sections efficaces macroscopiques homogénéisées, $\bar{\Sigma}_{M,G}$ sont obtenues par un procédé itératif d'équivalence entre configuration hétérogène et configuration homogène préservant les taux de réaction c'est-à-dire le nombre de réactions nucléaires ayant lieu dans une zone donnée du cœur du réacteur, par unité de volume (cm^{-3}) et par unité de temps (s^{-1}).

Retour sur la résolution numérique de l'équation du transport multigroupe

La discrétisation de la variable angulaire peut s'effectuer de différentes façons :

- À l'aide de **projections sur les harmoniques sphériques** : méthode P_N^* ou SP_N^* pour le transport simplifié ;
- par la méthode de collocation, dite « aux **ordonnées discrètes** » ou S_N^* (voir l'encadré, p. 192) ;
- ou très simplement par l'approximation du transport par la **théorie de la diffusion**.

Pour les variables en espace, on utilise de préférence la « **méthode des caractéristiques** » (**MOC***) à l'échelle d'un assemblage car elle permet de traiter des géométries non structurées, sans approximation, et la **méthode des éléments finis** ou la **méthode nodale** à l'échelle du cœur. La **méthode des différences finies** peut être utilisée dans les deux cas.

Dans le code APOLLO3® [6], développé au CEA, nous disposons d'une large panoplie de solveurs permettant de faire des calculs à l'échelle cœur : un solveur P_N utilisant une discrétisation spatiale nodale, un solveur basé sur les équations SP_N , et utilisant les *éléments finis de Raviart-Thomas* sur un maillage structuré cartésien ou hexagonal, un solveur S_N , utilisant les éléments finis de Galerkin discontinus sur maillage déstructuré et un autre reposant sur les « **caractéristiques courtes*** » avec un maillage cartésien représentant un réseau régulier des crayons.

Selon leurs spécificités, les solveurs ont des usages différents. Ainsi, un solveur SP_N est très rapide, il évalue correctement le flux scalaire (voir encadré p. 188), et est bien adapté aux calculs de plan de rechargement dans les centrales nucléaires. Un solveur S_N cœur, beaucoup plus précis, mais plus coûteux en temps de calcul, sera utilisé pour des études exploratoires ou de référence.

En rappelant que le calcul du flux s'effectue de manière itérative, une première façon d'accélérer ce calcul est d'optimiser les *algorithmes séquentiels* (qui s'exécutent sur un seul cœur **CPU***). Des méthodes employées sont de type synthétique, éliminant des modes avec un opérateur dégradé. Pour des problèmes où la diffusion est l'interaction dominante (comme dans les réacteurs à eau), l'accélération synthétique de diffusion (**DSA***) permet de réduire considérablement le nombre d'itérations. L'efficacité de la DSA est telle que, lorsque le calcul est bien parallélisé selon les directions angulaires (voir *infra*, p. 201), la majorité du temps de calcul passe dans sa résolution ! Cela signifie que les méthodes de calcul de haute performance doivent non seulement s'appliquer à l'équation originelle du transport, mais aussi à l'en-

semble de l'algorithme itératif, y compris la méthode d'accélération.

Lorsque les calculs séquentiels sont trop volumineux en taille mémoire ou trop coûteux en temps CPU, il devient alors nécessaire de pouvoir utiliser plusieurs processeurs : les algorithmes sont alors conçus pour fonctionner en parallèle, les cœurs CPU s'échangeant les informations pertinentes.

Le calcul intensif en approche déterministe traitant les domaines de grande taille emprunte plusieurs voies de développement.

Tout d'abord, différentes techniques d'accélération (**CMFD***, **DSA**, DP_N^* [7], **BPA***...), qui tirent parti des nouvelles architectures informatiques ont été développées utilisant des méthodes de parallélisme sur l'espace des phases en mémoire partagée ou distribuée. Ensuite, afin d'optimiser les calculs séquentiels, les algorithmes sont pré-conditionnés et des méthodes efficaces d'initialisation et de couplage entre solveurs différents sont implémentées : initialisation d'un calcul S_N par un calcul SP_N , par exemple.

Les principaux enjeux pour l'utilisation du calcul intensif en transport déterministe résident, d'une part dans l'organisation des différents niveaux de parallélisme et, d'autre part, dans l'augmentation de la précision des méthodes numériques en gagnant en performances de calcul. Les différentes réalisations et les travaux en cours sont brièvement présentés ci-après.

La méthode de décomposition de domaine

Les calculs de grande précision nécessitent de définir plusieurs centaines, voire un millier de régions hétérogènes de calcul du flux par assemblage. Pour surmonter cette difficulté de modélisation, deux voies coexistent :

- D'une part, la décomposition du problème en espace et/ou en énergie pour étendre le calcul à la taille du réacteur entier en distribuant les calculs et les données ;
- et, d'autre part, l'homogénéisation itérative dynamique : l'assemblage ou le groupe d'assemblages est calculé en utilisant les conditions aux limites issues du calcul du cœur.

Pour ces deux approches, la **méthode de décomposition de domaine spatiale (DDM*)** contribue significativement à l'amélioration des performances du calcul.

Le principe en est illustré sur la figure 146. Chaque sous-domaine peut utiliser un solveur différent, selon les problèmes physiques locaux. L'échange entre les domaines peut s'effectuer sans perte d'information ou par des échanges simplifiés. Dans ce dernier cas, la solution par

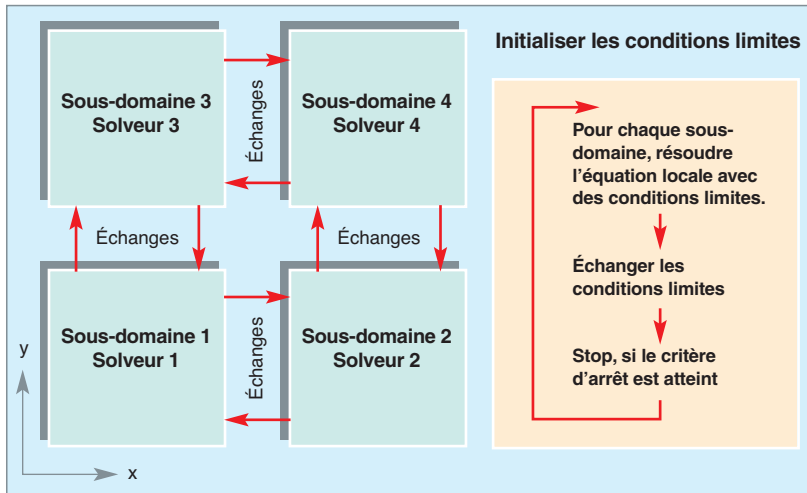


Fig. 146. La méthode de décomposition de domaine spatial.

DDM est une approximation de la solution directe. De plus, le taux de convergence global peut être dégradé, car on remplace un calcul direct par un calcul itératif.

Dans APOLLO3®, la DDM spatiale est opérationnelle sur des solveurs destinés à des calculs de cœur en approximation de la diffusion et SP_N [8], [9].

Ci-dessous, nous présentons les résultats d'un calcul critique de cœur 3D de type *réacteur à eau sous pression*, effectué avec l'approximation de la diffusion à deux groupes d'énergie (fig. 147). Les sections efficaces sont homogénéisées par cellule, et l'on atteint 40 millions d'inconnues.

Le calcul est parallélisé à l'aide de la DDM spatiale. Les résultats ont été obtenus sur le calculateur Titane du **CCRT*** : N_c est le nombre de processus, N_{DD} indique le nombre de sous-domaines dans chaque direction (grille de découpe), N_{IT} est le nombre d'itérations de l'algorithme des puissances inverses, CPU indique le temps de calcul et E_{ff} est l'efficacité.

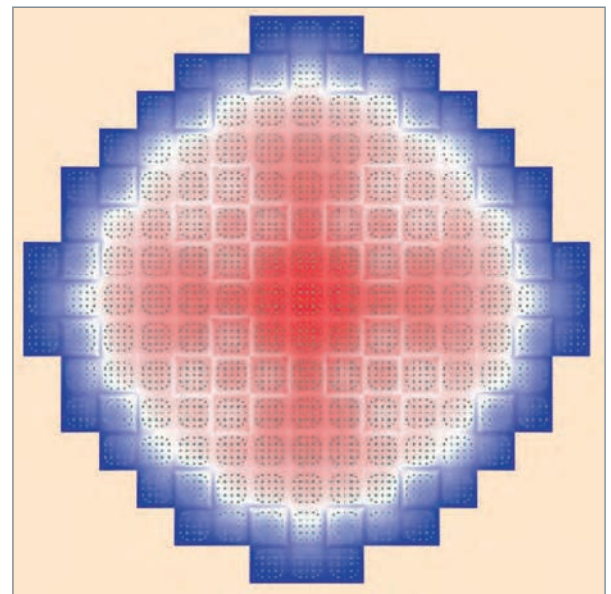


Fig. 147. Coupe axiale de la puissance produite dans un cœur de réacteur. Calcul réalisé avec le code APOLLO3®.

Tableau 15.

Calcul d'un cœur REP en diffusion à 2 groupes d'énergie avec décomposition de domaine (DDM)				
N_c	$N_{DD} (x, y, z)$	N_{IT}	CPU (s)	E_{ff} (%)
1	(1,1,1)	380	284	100
2	(2,1,1)	380	166	85
4	(2,2,1)	379	105	67
8	(2,2,2)	377	53	67
16	(4,4,1)	377	25	71
32	(4,4,2)	385	10	88
64	(8,8,1)	393	5	88
128	(8,8,2)	393	2,6	85

Des expériences numériques de calculs hybrides CPU/GPU en approximation de la diffusion et SP_N ont été menées [9], démontrant l'intérêt de l'utilisation des cartes graphiques pour des calculs sur maillage cartésien.

Ci-dessous, nous comparons les temps de calcul du test précédent pour différentes approximations angulaires, sans GPU, puis avec GPU.

La méthode de DDM spatiale a été expérimentée sur un solveur S_N à maillage structuré [11] et est en cours d'extension sur un solveur S_N à maillage non structuré [12].

Tableau 16.

Calculs d'un cœur REP à deux groupes d'énergie, comparaison des temps de calculs CPU et hybrides CPU/GPU		
Approximation	Temps de calcul	
	CPU	CPU/GPU
Diffusion	284	59
SP1	580	107
SP3	1244	301

Par ailleurs, pour les calculs cartésiens, il est intéressant d'adapter la DDM à des maillages de calcul non coïncidants entre les sous-domaines. En effet, cela permet de pouvoir adapter localement le maillage de calcul (voir figure 148), et aussi de traiter des géométries dont le maillage physique est non conforme (voir figures 149 et 150), comme celle de cœurs de réacteur à plaques (voir figures 151, RJH et 163, ORPHÉE), sans trop augmenter le nombre de mailles.

On pourra ainsi effectuer un raffinement de maillage localisé afin d'atteindre des grandeurs fines sans détériorer le temps de calcul [12]. Un exemple en est donné par le cas-test ci-après : on résout l'équation de la diffusion sur maillage cartésien avec un coefficient « en damier ». Le maillage est raffiné au centre afin de capturer les fortes variations du flux, sans trop augmenter le nombre total d'inconnues. Dans le tableau, on constate une réduction significative de l'erreur sur le facteur de multiplication des neutrons dans le cœur (noté k_{eff}) par rapport à un calcul de référence extrêmement raffiné, lorsqu'on raffine le maillage du sous-domaine central. Le nombre d'inconnues croît peu, de façon linéaire et non quadratique. On s'assure enfin de la robustesse de la méthode numérique employée [27, 29, 30].

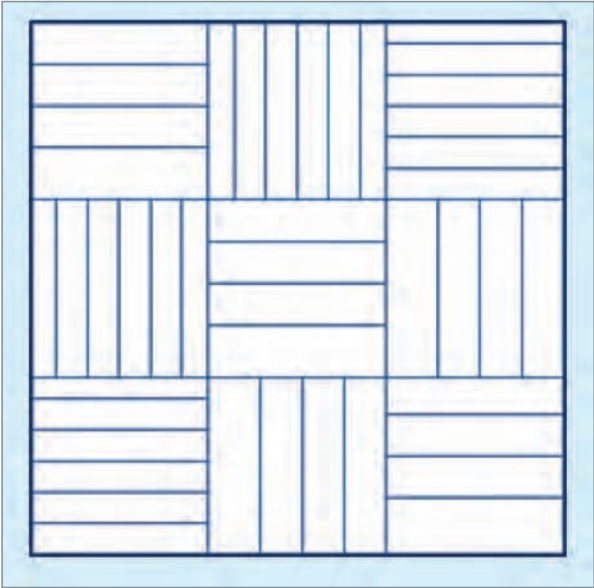


Fig. 149. Exemple de géométrie cartésienne physique non conforme, typique des réacteurs à plaques rectilignes.

Tableau 17.

Résultats de calcul avec raffinement du maillage sans dégradation significative du temps de calcul et avec amélioration significative de la précision obtenue sur le facteur de multiplication des neutrons dans le cœur, k_{eff}		
Taux de raffinement	Nombre d'inconnues (10^3)	Erreur sur k_{eff} (10^{-2} pcm*)
Non raffiné	31	44
2	41	13
4	81	6

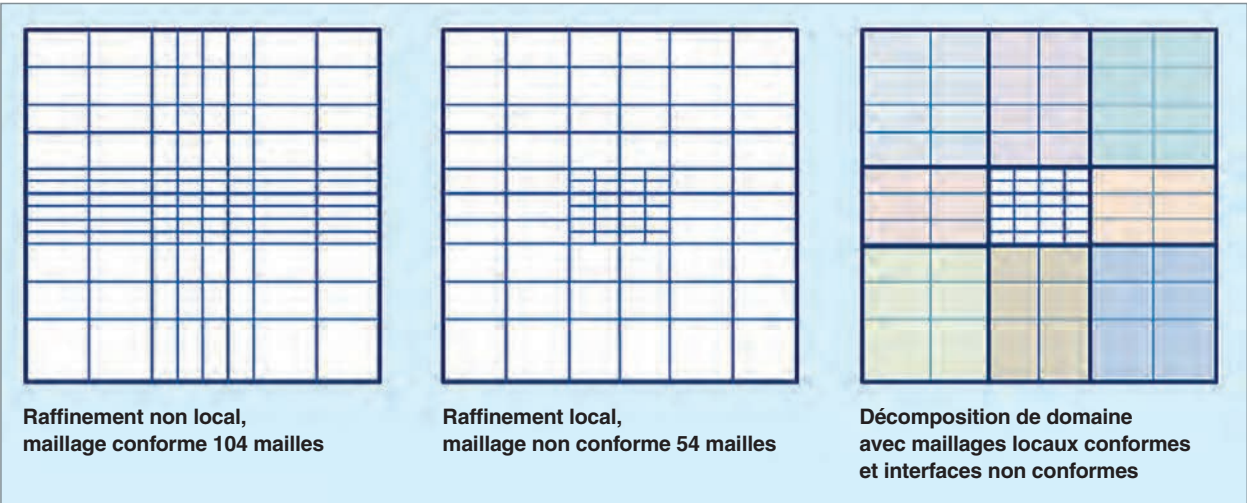


Fig. 148. La décomposition de domaine avec interfaces non conformes permet de réduire le nombre de mailles de calcul sans dégrader la précision autour d'une zone d'intérêt localisée.

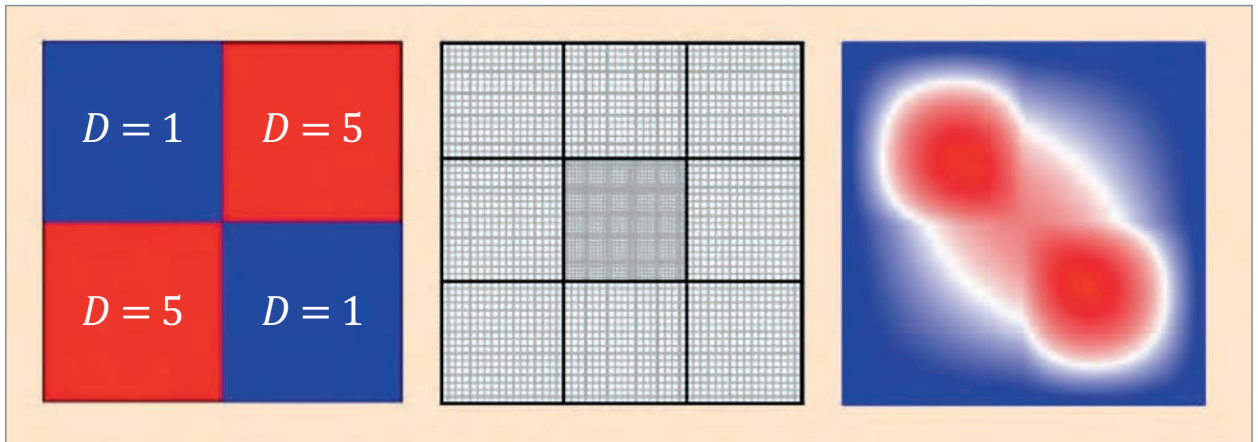


Fig. 150. Exemple de calcul sur maillage cartésien non conforme.

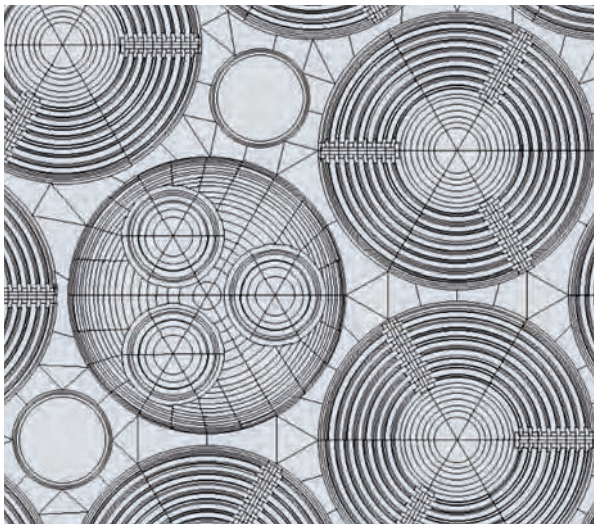


Fig. 151. Un maillage représentatif du plan horizontal du combustible à plaques circulaires du réacteur expérimental Jules Horowitz (RJH).

Le parallélisme des « ordonnées discrètes* »

Par ailleurs, un autre niveau de parallélisme est disponible dans les solveurs utilisant une discrétisation angulaire S_N puisque dans l'algorithme itératif sur les directions angulaires des neutrons (vecteur vitesse des neutrons), chacune peut être distribuée sur un processeur différent. La figure 152 ci-dessous illustre l'intérêt de ce parallélisme sur un cas test d'école de résolution de l'équation de Boltzmann par la méthode aux ordonnées discrètes S_N .

Un exemple de mise en œuvre de ce type de parallélisme se retrouve dans le solveur **MOC*** d'APOLLO3® (fig. 153 et 154) capable de traiter les motifs du cœur en 3D [13].

La méthode des caractéristiques (MOC) consiste à déterminer le flux angulaire en résolvant par intégration directe l'équation de propagation des neutrons en partant du point d'émission de la source (fission, diffusion après le choc)

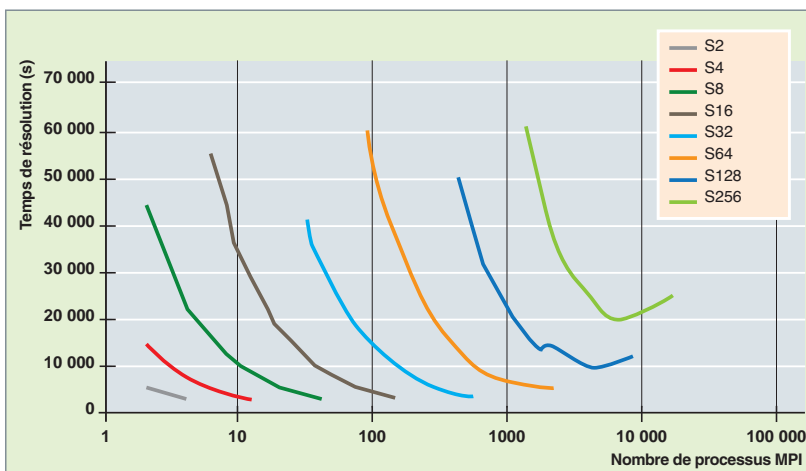


Fig. 152. Calcul S_N à 3D d'un cœur de réacteur à neutrons rapides, sur maillage déstructuré, machine Tera 100 du CCRT : évolution du temps d'exécution du calcul en fonction du nombre de processus MPI pour différentes discrétisations angulaires, S_2 à S_{256} ([1], p.153).

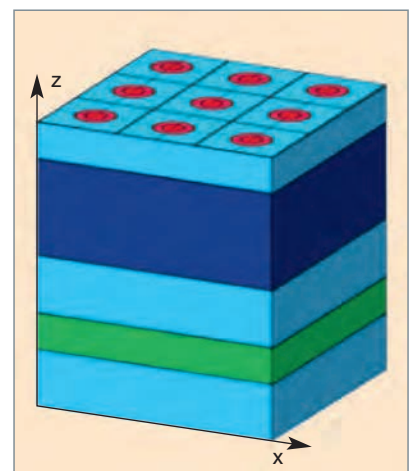


Fig. 153. Les motifs du cœur en 3D [19].

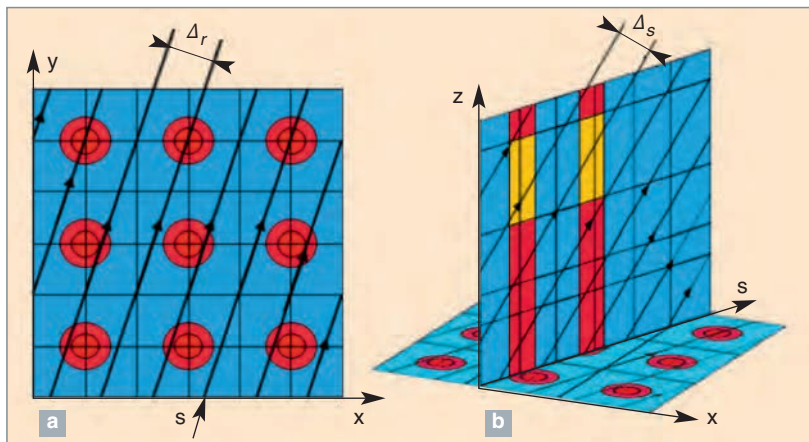


Fig. 154. Traçage dans un réseau de crayons avec les hétérogénéités axiales (a), plan XY (b) en 3D.

jusqu'au point d'observation (utilisation de la forme intégrale de l'équation du transport) le long de chacune des trajectoires associée à une direction discrète (dite « caractéristique ») et en balayant l'espace 3D du domaine de calcul par cet ensemble de trajectoires parallèles ayant un espacement suffisamment fin pour obtenir la précision souhaitée (fig. 148).

Cette partie du calcul est la plus consommatrice des ressources machine, surtout en 3D où un grand nombre de trajectoires est requis, d'où l'intérêt du calcul parallèle. L'exploitation de la périodicité de la géométrie d'un assemblage du réacteur permet cependant de minimiser le stockage mémoire de l'ensemble de ces trajectoires en classifiant les cordes traversant les régions du calcul (mailles 3D) selon la longueur et le type d'intersection.

Une autre propriété, largement exploitée [14], est relative aux méthodes S_N sur maillage de type éléments finis. En

effet, pour chaque direction discrète des vitesses des neutrons, $\vec{\Omega}_d$, le flux angulaire est calculé localement par maille. Comme nous résolvons une équation différentielle de premier ordre, le calcul se fait maille après maille, et le changement de maille suit la direction courante $\vec{\Omega}_d$. Pour une maille donnée, le flux angulaire sur les faces entrantes est imposé par le flux sortant des mailles en amont. Il est alors possible, direction par direction, d'identifier les mailles où le flux peut se calculer indépendamment des autres. Ces mailles sont parallèles dans la direction courante $\vec{\Omega}_d$, et nous appelons le *front* la rangée de mailles qui se propage à travers le maillage

dans la direction $\vec{\Omega}_d$. Sur la figure 155 [14], nous avons colorié, dans le cas d'un maillage 2D non structuré, les mailles d'un même front, et cela pour deux différentes directions $\vec{\Omega}_d$ (qui sont représentées par des flèches). Il est alors judicieux de paralléliser les calculs pour les mailles d'un même « front ». Ce type de parallélisation locale peut être utilisé conjointement avec une méthode de décomposition de domaine en espace [12,15] ou en temps [16-19].

La décomposition de domaine et parallélisme hybride pour les calculs de motifs de grande taille

Un algorithme numérique développé récemment pour APOLLO3® est capable de traiter les domaines de la taille d'un REP avec une description spatiale détaillée jusqu'à l'échelle des crayons combustible [11]. Cet algorithme utilisant le solveur des « **caractéristiques courtes*** » exploite une technique de DDM combinée à une accélération dite « de type "Diffusion Synthetic Accelerator" ».

Contrairement aux implémentations usuelles de la DDM, appliquées au traitement d'un groupe d'énergie, cet algorithme résout le problème multi-groupe par sous-domaine avant de communiquer les flux d'interfaces aux sous-domaines voisins, minimisant ainsi la communication. Pour chaque **itération externe***, une seule communication est effectuée et les calculs multigroupe par sous-domaines restent indépendants. Le taux de convergence des itérations externes (dégradé par rapport à un calcul direct) est accéléré par une technique de diffusion non linéaire sur des mailles larges (CMFD*), où le pro-



Fig. 155. Front des mailles traitées simultanément dans un maillage non structuré en 2D. Les flèches représentent la direction des vitesses des neutrons courante. Les mailles de la même couleur sont calculées en parallèle.

blème multigroupe est résolu au niveau du domaine complet et, optionnellement, avec un nombre réduit de groupes d'énergie. Cet algorithme est aussi capable d'accueillir une méthode d'homogénéisation itérative dynamique.

La cinétique : prise en compte de la dimension temporelle

Les calculs cinétiques donnent accès au comportement de la population neutronique en fonction du temps. Ils sont impliqués dans les études multiphysique, en situation instationnaire, telle qu'un transitoire de puissance ou une situation accidentelle.

Ces calculs peuvent être accélérés par un pré-calcul sur maillage grossier en énergie et en espace (méthode multi-échelle). Classiquement, nous utilisons une méthode quasi statique (le flux est factorisé en une amplitude dépendant du temps et un flux de forme stationnaire) prenant en compte les effets d'échelle pour les équations de la cinétique.

La **méthode pararéelle**, étudiée dans la référence [16], est une méthode de décomposition de domaine en temps qui permet d'accélérer les calculs cinétiques. Le principe en est le suivant : à partir d'un calcul avec un pas de temps grossier, qui fournit des conditions initiales locales, nous effectuons des calculs fins en parallèle sur des espaces de temps courts. Ces calculs permettent de corriger le calcul grossier,

et de mettre à jour les conditions initiales locales. Nous recommandons alors à faire des calculs fins en parallèle sur des espaces de temps courts. Le calcul se poursuit jusqu'à convergence entre les segments de calcul parallèle, ainsi que l'illustre la figure 156 ci-dessous.

Après avoir été testée efficacement sur l'opérateur de diffusion [17], cette méthode a été développée pour l'opérateur de transport [18]. Afin de limiter l'empreinte mémoire, il est envisagé d'utiliser une méthode de type base réduite pour stocker les flux angulaires à chaque pas d'itération (voir [19] pour l'opérateur de diffusion). Par ailleurs, il serait intéressant de coupler les méthodes de décomposition de domaine spatial et temporel, comme cela est fait dans d'autres disciplines (diffusion en milieux poreux).

Multidomaine / multiméthode

Pour les cœurs de réacteurs à eau sous pression les calculs les plus précis nécessitent la prise en compte du cœur et du réflecteur. Or, d'une part il est très coûteux de faire un calcul de transport complet, et, d'autre part, dans la partie cœur, un calcul de diffusion (éventuellement SP_N^*) convient. Il est alors judicieux de coupler un solveur de diffusion côté cœur et un solveur de transport côté réflecteur (voir la figure 157) : des techniques de projections sont utilisées pour échanger les informations entre les solveurs autorisant ainsi la parallélisation du calcul de cœur.

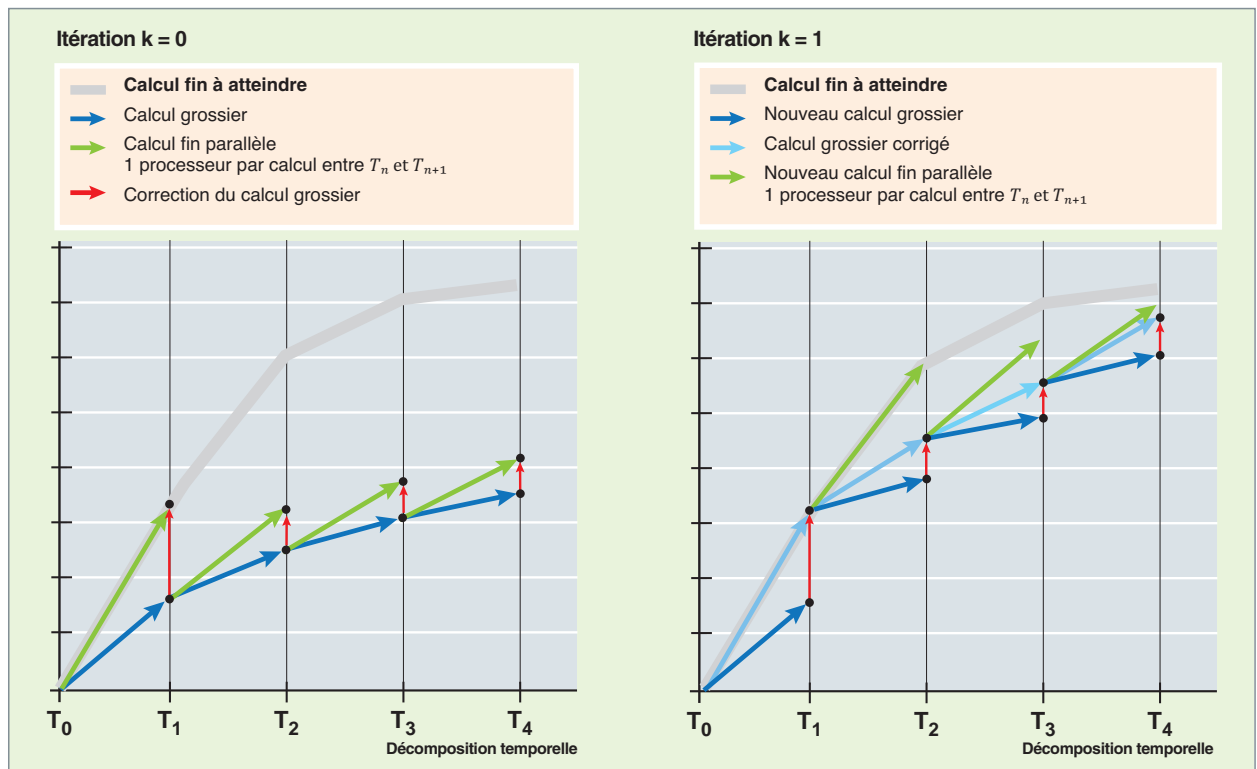


Fig. 156. La méthode de décomposition de domaine temporel : la méthode pararéelle.

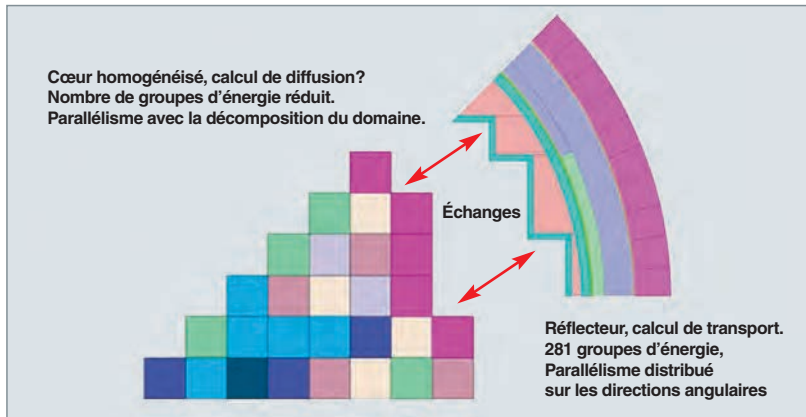


Fig. 157. Approche multidomaine / multisolveur. Calcul couplé cœur-réflecteur. Il est possible de faire du calcul parallèle de chaque côté.

Cette approche ouvre la voie vers l'homogénéisation itérative. Pour un résultat de précision, la solution de ce problème nécessite une ré-homogénéisation des assemblages traités par la diffusion, surtout pour ceux qui sont au voisinage du réflecteur ou l'hypothèse de motif étendu à l'infini n'est plus vraiment valide.

Par ailleurs, comme les solveurs sont itératifs, une bonne initialisation permet de limiter sensiblement le nombre d'itérations pour converger. Il est ainsi judicieux d'initialiser un calcul par la solution issue d'un calcul utilisant un opérateur dégradé : un calcul de diffusion peut initialiser un calcul SP_N , un calcul SP_N peut initialiser un calcul transport, le calcul d'initialisation devant être effectué par un solveur rapide.

En conclusion, les méthodes de parallélisation développées ont pour objectif commun d'atteindre le « **calcul en une étape** ». Il s'agit de s'affranchir partiellement ou totalement des étapes d'homogénéisation, qui induisent des biais de modélisation et de calcul. Cela représente un véritable défi compte tenu du nombre de variables à traiter, et de la quantité de données à stocker en mémoire. Pour atteindre ce but, nous devons utiliser à la fois des stratégies d'accélération numérique (DDM non conforme, initialisation S_N - SP_N , accélération DSA, couplage de solveurs) et informatique que permet le calcul intensif (calcul distribué sur les directions S_N , DDM spatiale et en temps...), tout en étant attentif à ne pas introduire de nouveaux biais.

Le calcul intensif et le transport probabiliste des neutrons dans la matière

Rappelons que dans la pratique sur ordinateur, pour construire aléatoirement les histoires de neutrons se propageant dans la matière nous avons recours à un **générateur de nombres aléatoires** (en réalité « pseudo-aléatoires ») qui est l'outil technique permettant de choisir au hasard et conformément aux lois de probabilités déduites des sections efficaces d'interaction neutron-noyau atomique-cible

(voir encadré *supra*, p. 195 et référence [1] (pp. 89-106), les caractéristiques d'émission d'un neutron (position, énergie, direction), la longueur de son parcours entre deux collisions successives, la réaction nucléaire à laquelle il donne lieu, et enfin, s'il s'agit par exemple d'une diffusion, l'énergie et la direction de ce neutron après choc.

La simulation parallèle

Les histoires de neutrons peuvent donc être vues comme des séquences d'événements indépendantes susceptibles dès lors d'être « naturellement » simulées en parallèle.

Dès sa conception, au début des années 90, le code de transport de particules par la méthode de Monte-Carlo, TRI-POLI-4® [20] a été conçu comme un code parallèle, initialement pour fonctionner sur des réseaux de machines hétérogènes, puis sur les ordinateurs « parallèles » utilisant un générateur de nombre pseudo-aléatoires approprié, le

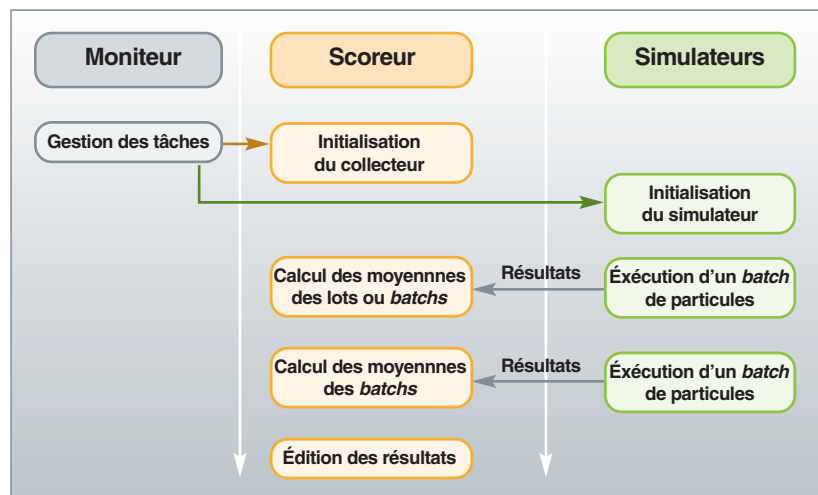


Fig. 158. Principe de mise en œuvre du parallélisme dans une simulation Monte-Carlo de propagation de particules dans le code TRIPOLI-4® [1, p. 150].

GSFR*. La fonctionnalité de parallélisme originelle du code repose sur une librairie de parallélisme propre (**IPC***) [21].

Ici, la philosophie du parallélisme est simple mais efficace : sur n processeurs disponibles, $n - 1$ effectuent des simulations indépendantes alors que le dernier se charge de collecter tous les résultats et de les agréger (voir fig. 158).

Grâce à cette fonctionnalité, les utilisateurs ont toujours pu bénéficier de la puissance de calcul mise à leur disposition par les grands centres de calcul tels que le Très Grand Centre de Calcul (**TGCC***) ; il s'est agi d'abord d'exécutions du code sur quelques dizaines de processeurs, puis sur quelques centaines, aux efficacités presque parfaites. Cela a permis de réaliser des simulations qui ont toujours été à la frontière de l'état de l'art : calculs statiques de la puissance crayon par crayon du cœur d'un réacteur, (figure 159 – « palier N4 » du parc de réacteurs nucléaires EDF), calculs de la fluence neutronique sur la cuve du réacteur, calculs d'évolution temporelle fine des petits cœurs expérimentaux (exemple d'ORPHÉE, voir *infra*, p. 208), calculs de débit de dose en champ lointain (exemple des dispositifs à fusion **ITER*** et **Laser MegaJoule***).

La simulation parallèle à plus de 1000 processeurs : vers un nouveau paradigme algorithmique

Le passage récent de la librairie de parallélisme originelle (**IPC***) à la « librairie » standard **MPI** a permis de franchir le seuil de 1000 processeurs et des calculs ont pu être réalisés sur 64 000 processeurs de la machine **CURIE** (exercice de validation du transport d'électrons), ce qui correspond à une utilisation presque totale (80 %) de la puissance machine. L'introduction d'un générateur de nombres aléatoires de type Mersenne Twister a encore accru la fiabilité des séquences aléatoires [20].

Pourtant, nous arrivons aujourd'hui à un point charnière pour les simulations de transport Monte-Carlo. Les utilisateurs exigent des simulations de plus en plus détaillées sollicitant un nombre de nucléides, de températures, et de « scores » (ou résultats de calcul) toujours plus élevé. En effet, l'objectif en physique des réacteurs est le calcul de la distribution fine de puissance, crayon par crayon axialement discrétisé, du cœur d'un réacteur « en évolution* », ce qui représente de l'ordre de 200 millions de valeurs à calculer et à stocker.

Par ailleurs, les ordinateurs accroissent leur puissance selon deux voies, l'une en augmentant le nombre de « cœurs de calcul* » par processeur, l'autre en intégrant des unités vectorielles de taille croissante.

La première voie conduit à une mémoire par unité de calcul qui pour la première fois est en décroissance, ce qui va à

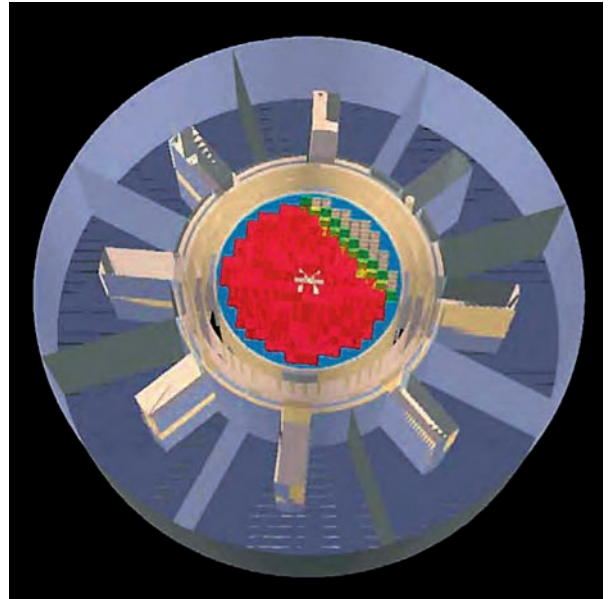


Fig. 159. Géométrie **ROOT** d'un réacteur à eau de puissance destinée au code de transport Monte-Carlo **TRIPOLI-4®**.

l'encontre des besoins de la simulation Monte-Carlo. La deuxième voie est difficilement exploitable dans les codes Monte-Carlo qui ne sont pas fondés sur des opérations d'algèbre linéaire mais sur l'échantillonnage séquentiel d'événements aléatoires.

Cela constitue un véritable défi pour les codes de transport Monte-Carlo, qui doivent se remettre en cause en profondeur non seulement pour exploiter pleinement les nouvelles opportunités matérielles, mais aussi pour conserver les performances actuelles sur les nouvelles machines.

La diminution de la mémoire par **thread*** de calcul a deux conséquences. La première est que le modèle de parallélisme hybride, qui allie mémoire distribuée avec **MPI*** et mémoire partagée avec par exemple **OpenMP***, est devenu incontournable. Un code ne disposant pas de cette architecture ne pourra pas espérer tirer profit de ces nouvelles architectures.

La seconde est que le temps de calcul est majoritairement passé dans l'évaluation des sections efficaces par recherche dichotomique dans les tables de sections efficaces pré-calculées en fonction de l'énergie du neutron et de la température des milieux. En particulier, une analyse fine montre que le facteur limitant est l'accès à la mémoire : en clair, les unités flottantes sont sous-utilisées parce qu'elles doivent attendre l'arrivée des données de la mémoire. Cela ouvre la porte à de nouveaux choix d'algorithmes. L'équilibre entre ce que l'on pré-calculé et stocke en mémoire et ce que l'on calcule à la volée se trouve fortement bouleversé.

Un exemple représentatif de cette problématique est l'« **élargissement Doppler*** » (voir encadré, *supra*, p. 189) des sections efficaces en fonction de la température. Jusqu'à une période récente, cette opération très gourmande en temps de calcul ne pouvait être faite qu'en amont de la simulation, et les sections efficaces pré-calculées aux quelques températures requises étaient chargées en mémoire [22]. Mais si nous voulons accéder à des modélisations plus fines d'un cœur de réacteur il faut pouvoir représenter des distributions réalistes de température, nécessitant des centaines de températures différentes, ce qui correspond à des centaines de giga-octets de données pour un calcul en évolution.

L'alternative est de recalculer la section efficace élargie à partir de cette même section efficace à une température de référence (souvent choisie à 0 K) chaque fois que nous en avons besoin, c'est-à-dire à chaque collision d'un neutron avec un nucléide cible. Cette voie est aujourd'hui envisagée comme moyen d'effectuer des simulations plus précises, tout en utilisant au mieux les **flops*** disponibles. En outre, l'algorithme de calcul de l'intégrale de convolution Doppler peut être vectorisé. Ce qui, il y a encore quelques années, aurait été un choix absurde (des calculs 50 fois plus longs que d'ordinaire) est aujourd'hui considéré comme la méthode qui, pour un coût raisonnable, permet des simulations autrement impossibles.

PATMOS : un Monte-Carlo pour le calcul intensif

La prise de conscience de la nécessité d'une refonte de l'architecture et des choix algorithmiques du code de transport Monte-Carlo TRIPOLI-4® a poussé le CEA à la création d'un prototype, dénommé « **PATMOS** », dont le but est justement de tester des alternatives possibles pour rechercher l'optimum sur les différentes architectures *hardware* disponibles aujourd'hui que sont les CPU, GPU et MIC.

PATMOS est programmé en C++ (standard 2011/2014) et son architecture objet au polymorphisme poussé permet la coexistence aisée d'algorithmes alternatifs qui sont choisis à l'exécution du programme. Sa physique allégée, où seules les collisions d'absorption, de diffusions élastique et inélastique discrète ont été implémentées, permet de disposer d'un code léger et très évolutif mais qui préserve l'architecture globale d'un code de transport Monte-Carlo.

Le **parallélisme hybride** a été le point de départ de PATMOS : dès l'origine, les objets ont été séparés entre non mutables à partager et mutables à dupliquer pour être distribués. Cela est particulièrement important pour les

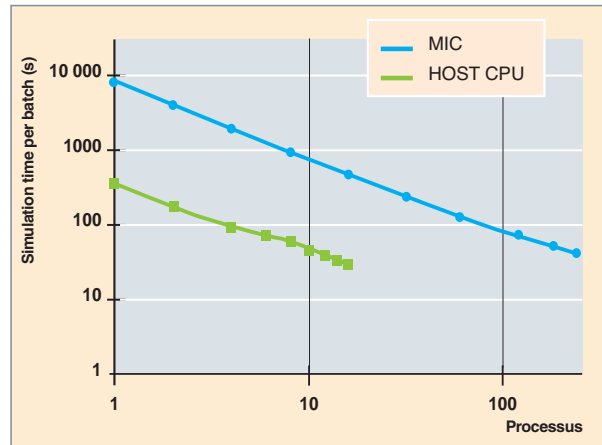


Fig. 160. Scalabilité forte de PATMOS sur un MIC Intel Xeon Phi KNC (60 cœurs, 240 threads) et sur un nœud *Sandy Bridge* à 16 cœurs (2 sockets de 8 cœurs).

sections efficaces qui sont gourmandes en mémoire. Les algorithmes des sections pré-tabulées et de l'élargissement Doppler au vol coexistent et peuvent être choisis indépendamment pour chaque nucléide.

Les performances de **scalabilité*** de cette maquette sont présentées ci-après. La figure 160 montre la performance en **scalabilité forte*** (le volume de travail à effectuer est fixé et on augmente le nombre de *threads* (processus)). On obtient une efficacité de 80 % sur les 16 cœurs CPU, de 100 % sur 60 *threads* MIC* (sans **hyper-threading***) et de 80 % sur 240 *threads* MIC*.

Les performances de **scalabilité faible*** (le travail à effectuer est augmenté en même temps que l'on augmente le nombre de processus en maintenant constant le travail à effectuer par processus : le travail à effectuer est doublé à chaque fois que l'on double le nombre de cœurs) sont montrées sur la figure 161. Une scalabilité faible idéale est caractérisée par

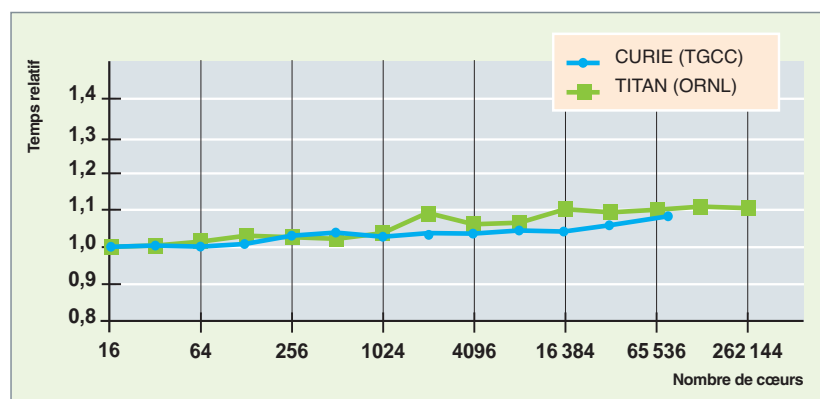


Fig. 161. Tracé de scalabilité faible obtenu avec PATMOS sur la machine CURIE du TGCC* (5 000 nœuds et ~ 80 000 cœurs) et sur la machine TITAN (16 nœuds et ~ 262 000 cœurs) de Oak Ridge National Laboratory, États-Unis.

une durée de calcul constante. On observe une efficacité de l'ordre de 90 % à 262 144 cœurs sur la machine TITAN de Oak Ridge National Laboratory (ORNL, États-Unis) et de l'ordre de 92 % sur CURIE à 79 200 cœurs.

La prochaine étape sera le calcul d'un nombre élevé de scores (plusieurs milliards). Un calcul d'évolution fine d'un cœur de réacteur demandera plusieurs téraoctets de données qui ne pourront pas être stockées sur un seul nœud de calcul. Il faudra donc mettre en place un échange de données efficient entre nœuds de simulation qui ne pourront stocker qu'une fraction des scores nécessaires. Cette stratégie se rapprochera de la décomposition de domaine, technique déjà très utilisée dans les codes déterministes mais qui n'avait pas encore trouvée sa place dans les calculs Monte-Carlo. Elle deviendra alors essentielle.

Des problématiques connexes

Le recours du calcul intensif pour les simulations Monte-Carlo soulèvent des problèmes spécifiques, dont deux sont mentionnés brièvement ci-après.

Le premier concerne la reproductibilité des résultats d'un calcul Monte-Carlo dans un contexte où la simulation des particules est distribuée sur plusieurs processeurs et où l'ordre d'exécution des opérations n'est plus déterministe mais véritablement aléatoire (il dépend du temps d'exécution de la tâche élémentaire qui dépend de la charge du processeur et de la localisation en mémoire des données demandées). Les différences d'ordre (par exemple, dans une somme $x_1 + x_2 + x_3 + \dots$ où les x_i sont issus de calculs exécutés sur des « *threads* » différents) induisent des différences d'arrondis numériques qui, dans un contexte Monte-Carlo produisent des divergences de suite pseudo-aléatoire, dès lors que l'un des nombreux tests logiques (« if $x < \text{seuil}$ ») passe de la branche « vrai » à celle « faux » (ou vice-versa). Le développement des codes mais aussi leur vérification et validation sont rendues plus délicates par cette « non-reproductibilité ».

Le second est relatif au **générateur de nombres pseudo-aléatoires** et plus précisément à la manière de l'exploiter. Son utilisation en calcul parallèle doit préserver l'indépendance des séquences d'événements traitées sur chacun des processeurs mobilisés. À cette fin, en mode parallèle, l'algorithme Monte-Carlo travaille avec des sous-suites de nombres aléatoires. Des stratégies alternatives existent telles que celle consistant à choisir aléatoirement, pour chacun des processeurs, la graine du générateur de nombres aléatoires employé.

Pour conclure, il convient d'insister sur le fait que la puissance calculatoire offerte par les ressources du calcul intensif ne diminue en rien l'intérêt de l'utilisation et du développement de techniques d'accélération de la convergence du

calcul Monte-Carlo (ou techniques de réduction de la variance), dont l'efficacité, pour certains types de problèmes comme la propagation en champ lointain, reste de plusieurs ordres de grandeur supérieure à la mise en œuvre du parallélisme seul.

Calcul intensif et études neutroniques

Une des premières applications neutroniques faites au SERMA du calcul intensif concerne un exercice d'**optimisation multicritère** du plan de chargement des assemblages combustibles dans un Réacteur à Eau Légère (REL). Cette analyse a été réalisée dans le cadre des études sur les Réacteurs à Eau sous Pression (REP) et à Haut Facteur de Conversion (REP-HFC).

L'objectif assigné à ce type d'analyses est à la fois la caractérisation des performances du cœur vis-à-vis de l'utilisation de la matière fissile (amélioration de l'utilisation du plutonium dans les REL), mais également vis-à-vis du comportement du cœur en fonctionnement normal par l'évaluation des points chauds et accidentel avec notamment l'optimisation de l'effet en réactivité lié à la **vidange*** du caloporteur.

Dans cet exercice, l'optimisation multicritère du plan de chargement du réacteur est réalisée *via* un couplage entre le code de neutronique APOLLO3® [6] et l'algorithme génétique VIZIR [23] de la plateforme URANIE [24]. La modélisation mise en place vise à évaluer le plus grand nombre possible d'« individus » – un « individu » correspondant ici à un plan de chargement – afin de parcourir au mieux l'espace de recherche.

Afin d'atteindre cet objectif, nous avons élaboré une modélisation du cœur avec une physique approchée. En effet l'essentiel est de pouvoir discriminer les individus les uns par rapport aux autres du point de vue des critères d'intérêt. La relation d'ordre que nous établissons entre individus dépend donc étroitement de la modélisation adoptée pour calculer les critères d'intérêts.

Cette modélisation approchée se doit donc de rester conservative par rapport à la relation d'ordre qui serait établie avec une modélisation de type « **best-estimate*** ». De cette manière, la fonction d'évaluation de l'algorithme génétique devient nettement moins coûteuse, et il est envisageable d'effectuer dans un temps imparti beaucoup plus de calculs et donc se rapprocher de la configuration optimale.

Parmi les travaux réalisés dans ce cadre, nous retiendrons dans ce qui suit une analyse d'optimisation tri-critères : maximisation du **taux de combustion*** moyen par cycle du cœur, minimisation du **coefficient de vidange*** et du **facteur de point chaud***). Elle a conduit à l'évaluation de 34 350 calculs

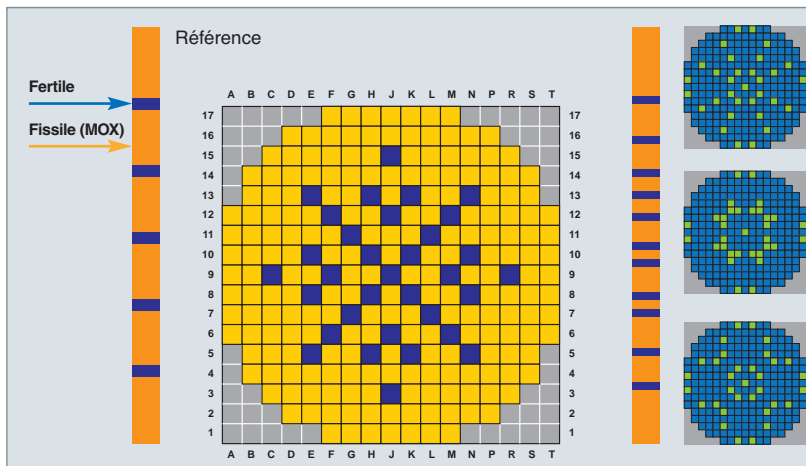


Fig. 162. Plan de chargement initial du combustible dans le cœur (à gauche) et illustration de divers plans de chargement issus de l'optimisation (à droite).

de cœur (calcul complet du cœur à l'équilibre) par permutations des assemblages d'un plan de chargement initial.

La génération de nouveaux plans de chargement et de rechargement a été réalisée sous contraintes, en particulier pas d'assemblage neuf (plus réactif que des assemblages déjà irradiés) autorisé dans les coins saillants près du réflecteur afin de ne pas trop irradier la cuve.

Le concept de référence – plan de chargement initial des assemblages – est indiqué sur la figure 162 en partie gauche. L'étude ainsi réalisée a permis de déterminer un ensemble de solutions optimales présentant des améliorations vis-à-vis du concept de référence (cet ensemble de

solutions optimales définit le front de Pareto). Parmi ces solutions, trois configurations présentant les meilleures performances pour les critères de l'optimisation ont été sélectionnées et sont présentées sur cette même figure 162 en partie droite. La méthode mise en œuvre a produit des résultats très prometteurs, ayant permis de dégager des configurations cœur qui n'ont pas été envisagées dans la phase préliminaire d'analyse du concept.

La seconde mise en œuvre du calcul intensif porte sur le calcul en irradiation (on dit aussi « en évolution », sous-entendu avec prise en compte

du changement au cours du temps de la composition isotopique du cœur induit par les réactions nucléaires provoquées par les neutrons) du cœur du réacteur de recherche ORPHÉE (voir figure 163).

Installé sur le site du CEA de Saclay, ORPHÉE [25] a pour fonction de produire des faisceaux de neutrons pour l'expérimentation en recherche fondamentale (neutronographie...).

C'est un réacteur de type piscine en eau lourde dont le cœur est refroidi par de l'eau légère. Le cœur d'ORPHÉE est un parallélépipède de 90 cm de hauteur et d'une section de 27 x 27 cm² (en intégrant le caisson dans lequel il est placé).

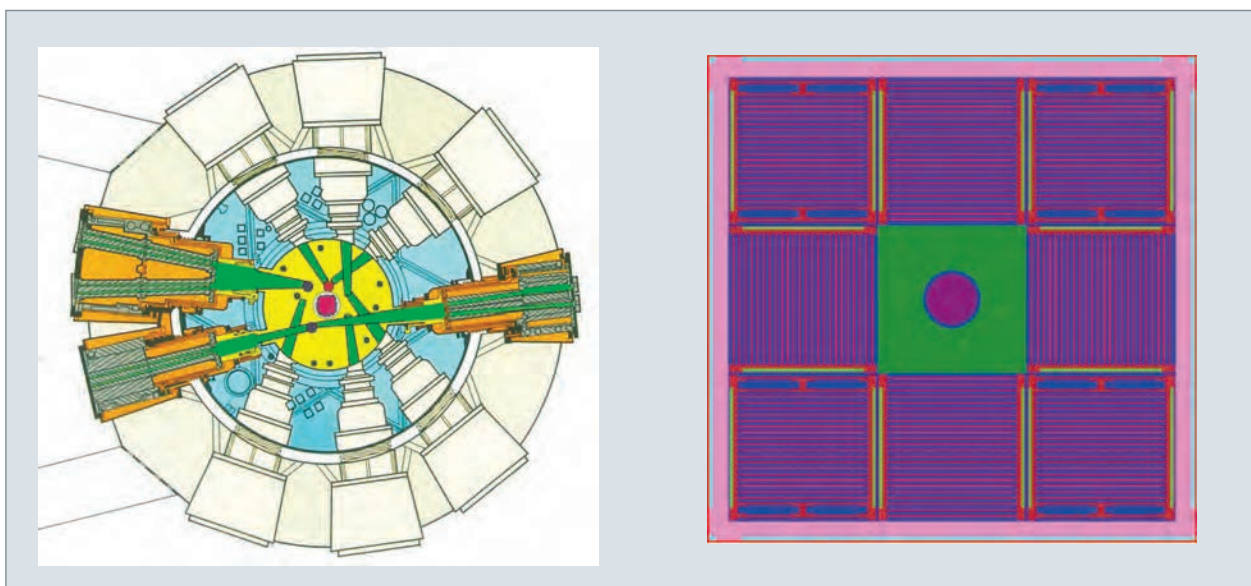


Fig. 163. Schéma représentant l'ensemble des canaux d'instrumentation du cœur du réacteur ORPHÉE (à gauche) et le caisson cœur avec les éléments combustibles (à droite).

Il est composé de 8 assemblages de combustible à plaques parallèles dont la matière fissile est un alliage d'aluminium et d'uranium hautement enrichi en U 235.

Sur ces 8 assemblages, 4 sont des assemblages dits standard (à 24 plaques combustibles) et 4 sont des assemblages dits « de contrôle » (18 plaques combustibles) dans lesquels sont insérées les barres de contrôle de la réactivité du cœur, constituées de hafnium (absorbant de neutrons).

C'est la complexité géométrique du cœur qui a motivé l'exécution du calcul d'irradiation en géométrie 3D réaliste du cœur à l'aide du code de transport probabiliste TRIPOLI-4® [26], alternative à l'emploi d'outils de calculs déterministes soulevant ici des difficultés de modélisation.

Le modèle ainsi mis en œuvre a permis d'effectuer un calcul du cœur en prenant en compte l'évolution de la composition du combustible au cours de l'irradiation ainsi que l'évolution de la position des barres de contrôle au cours du temps (la criticité du cœur étant obtenue par ajustement de la cote d'insertion des barres de contrôle). À cette fin, le code TRIPOLI-4® a été couplé au code MENDEL dédié à la résolution des équations différentielles couplées de Bateman, régissant les concentrations isotopiques en fonction du temps, par un algorithme Runge-Kutta d'ordre 4. Ce type de couplage « transport-évolution » est souvent désigné par l'expression « **Monte-Carlo évolutif** » (Monte-Carlo burnup code/calculations) [1], p. 136.

La représentativité physique du modèle neutronique mis en œuvre, sans prise en compte des **contre-réactions*** pour le calcul des configurations en fonctionnement normal (hors calcul des transitoires accidentels) est très bonne compte tenu des spécificités de ce type de cœur : faible contre-réaction Doppler liée à un enrichissement élevé, effet de vide quasi inexistant en fonctionnement normal et distribution de température combustible uniforme (~ 60 °C).

Le calcul en évolution du cœur a été réalisé en se fondant sur le principe des simulations indépendantes qui permet de propager l'incertitude statistique associée au calcul des taux de réactions sur l'ensemble du calcul d'irradiation. Ce sont ainsi 100 simulations indépendantes qui ont été réalisées en parallèle pour reconstruire l'irradiation complète du cœur.

Pour chaque simulation et à chaque pas de temps, 5 millions d'histoires de neutrons ont été simulées pour calculer les taux de réaction dans le quadrillage prédéfini du combustible : 5 000 mailles ou « milieux » dont les compositions isotopiques évoluent au cours du temps sont utilisés pour représenter la distribution de taux de combustion 3D dans le cœur.

La durée de simulation associée à un calcul d'irradiation (1 simulation indépendante) est de l'ordre de 10^3 heures

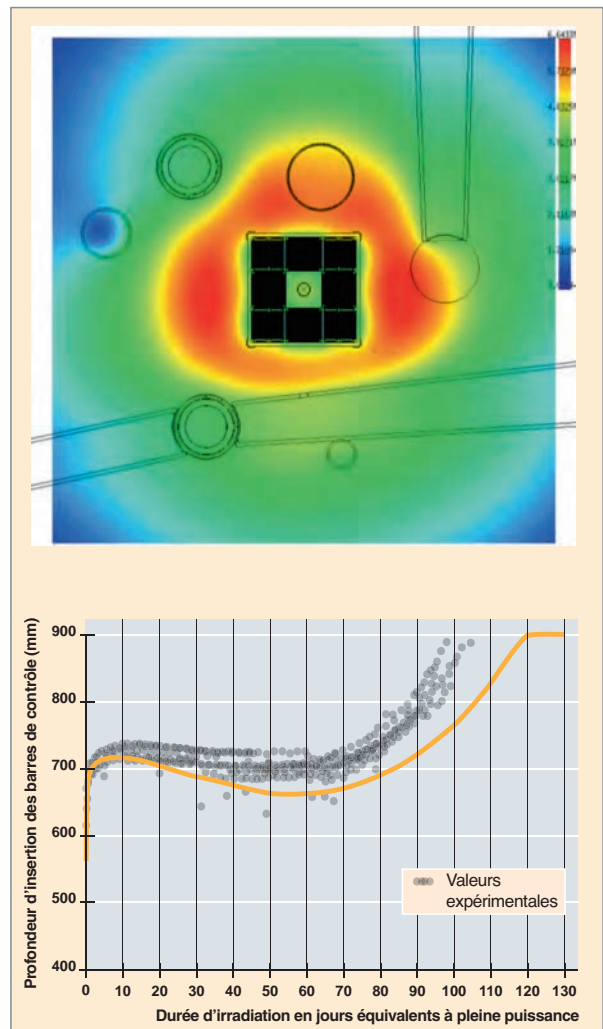


Fig. 164. Distribution de flux thermique au centre du cœur (en orange) et évolution de la cote critique d'insertion des barres de contrôle en cours d'irradiation (en gris).

(~ 41,2 jours terrestres) soit un total de 10^5 heures en temps CPU pour le calcul complet du cœur du réacteur.

La distribution de flux thermique au plan médian du cœur ainsi que de l'évolution de la cote d'insertion critique des barres de contrôle sont représentées sur la figure 164.

Conclusion

Nous avons décrit dans les grandes lignes les approches algorithmiques explorées pour faire bénéficier aux études neutroniques relatives au cœur des réacteurs nucléaires de la puissance calculatoire des superordinateurs. Rappelons que le besoin calculatoire générique de ces études est double :

- Diminuer les biais de calculs tout en diminuant la durée d'obtention des résultats recherchés avec comme cible le « calcul de cœur déterministe en 1 étape » ;

- réaliser des calculs de référence de plus en plus fins (obtention de résultats précis dans des volumes de petite taille de l'espace des phases) avec, comme cible, la détermination de la distribution fine de la puissance du cœur d'un réacteur nucléaire à l'aide d'une simulation Monte-Carlo.

Le moyen d'atteindre ces objectifs est d'effectuer des calculs parallèles grâce aux ressources du calcul intensif. La parallélisation des algorithmes de calcul est implémentée selon différentes stratégies qui dépendent, en particulier, du choix des méthodes numériques de résolution de l'équation de Boltzmann et des ressources informatiques employées. Elles vont du parallélisme naturel au parallélisme hybride sous ses différentes formes : hybridation de techniques de parallélisation, hybridation d'entités *hardware* de calcul (e.g. CPU/GPU), etc.

Il convient de souligner que le recours au calcul intensif ne dispense nullement de l'emploi des techniques traditionnelles ou nouvelles d'accélération de la convergence numérique des algorithmes implémentés dans les codes de calcul. Celles-ci restent au contraire indispensables. C'est la conjugaison des deux qui permet de répondre efficacement au besoin calculatoire générique rappelé plus haut.

Le grand intérêt du calcul intensif pour les études d'optimisation multicritère est également à retenir.

Au-delà des quelques exemples présentés, bien des calculs relevant de la neutronique au sens large peuvent tirer profit du calcul intensif. Nous pouvons citer ceux afférents à l'interprétation des signaux des dispositifs de mesures qui instrumentent le cœur du réacteur et sa périphérie, incluant l'étude du bruit neutronique et ceux relatifs à la propagation des incertitudes.

Les travaux réalisés contribuent à l'atteinte progressive de l'objectif de l'élaboration du « réacteur numérique ». Elle nécessite d'être en capacité de réaliser des études multiphysique avec les outils de simulation s'appuyant sur les ressources du calcul intensif.

Au plan international, des projets de « réacteurs nucléaires numériques », exploitant le calcul intensif, ont également été initiés et nous pouvons, en particulier, citer, aux États-Unis, le projet transverse CASL (*Consortium for Advanced Simulation of Light Water Reactors*) piloté par Oak Ridge National Laboratory et soutenu par le Department Of Energy (DOE, <http://www.casl.gov/>).

Les avancées réalisées auront des retombées sur l'architecture logicielle du schéma de calcul de cœur industriel qui doit continûment bénéficier des possibilités du calcul parallèle sur des machines multiprocesseurs, tout en préservant des

compromis raisonnables entre finesse de modélisation, précision du calcul, temps de calcul, portabilité, maintenabilité et évolutivité des logiciels de calcul concernés.

**Émeric BRUN, Frédéric DAMIAN, Cheikh DIOP,
Fausto MALVAGI, Erell JAMELOT, Igor ZMIJAREVIC**
Direction des énergies
et Franck GABRIEL
Direction des applications militaires

► Références

- [1] *La Neutronique*, ouvrage collectif, e-den, Une monographie de la Direction de l'Énergie Nucléaire, Paris, 2015, CEA Saclay et Groupe Moniteur (Éditions du Moniteur).
- [2] R. SANCHEZ, "Assembly homogenization techniques for core calculations", *Progress in Nuclear Energy*, 51, pp. 14-31, 2009. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0149197008000553>
- [3] J.C. LE PALLEC, « CORPUS un outil multiphysique dédié à la modélisation du comportement des Réacteurs à Eau Légère (REL) en conditions de fonctionnement normal et accidentel », Séminaire MAC DAYS, 11-12 décembre 2013. <https://www.ljll.math.upmc.fr/~charles/MACdays/exposes/MACDAYS-LePallec.pdf>
- [4] K. AMMAR, *Conception multiphysique et multiobjectif des cœurs RNR-Na hétérogènes : développement d'une méthode d'optimisation sous incertitudes*, Thèse de Doctorat, Université Paris-Sud, 9 décembre 2014. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01127156/document>
- [5] R. SANCHEZ, "Prospects In Deterministic Three-Dimensional Whole-Core Transport Calculations", *Nuclear Engineering and Technology*, March 2012, pp. 113-150. <http://www.kns.org/jknsfile/v44/JK0440113.pdf>
- [6] D. SCHNEIDER, F. DOLCI, F. GABRIEL, J-M PALAU, M. GUILLOT et B. POTHET, "APOLLO3®: CEA/DEN Deterministic Multi-Purpose Code For Reactor Physics Analysis", PHYSOR 2016, Sun Valley, Idaho, USA, May 1-5, 2016.
- [7] S. SANTANDREA, R. SANCHEZ, "Analysis and improvement of the DPN acceleration technique for the method of characteristics in unstructured meshes", *Annals of Nuclear Energy*, 32, pp. 163-193 (2005), <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454904002026>
- [8] E. JAMELOT, A.-M. BAUDRON and J.-J. LAUTARD, "Domain Decomposition for the SPN Solver MINOS", *Transp. Theory Statist. Phys.*, vol. 41, 2012, pp. 495-512. <http://thirdworld.nl/domain-decomposition-for-the-sp-n-solver-minos>
- [9] E. JAMELOT, P. CIARLET, A.-M. BAUDRON and J.-J. LAUTARD, "Domain decomposition for the neutron SPN equations", 21st Intl Conf. on DDM, Rennes, 2012.
- [10] E. JAMELOT, J. DUBOIS, J.-J. LAUTARD, C. CALVIN and A.-M. BAUDRON, "High performance 3D neutron transport on petascale and hybrid architectures within APOLLO3® code", MC 2011, Rio de Janeiro, Brazil, May 8-12, 2011. http://mathematicsandcomputation.cowhosting.net/MC11/_pdf/mc24_146_paper.pdf

- [11] R. LENAIN, *Amélioration des méthodes de calcul de cœurs de réacteurs nucléaires dans APOLLO3® : décomposition de domaine en théorie du transport pour des géométries 2D et 3D avec une accélération non linéaire par la diffusion*, thèse de l'Université Paris 11, 2015. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01224873/document>
- [12] N. ODRY, J.-F. VIDAL, G. RIMPAULT, A.-M. Baudron and J.-J. LAUTARD, "Domain Decomposition Method in APOLLO3® Solver, Minaret", SNA+M&C+MC 2015, Nashville, April, 19-23, 2015. <http://mc2015.org/pdf/WebProgramBook.pdf>
- [13] D. SCIANNANDRONE, *Élaboration d'une accélération et d'un schéma d'ordre supérieur pour la résolution de l'équation du transport des neutrons avec la méthode des caractéristiques pour des géométries 3D axiales*, thèse de l'Université Paris Sud, 2015. <http://www.theses.fr/2015PA112171>
- [14] E. JAMELOT, J. DUBOIS, J.-J. LAUTARD, C. CALVIN and A.-M. BAUDRON, International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011), Rio de Janeiro, RJ, Brazil, May 8-12, 2011, on CD-ROM, Latin American Section (LAS) / American Nuclear Society (ANS), ISBN 978-85-63688-00-2 ; K.R. KOCH and R.S. BAKER, "An SN Algorithm for the Massively Parallel CM-200 Computer", *Nucl. Sci. Eng.*, 128, pp. 312-320, 1998.
- [15] T.M. EVANS *et al.*, "DENOVO: A New Three-Dimensional Parallel Discrete Ordinates Code in SCALE", *Nuclear Technology*, 171, pp. 171-200, 2010.
- [16] O. MULA, *Some contributions towards the parallel simulation of time dependent neutron transport and the integration of observed data in real time*, thèse de l'univ. Paris 6, 2014. <http://hal.upmc.fr/tel-01081601/document>
- [17] A.-M. BAUDRON, J.-J. LAUTARD, Y. MADAY and O. MULA, "The parallel in time algorithm applied to the kinetic neutron diffusion equation", 21st Intl Conf. on DDM, Rennes, 2014. http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-05789-7_41#page-1 ; http://dd21.inria.fr/pdf/mulao_mini_15.pdf
- [18] A.-M. BAUDRON, J.-J. LAUTARD, Y. MADAY and O. MULA, "MINARET: Towards a time-dependent neutron transport parallel solve", SNA+M&C+MC 2013, Paris, October 27-31, 2013. http://sna-and-mc-2013-proceedings.edpsciences.org/articles/snmc/abs/2014/01/snmc2013_04103/snmc2013_04103.html
- [19] Y. MADAY, O. MULA and M.K. RIAHI, "Towards a Fully Scalable Balanced Parareal Method: application to neutronics", ENUMATH 2015. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01184303/document>
- [20] E. BRUN, F. DAMIAN, C.M. DIOP, E. DUMONTEIL, F.X. HUGOT, C. JOUANNE, Y.K. LEE, F. MALVAGI, A. MAZZOLO, O. PETIT, J.C. TRAMA, T. VISONNEAU and A. ZOIA, "TRIPOLI-4_, CEA, EDF and AREVA reference Monte-Carlo code", *Annals of Nuclear Energy*, 82, pp. 151-160, 2015. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454914003843>
- [21] Y. PÉNELIAU and J.P. BOTH, "Parallelization of the Monte-Carlo Code TRIPOLI-4", Mathematical and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Madrid, Spain, sept. 1999, p. 412.
- [22] M. COSTE-DELCLAUX, "GALILÉE: A Nuclear Data Processing System for Transport, Depletion and Shielding Codes", Proc. Int. conf. PHYSOR'08 Advances in Reactor Physics, Interlaken, Switzerland (2008). <http://toc.proceedings.com/10098webtoc.pdf> ; <https://www.oecd-neo.org/dbdata/process/workshop-2008/Galilee.pdf>
- [23] VIZIR : F. GAUDIER, "URANIE: The CEA/DEN Uncertainty and Sensitivity platform", 6th International Conference on Sensitivity Analysis of model output – Procedia and Behavioral Sciences, Chapitre VI : Conclusions, perspectives, vol. 2, pp. 7660-7661, 2010.
- [24] URANIE : <https://sourceforge.net/projects/uranie/>
- [25] ORPHÉE : http://www-llb.cea.fr/presllb/Part_2.pdf
- [26] F. DAMIAN and E. BRUN, "ORPHÉE research reactor: 3D core depletion calculation using Monte-Carlo code TRIPOLI-4®", Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte-Carlo 2013, SNA + MC 2013 Special Issue, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 82, August 2015, pp. 203-216. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306454914003880>
- [27] L. GIRET, *Numerical Analysis of a Non-Conforming Domain Decomposition for the Multigroup SP_N Equations*, thèse de doctorat, université de Paris-Saclay, 2018, <https://pastel.archives-ouvertes.fr/tel-01936967>.
- [28] P. CIARLET Jr., L. GIRET, E. JAMELOT, "Critically computation with finite element method on non-conforming meshes", MC 2017, Jeju, Korea, April 16-20, 2017.
- [29] P. CIARLET Jr., E. JAMELOT, F. KPADONOU, "Domain decomposition methods for the diffusion equation with low-regularity solution", *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 74, pp. 2369-2384, 2017.
- [30] P. CIARLET Jr., L. GIRET, E. JAMELOT, F. KPADONOU, "Numerical analysis of the mixed finite element method for the neutron diffusion eigenproblem with heterogeneous coefficients", *Math. Mod. Num. Anal.*, vol. 52, pp. 2003-2035, 2018.
- [31] M.-H. DO, P. CIARLET Jr., F. MADIOT, "Adaptive solution of the neutron diffusion equation with heterogeneous coefficients using the mixed finite element method on structured meshes", Physor 2020, Cambridge, United-Kingdom, 29th March – 2nd April 2020.

► Bibliographie

Pour en savoir plus sur les réacteurs nucléaires et leur fonctionnement

COPPOLANI (P.), HASSENBOEHLER (N.), JOSEPH (J.), PETETROT (J.-F.), PY (J.-P.), ZAMPA (J.-S.), *La chaudière des réacteurs à eau sous pression*, Les Ulis, INSTN/EDP Sciences, Collection Génie Atomique, 2004.

KERKAR (N.), PAULIN (P.), *Exploitation des cœurs REP*, Les Ulis, INSTN/EDP Sciences, Collection Génie Atomique, 2008.

TARRIDE (B.), *Physique, fonctionnement et sûreté des REP*, Les Ulis, INSTN/EDP Sciences, coll. « Génie Atomique », 2013.

BARRÉ (B.), ANZIEU (P.), LENAIN (R.), THOMAS (J.-B.), *Nuclear Reactor Systems – A technical, historical and dynamic approach*, Les Ulis, INSTN/EDP Sciences, Nuclear Engineering Series, 2016.

LIBMANN (J.), *Éléments de sûreté nucléaire*, Les Ulis, IPSN/Les éditions de physique, 1996.

Dynamique des fluides : simulation de l'écoulement à travers les grilles d'assemblage de réacteurs à eau sous pression

Les enjeux de la modélisation thermohydraulique dans les réacteurs nucléaires

Les études de conception et en support à l'évaluation de sûreté d'un **REP*** (Réacteur à Eau sous Pression) consistent à évaluer les comportements neutronique, **thermohydraulique*** et mécanique du réacteur. Elles requièrent une analyse complète du système incluant le cœur du réacteur avec son circuit primaire ainsi que les échangeurs de chaleur et les circuits annexes. Nous nous intéresserons ici à la partie soumise au flux neutronique, typiquement les assemblages combustibles situés dans le **cœur*** du réacteur, qui constituent un des éléments essentiels d'un REP. Ces **assemblages*** (fig. 165) sont composés d'un certain nombre de crayons qui contiennent le combustible nucléaire formé de pastilles d'oxyde d'uranium ou de **MOX*** empilées dans un tube de gainage. La réaction de fission qui produit l'énergie y a lieu. Ces crayons sont soumis à l'écoulement majoritairement axial d'un fluide. Ce fluide, de l'eau dans le cas d'un REP, agit comme réfrigérant et comme modérateur de neu-

trons (ralentissement de la vitesse des neutrons avec un pouvoir d'absorption minimal pour permettre une réaction nucléaire en chaîne efficace).

La modélisation des phénomènes physiques qui se développent au sein du cœur du réacteur fait intervenir plusieurs disciplines, notamment la neutronique et la thermohydraulique. La neutronique permet d'avoir accès aux dépôts de puissance engendrés par les réactions de fission dans le crayon combustible. La thermique régit la conversion de l'énergie de fission en chaleur et sa dispersion dans le crayon, ainsi que les transferts thermiques dans le fluide caloporteur qui peuvent, de par leurs disparités, être sources de courants transverses. Le fluide assurant la double fonction de **caloporteur*** et de modérateur de neutrons, une bonne prédiction de ses mouvements et de ses transferts thermiques avec le combustible est indispensable pour assurer une modélisation précise du fonctionnement du cœur.

Le cœur est également soumis à d'autres phénomènes tels que les interactions entre le fluide et la structure. Ces inter-



a). Structure d'un assemblage de MOX, constitué de tubes (environ 4 mètres de hauteur) appelés « crayons », dans lesquels sont empilées des pastilles de combustible (Source internet, médiathèque EDF).

b). Portion d'assemblage combustible composé de tronçons de gaine combustible avec bouchons et d'une portion de grille d'espacement des crayons [crayons d'environ 8 mm de diamètre] (Source internet, Médiathèque CEA).

Fig. 165. Assemblage d'un réacteur à eau sous pression, crayons combustibles.

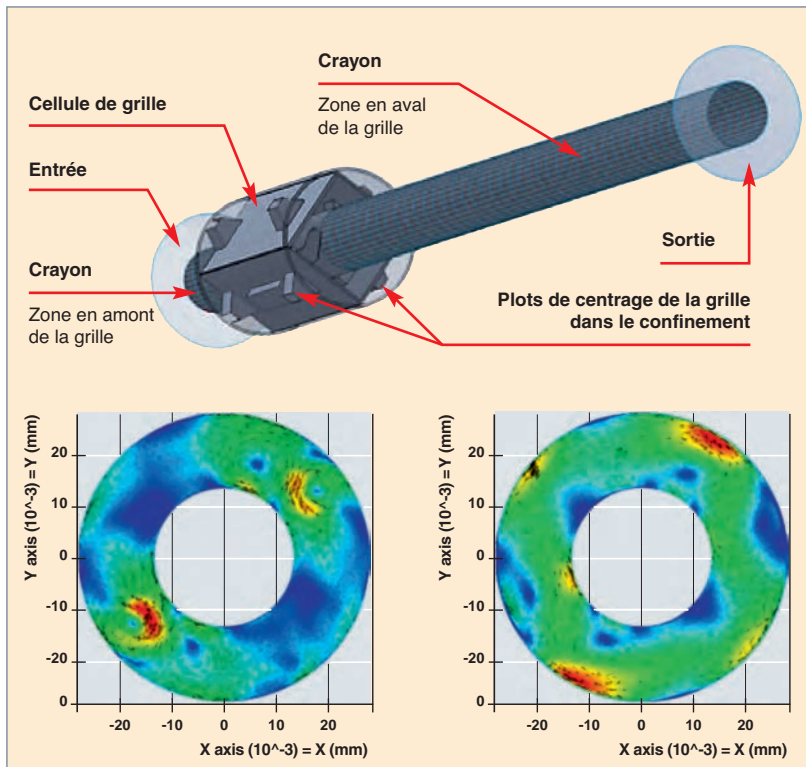


Fig. 166. Maîtrise du risque de percement des crayons en réacteur. Boucle d'essais CALIFS Experimental (Assemblage 5 x 5 avec grilles de mélange). Calcul TrioCFD, S. Delafontaine. Visualisation de la CAO (en haut). Superposition de la norme de la vitesse du fluide caloporteur et des vecteurs vitesses dans deux plans transverses à l'axe du crayon situés respectivement à une distance de $1 D_h$ de la grille (milieu) et $4 D_h$ (droite), où D_h désigne le diamètre du crayon.

actions conduisent à deux types de comportement :

1. Les **crayons*** des assemblages combustibles vibrent sous l'effet de forces de pression et de forces visqueuses exercées par le fluide sur leur surface. Cela peut conduire à l'usure des gaines, potentiellement au percement des crayons et à des fuites du combustible nucléaire dans le fluide caloporteur. Des études sont réalisées pour comprendre et prévenir ce risque d'usure. Elles consistent à simuler l'écoulement turbulent du fluide caloporteur autour des faisceaux de crayons afin de calculer les forces d'excitation turbulente s'exerçant sur les barres et d'en déduire, *via* un couplage avec un code de mécanique des solides, la réponse de la structure composée des crayons et de leurs supports (fig. 166).
2. Lors du déchargement du cœur réalisé au cours d'opérations de maintenance, des déformations ont parfois été observées (voir figure 167). Les principaux phénomènes physiques identifiés comme pouvant potentiellement conduire à ces déformations sont les chargements induits par la thermique et la neutronique ainsi que l'écoulement du fluide. Ici encore, la prédiction de ces déformations à l'échelle du réacteur passe par la simulation précise de l'écoulement dans les assemblages.

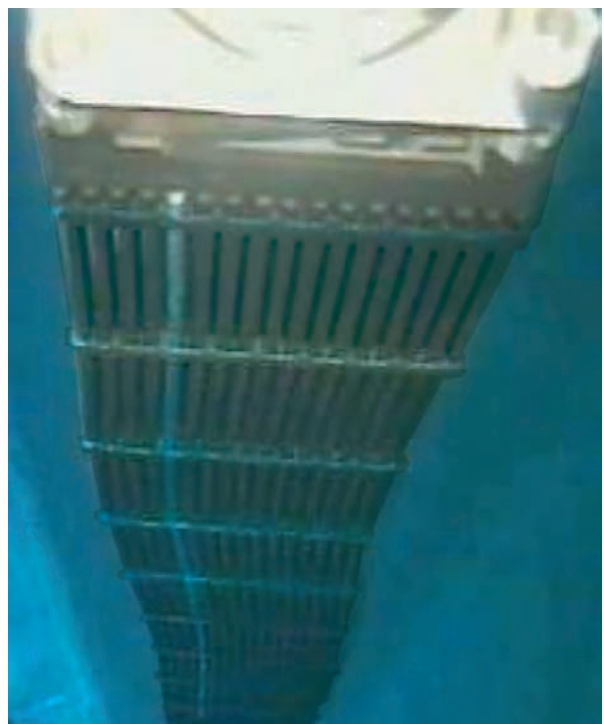


Fig. 167. Déformations résiduelles d'un assemblage en fin de cycle dans un REP.

Très encombrée, la zone du cœur peut être modélisée en décrivant l'écoulement fluide par une représentation homogénéisée associée à un milieu poreux. Cette modélisation dite « poreuse » donne uniquement accès à des quantités moyennes, par exemple sur un volume représentatif élémentaire. Il s'agit de l'approche utilisée aujourd'hui en production. L'inconvénient est qu'elle ne donne pas accès aux grandeurs locales pourtant nécessaires pour s'assurer des conditions de sûreté en tout point du réacteur. En effet, la répartition de puissance n'étant pas homogène dans le cœur, il faut être en mesure d'évaluer le comportement des différentes structures en tout point, et notamment à proximité des crayons chauds (crayons subissant un pic de température dans certaines situations incidentelles ou accidentelles). Notons que pour compenser la perte locale de précision associée à la modélisation poreuse, une approche conservatrice est adoptée, laissant augurer la possibilité de gagner des marges *via* des calculs à l'échelle locale.

Compte tenu du comportement fortement turbulent de l'écoulement, de la complexité et de la taille des structures solides présentes dans l'assemblage, la simulation fine à l'échelle microscopique des problèmes de thermohydraulique dans les assemblages combustibles à l'échelle du réacteur constitue un défi encore à relever.

La forte augmentation des ressources informatiques a permis de progresser significativement dans le domaine du calcul scientifique pour la thermohydraulique des réacteurs. Des expériences numériques basées sur la représentation d'échelles spatio-temporelles de plus en plus petites et des domaines géométriques de taille croissante permettent de compléter les données expérimentales et les analyses physiques associées, en donnant accès à des grandeurs non accessibles par la mesure.

Géométrie des assemblages

Les assemblages sont constitués de crayons regroupés en faisceaux carrés et maintenus par des grilles et des embouts supérieurs et inférieurs (voir la figure 165). Selon le type de REP, un assemblage combustible est composé de 15 x 15 à 17 x 17 crayons et le cœur du réacteur de 150 à 200 assemblages. Le corps de la grille de maintien se présente sous la forme d'un réseau régulier de plaquettes accouplées, équipées de ressorts et de bossettes (voir la figure 168). Les grilles sont équipées de dispositifs mélangeurs (ailettes incli-

nées) qui génèrent dans le fluide des écoulements transverses entre les crayons et accroissent la turbulence afin d'homogénéiser la température du fluide. Nous cherchons ainsi à améliorer l'échange de chaleur entre le combustible et le fluide caloporteur. Cela a pour avantage d'éviter l'apparition de la **crise d'ébullition***. Cependant, les grilles et les ailettes génèrent une résistance hydraulique supplémentaire à l'écoulement. Il faut donc augmenter la puissance de pompage nécessaire pour transporter le fluide réfrigérant à travers le cœur du réacteur. Pour cette raison, les grilles sont conçues de sorte à produire le mélange le plus efficace possible avec une résistance à l'écoulement minimale. Les études se concentrent donc principalement sur la prédiction de la chute de pression provoquée par les dispositifs de mélange et celle de la distribution de température axiale et horizontale à l'intérieur de l'ensemble. Le but est de déterminer le flux de chaleur maximal admissible, dit « **flux critique*** » ; c'est le principal paramètre de performance thermique.

À conditions thermohydrauliques données, les performances vis-à-vis du flux critique dépendent beaucoup de la conception de l'assemblage, en particulier de celle des ailettes. Ainsi, la prédiction du mélange produit par les ailettes est d'importance majeure dans les analyses thermohydrauliques de conception des dispositifs de mélange. L'objectif est d'optimiser la géométrie des ailettes, leur taille, leur forme et leur angle d'inclinaison pour améliorer le mélange fluide sans augmenter la **perte de charge***. Du point de vue

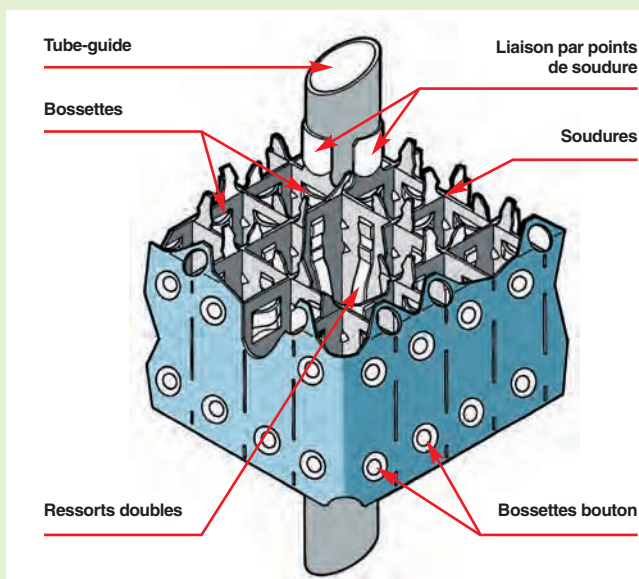


Schéma d'une grille d'assemblage AFA2G (AREVA). La grille est soudée sur les tubes guides qui assurent, à l'aide de ressorts et de bossettes, le maintien et l'espacement des crayons combustible (source internet, monographie du CEA « Les combustibles nucléaires »).

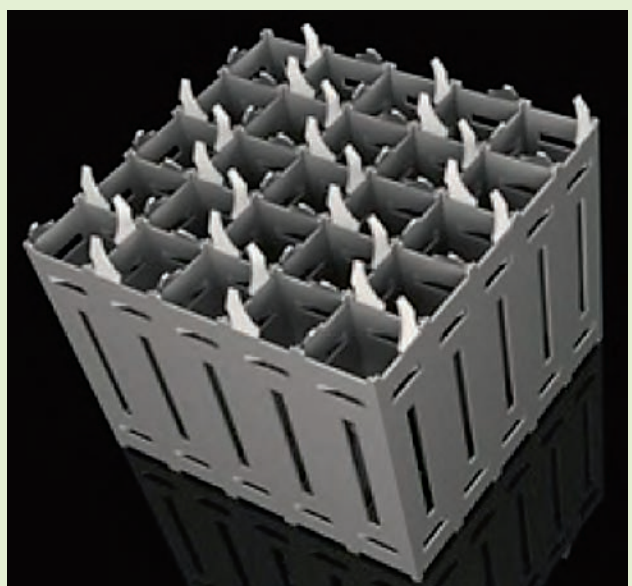


Photo d'une grille de mélange [environ 5 cm de largeur] (Source internet).

Fig. 168. Grille de mélange.

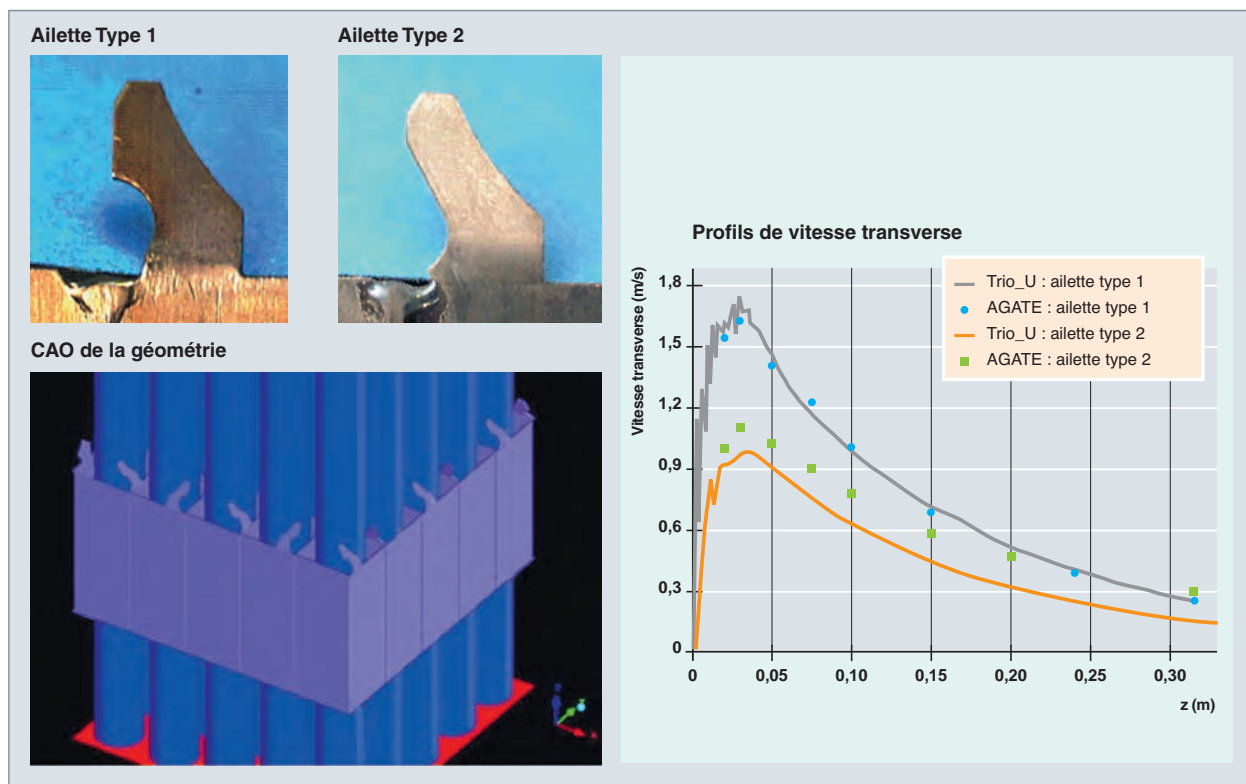


Fig. 169. Expériences AGATE. Comparaison des résultats obtenus lors de deux campagnes d'essais consacrées à la conception de deux types d'ailerres. Mise en évidence de l'importance de la forme de l'aillette sur le profil de vitesse transverse en fonction de la cote axiale. Le profil de vitesse transverse pour l'aillette de type 2 est mal restitué par le calcul qui ne prenait pas en compte la géométrie réelle de l'aillette. Calculs réalisés avec le code TrioCFD avec environ 20 millions de mailles en 8 heures de calcul sur 254 processeurs du CCRT.

de la modélisation, une CAO décrivant tous les détails de construction susceptibles d'agir sur les phénomènes de mélange est nécessaire. Il s'agit donc de prendre en compte la géométrie réelle des ailerres. En pratique, leur fabrication peut être différente des spécifications du dessin original, et ces écarts peuvent avoir une influence significative sur les coefficients de mélange de la grille en modifiant la vitesse transverse de l'écoulement dans le sillage proche de l'aillette. Ce point est illustré sur la figure 169, avec la présentation de résultats expérimentaux sur la qualification et la conception de grilles de mélange. Deux ailerres ont été testées. Bien qu'ayant des géométries voisines, elles conduisent à des écoulements notablement différents, avec une sensibilité élevée de la vitesse transverse au rayon de raccordement de l'aillette à la plaquette. L'obtention d'un bon accord entre expérience et simulation a été possible en construisant le maillage à partir de la géométrie réelle des ailerres, et non des CAO de conception. Ces études ont montré qu'une petite modification de la grille pouvait affecter significativement l'écoulement global.

La problématique des écoulements dans les assemblages combustibles

Dans un réacteur à eau sous pression l'assemblage est ouvert. L'eau circule donc entre les crayons mais peut également circuler transversalement aux assemblages. Au sein d'un même assemblage, les paramètres influents sur l'organisation de l'écoulement du fluide sont la distance entre les crayons et les caractéristiques géométriques des grilles. La compréhension de l'écoulement d'un fluide au sein d'un faisceau tubulaire « nu » (sans grille) constitue encore aujourd'hui un sujet de recherche. La complexité de l'écoulement s'explique en partie par des considérations géométriques, à savoir la présence d'espaces étroits (espace entre deux crayons ou espace entre un crayon et la paroi de la cuve) reliant des espaces plus larges (espace sous canal). Une des conséquences des variations locales de la géométrie est la présence d'écoulements secondaires organisés en cellules multiples dans la section perpendiculaire à la direction principale de l'écoulement (voir la figure 170). Ils trouvent leur origine dans l'anisotropie de la turbulence. L'intensité des écoulements secondaires est contrôlée par le niveau d'anisotropie, lui-même fortement influencé par la géométrie du canal.

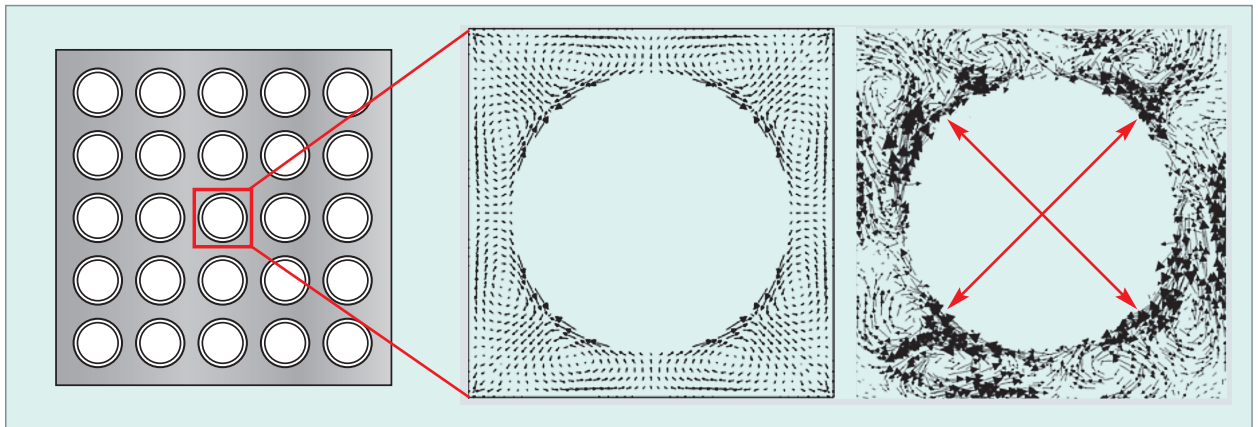


Fig. 170. Écoulement dans un faisceau de 5x5 tubes. Visualisation des structures de l'écoulement secondaire. Vecteurs vitesse dans une section transverse à la direction longitudinale. Calcul réalisé avec le code TrioCFD.

La modélisation thermohydraulique aux petites échelles repose en grande partie sur le modèle de turbulence adopté. Les principes des principales approches adoptées pour la modélisation des phénomènes turbulents sont brièvement rappelés ci-dessous.

Comme évoqué précédemment, l'organisation de l'écoulement au sein d'un assemblage est également fonction des paramètres géométriques des grilles de mélange.

La modélisation des écoulements turbulents : les principales approches

L'approche la plus exacte consiste à résoudre les équations de **Navier-Stokes*** incompressibles sans autre approximation que celles issues de la discrétisation numérique (voir la figure 171). Elle est appelée « approche **DNS*** » (*Direct Numerical Simulation*). Toutes les échelles spatio-temporelles de la solution sont résolues [2]. Il faut donc considérer des pas de discrétisation spatiale et temporelle suffisamment petits pour capturer la plus petite échelle dynamiquement active. Ce point est souvent illustré par le cas d'un écoule-

ment turbulent statistiquement homogène et isotrope. Dans ce cas, le rapport entre la longueur caractéristique L de l'échelle la plus énergétique (elle correspond à la taille des plus grosses structures tourbillonnaires), et celle de la plus petite échelle dynamiquement active η , est évalué par la relation $\frac{L}{\eta} = O(Re^{3/4})$. Le nombre de Reynolds Re mesure le rapport entre les forces d'inertie et les effets de viscosité moléculaire. L'échelle η , appelée « échelle de Kolmogorov », correspond à l'échelle à laquelle la viscosité moléculaire permet de dissiper l'énergie cinétique de l'écoulement. Le rapport des temps caractéristiques évolue également comme $O(Re^{3/4})$. Les ressources informatiques nécessaires pour des calculs d'écoulements à haut Reynolds dans un assemblage complet avec l'approche DNS sont inaccessibles aux supercalculateurs actuellement disponibles.

Pour diminuer le coût numérique de la simulation, un niveau de description moins fin peut être introduit en choisissant de ne calculer qu'une partie des échelles, dites « échelles résolues ». Les interactions entre les échelles résolues et les échelles non résolues (par définition absentes du calcul) sont prises en compte par un modèle. Par abus de langage, nous disons que les échelles non résolues sont modélisées.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \mathbf{S} - \frac{1}{\rho_0} \nabla P_m + \mathbf{f}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\kappa \nabla T)$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \nu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u})$$

(tenseur des vitesses de déformation)

$$P_m = (P - P_h)$$

$$\mathbf{f} = \beta_0 (T - T_0) \mathbf{g}$$

Notations : \mathbf{u} désigne la vitesse, ν la viscosité cinématique, P la pression, P_h la pression hydrostatique, $\rho_0 = \rho(T_0)$ la densité supposée constante qui dépend de la température de référence T_0 , κ le coefficient de conductivité thermique, \mathbf{g} la gravité, β_0 un coefficient de dilatation thermique.

Fig.171. Système d'équations instantanées régissant le mouvement du fluide dans les assemblages. Équations de Navier-Stokes incompressibles simplifiées selon l'approximation de Boussinesq, valable pour les écoulements à faible variation de masse volumique. Les effets de flottabilité sont pris en compte uniquement par la force de gravité.

RANS	LES
Moyenne statistique	Opérateur de filtrage F
$\langle \Phi \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \Phi(x_i, \alpha) d\alpha$	$\bar{\Phi}(x_i, t) = \iint_{-\infty}^{+\infty} F(\bar{\Delta}(x_i, t), x_i - \gamma, t - \alpha) \Phi(x_i, t) d\gamma d\alpha$
Décomposition du champ Φ : $\Phi(x_i, t) = \langle \Phi(x_i) \rangle + \Phi'(x_i, t)$	Décomposition du champ Φ : $\Phi(x_i, t) = \bar{\Phi}(x_i, t) + \Phi''(x_i, t)$

Fig. 172. Opérateurs et séparation d'échelles utilisés pour les modélisations RANS (gauche) et LES (droite) de la turbulence.

$\nabla \cdot \tilde{u} = 0$ $\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} + (u \cdot \nabla) \tilde{u} = \nabla \cdot \tilde{S} - \frac{1}{\rho_0} \nabla \tilde{P}_m + \tilde{f}$ $\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \nabla(\tilde{T} \tilde{u}) = \nabla \cdot (\kappa \nabla \tilde{T}) + \nabla \cdot \Theta$ <p>($\tilde{\cdot}$) opérateur générique (moyenne statistique ou filtre LES)</p>	$\tau_{ij}^{LES} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \overline{u_i u_j} \text{ et } \theta_i^{LES} = \bar{T} \bar{u}_i - \overline{T u_i}$ $\tau_{ij}^{RANS} = -\langle u_i' u_j' \rangle \text{ et } \theta_i^{RANS} = -\langle T' u_i' \rangle$ <p>τ_{ij} est appelé « tenseur de Reynolds »</p> $\tilde{S} = \frac{1}{2} \nu (\nabla \tilde{u} + \nabla^T \tilde{u})$
---	--

Fig. 173. Équations résolues dans le cas d'une approche LES (équations filtrées) ou RANS (équations moyennées).

Les méthodes statistiques de type **RANS*** (*Reynolds Averaged Navier Stokes*), en ne calculant qu'une valeur moyenne de la solution et en modélisant les autres échelles, réduisent considérablement le nombre de degrés de liberté à calculer. Cette approche se restreint à la description des champs moyens au sens statistique de l'écoulement. Elle est inadaptée pour l'étude de l'instationnarité de l'écoulement. Elle est très répandue en production. Le modèle mathématique considéré est celui des équations de Navier-Stokes auxquelles est appliqué un opérateur de moyenne statistique (voir figures 172 à 175). Ces équations font intervenir des tenseurs indéterminés, qui dépendent des inconnues du système à résoudre. Il faut les modéliser. Le modèle le plus simple très largement utilisé pour fermer les équations est le modèle (k, ϵ) ; il repose sur la notion de viscosité turbulente (voir figures 174 et 175). Ce modèle est en principe uniquement applicable à une turbulence isotrope.

La simulation des grandes échelles (**LES*** pour « *Large Eddy Simulation* en anglais ») consiste à calculer par résolution numérique directe les grandes échelles des structures turbulentes et à modéliser l'interaction entre ces grandes

$$\tau_{ij}^d = \tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = 2\nu_t \tilde{S}_{ij}$$

ν_t : viscosité turbulente

Fig. 174. Modélisation du tenseur des contraintes turbulentes avec l'hypothèse de Boussinesq. Modèles de viscosité turbulente.

$\nu_t = C_\mu' \frac{k^2}{\epsilon}$ où $k = \langle \frac{1}{2} u_i' u_i' \rangle$ est l'énergie cinétique turbulente et ϵ la dissipation

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial k}{\partial x_j} = \nu_t \langle S_{ij} \rangle \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) - \epsilon$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = C_{\epsilon_1} \nu_t \frac{\epsilon}{k} \langle S_{ij} \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) - C_{\epsilon_2} \frac{\epsilon^2}{k}$$

$$C_\mu' = 0,09, C_{\epsilon_1} = 1,44, C_{\epsilon_2} = 1,92, \sigma_k = 1, \sigma_\epsilon = 1,3$$

Fig. 175. Modèle de (k, ϵ) .

échelles et les plus petites. Cette approche repose sur l'idée que les grosses structures tourbillonnaires ont un comportement fortement anisotrope, conditionné par la configuration géométrique spécifique de l'écoulement considéré. Ces grosses structures, responsables des mécanismes d'échanges se produisant au sein du fluide, doivent être calculées explicitement. *A contrario*, les plus petites échelles sont caractérisées par un comportement isotrope. Elles ont pour rôle principal la dissipation de l'énergie. Nous considérons que l'effet des petites échelles sur les grandes échelles a un caractère universel et qu'il peut donc être modélisé.

Pour séparer les échelles, nous nous donnons une longueur de référence appelée « échelle de coupure ». Les échelles résolues sont celles de taille supérieure à l'échelle de cou-

$$\nu_t = (C_\omega \Delta)^2 \frac{\overline{OP_1}}{OP_2 + \epsilon}, \epsilon = 10^{-6}$$

$$\overline{OP_1} = (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}, \overline{OP_2} = (\overline{S_{ij}} \overline{S_{ij}})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}$$

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} (\bar{g}_{ij}^2 + \bar{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \bar{g}_{kk}^2, \bar{g}_{ij} = \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$$

Fig. 176. Modèle de (k, ϵ) .

pure. La séparation entre les échelles se fait par application d'un filtre passe-bas aux équations de Navier-Stokes. De même que pour les méthodes RANS, les équations obtenues font apparaître des termes qui ne peuvent pas être calculés directement car dépendant des petites échelles non résolues. Un modèle, dit « modèle de sous-maille », par analogie aux échelles dont il doit modéliser les effets, doit donc être introduit. Le modèle largement utilisé au CEA pour la thermohydraulique des réacteurs nucléaires est le modèle de WALE (*Wall-Adapting Local Eddy-viscosity*) [3]. Le modèle mathématique est résumé sur les figures 172 à 174 et 176. Pour obtenir des résultats de calcul physiquement corrects, le maillage utilisé dans une simulation LES doit vérifier des critères précis visant à garantir que l'échelle de coupure se situe bien dans la zone inertielle du spectre d'énergie cinétique turbulente.

Le choix de la méthode de modélisation des phénomènes turbulents dépend du problème physique à étudier et des paramètres d'intérêt. Si nous prenons l'exemple du calcul de l'écoulement dans une portion d'assemblage combustible, la situation est différente, du point de vue de la modélisation de la turbulence, selon que nous étudions l'écoulement directement en aval des grilles ou à une distance significative de celles-ci. En effet, au voisinage et en aval des grilles, le mélange dans l'espace sous canal et dans l'espace situé entre deux crayons est principalement contrôlé par des effets d'inertie (advection). Un modèle de turbulence

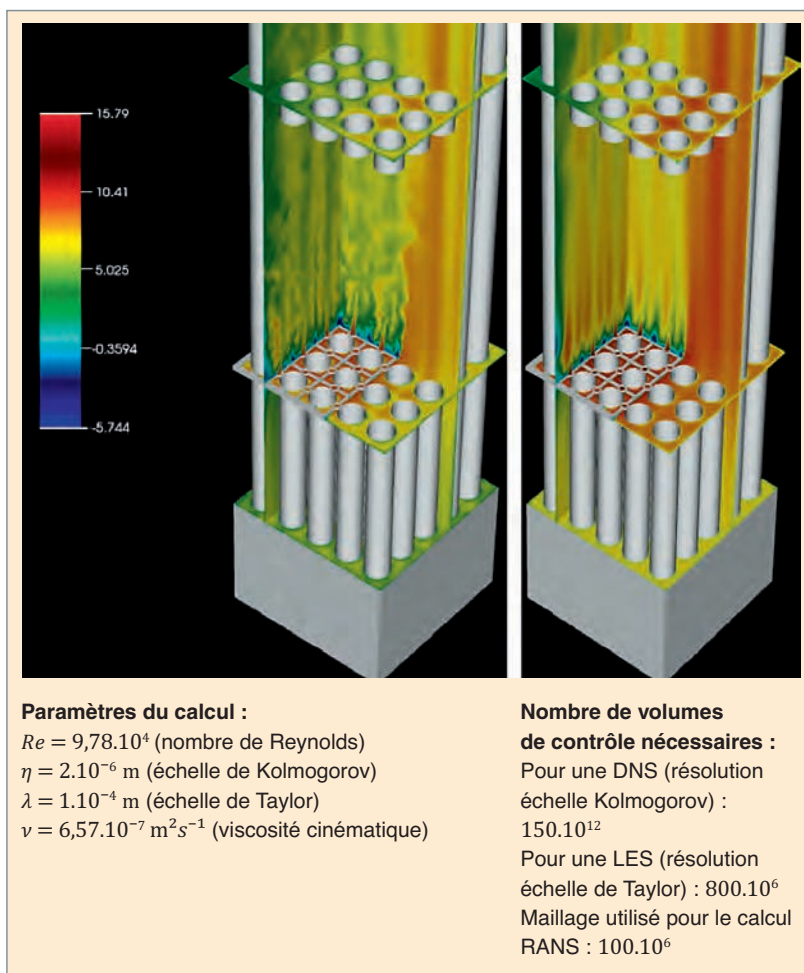
très simple pourra probablement réussir à prédire un champ de vitesse précis. Plus en aval des grilles, la vitesse de l'écoulement transverse est réduite et la turbulence anisotrope devient le phénomène de mélange prédominant. Le résultat numérique sera plus sensible à la modélisation de la turbulence qui devra être capable de prendre en compte l'anisotropie de l'écoulement.

Le choix du modèle de turbulence est également guidé par des considérations de coût de calcul. La figure 177 propose une estimation (très grossière) des ressources informatiques nécessaires pour simuler l'écoulement dans une portion d'assemblage plus ou moins grande, avec une description des phénomènes turbulents plus ou moins précise.

Pour illustrer les différences entre les approches RANS et LES, la figure 178 présente quelques résultats de simulation de l'écoulement du fluide dans un faisceau de tubes 5 x 5

2016					
Méthode	Pas du maillage	1 cm ³	1 sous canal 310 cm ³	1 assemblage 0,09 m ³	
DNS	$\eta = 12 \mu\text{m}$	578 10⁶	179 10 ⁹	51 10 ¹²	
LES	$f = 100 \mu\text{m}$	1 10⁶	310 10⁶	90 10 ⁹	
RANS	$\delta = 500 \mu\text{m}$	8 10³	2,5 10⁶	720 10⁶	
Nombre d'éléments requis pour modéliser l'écoulement dans le volume précisé avec les approches DNS, LES et RANS.					
FUTUR					
Méthode	Pas du maillage	1 cm ³	1 sous canal 310 cm ³	1 assemblage 0,09 m ³	Cœur complet 14,1 m ³
DNS	$\eta = 12 \mu\text{m}$	2010	2028	2055	2075
LES	$f = 100 \mu\text{m}$	2010	2010	2025	2052
RANS	$\delta = 500 \mu\text{m}$	2010	2010	2010	2025
<p>Estimation du coût des simulations futures, en se basant sur la référence d'une taille de maillage de 10³ éléments en 2010 (par exemple, avec cette taille de maillage, on pouvait en 2010 réaliser le calcul RANS d'un assemblage complet). Évaluation de l'année à laquelle il sera possible de réaliser le calcul. Ainsi, nous estimons qu'en 2055, on pourra réaliser le calcul DNS d'un assemblage complet. Cette prédiction est basée sur la référence 2010 et l'augmentation de la puissance de calcul suivante :</p> <p>Puissance de calcul $\approx \times 100$ par décennie Taille du maillage $\approx / 2.5$ par décennie Nombre d'éléments $\approx \times 15$ par décennie</p>					

Fig. 177. Besoins en ressources informatiques aux différentes échelles. Source: D. Bestion.



avec dispositifs de mélange. Le risque de crise d'ébullition étant plus grand à une grande distance en aval de la grille, il est nécessaire d'étudier l'écoulement sur toute la longueur entre deux grilles.

Le code TrioCFD

Une méthodologie pour la simulation CFD des écoulements turbulents dans les assemblages a été développée au CEA pour la thermohydraulique des réacteurs nucléaires. Elle repose sur le code de simulation TrioCFD, une **méthode VVQ*** intégrant la confrontation de résultats de simulation à des données expérimentales issues d'expériences à petite échelle, et le calcul HPC.

TrioCFD est un code CFD dédié à la simulation des écoulements instationnaires turbulents incompressibles ou dilatables à faible nombre de Mach. Il est exploité par le CEA depuis une vingtaine d'années pour réaliser des calculs industriels. Selon la géométrie à modéliser, nous pouvons considérer des maillages structurés (constitués de mailles parallélépipédiques) ou non structurés (mailles tétraédriques) composés de plusieurs centaines de millions d'éléments. TrioCFD est adossé

Fig. 178. Écoulement dans un faisceau de tubes 5x5. Calculs avec le code TrioCFD (P.-E. Angeli). Visualisation du champ de vitesses avec deux modèles de turbulence. Gauche : champ LES instantané. Droite : champ obtenu avec un calcul RANS. Des petites structures tourbillonnaires sont visibles sur le calcul LES dans le sillage de la grille.

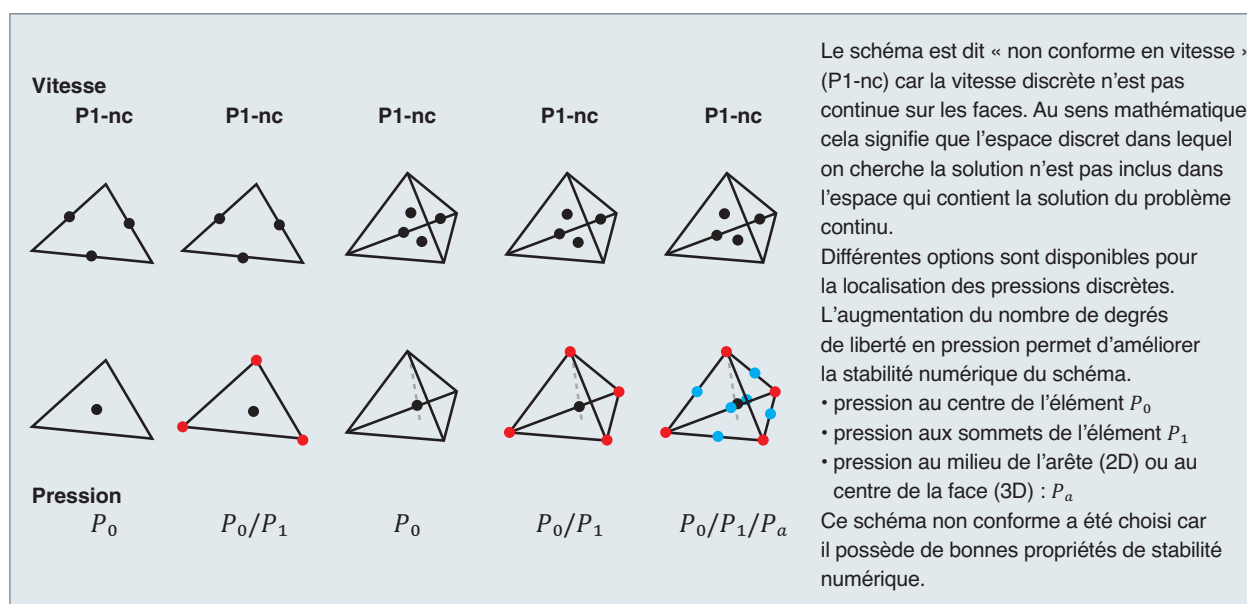


Fig. 179. Schéma Volumes Éléments Finis du code de dynamique des fluides TrioCFD. Localisation des degrés de liberté en vitesse et en pression.

à la plateforme informatique TRUST développée au CEA, fondée sur une conception orientée objet et une programmation en C++, massivement parallèle.

Le schéma numérique pour la discrétisation spatiale est un schéma VEF (Volumes Éléments Finis) [4]. La solution discrète est recherchée dans l'espace éléments finis choisi en écrivant les équations bilan sur les volumes de contrôle. Les inconnues vectorielles (vitesses) et les inconnues scalaires (température, concentration...) sont localisées au centre des faces. Un traitement spécifique pour la pression, calculée au centre de la maille ainsi qu'aux sommets des éléments et au centre des faces, permet d'obtenir un schéma stable au sens mathématique (voir la figure 179). Différents schémas de discrétisation temporelle sont disponibles : schéma d'Euler explicite d'ordre un, schéma explicite de Runge-Kutta d'ordre deux ou trois, schéma semi-implicite ou schéma implicite.

TrioCFD est un code massivement parallèle, régulièrement exploité sur des super-calculateurs. Les premiers calculs dédiés à l'interprétation de l'expérience AGATE (voir paragraphe suivant) ont été réalisés en 2009 en appliquant un modèle RANS. Le maillage considéré comportait 8 millions de mailles ; le calcul convergeait en 8 heures de temps CPU (254 processeurs sur la machine TITANE du CCRT). Les premiers tests réalisés avec une approche LES en 2010 concernaient une géométrie de 2 x 2 crayons. Les résultats obtenus n'étaient pas satisfaisants car le maillage considéré (10 millions de mailles) était trop grossier. En effet, les critères ci-dessus mentionnés sur la taille des mailles, pourtant nécessaires pour une LES, n'étaient pas satisfaits.

En 2012, dans le cadre de la définition du « grand challenge DEN », un nouveau calcul AGATE a été réalisé en adoptant une approche LES. L'écoulement a été calculé sur une plus grande longueur avec un maillage constitué de 300 millions de mailles. Le calcul a mobilisé 4 600 cœurs de processeurs, et duré 25 jours sur le calculateur CURIE du CCRT. En 2014, un calcul de deux parties d'assemblages séparées par une lame d'eau a été réalisé avec un maillage de 700 millions de mailles, sur 10 000 cœurs de processeur sur CURIE (24 jours de CPU) [5].

Exemple d'application : analyse de l'écoulement dans un assemblage simplifié de REP en présence de grilles de mélange

Nous présentons ici l'analyse de données expérimentales obtenues sur l'installation AGATE du CEA conçue pour la conception de grilles de mélange. Dans cette étude, nous nous sommes attachés à restituer le champ de vitesses. Nous simplifions le système d'équations à résoudre en supprimant l'équation sur la température (fig. 173) supposée constante.

La présentation de l'expérience

L'installation AGATE, dotée d'une instrumentation de vélocimétrie laser, a été mise au point pour étudier l'effet des dispositifs mélangeurs sur la thermohydraulique des assemblages. Elle n'est plus opérationnelle aujourd'hui. La section d'essai consistait en une structure métallique de section carrée fermée par des hublots en verre de très haute qualité optique. Elle abritait une portion d'assemblage REP constituée d'une grappe de 25 barreaux (5 x 5), ainsi qu'une grille de mélange. Les mesures alors obtenues du champ de vitesse tridimensionnel en aval de la grille et de la turbulence permettent une analyse très fine du comportement hydraulique de la grille. Plus de trente types de grilles de mélange ont été étudiés sur l'installation AGATE. Une expérience a été analysée en détails avec le schéma de calcul CFD cité ci-dessus.

L'ensemble de la section d'essai a été modélisée. La CAO est représentée sur la figure 180.

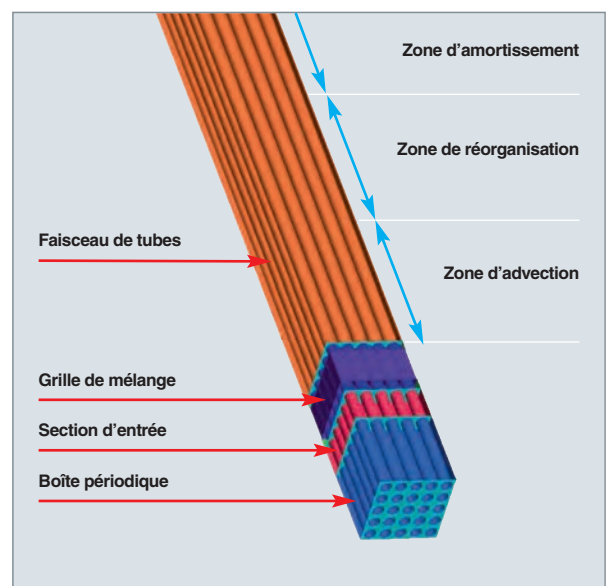


Fig. 180. CAO de l'expérience AGATE pour l'étude des écoulements dans un assemblage combustible de réacteur à eau sous pression.

Les objectifs de l'étude

Il s'agit de :

- Qualifier le code TrioCFD pour l'hydraulique des assemblages combustibles, c'est-à-dire montrer que le code permet de restituer des données expérimentales avec un ensemble de paramètres physico-numériques précisés ;
- progresser dans notre compréhension de la physique : par exemple, pour l'ensemble des expériences AGATE analy-

sées avec différentes grilles de mélange, l'écoulement du fluide a laissé apparaître certaines similarités. Trois régions différentes ont été identifiées, en fonction de la distance en aval au bord supérieur de la grille (voir la figure 180) :

1. Zone d'advection : l'écoulement global est piloté par les phénomènes d'advection et suit la géométrie des ailettes de mélange. Un écoulement transverse diagonal se forme dans une direction principale caractérisée par un angle d'inclinaison de 45° .

2. Zone de réorganisation : l'écoulement se réorganise et tend vers un état d'équilibre. La direction principale de l'écoulement tourne d'un angle de 90° .

3. Zone d'amortissement : l'effet de la grille s'atténue d'autant plus que le fluide s'en éloigne. La distribution de vitesse tend vers celle d'un faisceau tubulaire libre mais les effets de la grille sur l'écoulement restent dominants. À la suite à la réorganisation de l'écoulement dans la zone précédente, la direction principale de l'écoulement forme une diagonale à 135° .

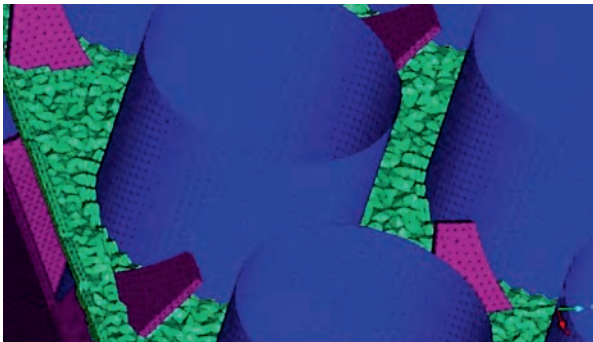


Fig. 181. Expérience AGATE. Maillage utilisé pour la simulation LES. Agrandissement au niveau des ailettes de mélange.

Nous cherchons à identifier les mécanismes qui conduisent à l'organisation de l'écoulement telle que décrite ci-dessus dans les différentes zones, et à établir si les phénomènes observés sont reproductibles.

Le schéma de calcul

Le schéma de calcul définit le maillage (le type et le nombre d'éléments, les régions à raffiner...) et précise l'ensemble des paramètres physico-numériques nécessaires à la réalisation du calcul. Les expériences AGATE ont été analysées avec deux modélisations différentes de la turbulence : une approche LES avec le modèle de WALE et une approche RANS avec un modèle ($k-\epsilon$). Dans les deux cas, une loi de paroi est utilisée au voisinage des bords en remplacement des modèles de turbulence inaptes à calculer précisément les couches limites pour les maillages considérés. Le schéma de calcul est étroitement lié à la modélisation de la turbulence choisie. Par exemple, pour le calcul LES, nous avons utilisé un schéma en temps très précis (schéma de Runge-Kutta d'ordre 3) et un maillage comportant 300 millions de points de calcul de la vitesse (fig. 181). Le nombre total de degrés de liberté associés à la simulation est supérieur au milliard. Le maillage utilisé pour le calcul RANS est beaucoup plus grossier avec 30 millions de points de calcul de vitesse. Le schéma en temps utilisé est moins précis (schéma d'Euler d'ordre 1).

Les résultats

Nous présentons ci-dessous les résultats obtenus dans la zone d'advection et la zone d'amortissement.

Le sillage proche de la grille

Les vecteurs vitesses dans un plan transverse aux crayons « juste en aval de la grille de mélange » sont représentés sur la figure 182. Ils sont comparés aux mesures expérimentales.

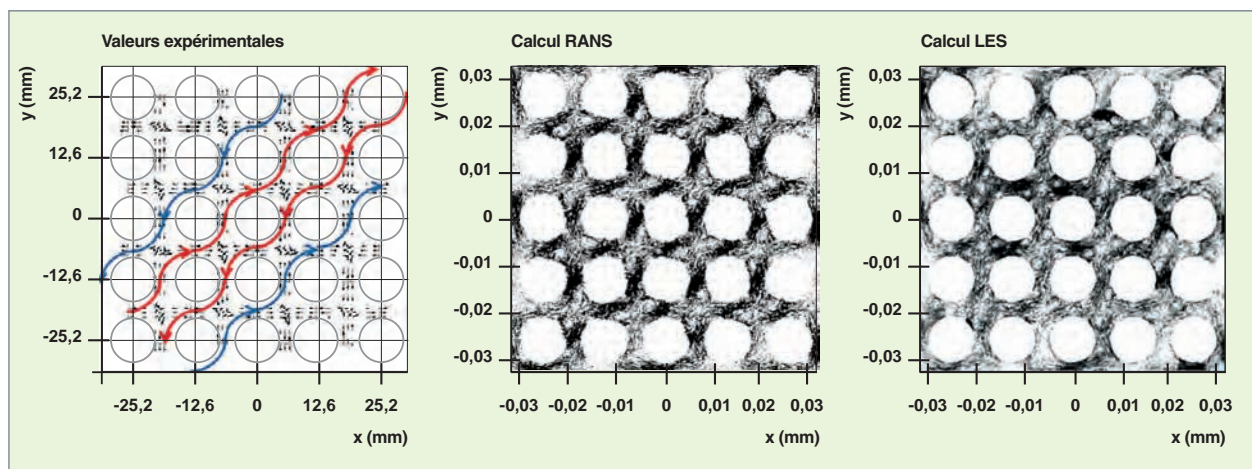


Fig. 182. Expérience AGATE. Projection du champ de vitesse dans un plan transverse à l'écoulement principal, dans la zone d'advection proche de la grille de mélange.

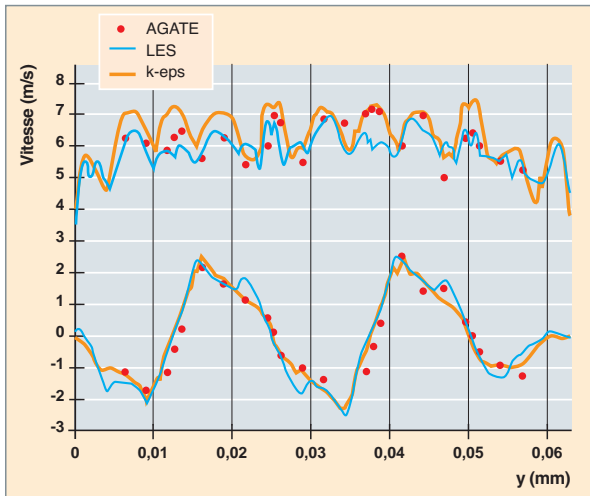


Fig. 183. Expérience AGATE. Profils de vitesse dans un plan transverse situé dans la zone d'advection. Comparaison des valeurs expérimentales et des valeurs numériques. Zone d'advection proche de la grille de mélange

tales, pour les calculs RANS et LES. Dans l'espace entre les crayons, seule une composante du vecteur vitesse étant mesurable par LDV (*Laser Doppler Velocimetry*), le champ de vitesses mesuré contient moins d'informations que les champs calculés. Néanmoins, la structure de l'écoulement dans la direction d'une diagonale à 45° est bien visible sur les mesures. Les résultats de simulations laissent apparaître des tourbillons dans l'espace sous-canal situé entre les crayons : deux structures dans le cas des calculs RANS et quatre pour les calculs LES. Sur ces derniers nous observons des structures de plus petite taille. L'organisation de l'écoulement selon la direction diagonale à 45° est bien visible.

Une comparaison quantitative sur la figure 183 montre que les profils de vitesse sont bien restitués par les deux

modèles de turbulence. Dans cette zone, l'écoulement étant piloté par l'advection, nous ne nous attendions pas à une forte influence du modèle. Nous pouvons déduire d'une telle étude qu'un modèle de type RANS, moins coûteux qu'une approche LES, permet de restituer les grandeurs caractéristiques moyennes de l'écoulement.

Le sillage loin de la grille

Loin en aval du dispositif de mélange, l'intensité de la turbulence et les vitesses de l'écoulement transverse sont potentiellement faibles et les flux de chaleur élevés. Il est donc important de simuler l'écoulement sur toute la longueur du faisceau entre deux grilles. Sur la figure 184, les valeurs expérimentales montrent une réorganisation de l'écoulement selon une direction à 135° . Ce comportement n'est pas restitué par le modèle RANS dont la solution conserve une direction principale selon une diagonale à 45° . La vitesse de l'écoulement transverse est seulement réduite en amplitude. Dans cette zone où la turbulence est fortement anisotrope les modèles fondés sur la théorie de viscosité linéaire turbulente ne sont pas adaptés.

Dans les calculs LES, l'écoulement s'est effectivement réorganisé en créant un mouvement circulaire autour du barreau central et en créant de grandes structures. Cependant, nous ne retrouvons pas le motif d'écoulement issu de l'expérience, malgré la capacité théorique d'une telle approche à simuler correctement une turbulence anisotrope. Ce point s'explique peut-être par une description insuffisamment précise de la géométrie réelle des ailettes. Il est intéressant de souligner que le même type de réorganisation de l'écoulement loin en aval des grilles de mélange a été mis en évidence expérimentalement sur d'autres essais.

Pour conclure sur les analyses réalisées sur les essais AGATE, nous sommes en mesure de calculer assez précisément l'écoulement sur une longueur partielle du faisceau,

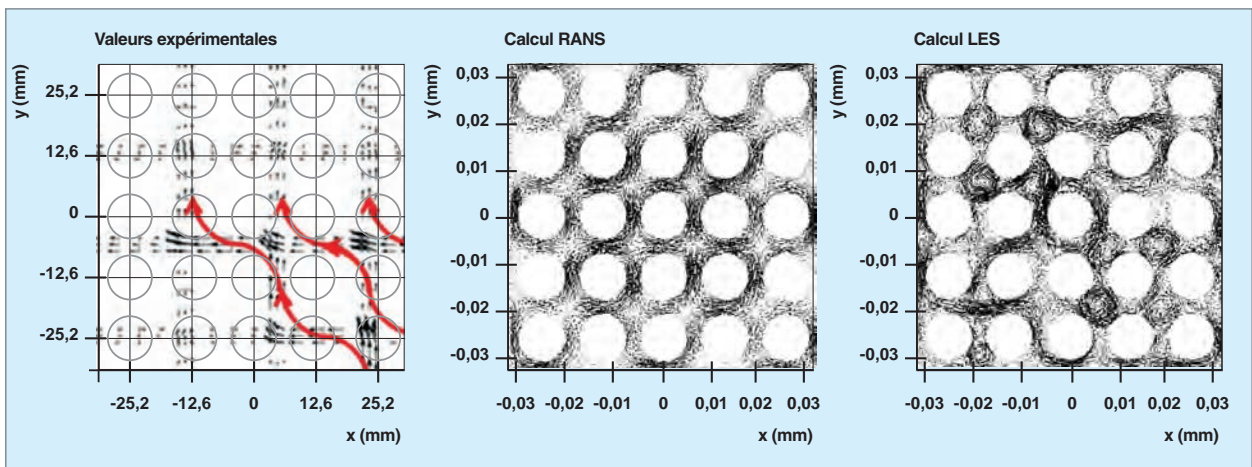


Fig. 184. Expérience AGATE. Projection du champ de vitesse dans un plan transverse à l'écoulement principal, dans la zone d'Amortissement (c'est-à-dire à une cote verticale $z=34$ Dh).

dans les zones d'advection et de réorganisation. Les données expérimentales sont insuffisantes pour analyser l'écoulement dans la zone d'amortissement : géométrie précise des ailettes, distribution des bossettes et raideurs, topologie de l'écoulement en amont de la grille, placement de la grille dans la veine.

Conclusion

Que ce soit pour la sûreté des réacteurs existants ou la conception de nouveaux réacteurs nucléaires, la maîtrise de la thermohydraulique des écoulements dans les assemblages combustibles est d'une importance majeure. La simulation numérique de l'écoulement dans les faisceaux de tubes en présence de grilles de mélange et des échanges thermiques entre le fluide caloporteur et les gaines combustibles constitue un véritable challenge. Des résultats numériques pertinents sur une partie du domaine d'intérêt commencent à être obtenus. Néanmoins, une grande marge de progrès est dès à présent identifiée :

- Du point de vue de la compréhension de la physique, dont l'amélioration contribue au développement de modèles de turbulence plus prédictifs ;
- sur les méthodes numériques, qui se doivent de gagner en précision et robustesse ;
- sur la modélisation des échanges thermiques entre le fluide et le solide ;
- sur le parallélisme massif, dont une exploitation optimale rend possible la prise en compte d'une géométrie de plus en plus réaliste.

Pour finir, des expériences finement instrumentées sont indispensables pour étudier des phénomènes locaux complexes et valider les codes de CFD. Différents moyens expérimentaux sont disponibles au CEA, comme la soufflerie Transat, spécifiquement conçue pour la validation du code TrioCFD.

Anne BURBEAU et Ulrich BIEDER,
Direction des énergies

► Références

- [1] S. BENHAMADOUCHE, *Pressure drop predictions using CODE_SATURNE in nestor CFD benchmark*, NURETH-16, 2015.
- [2] P. SAGAUT, *Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible*, Springer, Mathématiques & Applications 30, 1998.
- [3] F. NICOUD et F. DUCROS, "Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity", *Flow Turbul. Combust.*, vol. 62, p. 183-200, 1999.
- [4] T. FORTIN, « Une méthode d'Éléments Finis à décomposition L2 d'ordre élevé motivée par la simulation d'écoulements diphasiques bas Mach », 2006.
- [5] U. BIEDER, G. FAUCHET et C. CALVIN, "High performance Large Eddy Simulation of turbulent flows around PWR mixing grids", chez Proceedings of 16th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC 2014) – First International Workshop on HPC-CFD in Energy/Transport Domains., Paris, France, 2014.
- [6] C. BERNARDI et F. HECHT, "More pressure in the Finite Element Discretization of the Stokes problem", *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, vol. 34, n° 15, pp. 953-980, 2000.
- [7] H. LACOVIDES, A. LAUNDER et A. WEST, "A comparison and assessment of approaches for modelling flow over inline tube banks", *Int. J. Heat Fluid Flow*, vol. 49, pp. 69-79, 2014.
- [8] P.-E. ANGELI, U. BIEDER et G. FAUCHET, "Overview of the CFD code TrioCFD: main features, V&V procedures and typical applications to nuclear engineering", chez NURETH-16, 2015.

Modéliser le climat

Introduction

Modéliser le climat consiste à développer une représentation numérique virtuelle de la terre et de son climat. Le modèle répond à plusieurs objectifs. Il permet d'étudier la physique des enveloppes superficielles de la terre (atmosphère, océans, glaces, surfaces continentales). Il est un outil pour comprendre comment les interactions entre ces enveloppes déterminent les climats dans le passé comme pour le futur. Enfin, il aide à anticiper le changement climatique. Les échelles de temps concernées s'étendent de celle des événements météorologiques jusqu'à plusieurs milliers d'années ; les échelles spatiales vont de la vision intégrée à l'échelle planétaire jusqu'à des descriptions régionales ou locales.

La hiérarchie de modèles de climats

Comme dans toute discipline, il existe une hiérarchie de modèles allant des modèles conceptuels, en passant par des modèles de processus, jusqu'à des modèles offrant une représentation tri-dimensionnelle du système atmosphère – surfaces continentales – océan-glace en interaction avec un

niveau de détail de plus en plus fin, décrivant des échelles de temps et d'espace de plus en plus petites (fig. 185). Les modèles conceptuels sont le plus souvent des modèles d'équilibre radiatif de la terre comprenant un petit nombre de variables : concentration de l'atmosphère en gaz à effet de serre, albédo de la terre, température moyenne. Ils permettent, par exemple, de montrer que l'instabilité des calottes polaires est susceptible de produire des oscillations climatiques à des périodes de plusieurs dizaines de millénaires. Les modèles de complexité intermédiaire ont une description bi-dimensionnelle de l'océan et l'atmosphère (latitudinale et verticale). Ils sont aujourd'hui capables de simuler la réponse du système climatique aux variations lentes de l'orbite terrestre (périodicités de Milankovitch). Les modèles de processus ne traitent pas le système climatique complet, mais seulement une ou des sous-parties. Ils permettent, par exemple, d'étudier l'évolution d'un nuage, et d'analyser son interaction avec le rayonnement ou avec la chimie atmosphérique.

Le choix d'un modèle dépend de la question posée et, pour les simulations, d'un compromis entre le niveau de réalisme recherché et la puissance de calcul disponible.

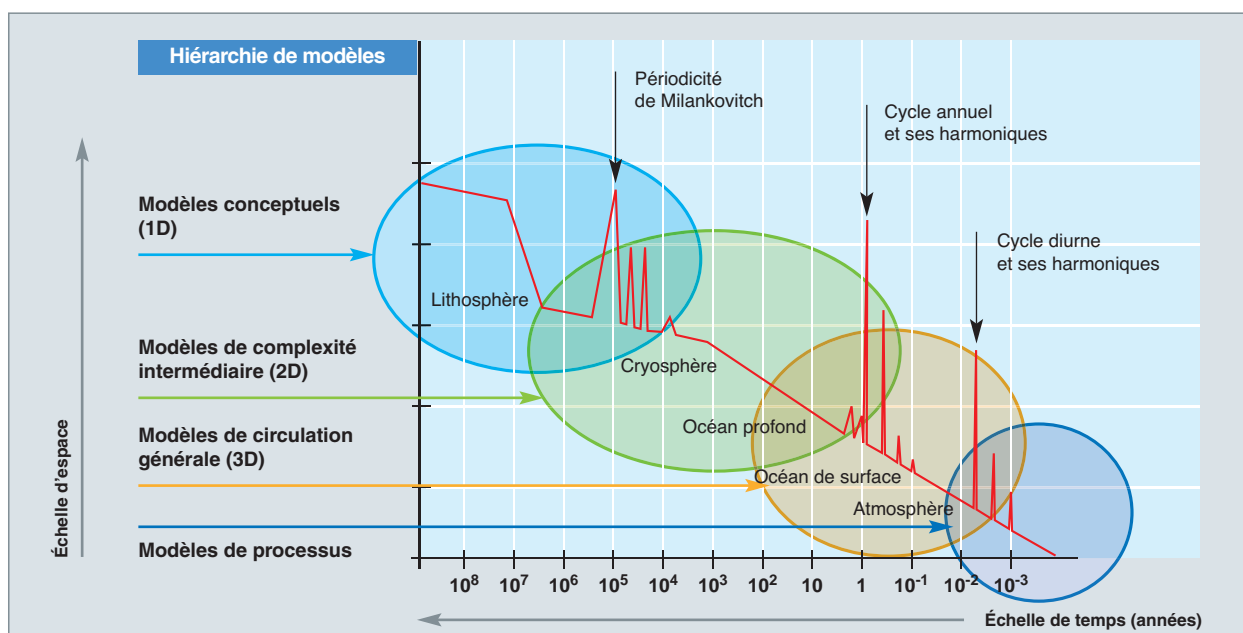


Fig. 185. Caractérisation de la hiérarchie de modèles permettant d'étudier les caractéristiques des circulations océaniques et atmosphériques. Les modèles les plus élaborés concernent les échéances (axe des abscisses en années) les plus courtes.

Ce chapitre se concentre sur les modèles de circulation générale (MCG) et les modèles du système terrestre (ESM), dont l'histoire a évolué en parallèle avec les modèles météorologiques et la puissance de l'ordinateur. Il décrit les différents processus mis en jeu et leurs interactions. Il aborde successivement la physique représentée dans les modèles, la façon de réaliser les simulations, et différentes facettes de l'évaluation de la capacité des modèles à représenter les caractéristiques du climat et leurs variations.

Les modèles numériques utilisés par les climatologues sont proches de ceux de la prévision météorologique. Ils calculent sur un maillage la température de l'air et de la mer, les vents, le contenu en eau vapeur, liquide ou solide, le rayonnement solaire, etc. Mais l'échéance d'une prévision météo est au maximum d'une dizaine de jours, et l'évolution de certains réservoirs plus lents peut être négligée. Les modèles climatiques doivent intégrer les courants océaniques, la végétation, le cycle du carbone (dans la végétation et la biologie marine) et parfois de la chimie de l'atmosphère et les calottes glaciaires. Ils sont alors appelés « modèles du système terrestre ». Ils sont utilisés pour les prévisions saisonnières, décennales et centennales. Ces dernières sont à la base pour les négociations internationales (comme par exemple la COP, Conférence des Parties de la Convention-cadre des Nations Unies sur les changements climatiques).

Équations et hypothèses

Les modèles de circulation générale sont fondés sur un système d'équations appelées « équations primitives ». Ces équations sont dérivées de la mécanique des fluides géophysiques et prennent comme point de départ les **équations de Navier-Stokes*** dans un environnement en rotation. Comme pour tout problème mécanique, elles comprennent les équations du mouvement dans les trois dimensions de l'espace, ainsi que la thermodynamique du système considéré. Elles traduisent les lois physiques fondamentales de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Elles encodent également la conservation des traceurs transportés à l'intérieur du fluide, comme l'eau dans l'atmosphère ou le sel dans l'océan. Les forces agissant sur le fluide sont essentiellement le gradient de pression, la force de gravité et les forces de friction. Les propriétés des fluides géophysiques permettent quelques simplifications par rapport au système général de Navier-Stokes. La première est que la profondeur de l'océan ou de l'atmosphère est très petite au regard du rayon terrestre, ce qui permet de faire l'approximation de couche mince et de considérer que la gravité est constante sur la verticale. L'équation d'état de l'atmosphère en tout point est déterminée par la pression, la température et la densité. L'atmosphère est considérée comme un gaz parfait, ce qui permet de relier directement sa densité à la température. L'océan est approximé comme un fluide incompressible, mais sa densité dépend de façon non linéaire de la température et de la salinité.

Le système climatique

Planète du système solaire, la terre tourne sur elle-même et décrit une ellipse autour du Soleil. L'axe de rotation de la terre est incliné, par rapport à la normale au plan de l'ellipse (plan de l'écliptique). Cette inclinaison crée l'alternance des saisons. La terre est entourée par une enveloppe gazeuse, l'atmosphère. Elle est recouverte sur 71 % de sa surface par des océans, d'une profondeur moyenne de 3 800 m. Dans les hautes latitudes et altitudes, la surface (sol ou mer) est éventuellement couverte de neige ou de glace. De la végétation recouvre une large fraction des continents.

La quasi-totalité de l'énergie de la machine climatique provient du soleil. Celui-ci émet de l'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique, dans l'ultraviolet, le visible et le proche infrarouge. Au sommet de l'atmosphère, il arrive à la terre un flux solaire de $1\,360\text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$ pour une surface perpendiculaire aux rayons du soleil. Compte tenu de la sphéricité de la terre, le flux reçu par une surface au sol est maximum dans les régions où les rayons du soleil arrivent perpendiculairement à la surface à midi, dans la zone inter-tropicale, et minimum aux hautes latitudes. Cette disparité géographique d'énergie reçue va être en partie compensée par le fonctionnement de la machine climatique (fig. 186).

Le contraste thermique va engendrer des différences de densité dans les fluides, atmosphère et océans. D'où des forces s'exerçant au sein de ces fluides, forces qui vont entraîner des mouvements. La terre étant en rotation sur elle-même, ces mouvements des fluides seront soumis aux forces de Coriolis. Ils seront affectés par le relief de la surface et contraints par les positions des continents.

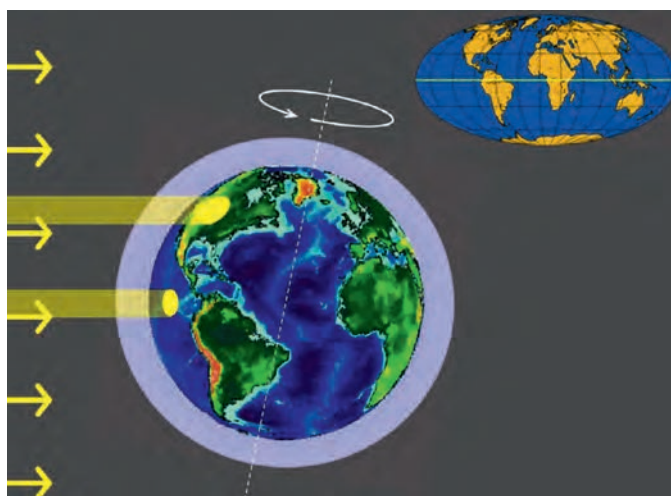


Fig.186. La terre recouverte à 71 % d'eau, baignant dans l'atmosphère. La mappemonde en haut à droite met clairement en évidence la disparité entre les deux hémisphères concernant la répartition des continents, qui va jouer un rôle important dans la répartition des grands types de climat et les évolutions du climat global [1].

La terre reçoit l'énergie du soleil sous forme de rayonnement électromagnétique. Elle en renvoie directement vers l'espace une partie variable suivant la réflectivité de la surface (albédo). Cet albédo est élevé sur les nuages, très variable à la surface du globe, selon la nature de cette surface : faible sur les océans ou sur les forêts, particulièrement élevé sur les surfaces enneigées ou englacées. La fraction de l'énergie incidente qui n'est pas rediffusée est absorbée et transformée en chaleur. La terre se refroidit par émission de rayonnement électromagnétique, essentiellement infrarouge compte tenu de la température de la terre, la seule forme d'énergie susceptible de s'échapper vers l'espace. La température moyenne de la terre sera stable si le bilan, énergie reçue moins énergie sortante, moyenné sur une longue période (30 à 100 ans), est nul. Le climat s'établit naturellement pour assurer cet équilibre entre énergie incidente et

énergie sortante. Cet équilibre est global. Localement, l'excès ou le déficit du rayonnement électromagnétique avec l'espace est en équilibre, sur une échelle de temps longue, avec le transport de chaleur par l'océan et l'atmosphère.

Les modèles de climat

La modélisation climatique, tout comme la prévision du temps, doit son apparition au développement spectaculaire des ordinateurs au cours du xx^e siècle. Dans un ouvrage visionnaire, *"Weather Prediction by Numerical Process"*, l'Anglais L.F. RICHARDSON expose dès 1922 comment les tendances des variables atmosphériques (température, vents etc.) peuvent être calculées en différents points répartis dans l'espace, en substituant aux équations différentielles décrivant la circulation atmosphérique un jeu d'équations fondées

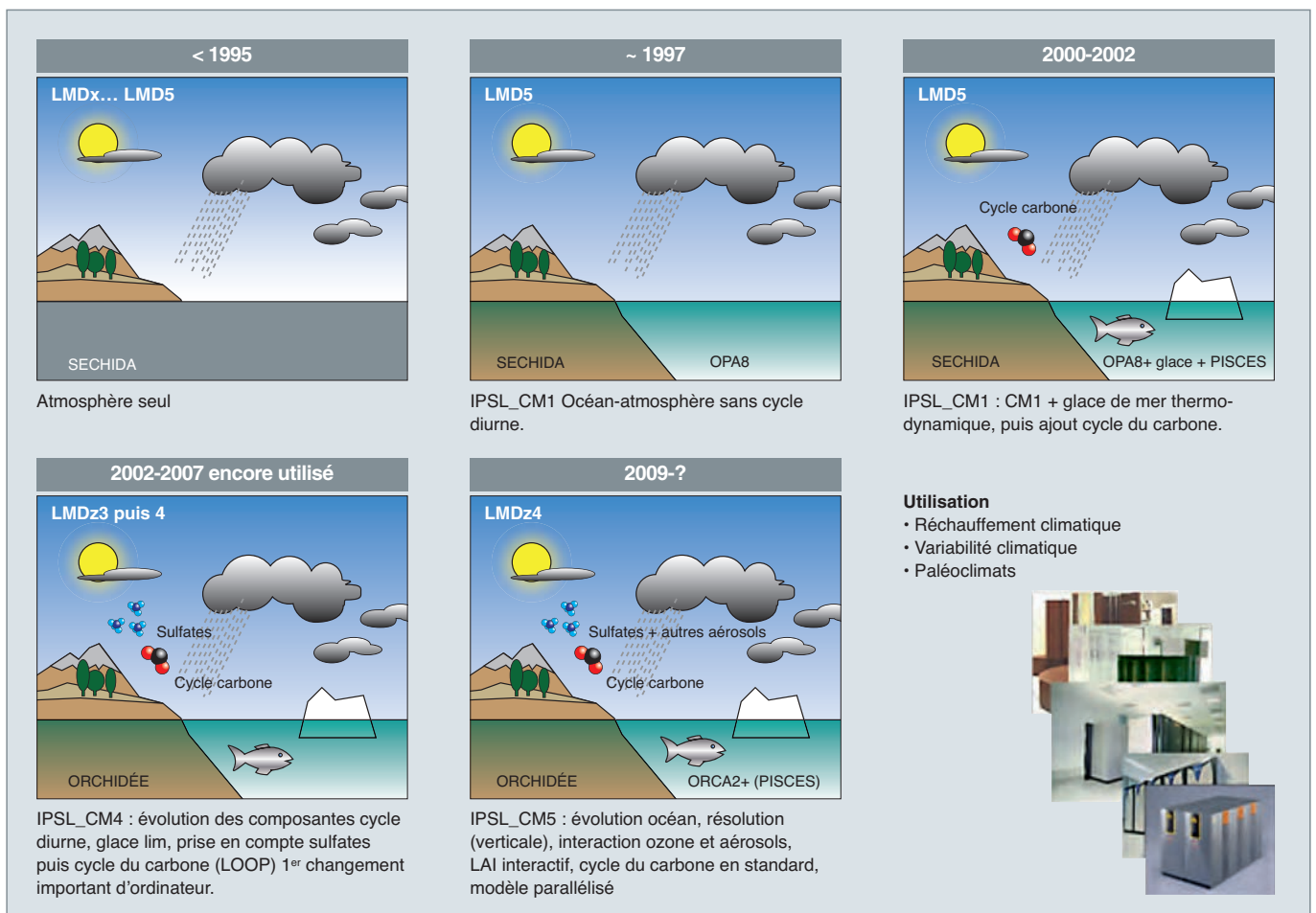


Fig. 187. Représentation schématique de l'évolution du modèle de climat de l'Institut Pierre-Simon de Laplace depuis les années 90. La première version considère seulement l'atmosphère. Les températures de surface de la mer sont imposées. Le modèle de surface continental est déjà relativement sophistiqué. Certains processus dans l'atmosphère, comme la convection, sont représentés de façon relativement simple. Les vignettes suivantes montrent les complexifications successives, par les processus représentés dans les différents milieux, mais aussi par les couplages complémentaires. La version actuelle incorpore l'ensemble des composantes et leurs couplages via les cycles de l'énergie, de l'eau et de différents cycles biogéochimiques comme le cycle du carbone. Notons qu'en même temps les interactions entre les composantes, mais également la représentation des interactions entre les différents processus à l'intérieur des différentes composantes, ont gagné en réalisme.

sur des différences algébriques. Il ira jusqu'à proposer une méthode de calcul parallèle à la main. Mais il aurait fallu 64 000 personnes pour effectuer ces calculs dans le temps requis pour les prévisions météorologiques. Ce n'est qu'en 1950 que l'Américain J.G. CHARNEY fait la première prévision du temps en utilisant un ordinateur. Dans les années 60, les prévisions météorologiques deviennent progressivement opérationnelles dans de nombreux pays.

Démarrées dans les années 70 avec des modèles d'atmosphère, les simulations climatiques n'ont depuis cessé de croître en réalisme au prix d'une complexité accrue, en considérant non seulement l'atmosphère mais aussi ses couplages avec les autres composantes du système climatique (voir la figure 187). Les années 90 ont ainsi vu le développement dans tous les groupes de modélisation de modèles couplés océan-atmosphère, ces deux fluides étant indispensables pour redistribuer l'énergie et l'eau des zones sources aux zones puits. Les autres composantes du système climatique : sol et végétation, glace de mer, se sont à leur tour complexifiées ou ont été ajoutées en tant que composantes à part entière à ces modèles de climat, comme illustré figure 187 pour le modèle de climat développé à l'Institut Pierre-Simon de Laplace (IPSL). Le vocabulaire s'est ainsi transformé. On ne parle presque plus de modèles

de climat, mais de modèles du système terre. Une représentation de la chimie, des aérosols, et des différents cycles biogéochimiques est en effet venue compléter le puzzle. Ils permettent de considérer le climat et ses variations sous l'impact de différentes perturbations externes, qu'elles soient d'origine naturelle telles que la modulation des paramètres orbitaux de la terre, la variation de la constante solaire (le flux de rayonnement venant du soleil), les éruptions volcaniques... ou anthropiques telles que les émissions de gaz à effet de serre, les aérosols issus de la combustion ou de l'agriculture, l'utilisation des terres...

Des composantes de plus en plus fines pour les modèles de climat

Le climat est la distribution statistique des paramètres dynamiques et thermodynamiques de l'atmosphère terrestre, de l'océan, mais aussi des caractéristiques environnementales et en particulier celles de la végétation. Les transferts de chaleur et d'eau entre l'atmosphère et la surface continentale (végétation et sol) sont ainsi une composante importante du climat (fig. 188). Les modèles de surface continentale résolvent l'équation de diffusion de la chaleur et de transfert de l'eau dans le sol. Le niveau de complexité de la représentation de l'hydrologie est variable d'un modèle à l'autre.

Historiquement, cette hydrologie était représentée par un modèle de seau qui se remplit ou se vide en fonction des flux de précipitation et d'évaporation. Ce seau s'est complexifié pour tenir compte de réservoirs de surface et de fond et de leurs temps caractéristiques, pour devenir dans certains modèles un véritable continuum hydrologique sous maille dans le modèle de sol.

Une complexification supplémentaire est aussi venue de l'introduction des interactions avec la végétation (fig. 188). La végétation est représentée dans la plupart des modèles actuels par une mosaïque de types de végétation dans une maille, chaque type ayant ses propres caractéristiques d'albédo, de rugosité et de capacité à pomper l'eau du sol. Les évolutions saisonnières des caractéristiques de la végétation sont calculées par le modèle grâce à des paramétrisations de la phénologie des plantes, rendues possibles par la représentation du cycle du carbone dans les modèles de surface. L'effet du carbone sur les plantes module l'ouverture des stomates et a une

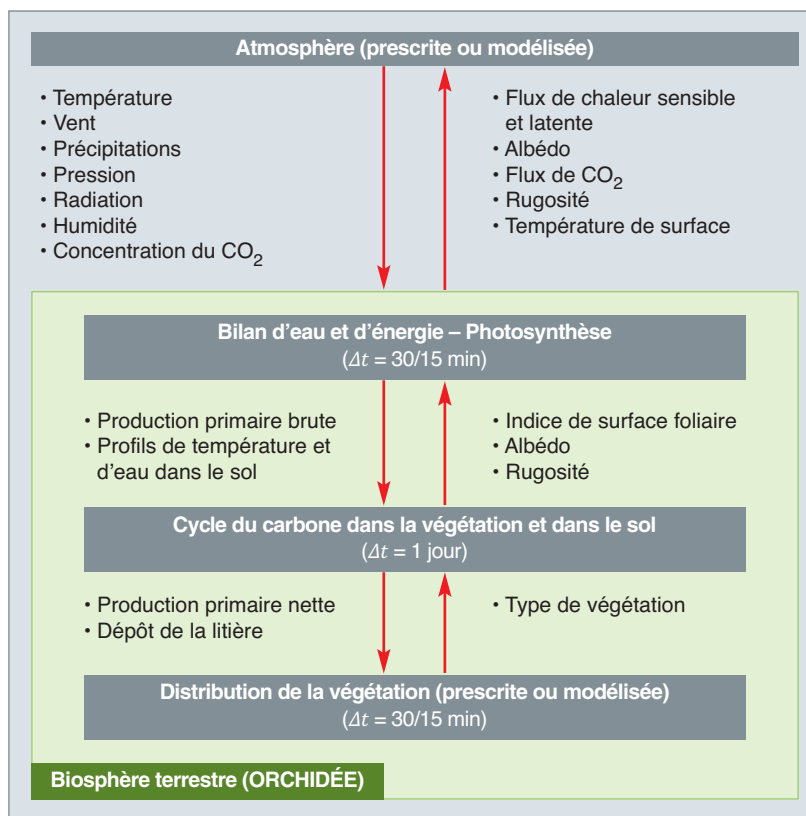


Fig. 188. Le modèle ORCHIDÉE est un des maillons du modèle de climat de l'Institut Pierre-Simon de Laplace. Les divers processus pris en compte par le modèle sont indiqués sur cette figure [1].

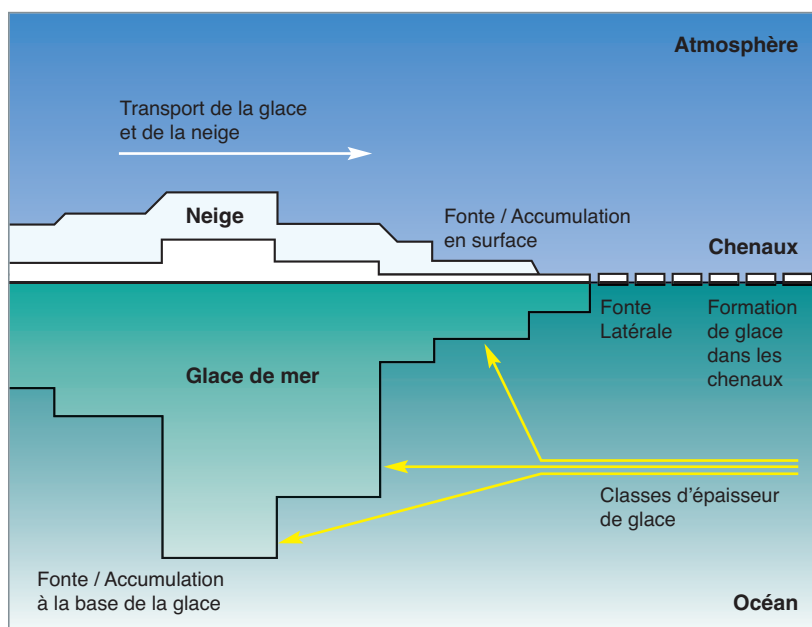


Fig. 189. Représentation schématique d'un modèle de formation et de fonte de glace de mer [1].

répercussion sur l'évapotranspiration. Certains modèles incorporent également une végétation dynamique, c'est-à-dire que les espaces couverts par un type de végétation varient dans le temps en fonction des conditions environnementales, introduisant des boucles de rétroactions entre le climat et la végétation.

La glace de mer *via* son albédo et son rôle d'isolant entre l'océan et l'atmosphère est une autre composante qui joue un rôle important dans l'évolution du climat et de sa variabilité décennale. Les premières représentations incluses dans des modèles globaux étaient très simplifiées et mettaient l'accent sur la diffusion de la chaleur au travers de la glace et sur l'albédo de la glace qui engendre de rétroactions rapides aux hautes latitudes. Les modèles de glace de mer (fig. 189) représentent actuellement cette composante sous forme d'un milieu visco-plastique ayant une distribution des types de glace. Les déplacements de la glace se déterminent en fonction des courants et du vent. Les modèles les plus évolués considèrent les chenaux d'eau qui fracturent la glace, les différents types de glaces et l'apport de pack par la circulation océanique. Les échanges de flux avec la surface et l'océan sont paramétrés et certains modèles incorporent également les processus thermodynamiques liés aux inclusions de saumures.

Le couplage de la chimie et des aérosols dans les modèles de climat est encore récent, même si ces facteurs font depuis longtemps l'objet d'études à partir de couplages entre les modèles de transport atmosphérique et les modèles de chimie-aérosols. Une des raisons est que, pour représenter

correctement les différentes interactions chimiques, ces modèles doivent considérer de nombreux composés transportés par la circulation atmosphérique entre les différents points de grille. Le calcul du transport de ces traceurs est coûteux en temps de calcul, ce qui ne permet pas de faire facilement des simulations longues. Des versions simplifiées ont été développées, qui prennent en compte l'ozone stratosphérique et troposphérique, ainsi que différents types d'aérosols et surtout leurs interactions avec le rayonnement solaire et les nuages.

La figure 187 montre comment sont intégrées progressivement dans les modèles de nouvelles composantes physiques. Chaque composante ajoute des degrés de liberté, et il faut multiplier les simulations pour explorer et déterminer la marge d'incertitude.

Le couplage entre les composantes

Les différentes composantes d'un modèle de climat, atmosphère, océan, surface continentale sont développées de façon autonome. Elles sont couplées dans les modèles de climat *via* les différents flux de quantité de mouvement, de chaleur et d'eau aux interfaces entre les modèles (fig. 190). Les pas de temps de couplage entre les modèles dépendent des vitesses relatives de variations entre les milieux. Ainsi, dans le cas de l'océan et de l'atmosphère, la température de surface de l'océan varie moins vite que la température de l'air et les flux turbulents. En général, la température de la mer est transmise à l'atmosphère une à plusieurs fois par jour, alors que les flux turbulents sont calculés à tous les pas de temps de la physique atmosphérique, moyennés et transmis à l'océan en retour.

Il faut aussi s'assurer que les bilans de chaleur et d'eau sont fermés entre les modèles. Ainsi, des schémas représentant le routage de l'eau entre le continent et l'océan sont incorporés aux modèles. Suivant les modèles, il s'agit de modules inclus dans la composante de surface continentale ou d'un modèle de routage autonome. Cette fermeture est indispensable pour éviter les dérives de salinité de l'océan, voire de niveau marin.

Pour les surfaces continentales, les variations de températures du sol à l'échelle diurne sont extrêmement importantes et les couplages se font en général à chaque pas de temps physique des modèles (*i.e.* quelques minutes). De même la glace a un temps de réaction rapide et pour être stable, le couplage, même s'il ne représente pas le cycle diurne, doit

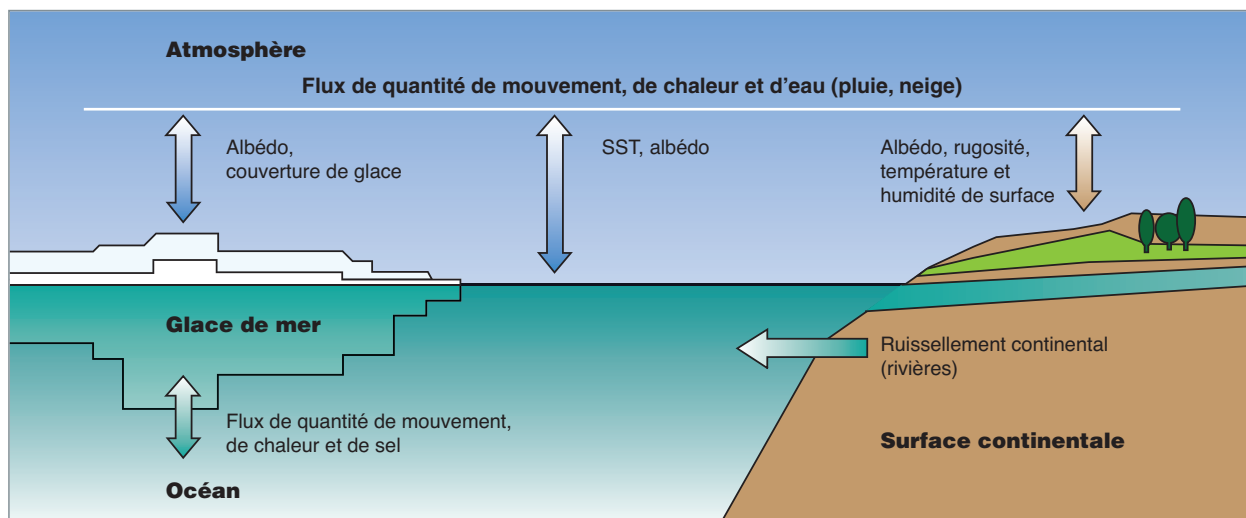


Fig. 190. Représentation schématique du couplage entre les composantes du système climatique tel qu'il est mis en œuvre dans le modèle de climat de l'Institut Pierre-Simon de Laplace [1].

pouvoir faire fluctuer les flux à la surface de la glace à un pas de temps inférieur à la journée. Ces contraintes physiques doivent être prises en compte dans le processus de couplage en fournissant, outre les variables d'interfaces, des variables complémentaires permettant d'ajuster les flux entre deux pas de temps de couplage. De même les interpolations entre les grilles des modèles doivent être conservatives, ce qui implique d'adopter des schémas d'interpolations spécifiques.

La course à la résolution

Outre la prise en compte de plus en plus fine des différentes composantes du système climatique et de leurs couplages, un autre front de développement des modèles de climat est celui de la résolution. La figure 191 montre une vue du modèle en Europe à 87,5 km de résolution (a) et dans un modèle à 30 km résolution (b). Une description détaillée de l'orographie peut mieux représenter le climat local. L'effet de la vallée du Rhône sur le Mistral, par exemple, est beaucoup mieux représenté à la résolution fine.

Mais l'effet sur le climat mondial est également crucial. L'Himalaya joue un rôle majeur sur la mousson indienne. Les montagnes Rocheuses en Amérique du nord modulent les trains de dépressions qui traversent l'Atlantique et arrivent en Europe.

La figure 192 montre un résultat de simulation du climat de la ceinture tropicale à la résolution de 9 km. Une telle résolution n'est pas possible aujourd'hui à l'échelle mondiale pour des études centennales. Mais elle permet d'explorer l'effet de la représentation explicite de petites échelles sur le climat, qui seront mises en œuvre dans les modèles du futur. En particulier, il devient possible d'étudier l'évolution des

événements extrêmes, tempêtes et sécheresses. Un objectif à moyen terme est d'atteindre une résolution d'environ 1 km afin de résoudre les échelles de la convection atmosphérique et celle de la formation des nuages.

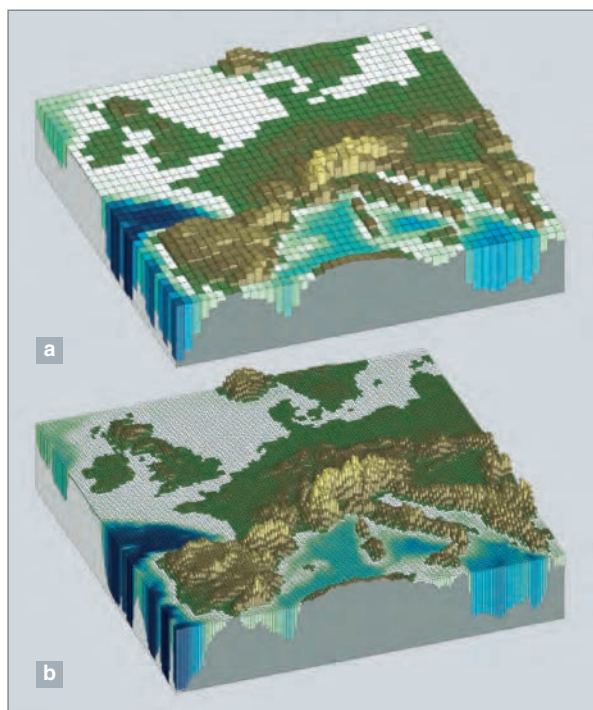


Fig. 191. Résolution horizontale et topographie. (a) L'Europe à la résolution 87,5 x 87,5 km, qui est l'état de l'art actuel des modèles système terre. (b) L'Europe à 30 x 30 km. La topographie est beaucoup mieux représentée, et les modèles à cette résolution affinent l'effet de la topographie sur le climat tant local que mondial. (5th IPCC assessment report – AR5 – *Climate Change 2013: The Physical Science Basis*, Figure 1.4).

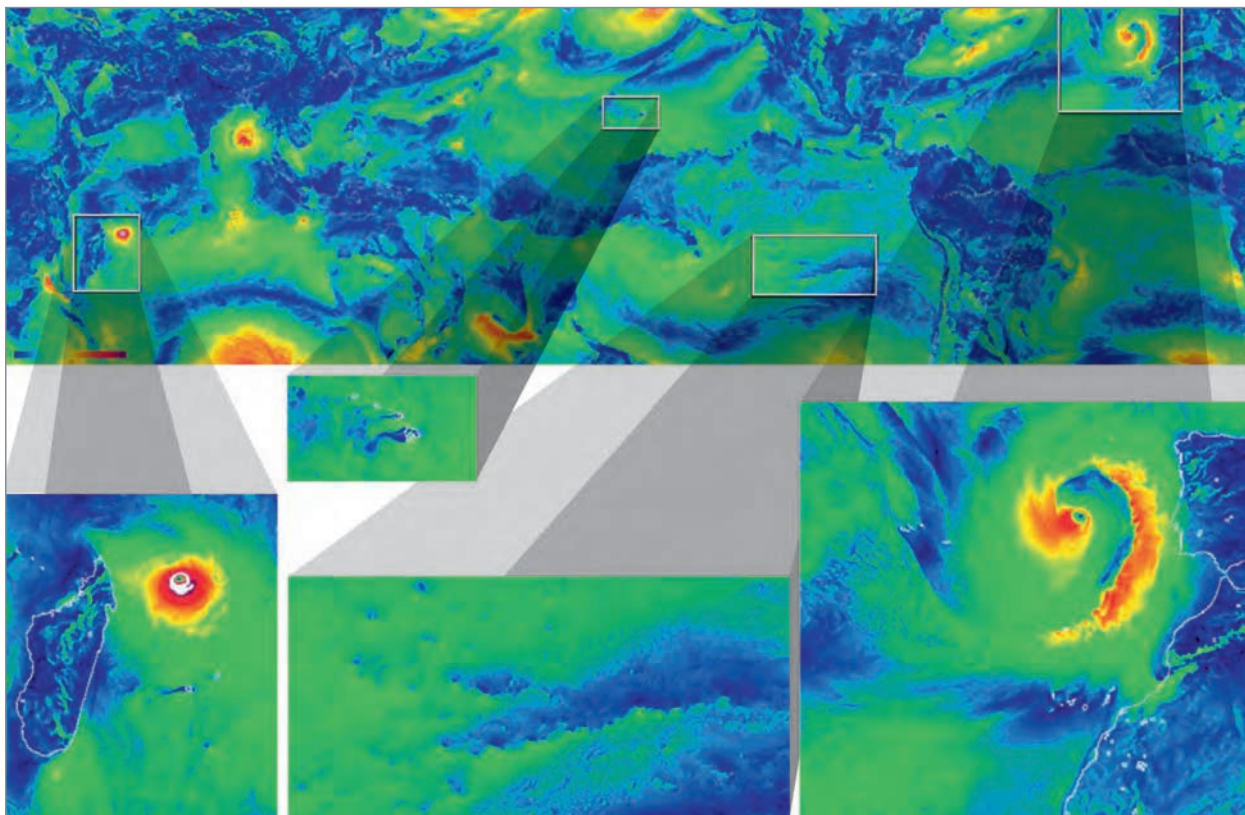


Fig. 192. Modélisation à haute résolution (9 x 9 km) de la ceinture tropicale. L'image montre la vitesse du vent à 10 m au-dessus du niveau de la mer. On y voit les cyclones, l'effet des îles, les structures mésoéchelles et les fronts. (Image Sébastien Masson – ANR Pulsation).

Le système climatique est chaotique

Dire que le système climatique est chaotique, c'est reconnaître que, si on modifie, même très légèrement les conditions initiales, la trajectoire du système va rapidement être très différente (fig. 193). Cette caractéristique est une propriété fréquente des systèmes dynamiques, dont le système climatique est un exemple.

C'est ce qui a fait dire à Lorenz (météorologue au MIT) : « Le battement des ailes d'un papillon au Brésil déclenche-t-il une tornade au Texas ? ». Un écart minime peut conduire à terme une situation complètement différente.

Les trajectoires d'un système climatique ayant des états initiaux ne sont cependant pas complètement aléatoires. Elles s'organisent autour d'un attracteur, comme le montre le panel de gauche de la figure 194. En revanche, si nous changeons les conditions aux limites, l'attracteur change, ce qui, pour notre problème, signifie que le climat change.

Cela explique pourquoi le météorologue ne peut pas faire de prévisions fiables au-delà de quelques jours : la connaissance de l'état initial est insuffisante, les mesures ne sont ni infiniment précises et exactes, ni infiniment proches dans le temps et dans l'espace. La situation est très différente pour

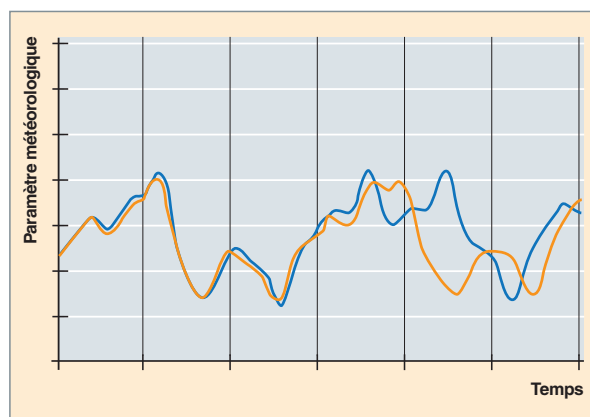


Fig. 193. Partant de deux conditions initiales très voisines, le système évolue d'abord de la même façon dans les deux cas. Au bout d'un temps assez court, les trajectoires se séparent pour devenir complètement différentes [1]. En météorologie, la séparation des trajectoires se fait en quelques jours, ce qui est très court pour un climatologue qui s'intéresse aux échelles de temps pluri-annuelles à pluri-séculaires. On doit alors analyser la statistique des trajectoires.

le climatologue : il s'intéresse non à la situation météorologique précise à une date précise, mais au climat, c'est-à-dire à l'ensemble des configurations météorologiques, précisément celui que va, à terme, balayer le système climatique, quelle que soit la situation initiale. Cette nécessité de balayer

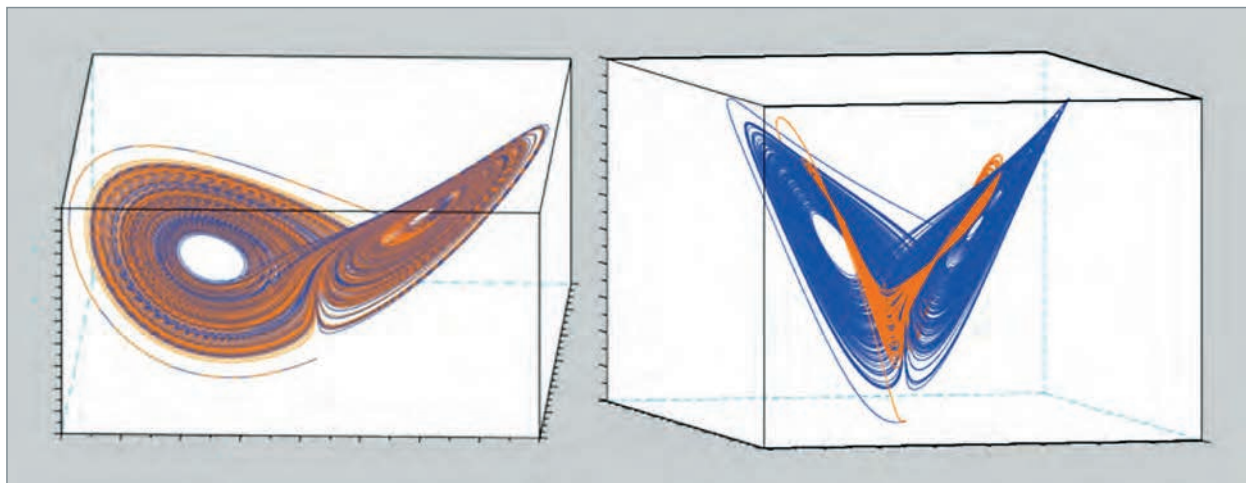


Fig. 194. Lorenz a montré en 1963 qu'un système d'équations différentielles à trois variables ou plus peut être, et est généralement, sujet à des comportements chaotiques. Sur chacune des deux figures, les trajectoires du système à trois variables (x , y , z) sont représentées ici dans un espace tridimensionnel. À gauche, les conditions initiales sont différentes pour la courbe en rouge et la courbe en bleu, mais les conditions aux limites sont identiques. Bien que constamment différentes, ces courbes s'organisent autour du même attracteur. À droite, les conditions aux limites sont différentes pour les deux courbes. De ce fait le domaine exploré est différent, le climat est modifié [1].

largement les histoires possibles du système climatique pour obtenir des moyennes statistiquement significatives oblige le climatologue à entreprendre des simulations sur des temps longs.

Le calcul haute performance pour les modèles de climats

Pourquoi la modélisation du climat nécessite du calcul haute performance

Comme nous l'avons vu plus haut, la modélisation du climat fait intervenir des processus physiques et chimiques complexes, portant sur un grand nombre de systèmes : continents, océan, atmosphère. Les processus en question sont intimement couplés, et les échelles de temps et d'espace peuvent être très différentes selon les processus. La simulation doit porter sur des temps longs, afin d'obtenir de bonnes moyennes sur les observables d'un système chaotique. L'évolution de la complexité et de la résolution de la modélisation du climat conduit donc à des calculs lourds, rendus possibles par la puissance croissante des superordinateurs (fig. 195). La modélisation du climat représente, de ce fait, un domaine d'application naturel du calcul haute performance.

La mise en œuvre du calcul haute performance dans le modèle de climat de l'Institut Pierre-Simon de Laplace

Le modèle couplé de l'IPSL est bâti par assemblage des différentes composantes du système climatique terrestre, dont les équations sont discrétisées sur des maillages pavant la sphère. Deux familles de maillages différentes sont utilisées pour l'océan et pour l'atmosphère. Cette distinction est motivée par des choix de schémas numériques pour la modéli-

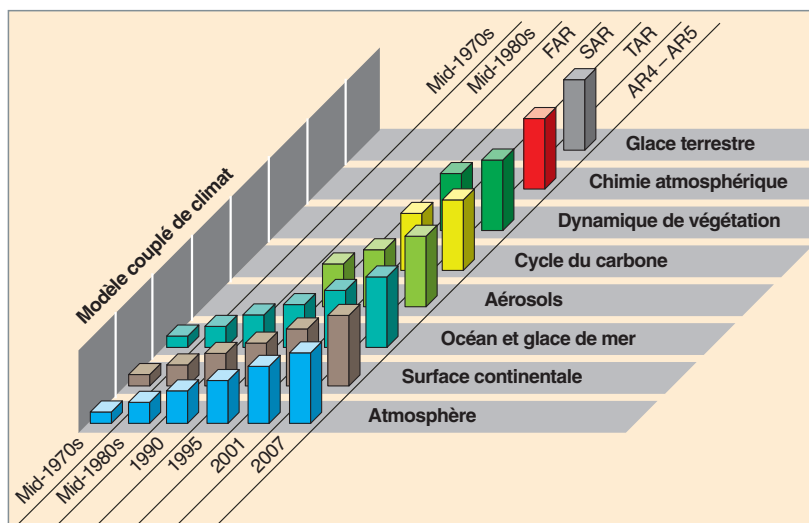


Fig. 195. L'intégration progressive des différentes composantes physiques dans les modèles du système terrestre. Dans chaque composante, la complexité des processus physiques représentés a augmenté avec le temps (représentée par la taille de cylindres). Durant la même période, la résolution a considérablement augmenté dans l'atmosphère à 500 km et 9 niveaux verticaux, à environ 100 km et 95 niveaux. (5^e rapport d'évaluation du GIEC – RE5 – Changement climatique 2013: *The Physical Science Basis*, Figure 1.3).

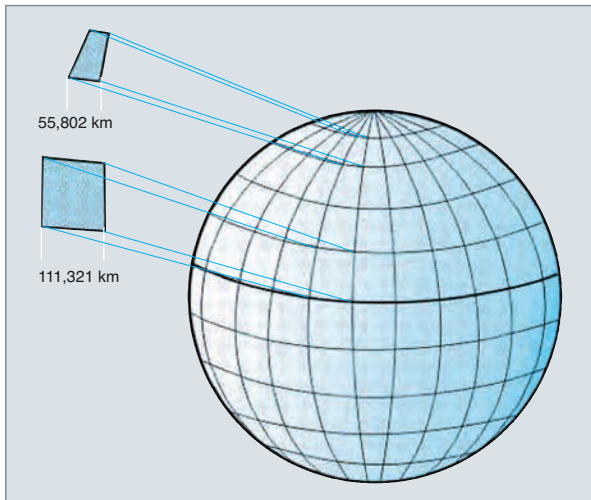


Fig. 196. Singularité aux pôles : plus on se rapproche des pôles, plus la taille des mailles diminue, rendant les schémas numériques instables par violation du critère CFL.

sation des deux systèmes et par la nécessité d'utiliser des résolutions spatiales et temporelles différentes suivant les modèles. Le coupleur OASIS est chargé d'opérer les échanges entre les modèles et d'interpoler les champs échangés d'un maillage vers l'autre. Dans les années 2000, la complexité de l'infrastructure informatique de ce modèle s'est accrue lorsqu'il a fallu paralléliser l'ensemble des composantes, afin d'anticiper le changement de paradigme architecture **vectorielle*** / architecture **scalaire*** massivement parallèle. Chaque famille de composantes a développé ses propres méthodes de parallélisme largement dictées par le maillage sous-jacent. En effet, le pavage de la sphère par un maillage régulier présente deux points singuliers aux pôles (fig. 196), qui rendent les schémas numériques insta-

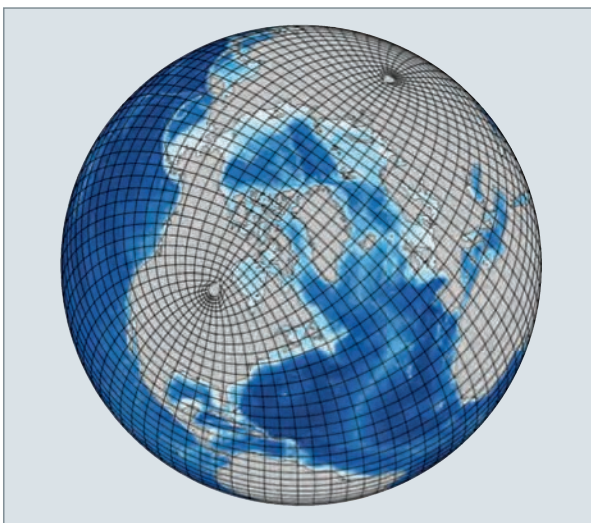


Fig. 197. Grille tripolaire : les codes océaniques peuvent s'affranchir des singularités polaires en les déplaçant sur les continents à l'aide d'une transformation conforme.

bles aux voisinages de ces points (violation des critères CFL*). Sur la grille océanique, à l'aide d'une transformation conforme, nous pouvons déplacer les points singuliers sur les continents (grille tripolaire, fig. 197), ce qui supprime *de facto* ces problèmes d'instabilité numériques. Sur la grille atmosphérique, comme nous calculons en chaque point du maillage, il est possible d'appliquer cette technique. Le schéma numérique est alors stabilisé en filtrant, dans l'espace réciproque, les ondes les plus rapides suivant les latitudes.

Ces différentes façons de traiter les points singuliers aux pôles impliquent des stratégies différentes pour la parallélisation des modèles. Pour la grille océanique, de manière classique, nous décomposons le maillage curvilinéaire en domaines horizontaux de taille équivalente répartis suivant les deux directions x et y . Pour échanger les données aux frontières des domaines, nous utilisons la bibliothèque MPI.

En revanche, pour la grille atmosphérique, le filtrage aux pôles ne permet pas une parallélisation efficace en décomposant le domaine sur les longitudes. Nous décomposons donc le maillage en découpant suivant une seule direction, sur les latitudes, ce qui implique une forte limitation de la **scalabilité*** du modèle (fig. 198). Pour compenser cela, nous rajoutons un niveau de parallélisme sur la verticale en mémoire partagée, en utilisant la technologie OpenMP : les différentes itérations des boucles de calcul sur les niveaux verticaux sont distribuées à chacun des **threads*** OpenMP s'exécutant au sein de chaque processus MPI (fig. 199).

De plus, nos modèles de climats ont été développés à l'origine pour des calculateurs vectoriels, et bien que ces calculateurs aient aujourd'hui disparu du paysage HPC, la struc-

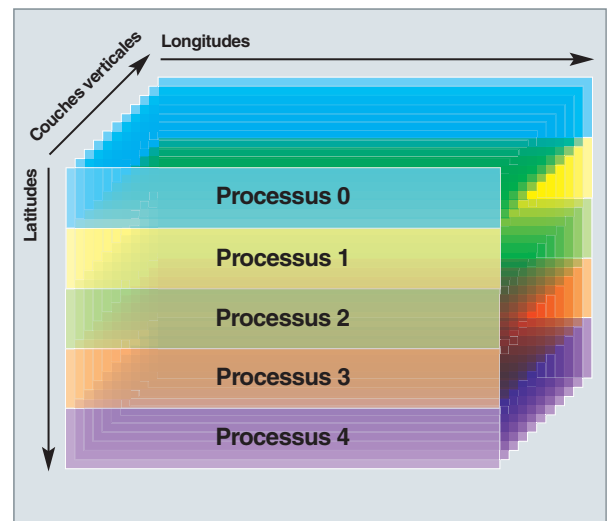


Fig. 198. Découpage MPI du modèle atmosphérique : le domaine des processus MPI est composé de plusieurs bandes de latitudes.

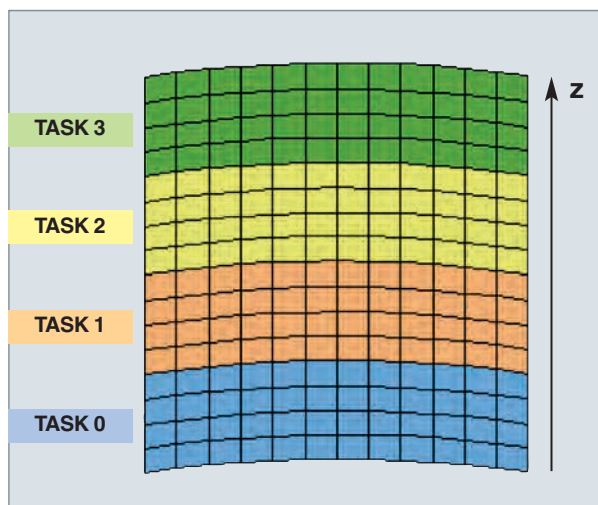


Fig. 199. Parallélisme OpenMP du modèle atmosphérique : les threads se partagent les itérations sur les boucles verticales.

ture vectorielle des boucles de calculs de nos modèles a été conservée. C'est un atout pour les performances, puisque les processeurs scalaires utilisent des unités vectorielles de plus en plus puissantes et il est généralement admis que les futures infrastructures de calcul ne franchiront pas la barre de l'**Exascale*** sans le paradigme **SIMD*** et la vectorisation.

En résumé les modèles mettent en œuvres quatre niveaux de parallélisme :

- Exécutions et couplages asynchrones des modèles *via* le coupleur OASIS-MCT ;
- parallélisme en mémoire distribuée (MPI) sur les domaines horizontaux ;
- parallélisme en mémoire partagée (OpenMP) sur les niveaux verticaux ;
- vectorisation des boucles de calculs.

Les résolutions des maillages des simulations climatiques sont relativement faibles comparées à d'autres domaines de la simulation numérique : par exemple, la résolution standard de notre modèle atmosphérique ($2^\circ = 200$ km) est de 144×142 mailles sur l'horizontale avec 39 ou 79 niveaux verticaux, pour lequel nous utilisons autour de 400 cœurs de calculs. Sur des résolutions plus fines, nous pouvons utiliser quelques milliers de cœurs (voir grand défi du CINES 2010). Néanmoins, le traitement des points singuliers aux pôles inhibe les performances à haute résolution, dû à l'augmentation du coût de calcul du filtrage, induisant aussi un important déséquilibre de charge entre les différents cœurs de calcul. Avec le modèle actuel sur grille régulière, nous savons qu'il sera difficile de dépasser les 10 000 cœurs de calcul (fig. 200).

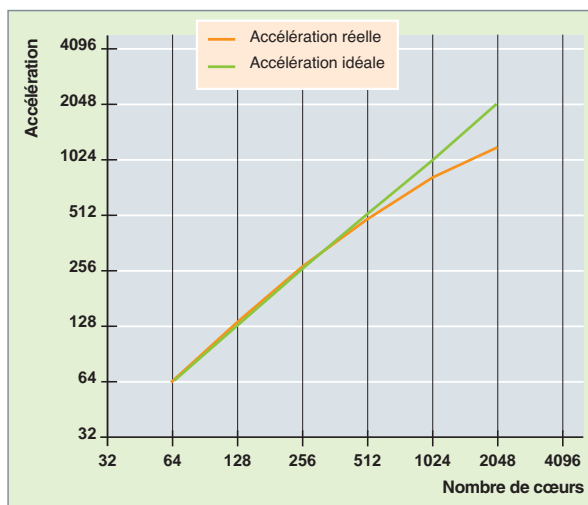


Fig. 200. Courbe d'accélération du modèle couplé de l'IPSL (grand défi du CINES 2010) jusqu'à 2 000 cœurs, pour une résolution de 30 km. Avec le modèle actuel, nous savons qu'il sera difficile de dépasser les 10 000 cœurs de calcul.

Pour aller plus loin : DYNAMICO, un pas vers l'Exascale

Dans le modèle couplé, l'essentiel du temps de calcul (80 %-90 %) est consommé par le code atmosphérique (LMDZ), la dynamique océanique étant beaucoup plus lente (pas de temps 20 fois plus longs). Pour diminuer les temps de restitution, il est nécessaire d'augmenter le nombre de cœurs et d'améliorer la **scalabilité*** du parallélisme du modèle. Pour cela, il faut s'affranchir du traitement aux points singuliers qui minent les performances du parallélisme. Le projet DYNAMICO (collaboration LMD/LSCE) a pour objectif le développement d'un nouveau cœur dynamique atmosphérique sur une nouvelle grille plus uniforme ne présentant pas de points singuliers et adaptée au parallélisme massif des futures architectures de calcul. Ce nouveau maillage est obtenu à partir du raffinement successif de l'icosaèdre (solide à 20 faces triangulaires), puis en prenant le maillage dual pour obtenir un pavage de la sphère composé d'hexagones et de 12 pentagones (fig. 201). Le schéma numérique « TRISK » (Thuburn *et al.*, 2010), utilisé pour résoudre les équations primitives, est une généralisation de nos schémas numériques pour les grilles non structurées, mélangeant des méthodes de volumes finis / différences finies sur une grille décalée, pour conserver les différents invariants nécessaires à la dynamique de l'atmosphère (masse, énergie/**enstro- phie***).

Le développement de ce nouveau modèle s'est effectué dès le départ en prenant en compte les contraintes liées au super-calcul. Pour des raisons de performance, nous avons choisi d'implémenter nos schémas sur un maillage semi-structuré plutôt que non structuré. Sur l'icosaèdre, cela s'obtient en joignant ensemble deux triangles principaux pour

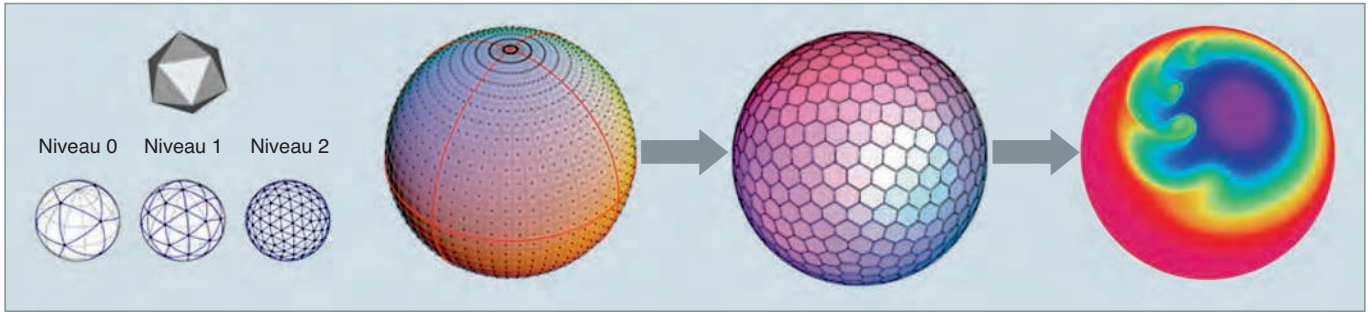


Fig. 201. Grille icosaédrique : la grille du code DYNAMICO est obtenu par raffinement successif de l'icosaédre (triangles), puis en prenant le maillage dual (hexagones). Nous obtenons ainsi un nouveau maillage uniforme pavant la sphère composé d'hexagones et 12 pentagones, s'affranchissant ainsi des points singuliers aux pôles.

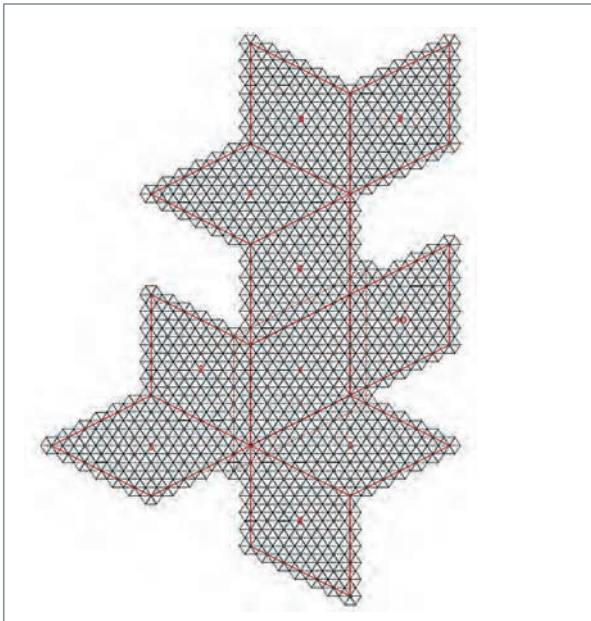


Fig. 202. Maillage semi-structuré de Dynamico, composé de 10 tuiles élémentaires en losange composée d'hexagones. La décomposition de domaine s'effectue en découpant chaque losange en sous-losanges.

former un losange. Nous obtenons donc 10 tuiles-losanges pavées d'hexagones. Cette structure présente plusieurs avantages : la structure des données sur un losange est représentée en mémoire par un tableau bidimensionnel, ce qui permet d'éviter les surcoûts d'indexation, et les données sont adressées de manière contiguë, ce qui permet de bénéficier de la localité des données et de conserver l'efficacité de la vectorisation. Par ailleurs, au niveau du parallélisme, la décomposition de domaines est beaucoup plus simple que pour un maillage complètement non structuré. Chaque losange, par découpages suivant les deux directions, est décomposé en sous-losanges (fig. 202 et 203).

L'implémentation du parallélisme s'effectue suivant quatre niveaux :

- Parallélisme MPI sur les domaines horizontaux (mémoire distribuée) : à chaque processus MPI est assigné plusieurs sous-losanges. Les échanges aux frontières entre processus s'effectuent à l'aide d'appels MPI.
- parallélisme OpenMP (mémoire distribuée) sur l'horizontale : chaque sous-losange d'un processus MPI est assigné

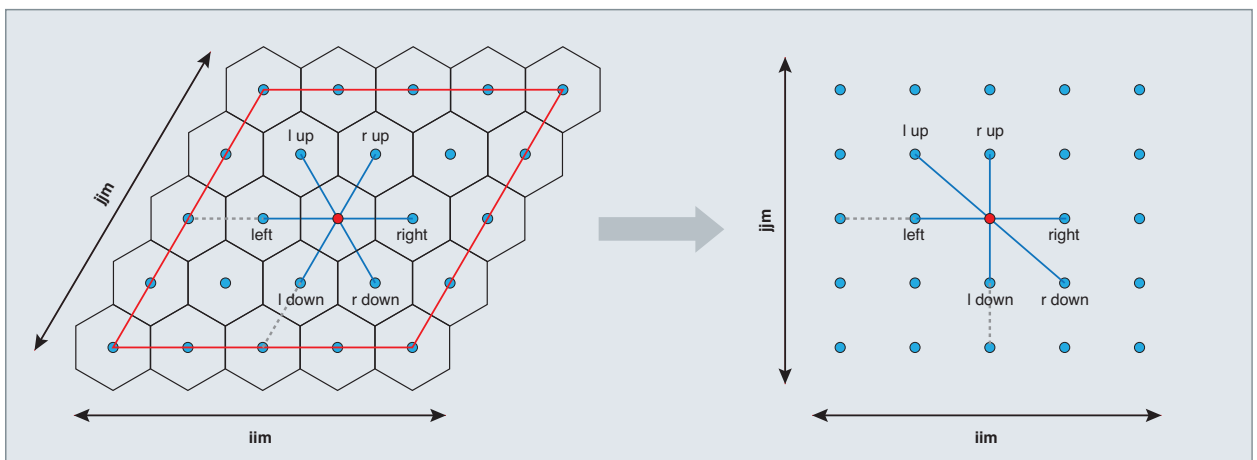


Fig. 203. Domaine local en losange, composé d'hexagones : la struture des données est représentée par un tableau 2D en mémoire. L'accès aux mailles voisines se fait par décalage constant en chaque point du maillage, permettant d'accéder de manière contiguë aux données en mémoire, évitant les fautes de caches et permettant une bonne vectorisation des boucles de calcul.

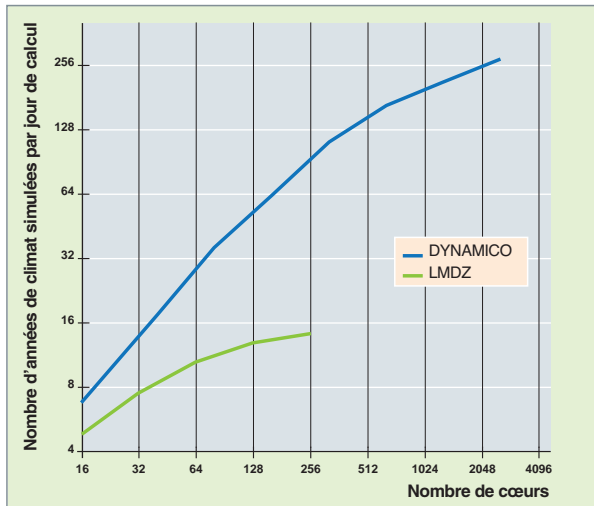


Fig. 204. Comparaison de performance entre les codes LMDZ et DYNAMICO à basse résolution : est ainsi obtenu un facteur 20 en temps de restitution grâce à de meilleures performances et scalabilité. À cette résolution, LMDZ ne peut pas dépasser 256 cœurs alors que DYNAMICO dépasse les 2 500 cœurs. À plus haute résolution, l'écart entre les deux modèles augmente.

à un pool de *threads*. Chaque pool de *threads* a sa propre mémoire privée ; les échanges aux frontières du losange se font par copie en mémoire partagée ;

- parallélisme OpenMP sur la verticale (mémoire partagée) : chaque *thread* d'un pool va se partager les itérations des boucles de calcul sur la verticale, à l'aide de directives OpenMP ;
- vectorisation : toutes les boucles les plus internes (sur l'horizontale) sont vectorisées.

Le gain en performance pour ce nouveau modèle DYNAMICO se traduit par un facteur 20 à 40 (suivant les résolutions) en temps de restitution par rapport au modèle LMDZ sur grille régulière (fig. 204). Le modèle, à résolution équivalente, est à la fois plus performant et beaucoup plus scalable. La scalabilité a été testée récemment jusqu'à 60 000 cœurs (grand défi du CINES 2015) et nous prévoyons un bon comportement au moins jusqu'à 500 000 cœurs de calcul. Les premières études scientifiques utilisant DYNAMICO ont été réalisées sur l'atmosphère de Saturne à très haute résolution ($1/8^\circ$) (fig. 205 et 206). Nous sommes actuellement en train d'adapter les composantes du modèle couplé « Système terre » de l'IPSL à la nouvelle grille icosaédrique. Ce nouveau modèle nous permettra, d'une part, d'intégrer des temps beaucoup plus longs à basse résolution, notamment pour les simulations paléo-climatique longues (20 000 ans), et, d'autre part, d'effectuer des simulations globales à beaucoup plus fine résolution qu'aujourd'hui (25 km contre 200 km actuellement).

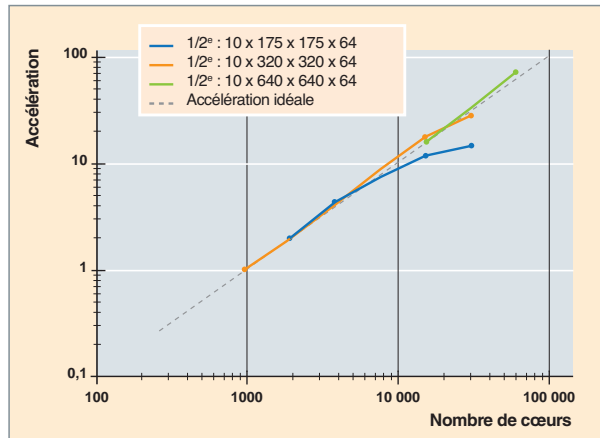


Fig. 205. Courbe d'accélération de calcul du code DYNAMICO en fonction du nombre de cœurs, obtenue lors des grands défis du CINES 2015 pour les résolutions $1/2^\circ$, $1/4^\circ$ et $1/8^\circ$. Pour $1/8^\circ$, la courbe est encore en régime superlinéaire à 60 000 cœurs.

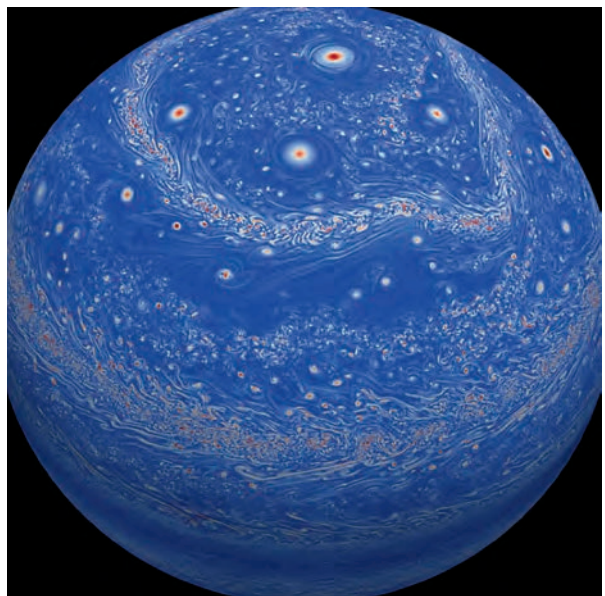


Fig. 206. Modélisation à haute résolution ($1/8^\circ$) de la vorticité de l'atmosphère de Saturne obtenue avec le code DYNAMICO, lors des grands défis du CINES 2015.

La paramétrisation des modèles de climats

De nombreux processus agissent à une échelle bien inférieure à celles de la maille ou du pas de temps du modèle (fig. 207). Ce sont, par exemple, les processus qui font intervenir les nuages dans l'atmosphère, la turbulence ou les échanges de carbone entre l'air et les feuilles. Ils ne peuvent donc pas être représentés de façon explicite et leur effet sur les résultats du modèle est modélisé à partir des variables de grande échelle. Ces représentations « **sous-mailles*** » sont, en général, fondées sur les lois physiques et font intervenir des paramètres empiriques permettant d'avoir une

approche globalisée du phénomène, d'où leur nom de « paramétrisations ».

Depuis les premiers modèles de climat, les paramétrisations ont beaucoup évolué, permettant une représentation plus réaliste de nombreux phénomènes physiques ou thermodynamiques. À titre d'exemple, le modèle d'atmosphère LMDz développé au Laboratoire de Météorologie Dynamique représente l'hétérogénéité sous-maille de la vapeur d'eau. Il définit ainsi la fraction de maille qui est à saturation et va donc pouvoir condenser pour produire des précipitations de grande échelle. Dans les premières versions du modèle, la distribution sous-maille était homogène. Les versions actuelles tiennent davantage compte de la possibilité qu'il coexiste dans une maille des zones fortement humides et des régions plus sèches, ce qui se traduit également par une mosaïque de nuages qui inclut des nuages convectifs, des nuages stratiformes ainsi que du ciel clair. De même, les modèles incorporent des schémas de convection à l'intérieur d'une maille de modèle de plus en plus complets qui représentent l'entraînement, la réévaporation de la pluie, des descentes précipitantes et des poches froides qui réalimentent la convection sous les nuages. Une tendance récente dans

certaines modèles consiste à incorporer dans une maille des super-paramétrisations qui sont en fait des modèles de processus à très haute résolution permettant de représenter explicitement la convection et les nuages.

Entrées/sorties parallèles et post-traitement parallèle *in situ* pour les codes de modélisation du climat

Les modèles « système terre » produisent un nombre et un volume de données considérables. La production des données brutes du prochain exercice CMIP6 à l'IPSL a été évaluée à 14 Po avec plusieurs centaines de variables (~ 800) intégrées sur plusieurs centaines d'années. À chaque variable est assignée une dizaine de métadonnées. La chaîne de post-traitement pour la mise en forme et la distribution des données sur la grille est complexe. XIOS est une bibliothèque qui décharge les modèles de climat de la gestion de ses données, et permet le passage au parallélisme massif (fig. 208). La bibliothèque assure des écritures parallèles performantes par un grand nombre de cœurs de calcul. Son

système de **workflow*** parallèle interne permet d'alléger la chaîne de post-traitement en effectuant les opérations correspondantes en parallèle et au cours de la simulation.

La description externe des données et le système de workflow parallèle

L'ensemble des variables, leurs **métadonnées*** associées (attributs) ainsi que les actions effectuées (recombinaison, transformation, sortie dans fichiers) sont décrites dans un fichier XML externe, qui est analysé dynamiquement à l'exécution. La structure XML est fortement hiérarchisée et implémente des concepts d'héritages évitant d'inutiles redondances. Le XML décrit le **workflow** interne qui s'appuie sur un système de flux (variables à un instant t) et de filtres agissant sur ces flux. Les flux entrant proviennent soit d'un fichier en lecture, soit des modèles, et les flux sortants sont destinés soit à être sortis dans des fichiers, soit à être récupérés par les modèles. Différents filtres peuvent être appliqués sur les flux, qui peuvent être chaînés pour aboutir à des traitements complexes. Les opérations sont exécutées en parallèle par l'ensemble

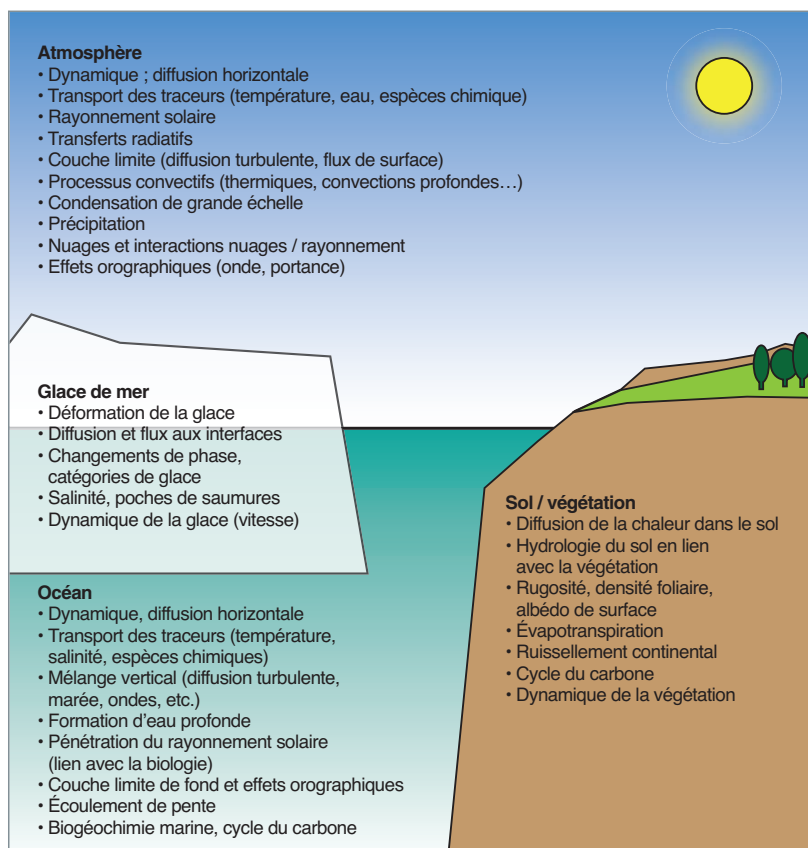


Fig. 207. Certains processus ne peuvent pas être décrits directement sous forme numérique pour l'ensemble des lois physiques qui les gouvernent, du fait de la taille de la maille du modèle. Cette figure liste les principaux processus de chaque milieu qui font l'objet de « paramétrisations » [1].

des clients et sont parfaitement **scalables***. Les filtres temporels permettent d'obtenir des valeurs moyennes, maxima, minima, etc. En chaînant ces filtres, il est possible d'effectuer des opérations plus complexes du type : « valeur moyenne mensuelle du maximum journalier ». Les filtres arithmétiques combinent différents flux, *via* des opérateurs arithmétiques ou des fonctions mathématiques. Les filtres spatiaux permettent les opérations de réduction (moyenne globale ou partielle), l'extraction d'un sous-ensemble (zoom), les interpolations, etc.

Les serveurs d'entrées/sorties parallèles

Dans les codes massivement parallèles intensifs en **entrées/sorties*** (E/S), il est impératif d'utiliser des appels E/S parallèles asynchrones pour éviter les goulets d'étranglement. Les appels de bas niveau *via* **MPI-IO*** sont complexes et difficiles à maîtriser, et les bibliothèques de plus haut niveau sont moins efficaces et ne permettent pas l'asynchronisme. Les systèmes de fichier actuels passent mal à l'échelle sur un grand nombre de cœurs. XIOS utilise des **cœurs de calcul*** exclusivement dédiés aux E/S : les serveurs XIOS. Le nombre de serveurs nécessaires à un bon équilibrage de charge est généralement beaucoup plus faible que le nombre de clients (~ 5-10 %) et réduit donc la charge du système de fichier parallèle. Les données côté clients sont agrégées sur les serveurs *via* des appels MPI

asynchrones. Les données des différents clients sont réorganisées de façon à optimiser les écritures par les serveurs (grands blocs contigus). Les serveurs s'appuient sur des bibliothèques parallèles de plus haut niveau pour agréger la bande passante E/S. Grâce à des communications non bloquantes et à des *buffers* internes, XIOS est capable de recouvrir les transferts et les écritures par du calcul, le coût des E/S devenant ainsi négligeable. De manière symétrique, XIOS fonctionne également pour effectuer les lectures. Dans le cas de lectures cycliques, XIOS transfère en avance les données vers les clients. Aujourd'hui, seul le format de fichier de données NetCDF est supporté par XIOS.

En mode client-serveur, il est nécessaire de lancer des processus MPI supplémentaires en mode MPMD qui gèreront les E/S. XIOS a également été architecturé pour fonctionner dans le cadre de modèles couplés, un même groupe de serveurs XIOS gérant l'ensemble des données des différents modèles.

Le système de gestion des données d'entrée-sortie XIOS est composé d'environ 70 000 lignes de C++. Il est aujourd'hui intégré à l'ensemble des modèles de l'IPSL, et est utilisé ou en cours d'intégration par d'autres organismes (IFREMER, Météo-France...). Il a été testé avec succès sur de grosses configurations dépassant 30 000 cœurs, lors de Grands Challenges **GENCI***.

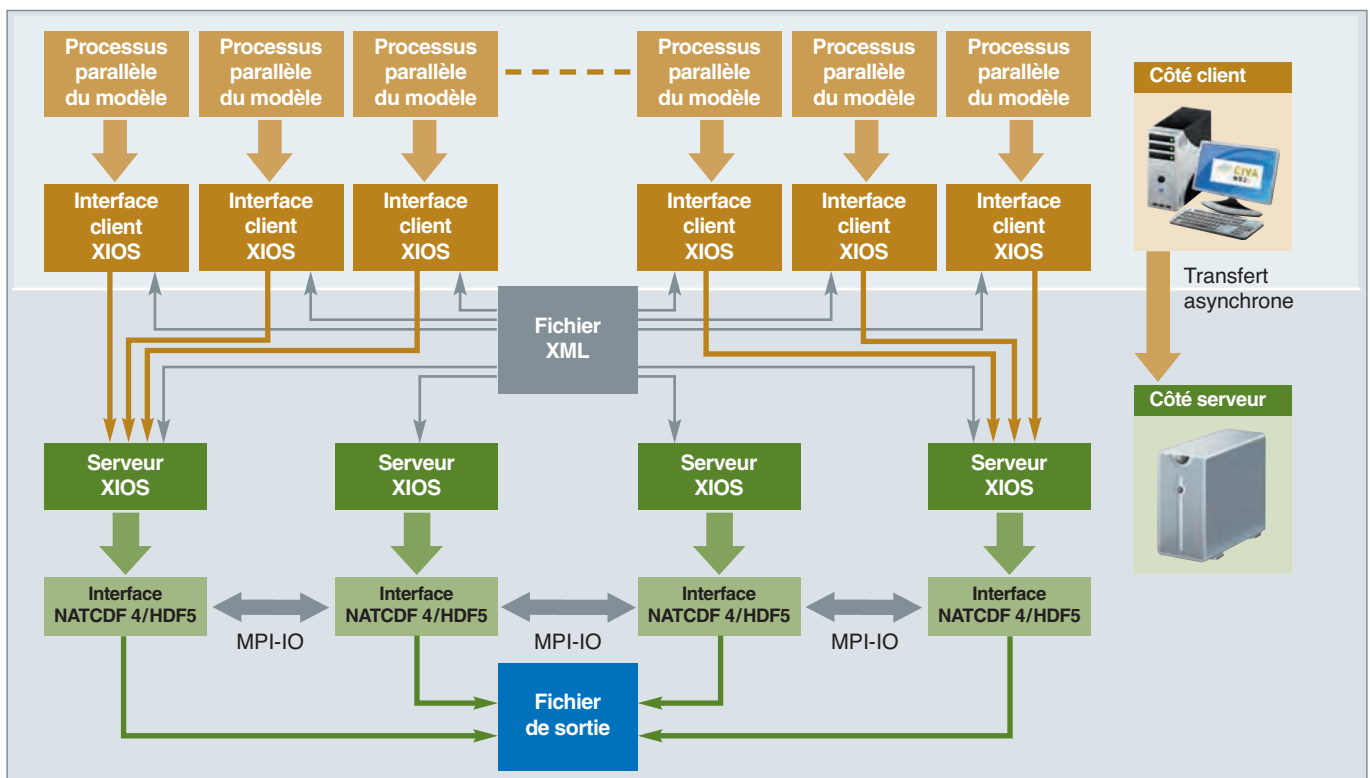


Fig. 208. Architecture du système de gestion des données d'entrée-sortie XIOS. Les différents processus MPI d'un modèle sont interfacés avec la librairie XIOS. Ce sont les « clients ». Ces clients échangent des données avec les serveurs qui assurent les transferts parallèles vers ou depuis les disques, et toutes les opérations nécessaires (filtres temporels et spatiaux, opérations arithmétiques, etc.).

Des modèles pour comprendre et pour prédire le climat

Appréhender le changement climatique

Les modèles sont maintenant des outils majeurs pour comprendre la physique du climat, pour détecter l'apparition du changement climatique et en comprendre les causes, pour étudier l'impact de différents scénarios économiques sur le climat futur. Le changement climatique est maintenant largement considéré comme inévitable. Les modèles sont utilisés pour étudier son impact sur les écosystèmes, l'hydrologie, les événements météorologiques extrêmes, etc. et trouver des moyens d'adaptation. D'un point de vue politique et social, deux échelles temporelles sont importantes pour appréhender le changement climatique : l'échelle de quelques décennies, où les vulnérabilités peuvent être évaluées et des mesures d'adaptation prévues ; et l'échelle du siècle, où nous cherchons à comprendre comment les stratégies pour la planète pourraient atténuer le changement climatique.

La validation des modèles de climats

Les exigences sur la qualité des simulations climatiques ne cessent de croître. De nombreuses observations, tests théoriques et prévisions rétrospectives permettent de vérifier si les grandes caractéristiques climatiques, ainsi que les mécanismes et processus mis en jeu, sont bien représentés.

L'évaluation de la capacité des modèles à représenter les différentes caractéristiques du climat consiste à confronter les résultats d'une simulation aux différentes observations disponibles. Les méthodes utilisées vont de simples comparaisons de cartes de moyenne et de variabilité (température, pluies..., voir la figure 209) à des estimations plus sophistiquées de l'accord modèles-données, faisant appel à des méthodes statistiques complexes. Ces méthodes plus avancées permettent de donner une mesure objective de l'accord, en tenant compte notamment des incertitudes à la fois sur les observations et sur les simulations, en particulier celles liées à un échantillonnage temporel limité.

Chaque composante d'un modèle de climat (océan, atmosphère, glace de mer, végétation...) est d'abord validée séparément avant d'être intégrée au système complet. Cette première étape permet de juger des performances intrinsèques de chaque élément. Le système complet, ou couplé, est ensuite évalué sur divers aspects : représentation du climat moyen (répartition des nuages, principaux vents, température...), capacité à reproduire les caractéristiques saisonnières du climat dans chaque région (aptitude à simuler les moussons tropicales, l'englacement de l'Arctique en hiver...), mais aussi capacité à simuler la variabilité interan-

Les simulations du GIECC

Pour le 5^e rapport du GIEC, dont la partie sur les bases scientifiques de l'évolution du climat est sortie en septembre 2013, un ensemble de simulations regroupées sous le nom de CMIP 5 (*Climate Model Intercomparison Project 5*) a été réalisée dans les divers laboratoires mondiaux. Ces simulations ont détaillées ci-dessous.

En caractères gras : le cœur de l'exercice ;

en vert : des simulations complémentaires optionnelles du premier cercle ;

en bleu : le deuxième cercle de simulations optionnelles.

Les simulations se classent en cinq catégories :

- Les simulations de conditions climatiques passées, pour lesquelles la concentration en CO₂ est fixée : **climat pré-industriel (1850)** qui sert de référence, **climat récent de 1850 à 2005** simulé d'une part, avec un modèle couplé et, d'autre part, avec un modèle d'atmosphère seule, **climat de l'holocène moyen** il y a 6 000 ans, **climat du dernier maximum glaciaire** il y a 21 000 ans, **climat du dernier millénaire** de 850 à 2005 ;
- les projections climatiques avec les divers chemins d'évolution de la concentration en gaz à effet de serre : **RCP4.5**, **RCP8.5**, **RCP2.6**, **RCP6.0**, **RCP4.5** jusqu'en 2300, **RCP 8.5** et **RCP2.6** jusqu'en 2300 ;
- les simulations pour l'étude des rétroactions climat-carbone, où la concentration du CO₂ est calculée : **climat pré-industriel**, **climat récent**, **RCP8.5**, **ESM avec climatologie fixée** (ESM = *Earth System Model* ; modèle du système climatique incluant un cycle du carbone interactif), **ESM avec rétroactions** ;
- les simulations pour l'analyse et l'étude des nuages : **1 % CO₂** (augmentation du CO₂, et de tous les gaz à effet de serre de 1 % par an), **4 fois le CO₂ pré-industriel**, **1 fois et 4 fois CO₂ avec température de surface de la mer fixée** (valeurs de la climatologie), **forçage par le CO₂**, **aérosols de tous types**, **aérosols sulfatés seuls**, **planète entièrement recouverte d'océan** ;
- simulations pour détecter et attribuer l'origine du changement climatique : **forçages naturels seuls** (solaire, volcanisme, aérosols), **forçages des gaz à effet de serre seuls**, **forçages anthropiques seuls**, **forçages anthropiques sans modification de l'usage des sols**, **aérosols anthropiques seuls**, **simulation sans variation de l'ozone**.

nuelle à décennale observée dans l'océan, l'atmosphère. Pour illustration, les modèles actuels sont ainsi capables de simuler et même de prévoir, jusqu'à six mois à l'avance, l'émergence de températures de surface de la mer anormalement chaudes dans le Pacifique, phénomène connu et observé sous le nom d'El Niño. En revanche, les modèles de climat ont, en général, beaucoup de difficulté à représen-

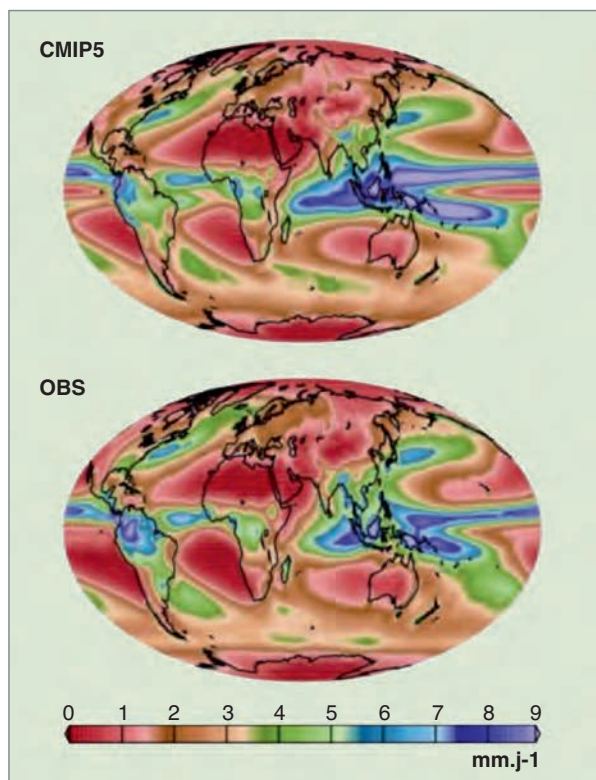


Fig. 209. Comparaison modèle données pour les précipitations. Précipitations moyennes annuelles observées (en bas) et simulées par l'ensemble des modèles CMIP5 (en haut) sur la période 1979-1999.

ter de façon satisfaisante les nuages dans l'atmosphère, et en particulier les nuages bas qui ont une extension verticale faible. Or, il est bien établi maintenant que les incertitudes sur l'évolution du climat au xx^e siècle sont principalement liées à la représentation même des processus nuageux et que l'effort doit être porté, entre autres, sur ce sujet. La communauté française a beaucoup œuvré ces dernières années pour améliorer la représentation des nuages. Par ailleurs, de nouvelles techniques de validation utilisant les données satellites, essentielles aux études climatiques, commencent à être utilisées afin d'échantillonner les caractéristiques des nuages simulés dans un modèle de manière correcte.

Les capacités des modèles à représenter les tendances récentes du climat observé (réchauffement global au xx^e siècle de $0,74\text{ }^{\circ}\text{C}$, hausse du niveau des mers de 17 cm) font aussi partie des critères de validation. Les simulations paléoclimatiques sont également appelées à la rescousse pour vérifier que l'on peut avoir confiance dans la capacité des modèles à reproduire les changements de climat importants déduits des enregistrements climatiques (carottes de glace, sédimentaire...) et résultant de forçages externes connus. C'est par la construction de modèles dûment validés que les chercheurs pourront construire la confiance sur la qualité de leur compréhension des phénomènes climatiques, et sur leur capacité à les représenter.

Conclusion

Les progrès des prochaines décennies dépendront de notre capacité à calculer vite et bien. Il faudra pour cela des centres capables de réaliser des calculateurs plus puissants, des ingénieurs capables de les exploiter à leur maximum, et des physiciens capables d'analyser les énormes quantités de données produites par les modèles du système terre.

Dans un contexte de lutte contre le changement climatique, les enjeux ne sont pas minces...

Olivier MARTI, Yann MEURDESOLF,

*Direction de la recherche fondamentale,
Laboratoire des sciences du climat et de l'environnement*

► Référence

[1] J. POITOU, P. BRACONNOT et V. MASSON-DELMOTTE, *Le climat : la terre et les Hommes*, EDP Sciences (2015), ISBN : 978-2759808816.

► Bibliographie

LYNCH (P), "The origins of computer weather prediction and climate modeling", *Journal of Computational Physics*, 227, pp. 3431-3444. doi: 10.1016/j.jcp.2007.02.034, 2008.

Calculer la structure en quarks des hadrons : la chromodynamique quantique sur réseau

Le problème de physique : hadrons, quarks et gluons

La **chromodynamique quantique*** (QCD) est la théorie de l'interaction forte. C'est elle qui assure la cohésion des **hadrons*** qui composent le noyau atomique et contrôle l'essentiel de la masse visible de l'univers. Ses degrés de liberté sont les **quarks*** et les **gluons*** dont l'existence au sein des hadrons a été révélée par un ensemble d'expériences de très haute énergie réalisées auprès d'accélérateurs d'électrons comme le SLAC en Californie puis confirmée par les campagnes d'expériences du LEP, au CERN, et de DESY, à Hambourg.

Les quarks sont des particules de **spin*** 1/2 qui interagissent suivant leur « **couleur*** », un nombre quantique qui prend trois valeurs: rouge, vert, bleu. Les **bosons*** associés à cette interaction sont les gluons, dont l'émission et l'absorption par les quarks sont décrites dans le cadre de la Chromodynamique quantique, théorie analogue à l'**électrodynamique quantique*** (QED) dont elle s'est en fait inspirée. QED et QCD sont deux théorie de jauge qui diffèrent seulement par la symétrie de leur structure. Dans QCD les gluons remplacent les photons de QED et la couleur remplace la charge électrique. La figure 210 résume les propriétés des particules élémentaires. Remarquons que les quarks ont aussi une charge électrique, 2/3 pour le quark u, -1/3 pour le quark d, etc., mais l'interaction électromagnétique qui

en résulte est complètement négligeable devant celle qui provient des gluons.

La grande différence entre QED et QCD est que le gluon est coloré alors que le photon n'a pas de charge électrique et les conséquences sont spectaculaires. En effet, à la différence du photon, le gluon interagit avec lui-même avec la *même intensité* qu'il interagit avec les quarks. Cela complique passablement l'exploitation de la théorie mais cette self-interaction est essentielle pour expliquer deux phénomènes fondamentaux. D'une part, les quarks se comportent comme s'ils étaient libres lorsqu'on les observe avec une sonde à haute résolution. C'est la liberté asymptotique, qui a été vérifiée en détail par les expériences de diffusion profondément inélastique d'électrons. D'autre part, les quarks et les gluons ne sont jamais observés dans les détecteurs. C'est le confinement de la couleur qui n'autorise que des objets « blancs ». Ces objets blancs sont, par exemple, les protons et les neutrons qui constituent le noyau atomique.

Comme nous l'avons expliqué plus haut, la self-interaction des gluons complique la théorie. C'est en fait une litote car, en dépit des efforts de cohortes de théoriciens depuis son invention dans les années 70, QCD résiste encore et toujours à l'analyse. Pour être plus précis, dès qu'un phénomène implique des distances de l'ordre de la taille d'un proton, nous ne savons pas le calculer, sauf par les simulations numériques sur réseau que nous présentons maintenant.

Constituants de la matière				Bosons de jauge			
	Première famille	Deuxième famille	Troisième famille	Interaction forte	Interaction électromagnétique	Interaction faible	
Quarks	Up (<i>u</i>) (0,03 GeV)	Charm (<i>c</i>) (1,3 GeV)	Top (<i>t</i>) (174 GeV)	Gluons (<i>g</i>)	Photon (γ)	Boson W^+ (80,4 GeV) W^- (80,4 GeV) Z^0 (91,2 GeV)	Boson de Higgs (H^0)
	Down (<i>d</i>) (0,06 GeV)	Strange (<i>s</i>) (0,14 GeV)	Bottom (<i>b</i>) (4,3 GeV)				
Leptons	Électron (e^-) (0,0005 GeV)	Muon (μ^-) (1,3 GeV)	Tau (τ^-) (1,7 GeV)				
	Neutrino (ν_e) électronique (P^d 0 GeV)	Neutrino (ν_μ) muonique (P^d 0 GeV)	Neutrino (ν_τ) tauique (P^d 0 GeV)				

Fig. 210. Tableau des particules élémentaires.

Avant d'entrer dans les détails de la simulation, il faut commenter les difficultés propres au problème de la description des hadrons en termes de quarks et gluons.

La première est que les quarks qui composent les nucléons ont une masse très faible, de l'ordre de 10 MeV, à comparer à la masse du nucléon, environ 940 MeV. Cela veut dire que la masse du nucléon provient principalement de l'énergie cinétique des quarks et de l'énergie stockée dans les gluons. Il s'agit donc d'un problème ultra-relativiste, qui plus est quantique, ce qui implique que le nombre de particules n'est pas conservé. Une approximation par une équation de Schrödinger ou Dirac avec une interaction entre quarks n'est donc pas possible et il faut formuler le problème directement dans le langage de la théorie des champs.

Une difficulté liée à la précédente est que nous n'avons pas d'approximation d'ordre zéro de la solution. Contrairement à la situation non relativiste où la masse d'un système est la somme des masses des constituants plus une correction, ici toute la masse doit être calculée à partir de rien. La précision actuelle des calculs réalistes est environ 1 % d'où une incertitude de 10 MeV pour le proton ou le neutron. C'est une précision satisfaisante pour le nucléon isolé, mais c'est insuffisant pour prétendre décrire le noyau en termes de quarks et de gluons car les énergies nucléaires typiques sont plutôt de l'ordre du MeV. Nous voyons les progrès qui sont encore nécessaires pour que nous puissions parler sérieusement des applications nucléaires de QCD sur réseau.

Autre difficulté due à la nature relativiste et quantique du problème, les fluctuations du nombre de particules sont tronquées par les approximations de la simulation. Par exemple, dans un réseau spatial dont la maille est a les impulsions ne peuvent pas dépasser $2\pi/a$. Cette coupure limite les fluctuations et permet de résoudre numériquement le problème. Par contre, nous devons nous assurer que la solution trouvée s'approche bien de la solution physique qui correspond évidemment à la limite $a \rightarrow 0$. Ce n'est pas toujours vrai et certaines quantités doivent être renormalisées pour atteindre correctement cette limite. Cette renormalisation des calculs sur réseaux est technique et difficile, et c'est un problème important qui parfois limite les applications de la méthode.

Finalement, bien que ce ne soit pas spécifique des calculs sur réseaux, il faut mentionner la taille du calcul due au grand nombre de degrés de liberté mis en jeu. Supposons que nous veuillons calculer la masse du proton ou une de ses propriétés comme son rayon moyen. L'extension spatiale du proton est environ 1 fm. Si nous ne cherchons pas une description très détaillée du système, nous pouvons nous contenter d'une maille $a = 0,1 \text{ fm}^{48}$. Pour que le proton soit « à l'aise », c'est-à-dire ne soit pas perturbé par les

conditions aux limites, une taille minimale de réseau est de 3 fm. Comme il est à 4 dimensions cela veut dire 30^4 sites. Chaque quark a 3 couleurs et il faut un indice qui prend 4 valeurs pour caractériser son spin et son état de particule ou d'anti-particule, soit 12 nombres complexes par site. La partie dominante du calcul est la propagation du quark dans le réseau. Cela revient à inverser un système linéaire de dimension $(30^4 \times 12) \times (30^4 \times 12)$ et cette inversion doit être faite à chaque étape de la simulation, qui peut en comporter plusieurs milliers. Une optimisation drastique est nécessaire pour faire converger le calcul dans un temps raisonnable.

Simulation de la chromodynamique quantique sur réseau

Comme nous l'avons écrit plus haut, les simulations de QCD sur réseau visent surtout à décrire les effets de longue distance⁴⁹ et ces effets sont importants surtout pour les états de basse énergie. Dans ce cas, l'information nécessaire est contenue dans la fonction de partition

$$Z(T) = \sum_m e^{-E_m T}$$

où la somme est sur tous les états possibles m d'énergie E_m . Le paramètre réel, qui ne doit pas être confondu avec la température, est homogène à un temps dans notre système d'unités. Nous voyons que dans la limite $T \rightarrow \infty$ la fonction de partition est dominée par les états de basse énergie (E_0, E_1, \dots).

Si nous savons calculer $Z(T)$ alors $-\frac{\log[Z(T)]}{T} \rightarrow E_0 + o\left(\frac{1}{T}\right)$

Si nous traçons cette quantité, qu'on appelle « masse effective », en fonction de T on doit observer un plateau⁵⁰ dont la valeur est l'énergie de l'état fondamental du hadron étudié. Pour généraliser le raisonnement, nous introduisons des fonctions de corrélations telles que

$$C(T, t) = \frac{1}{Z(T)} \sum_{m,n} e^{-E_m T} \langle m|A|n \rangle e^{-(E_n - E_m)t} \langle n|B|m \rangle$$

où $\langle m| \dots |n \rangle$ est un élément de matrice d'opérateurs A, B construits avec les degrés de liberté du système. En général ce sont de simples polynômes.

En prenant la limite $T, t \rightarrow \infty$ avec la condition $t \ll T$ on obtient $C(T, t) \rightarrow e^{-(E_1 - E_0)t} \langle 0|A|1 \rangle \langle 1|B|0 \rangle$ où E_1 est l'énergie du premier état qui a un recouvrement non nul avec $A|0 \rangle$ et $B|0 \rangle$. Nous devinons qu'en combinant des corrélateurs de plus en plus compliqués, nous pourrions extraire les énergies des premiers états excités du système ainsi que les éléments de matrice d'opérateurs arbitraires⁵¹.

48. En supposant que nous sommes dans la situation où la limite $a \rightarrow 0$ est douce.

49. C'est-à-dire de l'ordre de la taille du nucléon.

50. Le terme mathématique serait plutôt asymptote, mais en pratique, nous ne pouvons en observer qu'une petite fraction, d'où le nom de plateau.

51. Les développements ci-dessous font référence au corrélateur $C(T, t)$ pour simplifier la présentation, mais il est évident qu'ils s'appliquent de façon générale.

Le problème se ramène donc au calcul de ces corrélateurs. Pour cela, nous utilisons l'**intégrale de chemin*** qui permet d'écrire

$$Z(T) = \int [d\phi] e^{-S_T(\phi)}$$

et

$$C(T, t) = \frac{1}{Z(T)} \int [d\phi] e^{-S_T(\phi)} A[\phi(t)] B[\phi(0)]$$

où $\phi(t)$ représente tous les degrés de liberté du système au temps. $S_T(\phi)$ est l'action *Euclidienne* de QCD calculée entre 0 et T c'est-à-dire $S_T(\phi) = \int_0^T dt \int d\vec{x} L_{QCD}(\phi)$ où $L_{QCD}(\phi)$ est le Lagrangien de QCD où nous avons remplacé la variable temps t par it . Le but de cette formulation est que le facteur $\exp[-S_T(\phi)]$ soit un nombre réel positif, ce qui permet d'interpréter $\exp[-S_T(\phi)]/Z(T)$ comme une probabilité.

Après discrétisation du système l'intégrale de chemin devient une intégrale ordinaire, susceptible d'une évaluation numérique. Nous remplaçons donc l'espace-temps par un réseau de maille a et de dimension $T \times L^3$ et nous associons les sites aux degrés de liberté de quark tandis que ceux des gluons sont associés aux liens. L'expression de l'action discrétisée n'est pas vraiment utile dans notre contexte. Il en existe plusieurs et il suffit de savoir qu'elles sont toutes construites pour reproduire l'action de la limite continue. Les différences tiennent dans la vitesse avec laquelle cette limite est approchée.

Une fois choisie une expression de l'action, il faut évaluer l'intégrale multiple

$$C(T, t) = \frac{1}{Z(T)} \int d\phi_1 d\phi_2 \dots d\phi_n e^{-S(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n)} A[\phi_t] B[\phi_0]$$

où $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$ désignent les degrés de liberté associés aux sites et aux liens.

La présence des quarks dans les variables d'intégration complique encore le problème car, comme ce sont des **fermions***, ils sont décrits par des variables qui anti-commutent et donc sont difficiles à simuler numériquement. Heureusement, l'intégration sur ces variables peut être faite analytiquement et nous pouvons montrer que le corrélateur prend la forme

$$C(T, t) = \frac{1}{Z(T)} \int dU_1 \dots dU_n \det[D_U] e^{-S_g(U_1, U_2, \dots, U_n)} <AB>_U$$

où S_g est la partie gluonique de l'action et $\det[D_U]$ est le déterminant de l'équation de Dirac en présence du champ de gluons (U_1, U_2, \dots, U_n) . Dans les cas qui nous intéressent ici, ce déterminant est réel et positif, ce qui autorise à nouveau l'interprétation probabiliste du facteur $P(U_1, U_2, \dots, U_n) =$

$\frac{1}{Z(T)} \det[D_U] e^{-S_g(U_1, U_2, \dots, U_n)} = \frac{1}{Z(T)} e^{-\tilde{S}(U_1, U_2, \dots, U_n)}$, une condition essentielle pour le calcul pratique de l'intégrale. Pour simplifier les notations, nous avons défini l'action effective $\tilde{S}(U) = S_g(U) - \ln[\det(D_U)]$ et le facteur $<AB>_U$ dénote le produit

d'opérateurs où toutes les variables de quark ont été contractées avec le théorème de Wick. Ces contractions sont les solutions de l'équation de Dirac en présence du champ de gluons. L'intégrale fait maintenant intervenir uniquement des variables réelles et peut donc être évaluée numériquement.

Étant donné le grand nombre de degrés de liberté, nous calculons cette intégrale par des méthodes stochastiques en exploitant le fait que le facteur $P(U_1, U_1, \dots, U_n)$ est une probabilité. Si nous notons collectivement $U = (U_1, U_1, \dots, U_n)$ une configuration, c'est-à-dire l'ensemble des paramètres qui spécifient les gluons sur chaque lien, nous produisons un ensemble statistique, ou échantillon, $\{U^{(1)}, U^{(2)}, \dots, U^{(N)}\}$, dont la distribution coïncide avec la probabilité $P(U)$ et l'approximation

$$C(T, t) \sim \frac{1}{N} \sum_i <AB>_{U^{(i)}}$$

devient exacte quand le nombre de configurations, c'est-à-dire la taille de l'échantillon, tend vers l'infini.

La génération de l'ensemble statistique utilise des algorithmes fondés sur la théorie des chaînes de Markov. Le plus populaire est l'algorithme de Metropolis [1] : étant donné une configuration U nous lui appliquons une transformation réversible T qui donne U' . Nous acceptons U' conditionnellement avec la probabilité

$$\min \left[1, \frac{P(U')}{P(U)} \right]$$

Si U' est acceptée nous recommençons le processus à partir de U' . Sinon nous recommençons à partir de U .

La réalisation pratique de l'algorithme dépend de la localité de l'action $\tilde{S}(U_1, U_1, \dots, U_n)$. Lorsqu'elle couple uniquement des liens voisins nous pouvons nous contenter de faire l'opération de mise à jour (transformation T et test d'acceptance) lien par lien. C'est justifié pour des masses de quarks très élevées car, dans ce cas, nous avons $\tilde{S}(U_1, U_1, \dots, U_n) \sim S(U_1, U_1, \dots, U_n)$ et nous savons que l'action originale de QCD est locale. Dans cette situation, la génération de l'ensemble statistique est rapide et peut même se faire avec un PC muni d'un accélérateur graphique (**GPU***).

La faible masse des quarks u, d induit une forte non-localité de l'action effective $\tilde{S}(U_1, U_1, \dots, U_n)$. Physiquement, cela est dû à la fluctuation du gluon en une paire de quark-antiquark, comme illustré sur la figure 211. Plus la paire est légère, plus elle peut se propager loin dans le réseau. Dans ce cas, un algorithme de mise à jour lien par lien converge très lentement. C'est ce qui a longtemps empêché de faire des calculs avec des masses de quark réalistes.

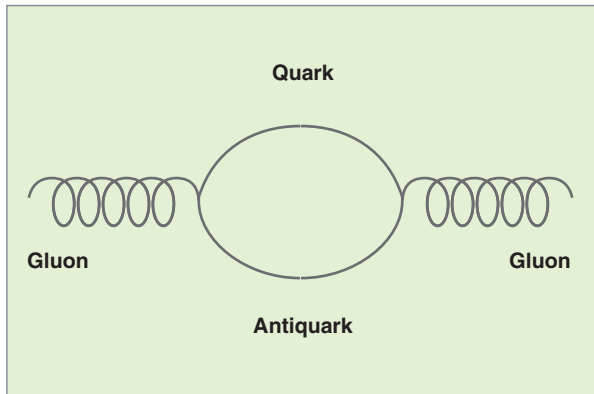


Fig. 211. La fluctuation du gluon en paire de quarks.

La difficulté d'une mise à jour globale du réseau est qu'en général la nouvelle configuration U' n'est pas acceptée si la transformation T est basée sur le hasard. La convergence est alors trop lente. L'idée de la dynamique moléculaire est de créer un mouvement de la configuration du réseau par rapport à un temps fictif τ . L'équation de ce mouvement est contrôlée par l'action \tilde{S} plus un terme de vitesse par rapport à τ . Le passage global d'une configuration à la suivante est effectué par ce mouvement avec un tirage au hasard de la vitesse. Nous pouvons montrer que le processus satisfait le critère de Markov, ce qui garantit la convergence vers la distribution statistique voulue. L'introduction de cet algorithme dit « Hybride Monte-Carlo » (HMC)[1] est à l'origine des progrès accomplis ces dix dernières années dans la simulation de QCD avec des masses de quark réalistes.

Cependant, il faut noter que l'utilisation de HMC ne résout pas à elle seule les difficultés inhérentes aux simulations avec petites masses de quark. En effet, l'action effective \tilde{S} est très complexe et doit être recalculée à chaque pas du

temps fictif τ . Ce calcul implique, en particulier, l'inversion d'un système linéaire dont la dimension est $(L^4 \times 12) \times (L^4 \times 12)$. De plus, le système est très mal conditionné à petite masse car il a des valeurs propres nulles, lorsque la masse des quarks est nulle. Cette inversion est la partie la plus coûteuse en temps calcul et toutes sortes d'améliorations des méthodes d'inversion ont été essayées. De ce point de vue, le pré-conditionnement par la **décomposition en domaines*** et la déflation s'est révélé très efficace[1].

Le problème du bruit

Comme mentionné plus haut le facteur $P(U) = \exp[-\tilde{S}_\tau(U)]/Z$ est positif, ce qui permet de considérer $P(U)$ comme une probabilité et de calculer l'intégrale de chemin par des méthodes stochastiques. Cette positivité est évidemment due au caractère euclidien de l'action. Dans l'espace-temps ordinaire, $P(U)$ serait complexe. Le caractère euclidien est aussi évident dans l'expression des corrélateurs qui sont des sommes d'exponentielles décroissantes. En se plaçant en un temps assez grand on peut isoler l'état de plus basse énergie et donc extraire la quantité physique souhaitée. Le problème est que le signal lui aussi décroît exponentiellement : dans un calcul stochastique, il est rapidement rattrapé par le bruit statistique. Le domaine temporel entre le moment où le signal n'est pas contaminé par les états excités et l'apparition du bruit peut être inexistant ou si petit qu'aucune information ne peut être extraite. Nous pouvons montrer que pour le **pion*** (composé d'un quark et d'un antiquark) le rapport signal sur bruit est approximativement indépendant du temps, alors que pour A nucléons ($3 \times A$ quarks) il décroît comme $-\exp[-A(M_N - 3m_\pi/2)t]$, avec $M_N - 3m_\pi/2 > 0$ dans un calcul réaliste. Pour illustrer ce point, nous montrons dans la figure 212 la masse effective du pion, du nucléon et de l'hélium-3. Pour ce dernier, a été retranché $3M_N$, de sorte que le plateau donne en fait l'énergie de liaison de ce noyau. Nous observons que la masse effective du pion est effecti-

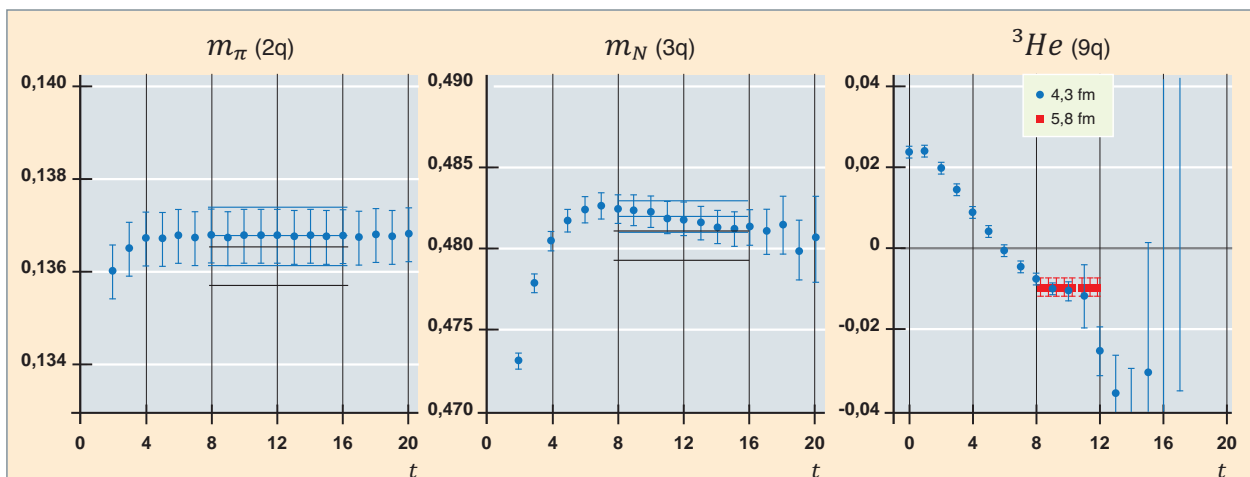


Fig. 212. Augmentation du bruit en fonction du nombre de quarks dans le calcul de la masse du pion, du nucléon et de l'hélium-3.

vement peu bruyante dans tout le domaine de temps⁵². Pour le nucléon, la situation se dégrade vers $t \sim 15$ et pour l'hélium-3 le bruit domine déjà vers $t \sim 8$, de sorte que nous devinons à peine le plateau.

Il existe plusieurs manières de dépasser ce problème. Il est évidemment possible d'augmenter la statistique, mais ce n'est pas très efficace car l'erreur ne décroît que comme la racine carrée de la taille de l'échantillon. En pratique, le coût devient vite prohibitif.

Une approche plus efficace est d'augmenter le recouvrement entre l'état $A|0\rangle$ ou $B|0\rangle$ et le véritable état fondamental. Nous réalisons cela en remplaçant A, B par des opérateurs qui ont les mêmes nombres quantiques mais qui sont « étalés » dans l'espace pour que $A|0\rangle$ ou $B|0\rangle$ ressemble le plus possible à l'état fondamental exact. Bien que grossière du point de vue théorique, cette procédure dite de « *smearing* » [1] est assez efficace pour favoriser l'apparition précoce du plateau. Cela est illustré dans la figure 213 où nous voyons que le plateau de la masse effective arrive bien plus rapidement avec l'application du *smearing* (points rouges).

Il est aussi possible de déterminer des combinaisons linéaires d'opérateurs qui permettent de séparer efficacement la contribution des états. Une méthode souvent retenue pour réaliser ce programme est connue sous le nom de GEVP (*Generalized EigenValue Problem*) [1]. Elle permet en fait de déconvoluer systématiquement la somme d'exponentielles qui compose le corrélateur, ce qui donne accès non seulement à l'état fondamental mais aussi aux premiers états excités du système. Cette méthode augmente le coût du calcul mais dans des proportions acceptables. Nous l'avons utilisée avec succès pour le calcul de la diffusion

52. En unités physiques, le domaine de temps montré est environ 2 fm/c.

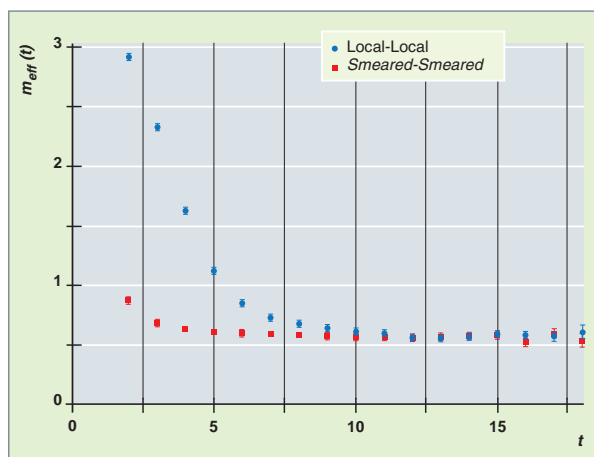


Fig. 213. L'effet du *smearing* sur l'apparition du plateau dans le calcul de la masse.

pion-pion dans la région de la **résonance** ρ^* . Suivant la masse choisie pour le pion, l'état recherché peut être soit l'état fondamental soit un état excité, et on ne le sait pas à l'avance. Dans ce cas, il est donc essentiel d'avoir une méthode efficace pour déconvoluer la somme d'exponentielles.

La diffusion pion-pion et la résonance

La majeure partie des applications de QCD sur réseau porte sur des systèmes, comme le proton, où les quarks sont confinés. Nous nous intéressons alors à sa masse et aux éléments de matrice d'opérateurs que nous pouvons relier à des quantités expérimentales comme les facteurs de forme du nucléon. La collision de deux hadrons pose un problème différent car, dans le monde réel, l'énergie prend des valeurs quelconques, alors que sur le réseau elles sont discrètes. De plus, les particules qui diffusent peuvent être à des distances arbitrairement grandes ce qui n'est pas compatible avec la taille finie du réseau. Nous pourrions donc penser que la diffusion est hors de portée des calculs sur réseau, ce qui voudrait dire qu'une part importante de la dynamique de QCD échappe à cette méthode. En fait, nous pouvons retourner le problème et profiter du volume fini du réseau pour étudier la diffusion.

Dans un problème de diffusion, la distribution angulaire des particules dans l'état final est spécifiée par la fonction d'onde à grande distance⁵³, et celle-ci peut être paramétrisée par les déphasages. Sans interaction les *déphasages* sont nuls. S'il y a une résonance, ils passent de 0 à 180° dans un petit intervalle d'énergie. Si nous mettons deux particules dans un réseau d'extension finie, l'énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes, E_1, E_2, \dots mais la dépendance de ces énergies sur l'extension spatiale du réseau peut être reliée aux déphasages à ces énergies [2]. Grâce à cette relation, nous pouvons donc, en principe, étudier la diffusion de façon indirecte.

La diffusion pion-pion est le cas le plus simple et il est logique de commencer par elle. L'échelle d'énergie qui contrôle le phénomène est avant tout la masse du pion. Physiquement, elle est de 140 MeV, mais sur le réseau elle dépend de la masse choisie pour les quarks et tous les calculs effectués jusqu'à présent ne descendaient pas en dessous de 250 MeV. Comme nous l'avons indiqué à plusieurs reprises, plus la masse des quarks, et donc celle du pion, est petite, plus la simulation est difficile car les systèmes d'équations qu'on doit résoudre à chaque pas de la chaîne de Markov deviennent singuliers. Les calculs présentés ci-après sont les premiers effectués à la masse physique du pion. Nous avons choisi d'étudier le système pion-pion qui a

53. Par rapport à la portée de l'interaction.

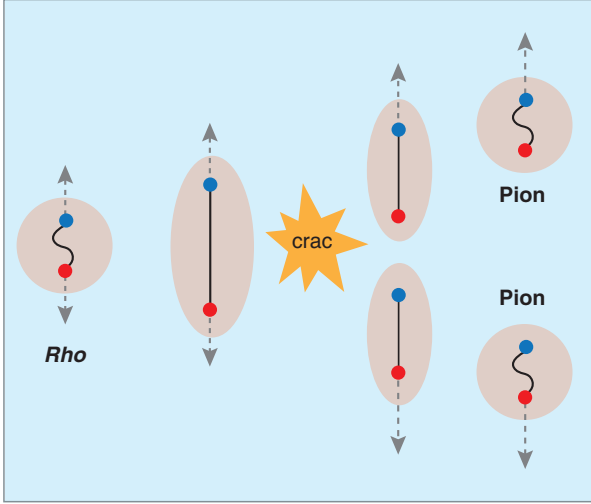


Fig. 214. Vue d'artiste de la désintégration du méson ρ .

les nombre quantiques du méson ρ car ce dernier, dont la masse est de 790 MeV doit se manifester comme une résonance, c'est-à-dire une particule instable. Cette désintégration en 2 pions, c'est à dire 2 quarks et 2 antiquarks, d'une particule *a priori* composée d'un quark et d'un antiquark fait manifestement intervenir la brisure de la « corde » comme c'est illustré sur la figure 214.

Ce phénomène, qui est caractéristique du (dé)confinement, n'avait jusqu'à présent pas été observé dans une simulation numérique, car la masse trop élevée du pion interdisait la désintégration du ρ dans le réseau.

Pour mesurer les déphasages dans la région d'énergie intéressante, la masse du ρ , nous considérons une série d'opérateurs $\{O_1^\pi, O_2^\pi, \dots\}$ tels que $O_1^\pi|0\rangle \sim |\pi(\vec{q}_i)\pi(-\vec{q}_i)\rangle$ avec \vec{q}_i une des impulsions permises sur le réseau et qui donne une énergie dans la région intéressante. Ces opérateurs contiennent 2 quarks et 2 antiquarks. À cela, nous ajoutons un opérateur quark-antiquark O^ρ tel que $O^\rho|0\rangle \sim |\rho(\vec{0})\rangle$. Ce ne sont pas des états propres de l'énergie. Ils ont juste les bons nombres quantiques et nous allons les utiliser dans le GEVP. Nous considérons le corrélateur matriciel

$$C_{ij}(T, t) = \frac{1}{Z(T)} \sum_{mn} e^{-E_m T} \langle m|A_i|n\rangle e^{-(E_n - E_m)t} \langle n|A_j|m\rangle,$$

$i, j = 0, 1, 2, \dots$ où $A_0 = O^\rho, A_1 = O_1^\pi, \dots$. Nous le calculons sur le réseau suivant

$$C_{ij}(T, t) \sim \frac{1}{N} \sum \langle A_i B_j \rangle_t$$

et nous le diagonalisons. Il est facile de montrer que, pour T suffisamment grand, les valeurs propres λ_k prennent la forme

$$\lambda_k = e^{-E_k t} + O(1/t)$$

où E_k sont les premiers niveaux d'énergie. Remarquons que, *a priori*, nous pourrions obtenir le même résultat en considérant le simple corrélateur

$$C_0(T, t) \sim \frac{1}{N} \sum \langle O^\rho O^\rho \rangle_t$$

car, toujours pour T grand,

$$C_0(T, t) = \sum_k e^{-E_k t} |\langle 0|O^\rho|E_k\rangle|^2$$

et avec un nombre suffisant de points (t_1, t_2, \dots) nous aurions un système d'équations pour déterminer les énergies. Cette méthode ne marche pas bien car, d'une part, le nombre de points avec une bonne précision n'est pas très grand et, d'autre part, les facteurs $|\langle 0|O^\rho|E_k\rangle|$ peuvent être très petits. En effet $O^\rho|0\rangle$ est un état quark-antiquark dont le recouvrement avec les états de diffusion à 2 pions est faible. La détermination des énergies par le GEVP est bien plus efficace. Elle a un coût assez important car le nombre de corrélateurs à calculer est le carré du nombre d'états considérés. Le calcul présenté ci-dessous a mobilisé le super-calculateur BlueGene-Q de l'IDRIS pendant environ 30 millions d'heures-processeur.

Sur la figure 215 nous montrons les masses effectives du GEVP pour 2 masses de pions. Nous avons utilisé les 2 opérateurs $\{O^\rho, O_1^{\pi\pi}\}$ pour $m_\pi = 308$ MeV, et les 5 opérateurs $\{O^\rho, O_1^{\pi\pi}, \dots, O_4^{\pi\pi}\}$ pour $m_\pi = 139$ MeV. De plus, nous montrons la masse effective obtenue avec le corrélateur C_0 , correspondant à l'opérateur O^ρ seul. Dans le premier cas, nous voyons que le plateau du premier niveau GEVP coïncide avec celui de C_0 . Cela veut dire que le ρ physique peut être obtenu avec le simple état quark-antiquark et la raison est que la masse du pion est trop grande pour permettre la désintégration vers l'état à 2 pions. Le seul avantage du GEVP est que le plateau est plus précoce. Dans le second cas, l'aspect est très différent. Le niveau le plus bas, en vert olive, ne coïncide pas avec celui de C_0 , qui d'ailleurs ne montre pas de plateau avant d'être noyé dans le bruit. Donc l'état de plus basse énergie *n'a pas ou peu* de recouvrement avec l'état quark-antiquark. C'est essentiellement un état à 2 pions. Le ρ physique est plutôt vers les niveaux 3 et 4, en vert et bleu. C'est manifestement un état excité qui peut donc se désintégrer en 2 pions.

Comme nous l'avons expliqué plus haut, les niveaux d'énergie dans le volume fini d'extension L sont reliés aux déphasages. *A priori*, il faudrait faire des simulations à plusieurs valeurs de L pour extraire le déphasage à une énergie donnée, ce qui n'est pas possible avec les échantillons statistiques disponibles. Nous pouvons aussi combiner les énergies de plusieurs niveaux à L fixe pour obtenir le même

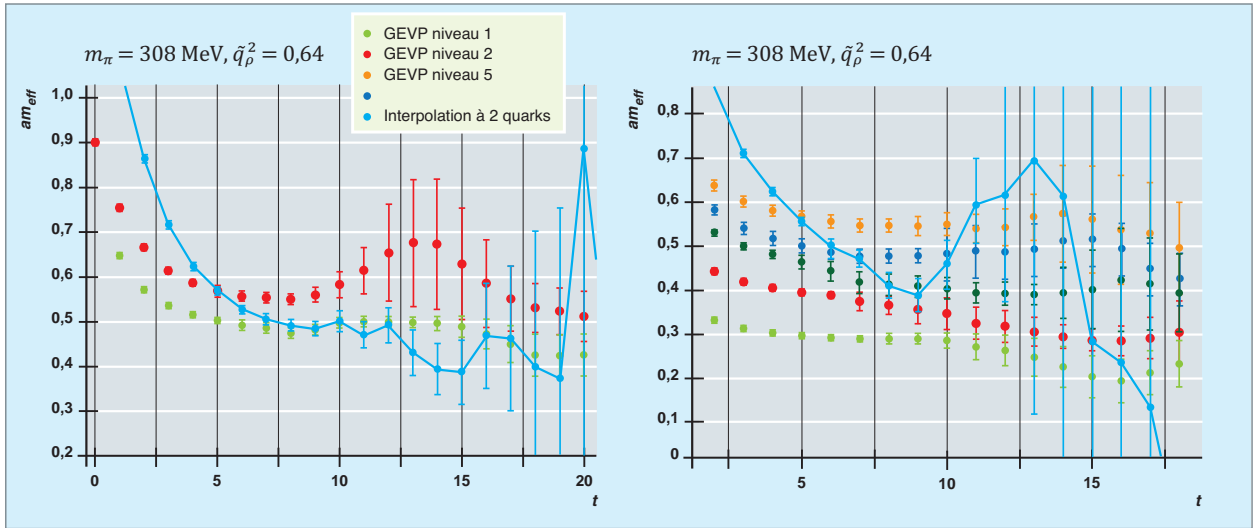


Fig. 215. La masse effective du GEVP pour deux valeurs de la masse du pion.

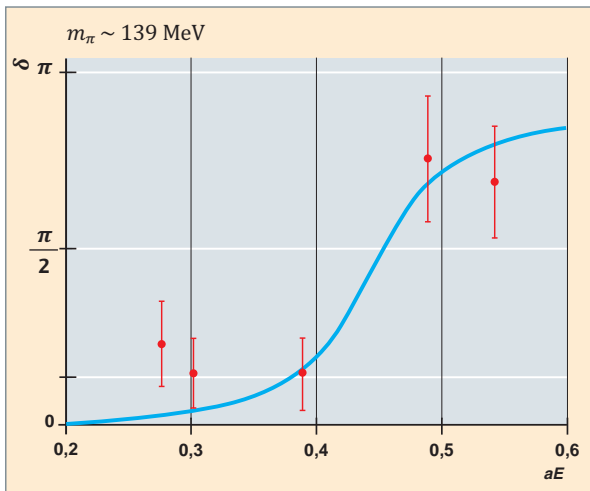


Fig. 216. Le déphasage pion-pion à la masse physique et l'approximation de portée effective. L'énergie est exprimée en unité de la maille du réseau.

résultat moyennant une hypothèse déjà bien testée, l'approximation de **portée effective*** [3], sur la variation du déphasage dans la région de la résonance. Cela conduit aux résultats [4] montrés sur la figure 216. La courbe en pointillé correspond à l'approximation de portée effective et les points rouges sont les valeurs obtenues pour le déphasage à la masse physique du pion. Nous reconnaissons la variation caractéristique au passage d'une résonance. Nous pouvons extraire les paramètres de celle-ci et nous trouvons, pour la masse M_ρ et la largeur Γ de la résonance ρ : $M_\rho = 790 \pm 20$ MeV, $\Gamma = 123 \pm 40$ MeV, en excellent accord avec les valeurs expérimentales $M_\rho = 776$ MeV, $\Gamma = 145$ MeV. Le fait de trouver une largeur correcte pour la résonance ρ montre que les simulations de QCD sur réseau sont maintenant capables de décrire les particules instables, ce qui était inenvisageable il y a dix ans.

Conclusions et perspectives

Les calculs de QCD sur réseau ont beaucoup progressé depuis le début des années 2000. La première raison est l'implémentation de la dynamique moléculaire et l'amélioration des algorithmes d'inversion, ce qui a permis de faire des simulations avec des masses de quark réalistes. La seconde est l'augmentation de la puissance de calcul disponible qui a permis d'effectuer ces simulations sur de grands réseaux.

Les calculs sur réseaux sont un cas d'école pour le calcul de haute performance. D'une part, le problème physique utilise naturellement une grille à 4 dimensions régulière. Nous pouvons donc profiter au maximum de l'architecture parallèle des supercalculateurs. Le comportement d'échelle de ces calculs est plutôt de type « *weak scaling* » car la tendance est d'augmenter la taille des réseaux pour le même temps calcul. Cela demande un bon équilibre entre le temps passé en calcul et le temps passé en communications. De ce point de vue, une machine à faible fréquence, environ 1Ghz, et à haute connectivité, semble un bon compromis.

La répartition des calculs sur les nœuds de la machine impacte fortement les performances, en particulier lorsque la connectivité ne permet pas au réseau de processeurs de se calquer sur le réseau physique, ce qui dégrade la vitesse des échanges. Dans tous les cas, il faut être très attentif aux réglages des paramètres de communication.

Les performances des codes de calcul sur réseau sont plutôt bonnes. Celui qui est utilisé pour faire les simulations présentées ci-dessus atteint environ 30 % de la puissance crête de la BlueGene-Q. Les parties les plus intensives ont été codées en langage machine et fortement optimisées. La conséquence négative est l'absence totale de portabilité, ce qui n'est peut-être pas un exemple à suivre, car la multipli-

cation des applications d'un code portable l'immunise contre les *bugs* et économise le travail.

Jusqu'à présent, les simulations de haut de gamme ont toutes été réalisées sur des super-calculateurs partagés. Les allocations de temps calcul sur ces machines sont gérées par des organismes nationaux (Genci en France) ou internationaux (Prace en Europe). Cette contrainte est souvent mal vécue par les physiciens « latticistes », d'une part parce qu'en raison du manque d'investissement les allocations partagent souvent la pénurie et, d'autre part, parce que le rythme de revue des allocations (6 mois ou 1 an) n'est pas en phase avec le travail de recherche. C'est pourquoi, périodiquement, nous voyons apparaître des projets ou des réalisations de calculateurs dédiés à QCD sur réseau. Ils ont été parfois (rarement) un succès, comme par exemple le projet QCD On Chip (QCDOC) [5] qui a donné naissance à la ligne de calculateurs IBM BlueGene. La difficulté de ces projets gérés par des chercheurs est avant tout la faiblesse du support technique aussi bien au niveau *hardware* (fabrication des puces) que *software* (développement des compilateurs).

Une tendance intéressante est peut être celle des calculateurs hybrides exploitant l'énorme puissance de calcul des cartes graphiques (GPU). Celles-ci sont relativement bon marché par rapport au nombre de cœurs et disposent d'un environnement de programmation presque convivial (CUDA pour les cartes NVIDIA). Bien que l'adaptation d'un code demande encore un effort conséquent, celui-ci peut être justifié par le gain en performance. Cela est pertinent pour de nombreuses applications mais, hélas, pas encore pour QCD. Le point de blocage est que le GPU communique avec le monde extérieur (*input*, *output*, autres GPUs) par la liaison PCIe et cette communication est trop lente pour des calculs parallèles intensifs. De plus, le GPU calcule vite mais oublie aussi vite car il a une mémoire limitée. Si une application tient en entier sur le GPU, code, données et résultats compris, la solution est efficace et elle est souvent utilisée pour le calcul des observables. Au-delà, il faut découper soigneusement les tâches et arranger le déroulement pour que la communication se fasse pendant le calcul. Dans le cas des simulations de chromodynamique quantique sur réseau, où la mise à jour du réseau requiert une communication fréquente entre tous les nœuds, l'utilisation des cartes graphiques n'est pas encore viable, mais le deviendra peut-être un jour.

Pierre GUICHON,
Direction de la recherche fondamentale

► Références

- [1] M. LUSCHER, *Summer School on Modern Perspectives in Lattice QCD*, LesHouches (2009), arXiv:1002.4232.
- [2] M. LUSCHER, *Nucl. Phys.*, B354,531 (1991).
- [3] L.S. BROWN and R.L. GOBLE, *Phys. Rev. Lett.*, 20, 346 (1968).
- [4] T. METIVET, *Lattice QCD at the physical point : pion pion scattering and nucleon structure*, thesis, 2015.
- [5] P.A. BOYLE, C. JUNG and T. WETTIG, (for the QCDOC collaboration) (2003), arXiv:hep-lat/0306023.

► Bibliographie

- ITZYKSON (C.) and ZUBER (J.B.), *Théorie de champ: Quantum Field Theory*, Mc-Graw-Hill.
- WEINBERG (S.), *Théorie de champ : The Quantum Theory of Fields*, Cambridge University Press.
- YNDURAIN (F.J.), *QCD: The Theory of Quark and Gluon Interactions*, Texts and Monographs in Physics, Springer.
- QCD sur réseau : M. CREUTZ est un des pionniers de la QCD sur réseau. Il est de bon conseil et il vient de sortir une revue historique de QCD sur réseau: *The lattice and quantized Yang-Mills theory*, (2015) arXiv:1510.02059.
- GATtringER (C.) and LANG (C.B.), QCD sur réseau : *Chromodynamics on the lattice*, Lectures Notes in Physics, Springer.

Big data : l'exemple de la génomique

Introduction : évolution des technologies de séquençage et applications

L'acide désoxyribonucléique (ADN), support de l'information héréditaire des organismes vivants, est un polymère formé à partir de quatre molécules élémentaires, appelées nucléotides ou bases : l'adénine, la cytosine, la guanine et la thymine, que l'on abrège en A, C, G et T. Sans entrer dans le détail, le séquençage vise à reconstituer la séquence linéaire des bases des molécules d'ADN. Les premières techniques de séquençage sont apparues dès les années 70, inventées séparément par Allan MAXAM et Walter GILBERT d'une part, Frederick SANGER d'autre part, techniques complètement différentes et qui leur ont valu de partager le prix Nobel de chimie en 1980. Nous pouvons néanmoins considérer que l'ère de la **génomique*** moderne a commencé à la fin des années 80, avec l'apparition des premiers **séquenceurs*** automatiques (ABI 370 de la société Applied Biosystems) fondés sur la méthode de Sanger et le marquage des nucléotides par fluorescence. Dans le même temps, le démarrage du projet génome humain (officiellement en 1990) a donné un formidable coup d'accélérateur au développement des technologies de séquençage (et de génomique, en général) : non seulement les machines basées sur la méthode Sanger ont considérablement évolué pour arriver à leur version la plus aboutie vers 2002 (le séquenceur ABI 3730 xl d'Applied Biosystems), mais les technologies dites « massivement

parallèles » qui dominent aujourd'hui le marché, et ce depuis les années 2005/2006, étaient déjà en gestation dès les années 90. Le coût généralement avancé d'environ 3 milliards de \$ pour le séquençage du premier génome humain (de 1990 à 2003) tient d'ailleurs compte en grande partie des investissements consentis pour tous ces développements, dont les retombées technologiques, industrielles et économiques sont énormes, en plus, bien entendu, des retombées scientifiques.

L'évolution exceptionnellement rapide (nous pouvons vraiment parler de révolution technologique) des machines de séquençage est bien résumée par la figure 217 [1] publié par le NHGRI (*National Human Genome Research Institute*) américain. Nous y constatons en effet, que globalement, le coût de génération des données brutes de séquençage est passé de 5 000 \$ / Mégabase en 2001 à environ 0,01 \$ / Mégabase fin 2015, soit un facteur 5×10^5 . Nous voyons également que le coût du séquençage par la méthode de Sanger (qui a dominé le marché jusqu'en 2007) a diminué *grosso modo* d'un facteur 2 tous les 2 ans, suivant en cela la loi de Moore, alors que l'apparition des technologies NGS (« *new generation sequencing* », dites aussi technologies « massivement parallèles ») a induit à partir de 2007 un « décrochage » spectaculaire par rapport à ladite « loi de Moore ». Les volumes des données de génomique produites à l'échelle mondiale ont, comme nous pouvions nous y attendre, augmenté dans des proportions comparables : là

où le séquenceur ABI 3730 xl pouvait (au début des années 2000) produire environ 1 millions de bases par jour (soit 1 Mo de données brutes), la machine NGS actuellement la plus puissante, le HiSeq X de la société Illumina, peut produire jusqu'à 1 800 Gigabases (soit 1,8 Po de données brutes) tous les 3 jours [2]. Pour donner quelques ordres de grandeur, un centre comme l'Institut de Génomique du CEA, deuxième centre de séquençage européen, peut aujourd'hui produire jusqu'à 100 téraoctets de données brutes par mois, les capacités des grands centres américains ou asiatiques étant plutôt de l'ordre de 500 à 1000 téraoctets par mois. Nous voyons que nous sommes vraiment en

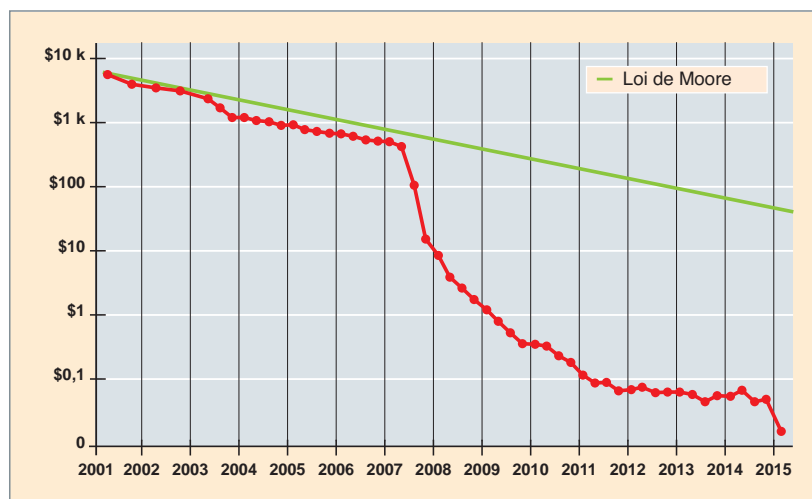


Fig. 217. Évolution du coût du séquençage de l'ADN (exprimé en \$ / million de bases de séquence brute) de 2001 à 2015.

droit, concernant la génomique, de parler de « **big data*** ». Le stockage, et surtout l’accessibilité de ces données (qui pour beaucoup de projets doivent être gardées « vivantes » sur de longues durées, souvent plusieurs années), sont donc des problématiques à part entière. Une question qui en découle, qui fait l’objet de nombreux débats et sera développée un peu plus loin, est celle de la compression de ces données et/ou des données qui sont vraiment « utiles » pour répondre aux questions biologiques ou médicales que l’on se pose ; s’agissant par exemple du reséquençage de génomes humains, nous pouvons (même si c’est en réalité un peu plus compliqué) concevoir que, dans une optique de médecine personnalisée, les seules variations de la séquence du génome individuel par rapport à un génome de référence contiennent toute l’information utile, ce qui revient à diviser par 100 à 1000 le volume de données à conserver.

Si les technologies NGS ont apporté en terme de débit un progrès plus qu’évident, il n’en va, en revanche, pas de même pour la longueur des séquences brutes produites. Le tableau ci-dessous (tableau 17) récapitule, pour les technologies citées, les principaux paramètres qui les caractérisent, dont la « longueur de lecture ». Ce paramètre a un impact essentiel sur la qualité de l’assemblage des séquences brutes pour aboutir à la séquence « finie ».

Sans entrer dans le détail car la question de l’assemblage des séquences sera développée plus loin, nous admettons généralement que pour reséquencer un génome humain (3 milliards de bases) à un niveau de qualité « acceptable », il suffit de le couvrir 5 à 6 fois (soit 18 Gb de séquences brutes) avec la technologie Sanger (longueur de lecture de 800 bases), alors qu’il faut le couvrir 30 à 50 fois (soit 90 à 150 Gb de séquence brute) avec la technologie Illumina HiSeq (longueur de lecture 150 bases). Un effet secondaire de l’arrivée des technologies « massivement parallèles » a d’ailleurs été une baisse très sensible de la qualité de la finition des séquences de génomes qui s’accumulent maintenant dans les bases de données, par rapport aux standards qui étaient en vigueur au début des années 2000.

Cet état de fait pourrait bien considérablement évoluer avec l’apparition, depuis 2011, des technologies de séquençage dites « longues lectures » ou « molécule unique », ou encore

« de troisième génération ». Celle qui paraît la plus prometteuse, proposée aujourd’hui par la société Oxford Nanopore Technologies (ONT), est basée sur le principe du passage de la molécule d’ADN à séquencer au travers d’un nanopore biologique, qui vient ainsi perturber le flux d’ions et donc le courant qui traverse le pore, lui-même inséré dans une membrane [3]. Cette technologie est encore en phase de développement intensif mais présente potentiellement un double avantage sur le plan de la qualité globale du séquençage, puisqu’elle permet (i) de générer des lectures continues extrêmement longues (en moyenne 10 à 15 kb et jusqu’à 100 kb, dans l’état actuel de la technique), et (ii) sur des fragments d’ADN uniques et donc sans biais d’amplification. Notons que si les technologies de 3^e génération devaient progresser comme nous pouvons l’espérer et, à l’horizon 5 ou 10 ans dominer le marché, nous pourrions bien assister à un second « décrochage » du coût du séquençage par rapport à la loi de Moore... Le principal obstacle aujourd’hui reste le taux d’erreurs très important associé aux technologies « molécule unique » : plus de 15 % et, ce qui pose un problème supplémentaire, ces erreurs ne sont pas aléatoires dans le cas du MinION d’Oxford Nanopore. Cela nous permet également d’introduire la notion (qui sera développée plus loin) de « modèle d’erreur » lié à chaque technologie pour le traitement bioinformatique des séquences brutes : à chaque base, séquence ou type de séquence (par exemple, riche en paires de bases GC...) est associée une certaine probabilité et/ou un certain type d’erreur il est essentiel de savoir comment une séquence a été produite pour pouvoir l’analyser correctement.

Génomique et big data : la problématique du stockage et de l’accessibilité des données

L’émergence des technologies de séquençage de seconde génération, caractérisées comme nous l’avons vu par des coûts de génération de données en forte baisse et une productivité des équipements en forte hausse, a permis l’émergence d’applications inimaginables économiquement et technologiquement il y a quelques années. En particulier, deux domaines sont porteurs d’une demande particulière sur le stockage, caractéristiques des problématiques Big Data : il s’agit de l’exploration de la diversité du vivant, particulièrement dans les écosystèmes complexes et peu accessibles à l’étude espèce par espèce, et la recherche de biomarqueurs par l’analyse sur des périodes de temps longues d’ensembles de données massives et hétérogènes. Cette dernière application est un des piliers de la médecine de précision, dont la qualité des diagnostics et des pronostics dépendra notamment de la capacité à mettre en œuvre des systèmes informatiques capables de stocker de manière pérenne (c’est-à-dire sur des

Tableau 17.

Comparaison des technologies de séquençage de première génération (Sanger), de deuxième génération (« massivement parallèles ») et de troisième génération (« molécule unique »), et des principaux paramètres qui les caractérisent			
Séquenceur	ABI 3730 xl	Illumina HiSeq X	ONT MinION
Débit	1 Mb/jour	1,8 Tb/3 jours	> 1 Gb/2 jours
Coût /Megabase	5.000 \$	0,01 \$	tbd
Longueur de lecture	800 bp	150 bp	> 10 kbp
Taux d’erreur	< 1 %	< 1 %	15 %

durées de 10 à 20 ans) des données mobilisables efficacement et en permanence sur des unités de traitement, le tout dans un contexte de sécurité particulier puisque nous pouvons considérer que les données de séquences sont hautement identifiantes.

On considère souvent qu'un domaine entre dans le champ du Big Data lorsque ses données et leur dynamique remplissent un certain nombre de critères (3V,... 7V), que nous allons examiner ci-après :

Volume : comme nous l'avons vu, un centre comme l'Institut de Génomique du CEA peut produire aujourd'hui jusqu'à 100 Tbases de données de séquence par mois. Ces données de séquences, qui seront dénommées « données brutes » dans ce texte, doivent être considérées comme des données de base, d'origine. Il s'agit du résultat de la lecture des bases des fragments d'ADN, après les opérations de traitement du signal et de déconvolution spécifiques de l'instrument. En ce sens, il s'agit vraiment de données de base, même si pour des raisons d'optimisations nous allons autant que faire se peut travailler sur des formes plus réduites : reconstitution de séquences consensus, différences par rapport à des références, différences fonctionnelles⁵⁴... Inversement, il existe un consensus général pour ne pas conserver les données de travail de l'instrument.

Dans la question du volume, se trouve aussi celle de l'accumulation de données au cours de projets d'étude s'étalant sur plusieurs années, typiquement du fait des contraintes de la collecte. Dans le cadre de la médecine de précision, nous pouvons ainsi imaginer que la nature même du problème n'ait pas de date de fin précise : en effet, c'est l'enrichissement des bases de données, avec des données de séquences, phénotypiques, environnementales, médicales (longévité, confort, réponse à un traitement...), et la confrontation en permanence de ces données avec celles précédemment acquises qui permet justement, par un mécanisme d'autoapprentissage permanent, d'affiner les diagnostics et de déterminer des biomarqueurs originaux.

Variabilité : c'est une caractéristique intrinsèque du problème. Une importante partie des codes de calcul en génomique a pour objectif de calculer une distance évolutive, associée à une probabilité qu'une différence observée soit due au hasard [4]. Par ailleurs, les données produites par chacune des différentes technologies de séquençage portent des caractéristiques différentes (longueur de lecture, type de contrainte entre deux lectures comme la taille d'in-

sert) et un modèle d'erreur particulier. Ainsi, certaines technologies produisent des erreurs aléatoires, alors que d'autres concentrent les erreurs dans ces régions particulières de l'ADN : répétition de nucléotides, en particulier. Si cette problématique affecte prioritairement les logiciels, elle n'est pas sans influence sur les exigences vis-à-vis du stockage. Il est évident qu'une incertitude sur la séquence d'ADN se propage dans la détermination de la différence vis-à-vis d'une référence. Cette contrainte peut imposer le stockage d'une version moins compacte des données, afin de conserver des capacités de levé de doutes.

Vitesse : là encore, la disponibilité des instruments (coût, environnement), la relative facilité de leur mise en œuvre et les coûts en forte baisse font que les données sont très massivement disponibles. Les systèmes à mettre en œuvre près des instruments doivent avoir des capacités en lecture et écritures (nombre d'entrées/sorties par seconde) adaptés. Cette étape est cependant facilement parallélisable. Reste que le rythme est soutenu, de l'ordre de 150 Mo/s pour une configuration Illumina X5 (5 machines HiSeq X), sans compter les opérations de déconvolution concomitantes.

Les architectures de stockage

Le domaine de la génomique se caractérise par une très importante production, principalement académique, de codes (quelques milliers), adaptés à la fois à la nature des données et des biais qui les affectent, ainsi qu'aux applications rendues accessibles par les technologies de séquençage. La quasi-totalité de ces codes sont écrits pour des systèmes UNIX, et dépendent donc de l'interface POSIX. Il s'agit d'une caractéristique favorable en première approche, puisque les systèmes UNIX supportent à la fois le prototype rapide d'applications et les environnements de production informatique. Comme nous l'avons vu, une grande partie des problèmes en génomique présentent des caractéristiques favorables vis-à-vis du parallélisme par les données. Nous mettons à profit ici la propriété d'indépendance du calcul sur une donnée vis-à-vis du calcul sur une autre donnée. Ainsi, le temps de restitution peut être réduit en travaillant sur ce découpage et en mobilisant le nombre adéquat d'unités de calcul. Deux éléments peuvent influencer négativement ce modèle : 1) le calcul peut nécessiter l'accès à une référence, dont la lecture multiple pourra être source de contention, et 2) il existe toujours une étape, plus ou moins limitante, de consolidation des résultats individuels et indépendants. Ces deux éléments peuvent nuire à la capacité du système à s'adapter aux changements d'échelle (« scalabilité »). De ce fait, le terme anglo-saxon d'« *embarrassingly parallel* » donne une fausse impression d'universalité et de simplicité de la solution.

Reste que la plupart de ces codes ne sont pas prévus pour être utilisés à des échelles aussi importantes que celles auxquelles nous sommes confrontés aujourd'hui, et encore

54. À noter qu'il est possible de considérer l'ADN comme un support de stockage en lui-même. C'est évidemment tout à fait juste, l'ADN étant le support de stockage de l'information génétique. C'est effectivement un moyen de stockage assez compact, et qui présente une relative stabilité dans le temps. Bien entendu, le temps de latence pour l'accès à l'information se compte aujourd'hui en heures, voire en jours, délai peu opérationnel !

moins demain. Aussi, un travail important est-il consacré à l'environnement d'exécution de ces codes, au découpage du flot de données en entrée et à l'orchestration du calcul, ainsi qu'à la réconciliation du résultat. Il n'y a pas en ce domaine d'algorithmique particulièrement évoluée, mais un travail d'ingénierie et d'optimisation, nécessitant une bonne connaissance des caractéristiques des systèmes d'exploitation et des systèmes de fichiers.

Concevoir une architecture de stockage performante, c'est-à-dire possédant des capacités de lecture et d'écriture élevées, n'est pas trivial. Les codes disponibles aujourd'hui exigent une interface POSIX, sauf à entreprendre des chantiers de ré-engineering massifs pour les adapter aux modèles qui seront exigés par l'exabyte (1 000 Po). Les rythmes d'apparition des codes et celui des changements dus aux évolutions des technologies de séquençage (débit, caractéristique des lectures, modèle d'erreur) font que c'est absolument impraticable. Aujourd'hui donc, la génomique doit disposer de centres de stockage et de traitement présentant aux calculateurs des systèmes de fichiers accessibles efficacement au travers d'une interface POSIX, sauf à être capable de définir et de rétro-concevoir une chaîne de traitement figée, pour une application donnée.

Nous l'avons vu, de telles quantités de données ne peuvent se mouvoir facilement, et la contrainte économique semble imposer une forme d'unité de lieu pour les données. En effet, les mobiliser efficacement impose qu'elles soient proches des unités de calcul. Se pose alors les questions de préservation de ces données, qui seront souvent uniques. De tels volumes (quelques Po à quelques centaines de Po) ne sont pas accessibles aux techniques traditionnelles de sauvegarde et d'archivage. Des solutions élégantes sont disponibles dans le cadre du modèle de stockage hiérarchique. Il s'agit d'une architecture de stockage hybride, mêlant différentes technologies (mémoire, disque, bande magnétique) mais présentant une vision unifiée des données. Autrement dit, les calculateurs ont l'illusion de voir l'ensemble des données, mais celles-ci peuvent effectivement résider sur des systèmes de stockage plus économiques sans nécessiter de modifier les codes de calcul.

Du fait du faible coût de stockage associé aux bandes magnétiques notamment, mais aussi de leur faible empreinte environnementale, il est possible d'utiliser l'accroissement de la capacité de stockage pour mettre en œuvre des systèmes *ad hoc* de préservation des données, voire de versionnement.

Pour finir, il faut revenir sur la confidentialité des données. Rien n'est plus identifiant que la séquence génomique d'un individu. L'anonymisation des données n'a donc quasiment pas de sens en ce domaine, puisque cela reviendrait à anonymiser justement les données d'étude ! Cette information porte en outre des informations prédictives, et au-delà, des

informations touchant ses descendants, ascendants ou sa fratrie.

Des solutions élégantes sont en train d'apparaître, sous les termes de « chiffrement homomorphe ». Le chiffrement homomorphe permet de calculer sur une donnée chiffrée, et d'obtenir un résultat lui-même chiffré. Avec un crypto-système à deux clés (publique et privée), il devient possible de garantir que les données sont conservées sur le centre de stockage et de traitement sous une forme chiffrée, non déchiffrable sans la clé, et que le centre de traitement ne connaît à aucun moment les données en clair. La gestion des clés permet alors d'organiser et de garantir les conditions de diffusion de l'information. La recherche sur ces crypto-systèmes est récente, mais très active [5,6]. Actuellement, deux écueils subsistent : le temps de calcul est assez fortement pénalisé, et les besoins de stockage sont significativement augmentés. Ce domaine de recherche a été clairement identifié comme un contributeur aux questions de confidentialité dans le domaine de la génomique médicale [7].

Génomique et big data : format et compression des données

Les séquenceurs Illumina de dernière génération (HiSeq X), sont capables de produire une séquence de génome humain (couvert 30 fois) toutes les 4 heures en moyenne, et produisent un volume colossal de données brutes, qui sont traitées par le logiciel fourni par Illumina et sorties dans un format dit « fastq », utilisable par les bioinformaticiens. Ces données fastq pèsent toutefois encore environ 260 Go par génome, soit 1,56 To de fastq cumulés par jour et par machine. Or, l'espace disque où s'accumulent les fichiers produits par ces séquenceurs, ainsi que les fichiers résultant des calculs bioinformatiques qui s'ensuivent, est physiquement limité. En l'état, même en archivant les données sur bandes, et en les supprimant des disques peu après la clôture de chaque projet de séquençage, le volume total occupé par tous les projets en cours reste conséquent. De plus, comme le stockage réside au sein de baies de disques connectées au réseau local, les serveurs de post-traitement et d'analyse consomment d'autant plus de bande passante que les fichiers sont volumineux.

Si nous prenons l'exemple de l'Institut de Génomique, dont le réseau local est en 10 Gbit/s, le débit du dispositif de stockage constitue le facteur limitant. D'ailleurs, 10 Gbit/s n'équivalent qu'à 1,16 Go/s, et donc ces fichiers prennent beaucoup de temps à lire, même au débit maximal. Le Centre de Calcul du CEA fournit par ailleurs à l'Institut de Génomique un espace de 5 Po (dont 3 sur bandes dans ce stockage hiérarchique HSM), accédés à un débit de 100 Go/s depuis leurs calculateurs, et un mécanisme d'archivage sur bandes des fichiers fastq expédiés *via* Internet.

Pourtant, ces fichiers sont constitués uniquement de texte, où certains caractères dominent très largement. Historiquement, la génomique a beaucoup exploité les outils Unix de manipulation de fichiers texte, et le langage Perl, puisque son centre d'intérêt, l'ADN, se résume à une suite de lettres. Ce n'est que depuis tout récemment que des appareils produisent des formats binaires ou adaptés au traitement parallèle, tel que le format Fast5, basé sur le HDF5, dans le cas des séquenceurs Nanopore. De nombreux programmes en génomique traitent et produisent toujours du texte.

Dès lors, l'idée de compresser tous ces fichiers texte s'est imposée logiquement au sein de la communauté bioinformatique. Cette solution simple réduit l'espace occupé sur disque, et *de facto* le débit réseau nécessaire, au prix d'une consommation accrue de temps de calcul CPU afin de décompresser à la volée avant tout calcul, et de compresser le résultat en sortie. Les bioinformaticiens intègrent ces opérations dans leurs chaînes de calcul, autour des logiciels qui ne peuvent gérer directement des fichiers compressés. Cependant, un nombre croissant de programmes emblématiques prend en charge nativement ces fichiers compressés. Quant aux autres logiciels d'analyse, ils s'orientent désormais vers des formats de fichier incorporant diverses méthodes de représentation et de compression des données.

La figure 218 ci-après illustre les rendements (taux de compression) et les coûts (temps CPU) de divers algorithmes très répandus utilisés pour compresser les données brutes de format fastq.

Nous voyons que l'algorithme de compression Lzo est très rapide, efficace et économe en CPU, idéal pour le stockage du fastq durant toutes les étapes de prétraitement sur ce fichier. Deflate est le meilleur compromis pour stocker la ver-

sion finale du fichier, avant de lancer les analyses dessus. L'emploi d'une implémentation parallèle de Deflate rend son temps de compression ou de décompression négligeable au prix d'une consommation accrue de temps de calcul CPU. Bzip2 et LZMA2 apportent trop peu par rapport à leur coût. L'outil lbzip2 (bzip2 parallèle) permet d'abaisser son temps au niveau de celui de gzip, mais en utilisant plus de cœurs. BZip2 est plus lent que Deflate en décompression, notamment dans ses implémentations en pur Java. Quant au xz (LZMA2) parallèle, il demeure trop lent.

L'algorithme retenu à l'Institut de Génomique est Deflate (basé sur les algorithmes LZ77 et Huffman), tel qu'implémenté dans l'outil gzip, pour sa portabilité et son bon rapport rendement/coût. Afin d'améliorer les temps de compression et de décompression, une version parallèle de l'algorithme a été mise en œuvre : pigz [8]. Ce programme exploite quatre CPUs maximum en décompression. En compression, le nombre de CPUs idéal plafonne quand ceux-ci parviennent à traiter le flux entrant aussi vite que la lecture depuis les disques le permet. Ce débit maximum est atteint avec douze à vingt-quatre CPUs sur les serveurs de l'Institut, selon la charge des disques. Sur ces machines, les étapes de compression et de décompression ont lieu au sein de travaux auxquels plusieurs CPUs sont déjà alloués en vue de calculs parallèles. Il est donc optimal d'employer ce même nombre de CPUs dans les étapes de compression afin de ne pas gaspiller de temps CPU.

Après le cas des données brutes réglé par compression en fichiers fastq.gz, l'attention se porte sur les formats de fichiers d'analyse. Dans les analyses de génomique humaine telles que celles pratiquées à l'Institut de Génomique, les séquences des divers fragments d'ADN rassemblés au sein d'un fichier fastq font l'objet d'un alignement sur le génome humain de référence. Le fichier ainsi obtenu est au format BAM, qui intègre déjà une compression Deflate

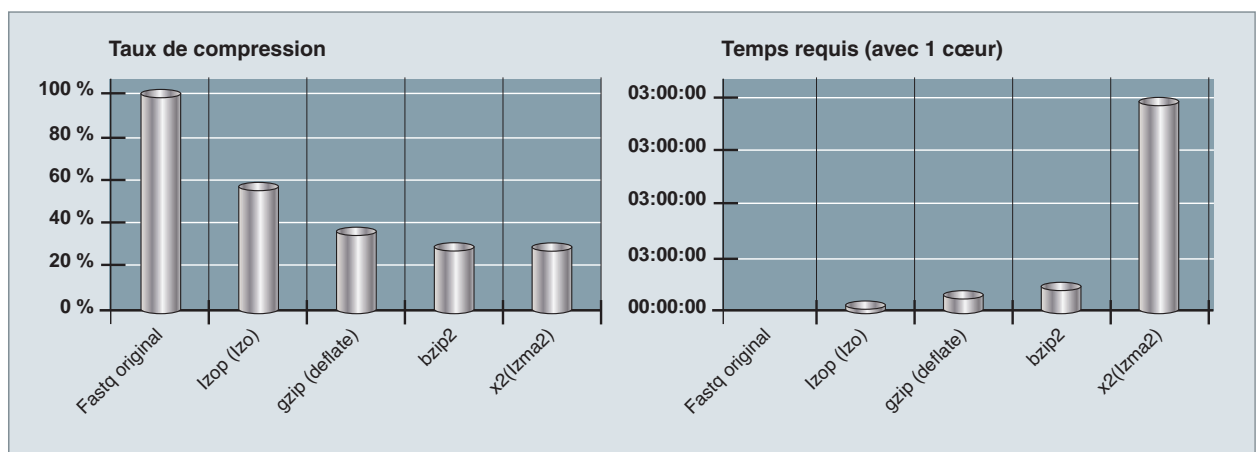


Fig. 218. Compression de 21 Go de données fastq issues d'un séquenceur Illumina HiSeq 2500.

sur la majeure partie de son contenu. Cependant, il existe un format alternatif, CRAM 3.0, qui réduit encore la taille de ces fichiers, en combinant de la suppression d'information redondante et de la compression [9]. Les éléments du fichier BAM d'origine sont réorganisés de façon à minimiser les redondances dans les métadonnées. Puisque le fichier BAM résulte d'un alignement sur un génome de référence, le format CRAM va plus loin en ne conservant que les différences entre la séquence alignée et la référence [10]. De surcroît, les valeurs de qualité des séquences peuvent être réduites à des intervalles de valeurs. Cela diminue leur précision mais aussi la taille de leur représentation numérique (« lossy compression »). À raison d'une valeur par base ADN séquencée, cette réduction divise encore par deux la taille du fichier final (fig. 219).

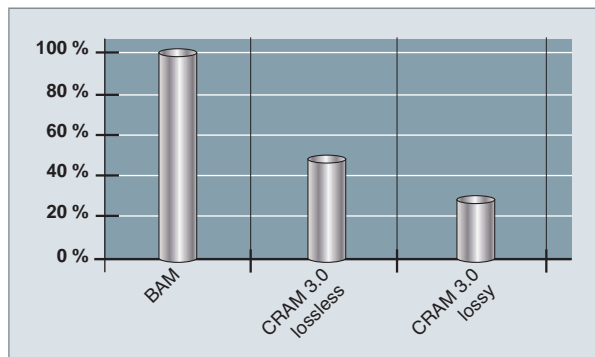


Fig. 219. Taux de compression moyen obtenu par conversion de BAM vers CRAM sur un génome humain complet en utilisant le génome de référence hg19. Tous les convertisseurs testés ont fait gagner environ 50 % sur la taille (lossless) du BAM original. L'utilisation de Bzip2 au lieu de Deflate en interne n'apporte que 1 % supplémentaire en prenant le double de temps.

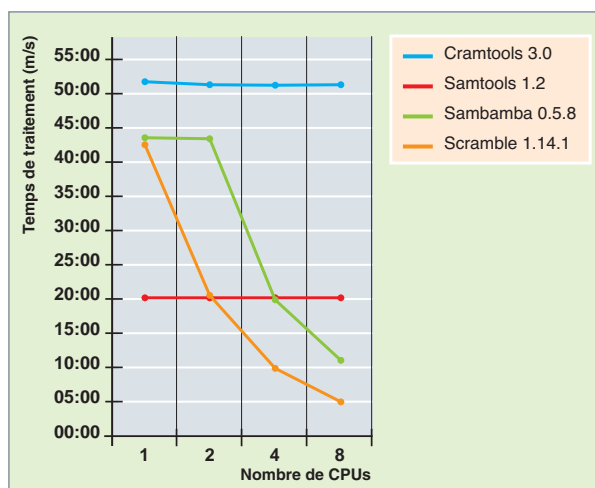


Fig. 220. Conversion d'un même fichier BAM de 22 Go vers CRAM (lossless) grâce à divers logiciels. Samtools et Cramtools ne sont pas parallélisables. Dans notre essai, Scramble [11] atteignait les limites en lecture disque avec 8 CPUs, nous n'avons donc pas tenté au-delà. Scramble en mode lossy (non figuré) prend autant de temps qu'en mode lossless.

Plusieurs bibliothèques centrales aux logiciels lisant du BAM prennent aussi en charge le format CRAM, dont htslib en C (samtools, pysam), htsjdk (Java), picard (1.133), ce qui lui assure une plus large portabilité que des formats concurrents [12,13,14].

La séquence de référence, conservée sous forme compressée sur disque, est décompressée vers un système de fichiers résidant en mémoire vive afin d'en accélérer la lecture à chaque itération lors de conversions massives de fichiers BAM vers CRAM (fig. 220).

Le traitement des données : introduction

Dans le domaine de la génomique, deux grands types d'usage représentent l'essentiel des applications nécessitant de gros besoins de calcul : l'assemblage (la reconstitution *de novo* de génomes complets ou de fragments de génomes à partir des données de séquençage brutes) et la comparaison de séquences avec des séquences déjà connues. Ces deux approches présentent des spécificités de calculs différentes, avec néanmoins deux caractéristiques globalement partagées : l'importante quantité de données à manipuler (des fichiers de plusieurs dizaines ou centaines de Go sont courants en comparaison de séquence, et ce sont des To de données qu'il est nécessaire de manipuler) et la quasi-impossibilité de prévoir et de calibrer le temps d'exécution. Ces deux faits suffisent à compliquer grandement le portage de beaucoup d'outils bioinformatiques vers les centres de HPC.

Pour ce qui est des comparaisons de séquence, nous sommes dans une situation où le calcul est indépendant pour chaque séquence requête. Nous utilisons cette propriété pour paralléliser les calculs en découpant le jeu requête en plusieurs paquets, chacun exécuté de façon indépendante sur un nœud de calcul. Cependant, du fait de la difficulté de prévoir le temps de calcul d'une comparaison de séquences, nous sommes dans une situation où nous devons distribuer sur les nœuds des tâches dont le temps d'exécution est variable. Afin de maximiser l'usage des ressources de calcul, il est nécessaire d'utiliser des systèmes *ad hoc* de gestion (fig. 221).

Pour l'assemblage *de novo*, en revanche, les besoins sont plutôt de type « pas de parallélisation possible » (hors du « *multithreading* ») et énormément de mémoire nécessaire (des machines avec 4 To de RAM sont classiquement utilisées aujourd'hui). Les temps de calcul sont généralement longs : plusieurs jours, voire plusieurs semaines.

La taille conséquente des fichiers de données manipulés aujourd'hui en génomique pose aussi un certain nombre de contraintes quant aux ressources informatiques néces-

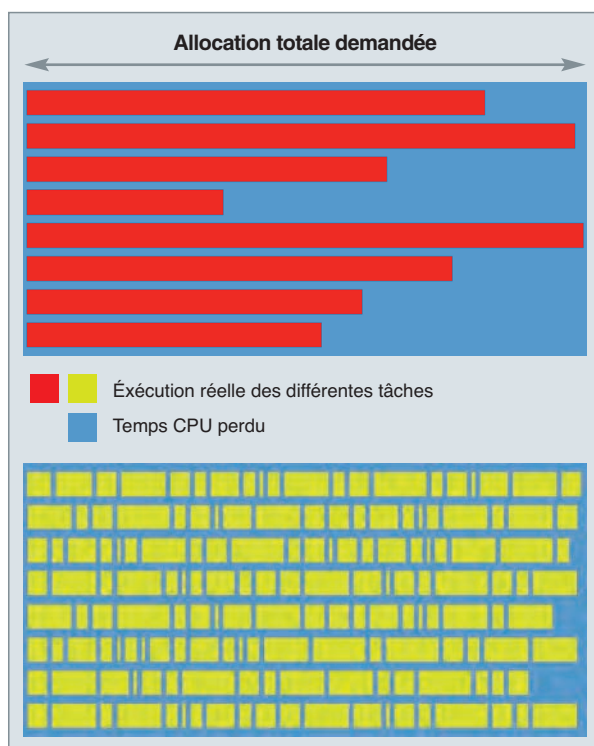


Fig. 221. Stratégie d'adaptation de calculs de durée variable pour optimiser l'usage des ressources ; dans la première situation, le déploiement direct d'unités de calcul de durée variable sur les nœuds de calculs se traduit par une perte globale d'efficacité. Dans le second cas, en sur-découpant les unités de calculs et en utilisant un système sous-jacent de distribution, l'usage global de la ressource est amélioré, au prix d'une multiplication du nombre de fichiers à manipuler, ce qui nécessite aussi une adaptation pour que le système de fichiers puisse l'absorber.

saies : les données doivent être au plus proche des moyens de calcul, et les capacités en lecture/écriture doivent être adaptées. Ainsi, il paraît peu praticable, pour les projets génomiques d'envergure, d'utiliser les ressources de « *cloud computing* » à grande échelle, ne serait-ce que par le temps nécessaire au transfert des données vers les sites de calcul. De même, certaines infrastructures de calcul HPC bien adaptées à la simulation, avec entre autres les machines hyperparallèles de type IBM BlueGene/Q, ne sont que peu utilisables en génomique. Seules deux des six ressources de calcul de type Tier-0 en Europe [15] sont adaptées aux besoins spécifiques de la génomique à grande échelle, l'une de ces machines étant CURIE, au TGCC, en banlieue parisienne. Nous verrons que dans le cadre de vastes projets de génomique, comme, par exemple, dans le projet Tara Océans, qui vise à décrire la diversité des organismes planctoniques marins à l'échelle planétaire, cette ressource constitue le pilier principal des moyens d'analyse des données produites, à savoir près de 100 Tbases (10^{14} bases) de séquences à ce jour.

Le reséquençage : données et calcul haute performance pour le génome humain

Historique et croissance des données

Depuis la complétion du projet Génome Humain en 2001, les avancées technologiques ont permis de séquencer les génomes beaucoup plus vite, plus facilement et surtout pour beaucoup moins cher. En 2015, sont recensés plus de 2 000 génomes humains complètement séquencés [16]. Avec l'arrivée de nouvelles plates-formes permettant le séquençage de plusieurs milliers de génomes par an, une nouvelle ère est née, celle du séquençage des populations, moteur essentiel des plans de la médecine de précision. Avec ces progrès, le volume de données produites en génomique humaine est entré dans les échelles du Peta-Octets. Par exemple, le Consortium International Genome Cancer (ICGC, voir : <https://icgc.org/>) a accumulé plusieurs Peta-octets de données au cours de ces cinq dernières années, données qui doivent être analysées.

Un enjeu majeur devient ainsi le stockage et la partage de ces données. Des bases de données centralisées rendent l'information disponible, mais les volumes en jeu nécessitent des infrastructures de haute performance pour réaliser des analyses intégratives. Il s'agit d'un véritable changement de la manière dont les biologistes accèdent et analysent les données – celles-ci ne peuvent plus être transférées vers les analyses – c'est aux analystes (aujourd'hui les bioinformaticiens) à venir vers les données et apprendre à exploiter des ressources de calcul haute performance.

Les analyses informatiques en génomique humaine

Dans les programmes de génomique humaine réalisés par exemple à l'Institut de Génomique du CEA, les analyses bioinformatiques exécutées sur le calculateur visent à identifier, dans l'ensemble des lectures, les déterminants génétiques (les **mutations***) impliqués dans différents pathologies (maladies rares, complexes, cancers). Afin d'opérer ces analyses dans des temps compatibles avec les rythmes de production de données, les chaînes de traitement pour l'analyse des données, issues des travaux de développement algorithmique, doivent être mises en œuvre sur le cluster HPC pour exploiter au mieux les capacités de traitement parallèle.

Un tel « *workflow* » pour l'analyse d'**exomes*** est illustré en figure 222. Ce *workflow* commence par analyser un ensemble de « lectures » du génome, tout d'abord en comparant chacune d'entre elles (environ 300 millions de lectures par génome) à un génome de référence à l'aide d'algorithmes de type Burrows-Wheeler [17]. Chaque calcul étant indépendant, cette phase est facilement distribuée, sous un mode « *map / reduce* ».

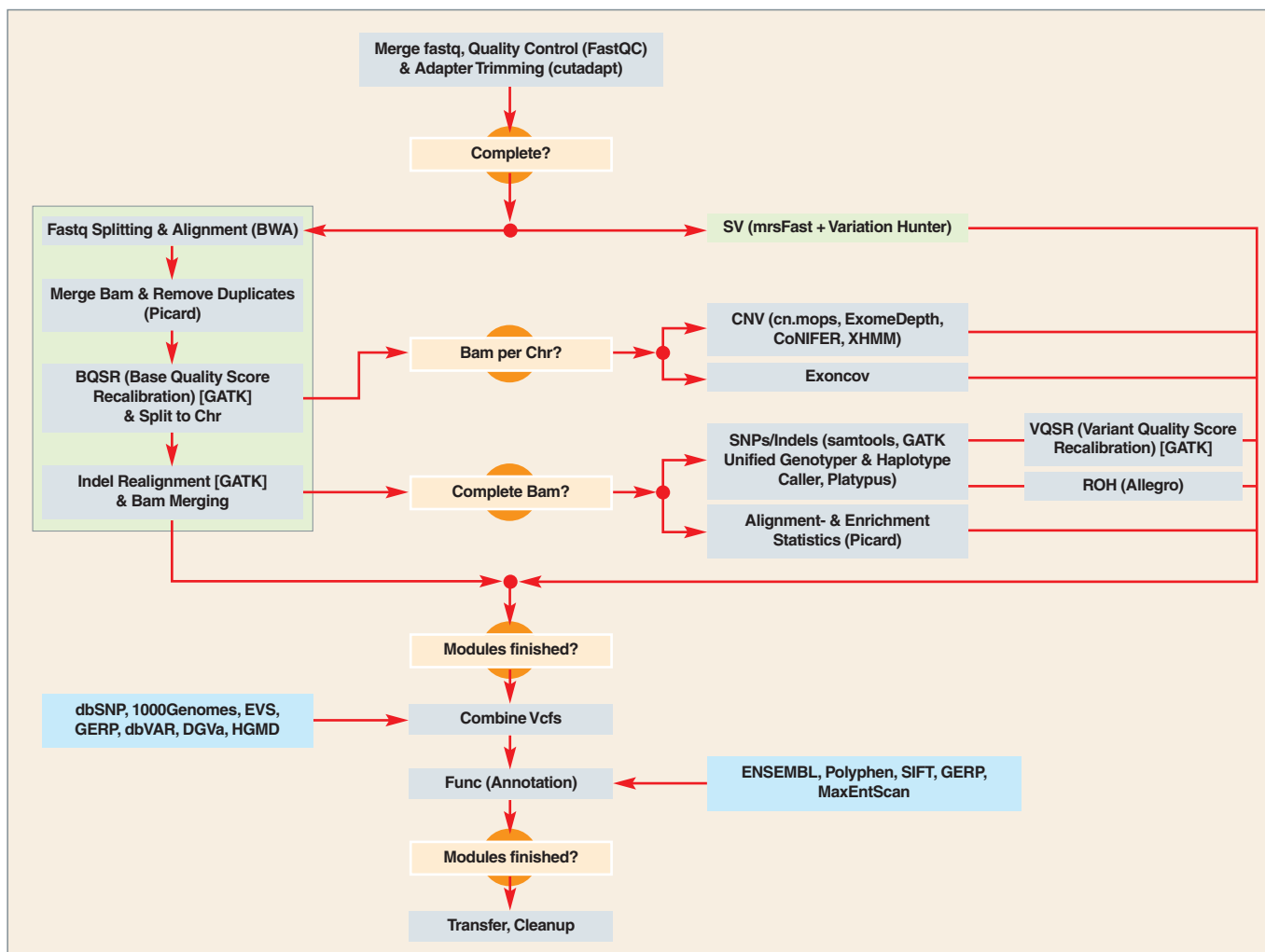


Fig. 222. Schéma de calcul ou *Workflow* d'analyse d'exome [18].

Les résultats d'alignement sont ensuite réindexés en fonction de leur position sur le génome, ce qui permet de déterminer, position par position, pour chaque échantillon, l'ensemble des différences (mutations ponctuelles, insertions, délétions, remaniement génomiques...) relatives au génome de référence. Cette phase, « *variant calling* » s'appuie sur des outils logiciels développés dans de grands centres de génomique comme, par exemple, le « *framework* » d'analyse de variants GATK développé au Broad Institute et s'appuie sur des algorithmes d'assemblage locaux *de novo* [19]. Finalement, l'ensemble des polymorphismes détectés, de l'ordre de 3 millions par génome, doit être comparé à un ensemble de bases de données de connaissances pour trouver des associations génétiques ou fonctionnelles avec des fonctions biologiques ou des états pathologiques. Cette phase, d'annotation, produit pour chaque échantillon analysé un fichier au format standardisé « *vcf* » (*variant calling format*), fichier d'échange qui peut être ré-exploité, réinterrogé ou redistribué.

Aujourd'hui, le « portage » des chaînes de traitement bio-informatiques réalisés par les équipes de l'Institut de Génomique et du TGCC, sur le supercalculateur, fournit une infrastructure capable de traiter plus d'une centaine de génomes humains en parallèles (160 cœurs par génome) avec un temps réel de restitution d'une dizaine d'heures.

Les perspectives : les partages de données

La dernière phase des processus d'analyse, l'annotation, introduit une notion critique de l'analyse génomique : étant donné la rareté des événements génétiques (la majorité des polymorphismes est privé à un individu et à ses proches), les données produites pour chaque échantillon ne prennent de sens et de valeur que si elles peuvent être croisées avec de nombreuses bases de données et notamment avec d'autres échantillons, idéalement avec l'ensemble des génomes connus [20]. Le partage des données génomiques devient ainsi un enjeu majeur de la génomique. Piloté par les grandes universités américaines pour stimuler la translation des connaissances génomiques fondamentales vers des

applications biomédicales, un cadre de réflexion (*Global Alliance for Genomics and Health*, voir : <http://genomicsandhealth.org/>) définit aujourd'hui les grands éléments (standards de qualité, sécurité, gouvernance, transparence, confidentialité...) pour répondre à ce nouvel enjeu lié à la médecine personnalisée.

Le traitement des données : le séquençage *de novo* et l'assemblage

Le séquençage *de novo* du génome d'un organisme vivant vise à reconstituer la séquence de chacun de ses chromosomes : ces chromosomes sont, suivant les organismes, de taille très variable, de l'ordre du million de bases pour les bactéries jusqu'à plusieurs centaines de millions chez les mammifères, par exemple. Le génome humain est composé de 23 paires de chromosomes avec une taille globale de 3 200 millions de bases (3,2 Gigabases). Un autre exemple : le génome du blé est lui composé de 21 paires de chromosomes pour une taille totale de 16,5 Gigabases. La chute drastique du coût du séquençage aboutit à une multiplication des projets de séquençage, et l'informatique joue un rôle de premier plan dans cette « course au génome », d'autant plus que, comme nous l'avons vu en introduction, les technologies actuelles (« massivement parallèles ») ne permettent de lire que des séquences d'ADN très courtes (les « lectures »), typiquement 100 à 150 bases.

Pour reconstituer ces génomes gigantesques, il faut donc « lire » un grand nombre de courts fragments d'ADN, et même produire un volume de séquence plusieurs fois supérieur à la taille du chromosome : ces lectures redondantes permettent de raccorder les séquences les unes aux autres, à la façon d'un immense puzzle. La résolution de ce puzzle

est compliquée pour plusieurs raisons : les lectures contiennent des erreurs, certaines régions du génome sont difficiles à séquencer et ne seront donc pas représentées dans l'ensemble des lectures, et pour finir les génomes contiennent de nombreuses répétitions, dont certaines sont très longues (plusieurs milliers de bases). Ce processus complexe, appelé « assemblage » reste un des verrous actuel de la génomique. Les répétitions produisent des ambiguïtés dans le graphe d'assemblage avec pour conséquence la fragmentation des séquences reconstituées (fig. 223). Ainsi, pour un génome humain à 23 chromosomes, un assemblage à base de courtes lectures produit plusieurs milliers de séquences.

De nombreux algorithmes ont été développés ces dernières années pour répondre à cette problématique de l'assemblage des génomes. Chacune de ces méthodes étant en général adapté à un type particulier de séquenceur et donc de données produites (longueur de lectures, taux d'erreurs...). Avec les technologies actuelles de séquençage, un concept mathématique connu sous le nom de « graphe de De Bruijn » a permis de transformer l'assemblage d'un génome à partir de milliards de lectures en un problème informatique soluble [21]. Pour assembler un génome, les méthodes basées sur les graphes de De Bruijn découpent les lectures en morceaux chevauchants de k bases : les k -mers (fig. 224a).

L'ensemble des k -mers pour un génome donné est borné. Cependant, à cause des erreurs de séquençage, il est difficile d'estimer cette borne supérieure. En général, les k -mers contenant des erreurs de séquençage sont peu fréquents. Une des premières étapes de l'assemblage vise donc à compter la fréquence de chaque k -mer pour ensuite éliminer les k -mers peu fréquents. Pour calculer la fréquence des k -mers, il est indispensable de les stocker en mémoire, ce qui pour des valeurs de k élevés peut demander un grand espace d'adressage. Par exemple, pour $k = 127$ il existe 4127 k -mers différents. En compressant chaque base sur 2 bits, on peut donc stocker un 127-mers sur 8 octets auquel il faut rajouter 4 octets pour stocker le nombre d'occurrence d'un k -mer donné. Il est donc possible de stocker 4^{36} 127-mers différents sur une machine disposant d'un espace d'adressage de 2To, soit une toute petite proportion de l'ensemble des 127-mers. L'étape suivante consiste en la création d'un graphe de k -mers (figures 224b et 224c). Le parcours de ce graphe permet de produire une séquence « correspondant » à la séquence du génome étudié. Les répétitions et les erreurs créent des ambiguïtés dans ce graphe (fig. 224d), il existe cependant des heuristiques, propre à chaque programme, permettant de diminuer le nombre d'ambiguïté et, par conséquent, augmenter la continuité de la séquence. De nombreux génomes sont assemblés avec ces outils sur des machines disposant de 512 Mo à 2 To de mémoire. Le facteur limitant aujourd'hui est la disponibilité, dans de bonnes conditions économiques, de machines de plus de 2 To de mémoire.

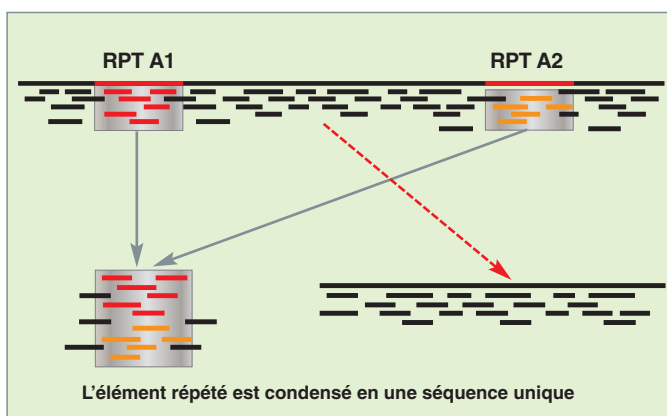


Fig. 223. Effet des régions répétées (ici en orange et rouge) sur l'assemblage. Les lectures orange et rouge provenant des deux régions répétées A1 et A2 étant identiques, elles vont s'assembler en une séquence unique. L'assembleur ne peut donc reconstituer la séquence originale.

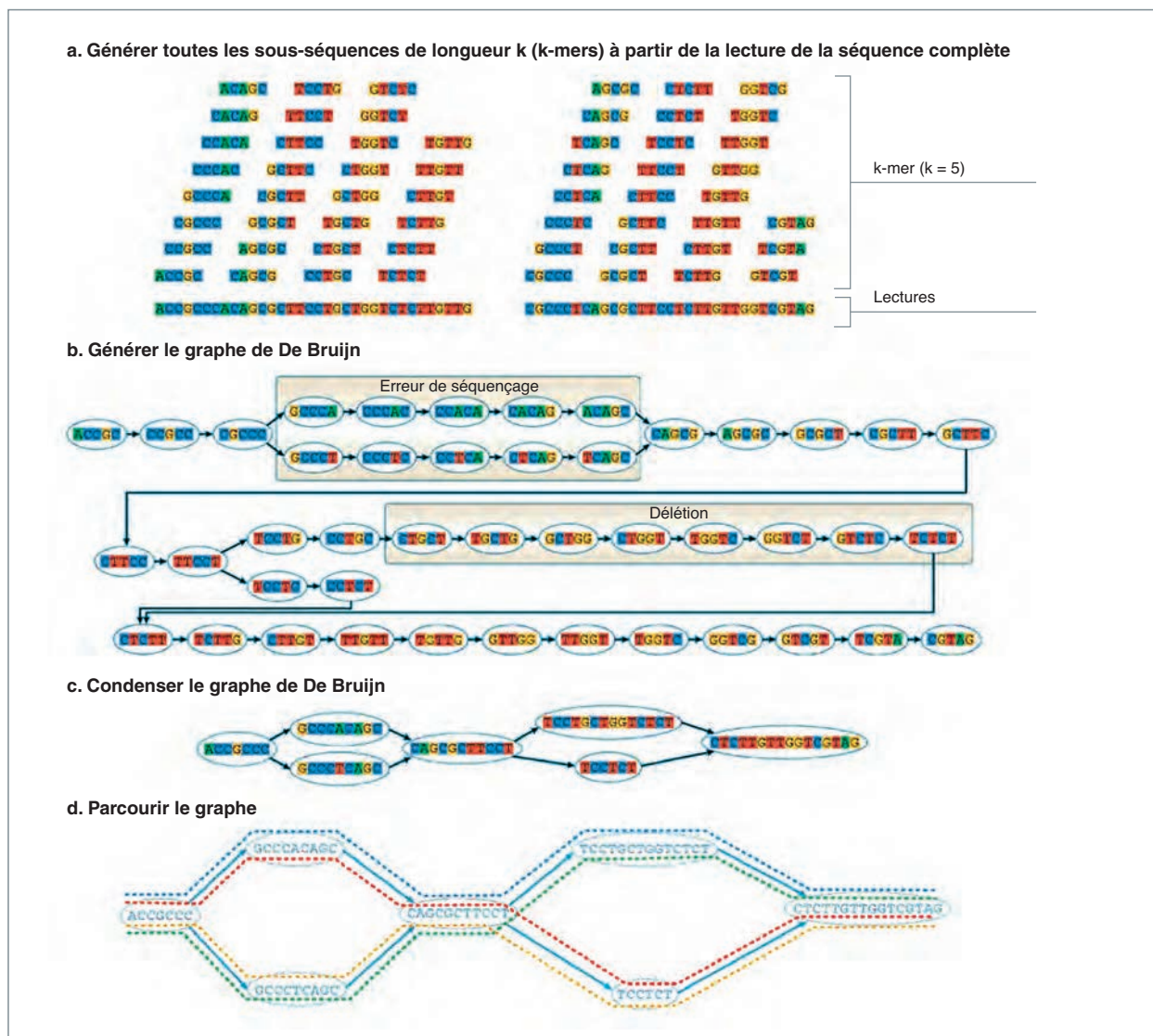


Fig. 224. Représentation des différentes étapes de l'assemblage. a) Les k-mers sont produits à partir des lectures, ici $k = 5$. b) Chaque k-mer unique représente un nœud dans le graphe de De Bruijn et une paire de nœuds est connectée si, en décalant un k-mer d'un caractère, on obtient deux $(k-1)$ -mers identiques. L'exemple montre une erreur de séquençage (A/T) et une délétion. Les différences d'une base créées des « bulles » de taille k dans le graphe. c,d) Les chaînes de nœuds adjacents dans le graphe sont collapées en un unique nœud, quand le 1^{er} nœud a un degré de sortie de 1 et le second nœud un degré d'entrée de 1. Pour finir, le parcours du graphe permet d'extraire la séquence finale. Ici, à cause des ambiguïtés, nous obtiendrons 7 séquences correspondant à chaque nœud du graphe. (extraite de [22]).

Certains projets, appelés métagénomiques, ont pour but la caractérisation (au niveau génomique) d'échantillons complexes. Ces échantillons représentent un mélange de nombreuses cellules. Il faut donc, dans ce cas, reconstituer, non pas la séquence d'un génome, mais la séquence de nombreux génomes. Ce qui, en terme de mémoire, devient problématique. En effet, l'ensemble des k-mers différents est spécifique à chaque génome, chaque espèce présente dans l'échantillon de départ va venir augmenter le nombre maximal de k-mers différents. Par exemple, le projet Tara Océans [23] vise à comprendre la biocomplexité du plus grand écosystème planétaire que représente le plancton océanique. Les écosystèmes planctoniques marins représentent > 98 %

du volume de notre biosphère. Encore très peu étudiés, ces écosystèmes contiennent pourtant de 10 à 100 milliards d'organismes par litre d'eau de mer, une ressource énorme et inconnue. Depuis le démarrage du projet, le Genoscope explore cette collection unique par des méthodes de séquençage de l'ADN. Cette expédition a parcouru tous les océans de la planète (entre 2009 et 2012) et a effectué près de 900 prélèvements en trois ans, dans le but d'explorer la diversité du plancton et de relier ces paramètres biologiques aux paramètres physico-chimiques enregistrés. Le Genoscope s'intéresse plus particulièrement à des microorganismes eucaryotes unicellulaires que l'on appelle « protistes ». Leur impact sur les cycles géochimiques globaux et

Tableau 18.

Assemblages réalisés avec un nombre croissant de lectures en entrée

La complétion de l'assemblage représente le nombre de gènes communs à tous les eucaryotes identifiés dans chaque assemblage.

Nombre de séquences ADN (millions)	Nombre de CPU utilisés	Mémoire virtuelle (Go)	Taille de l'assemblage (Mb)	Complétion de l'assemblage
590	32	569	121	87,9 %
892	32	826	221	91,6 %
1 199	32	1 111	270	90,3 %
1 404	32	1 278	316	90,7 %
3 560	32	2 848	915	98,8 %
4 881	128	3 831	1152	98,4 %

le climat est extrêmement important. Ils représentent, en effet, un des maillons essentiels de la chaîne alimentaire, absorbent la moitié de notre production en CO₂ et dégagent 50 % de l'oxygène de la planète. Malgré cela, leur extraordinaire biodiversité reste encore à découvrir.

Pour reconstituer la séquence du génome de ces organismes (pour la plupart incultivables) il n'y a pas d'autre moyen que de les prélever directement dans leur environnement ; il est impossible de les isoler. Dans ce contexte, l'espace d'adressage des calculateurs actuels ne suffit plus. Pour ce faire, nous avons collaboré avec Bull dans le cadre d'un projet nommé TIMCO (Technologie pour *In-Memory Computing*) et financé par l'appel à projet FUI (Fond Unique Interministériel, qui finance des projets collaboratifs de R&D labellisés par les pôles de compétitivité). L'ambition du projet TIMCO, lancé en 2012 pour trois ans, était de concevoir des systèmes adaptés à un très large spectre de besoins dans le domaine de calcul nécessitant de très grandes mémoires

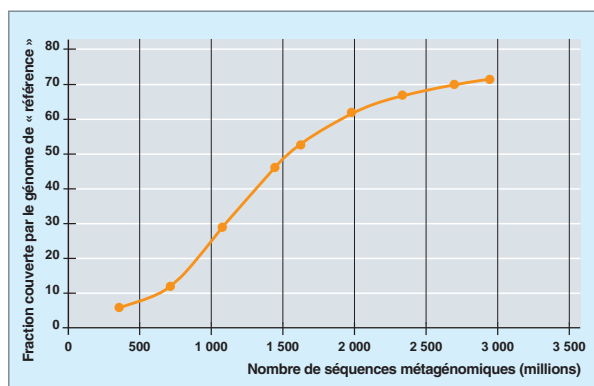


Fig. 225. Les métagénomes obtenus avec la stratégie précédente ont été caractérisés biologiquement, en étudiant, par exemple, la représentativité d'un génome connu d'une algue marine. Nous voyons qu'en co-assemblant un très grand nombre de lectures (axe x), nous parvenons à obtenir une séquence presque complète du génome de l'algue marine (axe y).

(*In-Memory Computing*). L'objectif sera d'atteindre une taille mémoire adressable de 24 To. Le Genoscope est partenaire de ce projet d'un point de vue applicatif, notamment pour tester l'assemblage de méta-génomes complexes, issus du projet Tara Océans, sur ce prototype. Dans un premier temps, Bull a livré un prototype disposant de 4 To, et à partir duquel nous avons pu réaliser plusieurs assemblages (tableau 18) et vérifier l'intérêt d'assembler un grand nombre de séquences lorsque nous travaillons avec des échantillons environnementaux complexes (fig. 225).

Dans le projet Tara Océans le nombre de gènes reconstitués avec succès dépend beaucoup plus aujourd'hui des capacités à assembler un grand nombre de séquences, que de la capacité à les produire. Nous limitons aujourd'hui la production de séquences par échantillon en raison de ce verrou.

Conclusion et perspectives

En guise de brève conclusion, soulignons la multiplicité grandissante des applications des technologies de séquençage, telle que la figure 226 ci-dessous l'illustre : loin de ne concerner que l'analyse des génomes (séquençage *de novo* ou reséquençage), la génomique au sens large couvre l'analyse de l'expression des gènes (RNAseq...) aussi bien que les différents aspects de l'épigénomique. La très grande profondeur de séquençage qu'autorisent les technologies actuelles, ainsi que la baisse des coûts, permettent par ailleurs d'adresser toute la complexité de certaines questions, très diverses, comme l'hétérogénéité clonale des tumeurs en oncologie, l'analyse d'écosystèmes dans leur entièreté (approche métagénomique de la biodiversité), ou encore le séquençage « cellule unique » de microorganismes non cultivables.

Cela se traduit également, en termes de traitement et d'analyse des données, par la grande diversité et l'évolution rapide des algorithmes et pipelines mis en place, qui doivent être exactement adaptés aux questions posées et aux stratégies, méthodes et technologies employés pour y répondre. Le dynamisme de la communauté bioinformatique est une des caractéristiques de la génomique, et les exemples décrits plus haut des *workflows* mis en place pour le traitement et l'analyse des données issues des séquençages d'exomes ou de génomes en lien avec des pathologies humaines, ou encore dans le domaine de l'assemblage *de novo* pour la métagénomique, illustre cette diversité et cette complexité.

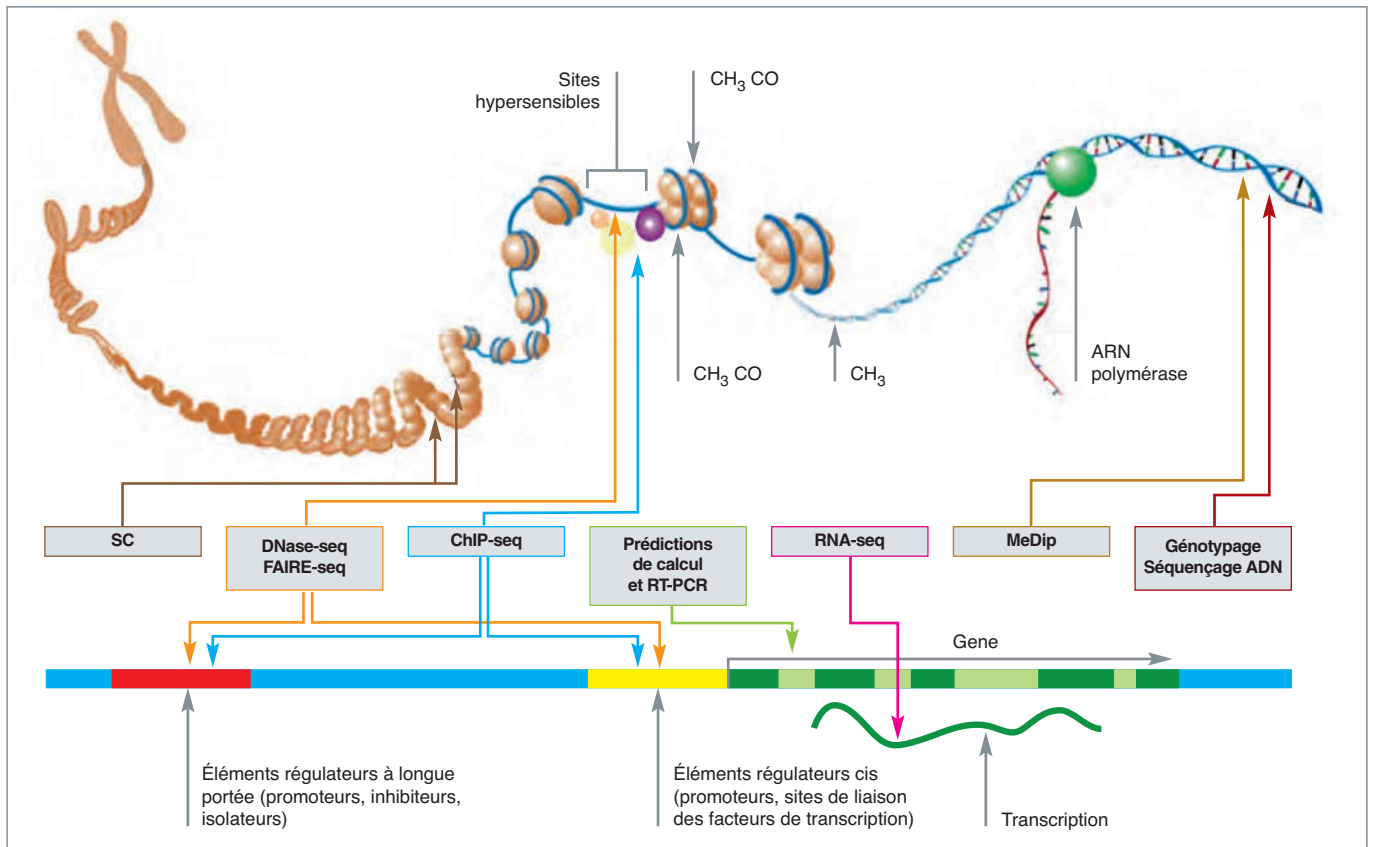


Fig. 226. Loin de ne concerner aujourd'hui que l'analyse des génomes (génomique *stricto sensu*), les technologies de séquençage s'appliquent aujourd'hui à analyser à haut débit l'expression des gènes (transcriptomique) aussi bien que les mécanismes de régulation de cette expression (épigénomique).

Enfin, nous avons également évoqué le développement de la médecine personnalisée génomique qui, au-delà des volumes de données à stocker et à traiter, pose des défis d'un autre ordre : partage des données et méta-analyses, interopérabilité avec des données de nature différente (clinique, imagerie, protéomique, etc.), possibilité pour les praticiens d'interroger les données « en temps réel », le tout dans des conditions inattaquables de sécurité et de confidentialité des données génomiques, transcriptomiques, épigénomiques. Ce sont, entre autres, ces défis qui devront être relevés afin que la France puisse entrer de plain-pied dans la médecine du futur [24] et réaliser les promesses de la génomique dans ce domaine.

**Pierre LE BER, Claude SCARPELLI, Nicolas WIART,
Éric PELLETIER, François ARTIGUENAVE et Jean-Marc AURY,**
Institut de biologie François-Jacob

► Références

- [1] K.A. WETTERSTRAND, DNA Sequencing Costs: Data from the NHGRI Genome Sequencing Program (GSP) Available at: www.genome.gov/sequencingcosts.
- [2] E.C. HAYDEN, "Technology: The \$1,000 genome", *Nature*, vol. 507, issue 7492, 2014.
- [3] *How it works: the MinION for nanopores DNA sequencing*, <https://nanoporetech.com/science-technology/how-it-works>
- [4] S.F. ALTSCHUL *et al.*, "Basic local alignment search tool", *Journal of molecular biology*, 215(3): 403-10, 1990.
- [5] M. VAN DIJK *et al.*, Fully Homomorphic Encryption over the Integers, Eurocrypt (2010).
- [6] C. AGUILAR-MELCHOR *et al.*, "Recent Advances in Homomorphic Encryption: A Possible Future for Signal Processing in the Encrypted Domain", *IEEE Signal Processing Magazine*, March 2013.
- [7] <http://www.humangenomeprivacy.org/2015/index.html>
- [8] <http://zlib.net/pigz/>
- [9] G. COCHRANE, C.E. COOK and E. BIRNEY, "The future of DNA sequence archiving", *Gigascience*, 1: 2, 2012.
- [10] M. HSI-YANG FRITZ, R. LEINONEN, G. COCHRANE and E. BIRNEY, "Efficient storage of high throughput DNA sequencing data using reference-based compression", *Genome Res.*, 21: 734-40, 2011.

- [11] J.K. BONFIELD, "The Scramble conversion tool", *Bioinformatics*, 30: 2818-9, 2014.
- [12] <https://www.ebi.ac.uk/ena/software/cram-toolkit>
- [13] <http://www.htslib.org/benchmarks/CRAM.html>
- [14] <http://samtools.github.io/hts-specs/CRAMv3.pdf>
- [15] <http://www.prace-ri.eu/prace-resources/>
- [16] E. BIRNEY and N. SORANZO, "Human genomics: The end of the start for population sequencing", *Nature*, 526, pp. 52-53, 2015.
- [17] H. LI and R. DURBIN, "Fast and accurate short read alignment with Burrows-Wheeler transform", *Bioinformatics*, 15; 25 (14): 1754-60, 2009.
- [18] KAWALIA *et al.*, "Leveraging the power of high performance computing for next generation sequencing data analysis: tricks and twists from a high throughput exome workflow", *PLoS One*, 5, 10(5): e0126321, 2015.
- [19] M.A. DE PRISTO *et al.*, "A framework for variation discovery and genotyping using next-generation DNA sequencing data", *Nat. Genet.*, 43: pp. 491-498, 2011.
- [20] A.A. PHILIPPAKIS *et al.*, "The Matchmaker Exchange: A Platform for Rare Disease Gene Discovery", *Hum Mutat.*, 36(10): 915-21, 2015.
- [21] PEC. COMPEAU, P.A. PEVZNER and G. TESLER, "How to apply de Bruijn graphs to genome assembly", *Nature Biotechnology*, 29, pp. 987-991 (2011).
- [22] J.A. MARTIN and Z. WANG, "Next-generation transcriptome assembly", *Nature Reviews Genetics*, 12: pp. 671-682, 2011.
- [23] <http://oceans.taraexpeditions.org>
- [24] Discours de Marisol Touraine lors des Rencontres Internationales de la Recherche « des maladies rares à la médecine personnalisée », Collège de France, 30 juin 2015. Voir : <http://sante.gouv.fr/discours-de-marisol-touraine-lors-des-rencontres-internationales-de-recherche.html>

Conclusion

Conclusion

Les technologies numériques induisent aujourd'hui une véritable révolution des usages, tant dans le monde de la recherche que dans l'industrie, la santé ou la sécurité. Plus généralement, et c'est sans doute la vraie nouveauté, cette révolution modifie profondément la vie de tous les individus de la planète. En effet, pendant près de 50 ans, la simulation numérique a été la principale application de ces technologies et la performance des moyens de calcul, même si elle apparaissait gigantesque à chacune des époques passées, restait insuffisante pour que ces applications sortent du cénacle des laboratoires de recherche publics ou des grands groupes industriels. S'ajoutait, à ces coûts élevés, une véritable complexité dans la programmation et la mise en œuvre des applications sur ordinateurs qui limitait la population des individus « capables d'interfacer ces nouvelles machines » à des spécialistes hautement qualifiés.

Le CEA a mis en œuvre la simulation numérique dès ses origines, à la fin des années 40. L'usage du calcul numérique, utilisant des ordinateurs, était alors le complément indispensable à la « théorie », permettant d'établir des solutions (éventuellement approchées) des « équations physico-mathématiques » bâties pour interpréter puis, dans un deuxième temps, prévoir le résultat des mesures réalisées lors des expériences ou des essais. Quelques rares autres domaines, en dehors de la physique et du nucléaire, avaient alors une démarche identique.

La présente monographie donne une vision des différents travaux que conduit le CEA autour des technologies numériques. Riches de leur expérience passée, les différents auteurs rappellent parfois ce qu'était l'état de l'art du numérique au CEA dans les décennies passées. Ainsi, on prend conscience que les véritables concepts de base qui fondent encore les ordinateurs d'aujourd'hui ont été énoncés durant les années 40 par John VON NEUMANN et qu'il a fallu avoir une compréhension « très extensive » de la loi de Moore pour que la croissance exponentielle de la puissance des ordinateurs « n'atteigne pas une asymptote », en substituant le parallélisme à la croissance de la fréquence.

Cet historique des technologies numériques qui s'entremêle avec la description des axes d'effort actuels du CEA amène à faire deux constats. Le premier est que la révolution qu'a été la mise sur le marché du microprocesseur par INTEL a ouvert la voie à l'utilisation des technologies numériques par

le grand public. La miniaturisation des puces en silicium a permis d'en réduire drastiquement le prix et d'en augmenter tout autant la performance : un microprocesseur de dernière génération dont la valeur est la centaine d'euros et qui équipe nos smartphones est plusieurs milliers de fois plus rapide que le CRAY 1 de Seymour CRAY qui valait 50 millions de francs en 1980. Le second constat est que les technologies qui sont « à la pointe » continuent à nécessiter autant, voire plus, de spécialistes pour les mettre en œuvre. À ce stade, l'analogie avec l'automobile nous semble garder toute sa pertinence : tout un chacun est désormais capable d'utiliser un micro-ordinateur ou un smartphone, comme il utilise une voiture, c'est-à-dire en n'ayant aucune connaissance de comment ils sont faits, mais les supercalculateurs, comme « l'automobile de course » doivent toujours être mis en œuvre par des experts, comme par le passé.

L'intelligence artificielle, dernier sujet à la mode du monde médiatico-politique ne fait rien d'autre que de vérifier ces deux constats : elle est aussi ancienne que l'« informatique » mais est restée durant de longues décennies l'affaire des spécialistes. Le fait que certains GAFA pensent que son usage peut désormais être mis à la portée de tout un chacun grâce à la révolution du silicium amène la découverte de son existence par le monde de la communication, de la politique et de l'économie : la révolution n'est pas la création de l'intelligence artificielle, mais sa mise à la portée de tous.

Aujourd'hui, dans le domaine des technologies numériques, le CEA ne limite plus ses travaux à l'utilisation du calcul numérique en complément de la « théorie » : ses recherches vont désormais « du silicium au calcul intensif », en incluant, dans cette chaîne de la valeur, des applications qui vont largement au-delà de la simulation numérique. Ainsi, les mégadonnées ou big data et l'intelligence artificielle ou le développement de briques matérielles ou logicielles sont partie intégrante de ses travaux.

Au travers de cette monographie, le CEA montre qu'il utilise la simulation numérique dans de nombreux domaines de la recherche scientifique : la dynamique moléculaire, la neutronique et le transport de particules, le calcul de structures, la dynamique des fluides et la turbulence, l'astrophysique, les sciences du climat et de la terre, les sciences du vivant et, en particulier, la génomique, la simulation du contrôle non destructif ou encore la chromodynamique quantique. Au

CEA, d'un simple complément de la théorie, la simulation numérique est devenue le troisième pilier de la démarche scientifique, car même si elle repose sur la modélisation, nous pouvons parler d'expérimentation numérique, complémentaire de l'expérimentation réelle. Dans certains secteurs où il est impossible de réaliser des expériences réelles ou bien encore où elles sont interdites, la simulation numérique est le cœur de l'activité puisqu'elle est devenue soit la source des connaissances, soit l'outil de démonstration scientifique.

Le big data est également devenu un mode d'utilisation important des technologies digitales au CEA. Les très grandes installations expérimentales, souvent gérées à l'échelle internationale, produisent en permanence de très gros flux de données qui n'ont d'intérêt véritable que si on sait les recueillir, les analyser, les exploiter et les conserver. De par sa démarche simulation, le CEA gère également depuis plusieurs décennies les très gros volumes de données issus des simulations numériques : ainsi, dès 2000, son centre de stockage des données recueillait plus d'un pétaoctet de données chaque jour. La démarche a conduit à construire des outils d'analyse *ad hoc*, anticipant ce qu'on appelle l'« intelligence artificielle ».

Au cours des années, le périmètre des travaux du CEA s'est élargi pour y inclure le développement des technologies digitales, tant matérielles que logicielles. Il est en effet apparu durant la décennie 1990, en grande partie du fait du passage à la simulation au CEA/DAM, que le rôle du CEA ne pouvait se limiter à celui de développeur d'applications sur des plates-formes acquises auprès de fournisseurs qui voulaient bien les lui vendre, mais qu'au contraire, il devait maîtriser l'architecture de ces plates-formes et la capacité à les construire effectivement : la simulation numérique, et plus globalement, les technologies digitales étant devenues vitales pour notre pays, il n'était plus question que notre capacité de développement soit entravée.

Acquérir cette nouvelle compétence a été rendu possible grâce à l'émergence des supercalculateurs massivement parallèles reposant sur des technologies de processeurs « *off the Shelf* » (sur étagère) qui ont pris le relais des calculateurs vectoriels mettant en œuvre un petit nombre de processeurs « propriétaires » partageant une même mémoire. Alors que la France avait perdu toute compétences en matière de technologie des supercalculateurs vectoriels, la révolution portée par ce nouveau paradigme qu'était le parallélisme mettant en œuvre des processeurs pour le « grand public » a permis au partenariat Bull-CEA d'entrer de nouveau de plain pied dans le club des acteurs des technologies numériques.

Le partenariat Bull-CEA, au-delà de reconstruire une compétence industrielle française en matière de technologies des supercalculateurs, a permis la réussite des programmes de simulation numérique au CEA. En effet, ces programmes ont toujours demandé, à chacune de leurs étapes, des puissances de calcul, des tailles mémoire et, plus généralement, des performances des ordinateurs un ordre de grandeur au-dessus de l'état de l'art des constructeurs de par le monde. Chaque nouveau projet, chaque nouvelle plate-forme, a donc demandé d'innover, ce qui a toujours conduit à proposer de nouvelles architectures qui avaient toutes les raisons de désoptimiser la programmation existante au cœur des applications (les « codes » de simulation). Sachant que l'optimisation, l'adaptation d'un code à un nouveau supercalculateur peut prendre de quelques mois à plusieurs années, il y a tout intérêt à rendre simultanées la conception d'un nouvel ordinateur et l'adaptation des algorithmes à la future architecture, voire à gérer les deux projets comme un seul pour que les choix architecturaux du futur calculateur soient les mieux adaptés aux codes et algorithmes qu'il devra implémenter. C'est ce qu'ont fait Bull et le CEA depuis 2000, permettant ainsi que quelques mois après l'installation de chaque nouvelle génération de supercalculateurs dans le Centre de calcul du CEA, ses principaux codes de simulations y soient en production optimale.

Cette démarche, ce partenariat avec l'industrie, mis en œuvre depuis près de trente ans a permis de doter la France d'une capacité industrielle reconnue au niveau international, parce que Bull détient de l'ordre de 8 % du marché mondial des supercalculateurs et que cette activité représente plusieurs centaines de milliers d'emplois. Ils doivent être reconduits pour préparer l'avenir de la simulation numérique et développer cette compétence.

Quels sont, dans les années à venir, les défis que la simulation numérique doit relever et quelles sont les principales avancées qui seront nécessaires ?

En préalable, n'en doutons pas, pour les futures générations d'ordinateurs, la demande des chercheurs en termes de puissance de calcul, de taille de mémoire et de performances sera encore d'au moins un ordre de grandeur au-dessus des capacités actuelles des constructeurs, puisque le PetaFlop/s vient tout juste d'être franchi et que nos chercheurs et nos ingénieurs estiment que l'ExaFlop/s (soit trois ordres de grandeur au-delà de l'état de l'art) est indispensable pour relever de nombreux défis scientifiques.

Une telle demande est, de fait, totalement justifiée par les limitations imposées aux modélisations et aux simulations numériques qui leur sont associées, par la puissance de calcul aujourd'hui limitée à quelques PetaFlop/s.

Quelques exemples suffisent à l'illustrer.

Ainsi, pour la modélisation en mécanique des fluides des phénomènes qui interviennent au sein de la cuve d'un réacteur nucléaire à eau sous pression, compte tenu du comportement fortement turbulent de l'écoulement, de la complexité et de la taille des structures solides présentes dans les assemblages, la simulation précise à l'échelle microscopique constitue un défi encore à relever. D'une manière générale, l'utilisation plus massive de la CFD (*Computational Fluid Dynamics*) ou encore la modélisation et la simulation des écoulements diphasiques à l'échelle « composant », que ce soit pour les applications « cœur » ou « générateur de vapeur » demandent des puissances de calcul nettement plus importantes que celles actuellement disponibles.

Dans le domaine du séisme, du fait de la complexité des phénomènes étudiés, aussi bien au niveau géométrique que rhéologique, et du caractère souvent fortement non linéaire du problème posé, un certain nombre de simulations réalistes nécessiteront des puissances de calcul décuplées. C'est aussi le cas pour la simulation du passage d'un milieu continu à un milieu discontinu (liquéfaction des sols, déstabilisation de versant sous séisme, fissuration en cas d'endommagement structurel...) ou encore la simulation des interactions à grande échelle comme l'interaction sol-structure à l'échelle d'une ville.

C'est également vrai en astrophysique, par exemple pour améliorer la compréhension de la formation des planètes, qui naissent aux plus petites échelles de l'univers. Cette compréhension passe par une étude approfondie des processus physico-chimiques qui gouvernent l'évolution des disques protoplanétaires. Il sera probablement indispensable d'avoir une approche reposant sur la modélisation d'instabilités magnétohydrodynamiques, ce qui requerra des puissances de calcul largement supérieures à celles existant.

En neutronique enfin, les projets de « réacteurs nucléaires numériques », exploitant le calcul intensif, seront dans un avenir assez proche les outils indispensables pour certifier par la simulation un réacteur avant qu'il ne soit construit. De telles approches nécessitent l'utilisation de puissances de calcul qui dépassent largement l'échelle de l'ExaFlop/s.

Pour répondre à une telle demande, il apparaît immédiatement qu'une simple extrapolation des technologies actuelles avec une multiplication par un, deux, voire trois ordres de grandeurs du nombre de cœurs de calcul ou de processeurs n'est pas une réponse adéquate. Pour plusieurs raisons : la première tient évidemment à la consommation électrique, qui requerrait quasiment l'équivalent d'une tranche nucléaire pour l'alimentation d'un tel super-

ordinateur. La deuxième est l'évacuation de la chaleur produite, qui demanderait elle aussi des systèmes comparables à une « source froide » d'un tel réacteur. La troisième a trait à la taille d'une telle installation, qui se chiffrerait en kilomètres carrés et à la quantité de câble constituant le réseau d'interconnexion, qui se chiffrerait en milliers de kilomètres. La dernière raison, qui est la conséquence de ce gigantisme, est bien entendu son coût.

Du point de vue de l'algorithmique, il est clair que la plupart des algorithmes usuels utilisés dans les codes ne sont pas « scalables » à de telles échelles et, en particulier, beaucoup de méthodes itératives n'auraient plus d'efficacité.

La solution adéquate devra, plus encore que par le passé, être le produit de l'innovation, mais d'une innovation allant puiser ses sources dans celle destinée aux technologies grand public, presque « *off the Shelf* » du point de vue des technologies HPC.

En effet, nous pensons que la tendance qui s'est dessinée il y a quelques années va s'amplifier : nous estimons que les technologies digitales vont poursuivre, peut-être même à un rythme accéléré, leur pénétration dans tous les secteurs, et en particulier auprès du grand public. Et il est donc quasi certain que ce sont ces « technologies grand public » qui vont être à la source des technologies pour les futurs supercalculateurs. Ou, à tout le moins, permettre de financer ces dernières, en abaissant les coûts de production.

Il s'agit là d'un sujet de première importance pour notre pays et pour l'Europe, si nous estimons que nous devons maîtriser toute la chaîne de la valeur associée afin que notre dépendance vis-à-vis de ces technologies ne se traduise pas par une perte de souveraineté et d'autonomie. En effet, et contrairement aux mécanismes qui gouvernaient leur développement il y a deux décennies, c'est désormais le marché qui oriente les développements des technologies, y compris les plus avancées. Seuls les pays fournisseurs de technologies « grand public » auront dans le futur les moyens de financer et donc de développer les hautes technologies.

Le but des recherches conduites au CEA, et qui sont pour partie décrites dans la présente monographie, est de répondre à cette problématique.

Rappelons tout d'abord, pour le « silicium », que le CEA a été le créateur, dans les années 80, et est aujourd'hui le principal promoteur au niveau mondial de la technologie SOI (pour *Silicon On Insulator*). Comme cela a été décrit *supra*, p. 18, cette technologie présente l'avantage, par rapport aux technologies concurrentes, de minimiser les fuites des courants électriques, donc de pouvoir fonctionner à plus basse tension, et donc de consommer moins d'énergie. Le

FD-SOI est aujourd'hui vu comme une des meilleures solutions pour l'électronique embarquée et l'Internet des Objets (IoT). Nous estimons que la convergence des technologies pour l'IoT et l'embarqué avec celles pour les supercalculateurs est, à l'horizon de dix ans, une partie de la solution car elle satisfait deux objectifs : basse consommation et très large diffusion dans le grand public.

Mais les avancées qu'apportent une technologie comme la technologie SOI ne seront certainement pas suffisantes pour répondre à la demande d'augmentation de puissance qui ne s'arrêtera pas à l'ExaFlop/s : des ruptures technologiques sont indispensables pour ne pas aller vers le gigantisme qui condamne rapidement à la stagnation. Le CEA considère que l'électronique quantique est aujourd'hui une piste très sérieuse pour y parvenir et plusieurs de ses équipes sont mobilisées dans le cadre de projets européens, en partenariat avec des industriels. Compte tenu de leur position de leader, l'arrivée sur le marché de cette technologie en rupture sera à la fois une opportunité pour notre pays, car la donne technologique mondiale en sera rebattue, mais présente aussi le risque que nous soyons définitivement « hors course » si nous ne poursuivons pas nos efforts.

Beaucoup d'innovation sera nécessaire pour que l'architecture des futurs calculateurs et la définition de leurs composants permettent d'atteindre les performances demandées aux futures générations de calculateurs. Pour y parvenir, et que les algorithmes y soient exécutés de manière efficace, il sera encore plus important que par le passé de conduire de manière cohérente le projet de conception du calculateur et celui de choix des algorithmes des codes qui s'y exécuteront. Tout en visant un calculateur « généraliste », il est indispensable que le design des processeurs (qui pourront être de plusieurs natures), du réseau d'interconnexion, de la mémoire et de ses accès depuis les processeurs soit conduit de conserve avec le projet d'adaptation des algorithmes et des applications. Cela implique que la conception de ces composants, même s'ils visent une très large diffusion, soit supervisée par l'équipe en charge du calculateur et des algorithmes.

Cette démarche, indispensable pour la réussite de la simulation numérique dans le futur, présente aussi l'avantage de maintenir, voire d'enrichir, notre compétence et notre maîtrise nationales en matière de technologies numériques, puisqu'elle permettra de préserver ou d'augmenter la part nationale dans la « valeur ajoutée » de l'ordinateur final. Elle permet aussi de conserver la maîtrise de la problématique « sécurité informatique », très fréquemment remise en cause par l'arrivée de nouvelles technologies.

Comparés aux flux de données produits actuellement, les flux de données qui seront produits par un calculateur

« ExaFlopique » risquent d'être, en quantité, dans le rapport des puissances des deux générations d'ordinateurs si aucune démarche novatrice n'est mise en place pour la gestion des données. Un effort de recherche important doit être fait pour stocker de manière beaucoup plus professionnelle les données numériques produites afin de pouvoir les exploiter avec les outils qui seront développés pour l'intelligence artificielle.

Enfin, et c'est pour nous la clé de voûte de la démarche de simulation, l'analyse numérique doit rester le cœur des travaux de recherche au CEA. Après y avoir consacré un effort très important, dans le sillage de l'École française emmenée par Jacques-Louis LIONS, le CEA a diminué son effort ces dernières années pour se concentrer sur l'optimisation des algorithmes sur les nouvelles architectures informatique et la production de résultats pour les physiciens. Si cette démarche est indispensable pour tirer le meilleur parti des investissements informatiques, les « progrès de fond » pour « bien » utiliser les futures machines ne viendront que des progrès de l'analyse numérique. C'est pourquoi l'analyse numérique doit être une spécialité des métiers du CEA.

On ne produit qu'une nouvelle « méthode de Cholesky » ou de « gradient conjugué » ou encore un « théorème de Lax » par siècle, mais les nouvelles disciplines scientifiques qui progressivement introduisent la simulation numérique dans leur méthode de travail y viennent souvent avec des méthodes originales et peu étayées mathématiquement. Cette mathématisation des méthodes issues des sciences ou même de la finance n'est pas nouvelle : après tout, ce sont les mécaniciens qui ont inventé la Méthode aux Éléments finis et la Formulation Variationnelle. Les nouvelles disciplines qui frappent à la porte de la simulation n'arrivent pas les mains vides : la méthode des « éléments discrets », que les géophysiciens apportent aux spécialistes de l'analyse numérique, est peut-être l'exemple du futur.

Au-delà des progrès du numérique, nous assistons à l'émergence de ruptures qui vont révolutionner et intensifier la recherche. Citons au premier chef *le calcul quantique* : le CEA est présent à la fois pour la compréhension des phénomènes fondamentaux, la conception des circuits élémentaires et la réflexion sur le développement de codes de simulation adaptés à ce nouveau paradigme. Par ailleurs, l'utilisation des *nouvelles technologies du numérique* devient un axe essentiel des travaux de simulation, du fait des progrès réalisés sur les algorithmes et de leur déploiement sur les machines de très grande puissance. Le CEA est désormais un acteur majeur de ce nouveau pan d'activité, impactant de très nombreuses branches de la physique, de la chimie, de la santé et de la biologie (modélisation de la turbulence, des matériaux, des réactions chimiques, analyse de corrélations pour les phénomènes complexes et multiphysiques, chimie des matériaux, cri-

blage en biologie, environnement et climat...). Il a également un rôle moteur sur le plan du développement des algorithmes (*IA de confiance*). La conception des nouvelles machines particulièrement dédiées à ces approches (puces neuromorphiques en particulier) constitue une autre rupture qui impactera fortement le monde de la simulation. Enfin, le CEA a un fort engagement national et international sur ces thématiques, en particulier à l'échelle européenne ; citons notamment la réflexion sur un processeur européen et la construction des nouveaux centres de calcul exascale.

Daniel VERWAERDE,

ancien Administrateur Général du CEA

Anne NICOLAS,

Direction des énergies

Daniel BOUCHE et Guillaume COLIN DE VERDIÈRE,

Direction des applications militaires

Glossaire – Index

Les entrées du présent glossaire suivies du signe * sont des **termes recommandés** qui ont été publiés au *Journal officiel*. Consultez leur définition sur le site www.franceterme.culture.fr

ab initio : des calculs sont dits « *ab initio* » quand ils se fondent sur les premiers principes, sans paramètres ajustables. Le terme est particulièrement employé pour désigner des calculs visant à déterminer la structure et les propriétés des atomes, molécules ou matériaux directement à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger. La **théorie de la fonctionnelle de la densité*** (DFT*) est aujourd'hui l'une des approches *ab initio* les plus courantes en chimie et en sciences des matériaux. Elle donne, par exemple, accès aux propriétés spectroscopiques, de transport et de cohésion des matériaux, quelle que soit la nature des liaisons entre les atomes (métallique, covalente ou ionique). **150, 158, 166.**

Actinides : éléments terres rares de numéro atomique compris entre 89 et 103. Ce groupe correspond au remplissage de la sous-couche électronique 5f et 6d. Les actinides sont dotés de propriétés chimiques très voisines entre elles. Les actinides intéressent la communauté nucléaire car les atomes d'uranium, de plutonium, de neptunium, d'américium et de curium présents ou formés dans le combustible nucléaire appartiennent à ce groupe. **149, 168.**

Algorithme : suite finie et non ambiguë d'opérations ou d'instructions permettant de résoudre une classe de problèmes. **61-80.**

Algorithme génétique : algorithmes d'optimisation s'inspirant de la génétique et de l'évolution : croisements, mutations, sélection. **72.**

Algorithme à population : algorithmes d'optimisation fondée sur l'évolution d'un ensemble d'individus-solutions (heuristiques d'adaptation, de collaboration : colonies de fourmis, essais particuliers). **72.**

Algorithme de Tarjan : algorithme de théorie des graphes permettant de rechercher les composantes fortement connexes d'un graphe orienté. Sa complexité est linéaire et il est séquentiel. **68.**

Année-lumière : unité de distance utilisée en astrophysique, correspondant à la distance parcourue par la lumière en une année. **137.**

Anti-réactivité : baisse de **réactivité*** que peut produire un **absorbant neutronique** (tel que le bore 10 qui est un puissant absorbant de neutrons dans le domaine des énergies thermiques), via une **barre de commande*** par exemple, quand il est introduit dans le cœur d'un réacteur. **188.**

API (*Application Programming Interface*) : interface logicielle permettant l'utilisation d'un composant logiciel par un autre. **27.**

Arrêt automatique : chute des barres (grappes) de commande moins une (la plus anti-réactive) dans un réacteur nucléaire. **188.**

Assèchement : disparition, par vaporisation, du film liquide, au contact d'une paroi chauffante refroidie par ce liquide. **215.**

Assemblage (combustible)* : dans le cœur d'un réacteur à eau, les **crayons*** combustibles sont groupés en faisceaux dotés d'une bonne rigidité et positionnés avec précision dans le cœur du réacteur. C'est l'ensemble de cette structure, regroupant une à quelques centaines de crayons et chargée d'un seul tenant dans le réacteur, qui est appelée « assemblage combustible ». Dans un réacteur à neutrons rapides, les **aiguilles** combustibles sont

groupées en faisceaux dans un tube hexagonal (TH), cet ensemble constituant également un assemblage. Voir aussi **Élément combustible***. **213.**

Autoprotection : effet de creusement (dépression) du flux neutronique en présence des résonances que l'on doit prendre en compte pour calculer les sections efficaces multigroupes des isotopes résonnants. **191.**

AVX : *Advanced Vector Instructions* (jeu d'instructions vectorielles avancé). **25.**

Barre de commande* (ou **barre de contrôle**) : barre ou ensemble de tiges solidaires mobiles contenant une matière absorbant les neutrons (bore, cadmium...) et qui, suivant sa position dans le cœur d'un réacteur nucléaire, influe sur sa **réactivité***. Dans le cas d'un ensemble de tiges solidaires, l'expression **grappe de commande*** est aussi utilisée. **190.**

Bayésienne : méthode permettant d'adapter la probabilité d'une hypothèse (loi *a priori*) en fonction de nouvelles données (loi *a posteriori*). **75.**

“**Best-estimate**” : la meilleure évaluation possible. **207.**

Big data : gestion informatique de grandes quantités de données. **250.**

Bit : unité logique en informatique ne pouvant prendre que les valeurs 0 ou 1. **23.**

Bloc : en informatique, groupe de fils de calcul (ou **threads**) qui peuvent être exécutés séquentiellement ou en parallèle. **112.**

Boson : en mécanique quantique, un boson est une particule de **spin*** entier. La famille des bosons inclut des particules élémentaires : les photons, les **gluons***, les bosons Z et W (ce sont les quatre bosons de jauge du modèle standard), le boson de Higgs récemment découvert, et le graviton encore théorique ; ainsi que des particules composites (les **mésons** et les noyaux qui ont un nombre de masse pair comme le deutérium, l'hélium 4 ou le plomb 208) ; et quelques quasi-particules (paires de Cooper, plasmons et phonons). Alors que les particules élémentaires qui constituent la matière (leptons et **quarks***) sont des fermions, les bosons élémentaires sont vecteurs de force et servent de « colle » pour lier la matière. **241.**

BPA : *Boundary Projection Acceleration*. **198.**

Cache : mémoire très rapide stockant temporairement une copie d'une petite zone de la mémoire principale pour éviter au processeur d'accéder à cette ressource trop lente. **29.**

Caléfaction : (du latin *calefacere* : chauffer) phénomène d'isolation thermique d'un liquide par rapport à une surface chauffante ayant atteint une température seuil T_s supérieure à la température d'ébullition du liquide T_e . **215.**

Caloporteur (ou **réfrigérant**) : fluide (gaz ou liquide) utilisé pour extraire du cœur d'un réacteur nucléaire la chaleur produite par les fissions. Dans un réacteur à eau sous pression, l'eau joue à la fois le rôle de caloporteur et celui de modérateur, c'est-à-dire de ralentisseur de neutrons. **213.**

CAO : se dit d'un logiciel pour la Conception Assistée par Ordinateur. **87.**

Capture : capture d'un neutron par un noyau. La capture est dite « radiative » si elle est suivie par l'émission immédiate d'un rayonnement *gamma*. Elle est dite « **fertile** » si elle donne naissance à un noyau **fissile**. Elle est dite « **stérile** » dans le cas contraire. **195.**

Caractéristiques longues : méthode des caractéristiques (MOC) résolvant l'équation de propagation, qui est la forme intégrale de l'équation du transport, fondée sur l'intégration analytique le long de la trajectoire du neutron en supposant une forme analytique de la source et des sections efficaces (souvent constante ou polynomiale) à travers le maillage spatial. La méthode de caractéristiques longues effectue l'intégration entre le point d'émission du neutron et le point où l'on calcule le flux angulaire. Le flux à l'intérieur de la maille est calculé par l'intégration numérique sur l'ensemble des trajectoires en espace et en angle. **202.**

Caractéristiques courtes : voir **Caractéristiques longues***. Dans la méthode des caractéristiques courtes l'intégration le long de la trajectoire porte sur le domaine de la maille spatiale, et la propagation à travers le maillage se fait par l'échange des grandeurs projetées sur les interfaces des mailles dans les sens de la direction de particules. Cela est alors une méthode approchée par rapport aux caractéristiques longues du fait qu'une approximation supplémentaire est nécessaire aux interfaces. **202.**

CCRT : Centre de Calcul Recherche et Technologie du CEA. **199.**

CFD (*Computerized Fluid Dynamics*) : terme générique désignant l'ensemble des méthodes numériques de résolution des équations de la dynamique des fluides. **213.**

Chaîne de Markov : en simulation Monte-Carlo, c'est une suite stochastique d'états d'un système telle que la probabilité de passer d'un état à l'autre ne dépend que de l'état immédiatement antérieur dans la suite. **69, 166.**

Chromodynamique quantique : théorie de l'interaction forte. **241.**

Cinétique des réacteurs* : étude du comportement neutronique (nombre de neutrons, puissance, etc.) des réacteurs nucléaires en fonction du temps. **191.**

CIVA : plate-forme logicielle dédiée à la modélisation du contrôle non-destructif. **110.**

Cluster : on parle de « grappe de serveurs », de « ferme de calcul » (*Computer Cluster*) ou de « cluster de calcul », pour désigner des techniques consistant à regrouper plusieurs ordinateurs indépendants appelés « nœuds » (node), afin de permettre une gestion globale et de dépasser les limitations d'un ordinateur. **15, 33, 34, 110.**

CMFD : *Coarse Mesh Finite Difference*. **198.**

CMOS : *Complementary Metal Oxide Semiconductor*. **16.**

Coefficient de vidange (ou **vide**) : coefficient qui traduit la variation du facteur de multiplication dans un réacteur lorsque le caloporteur forme plus de vides (zones de moindre densité, par exemple, des bulles) que la normale.

Cœur* : en physique des réacteurs, région d'un réacteur nucléaire contenant le **combustible nucléaire***, qui est agencée de manière à permettre une réaction de fission en chaîne. **187, 213.**

Cœur : en informatique, élément d'un **processeur***, constitué d'un ensemble de circuits capables d'exécuter des programmes de façon autonome. **15-39, 101, 205, 238.**

Cœur en évolution : en physique des réacteurs, cœur de réacteur sous irradiation (sous flux de neutrons).

Compilateur : programme qui traite les instructions écrites dans un langage de programmation donné pour les traduire en langage machine, ou « code », utilisé par le processeur d'un ordinateur. **38, 39.**

Condition aux limites (de Dirichlet ou de Neumann) : en mathématiques, une condition aux limites de Dirichlet (nommée d'après Johann DIRICHLET) est imposée à une équation différentielle ou à une équation aux dérivées partielles lorsque l'on spécifie les valeurs que la solution doit vérifier sur les frontières/limites du domaine ; une condition aux limites de Neumann (nommée d'après Carl NEUMANN) est imposée à une équation différentielle ou à une équation aux dérivées partielles lorsque l'on spécifie les valeurs des dérivées que la solution doit vérifier sur les frontières/limites du domaine. **89.**

Contre-réactions : contre-réaction (de réactivité) : effet des variations de certains paramètres d'un réacteur nucléaire, tels que la puissance, la température, ou le taux de vide, sur sa réactivité. **190.**

Convection : ensemble des mouvements d'un fluide sous l'effet de gradients de densité, de température ou de pression. **121.**

Couleur : en chromodynamique quantique, la « charge de couleur », abrégée en « couleur » est le nombre quantique de l'interaction forte. C'est l'analogue de la charge électrique pour l'interaction électromagnétique. La couleur est le nombre quantique porté par les quarks et les gluons. Chaque quark peut exister dans trois états de couleur : rouge, vert, bleu, ou dans une combinaison linéaire des trois. On passe d'une combinaison à une autre par une matrice du groupe SU(3) (transformation de jauge). Le gluon sert à transmettre la couleur entre deux quarks en interaction. Le mot « couleur » est évidemment conventionnel. **241.**

Courant de Foucault : courant induit qui prend naissance par exemple dans un conducteur en mouvement dans un champ magnétique ou encore dans un conducteur immobile soumis à une variation de champ magnétique. **109.**

CPU : *Computing Processing Unit*, traduisible en français par **processeur***. **21, 23.**

Crayon* : tube de faible diamètre, fermé à ses deux extrémités, constituant du **cœur*** d'un réacteur nucléaire quand il contient une matière fissile, fertile ou absorbante. **214.**

Crise d'ébullition : correspond à une dégradation importante du coefficient d'échange paroi-écoulement, engendrant une augmentation de la température de la paroi due au déficit du transfert thermique, et par conséquent, pouvant conduire à la fusion de la paroi chauffante (*burn out*). Il existe deux types de crises d'ébullition : la crise d'ébullition à faible titre appelée « **caléfaction*** » (*Departure from Nucleate Boiling, DNB*) rencontrée à la fin d'ébullition nucléée sous-saturée et la crise d'ébullition à titre élevé appelée **assèchement*** (*dry out*) rencontrée à l'épuisement du film liquide dans l'écoulement annulaire. **215.**

CUDA : *Compute Unified Device Architecture*. **26.**

Cycle des graphes : graphe bouclant sur lui-même. **68.**

Cycle magnétique de 11 ans : modulation quasi régulière de l'amplitude du champ magnétique solaire et de son nombre de taches. **126.**

DDR : *Double Data Rate*. **30.**

Debye : unité de **moment dipolaire*** électrique valant $3,3 \cdot 10^{-30}$ C.m. **178.**

Décomposition de domaines (DDM) : méthode de résolution d'une **équation aux dérivées partielles*** consistant à **discrétiser*** son domaine d'intégration, puis à résoudre itérativement l'équation dans chaque sous-domaine en imposant des contraintes de régularité de la solution entre les sous-domaines. **198, 244.**

DFT : *Density Functional Theory*. Voir **Théorie de la Fonctionnelle de la Densité***. **61, 62.**

Diagramme des phases : représentation graphique utilisée en thermodynamique, généralement à deux ou trois dimensions, représentant les domaines de l'état physique d'équilibre d'un système (corps pur ou mélange de corps purs), en fonction de variables choisies pour faciliter la compréhension des phénomènes étudiés. Les diagrammes les plus simples concernent un corps pur avec pour variables la température et la pression ; les autres variables souvent utilisées sont l'enthalpie, l'entropie, le volume massique, ainsi que la concentration en masse ou en volume d'un des corps purs constituant un mélange. **158.**

Discrèpance : critère caractérisant la distribution empirique des données d'un échantillon par rapport à la distribution théorique. **76.**

Discrétisation : opération consistant à découper le domaine d'intégration d'une **équation différentielle** selon un **maillage*** pour la résoudre numériquement par la **méthode des éléments finis**. **62-66, 192.**

DFT : *Density Functional Theory*.

DNS (*Direct Numerical Simulation*) : dans le contexte de la mécanique des fluides, simulation résolvant numériquement les équations de Navier-Stokes sans aucune hypothèse simplificatrice, avec une résolution spatio-temporelle permettant de capturer toutes les échelles dynamiques actives. **217.**

Doppler (effet) : en neutronique, élargissement des résonances de sections efficaces neutroniques sous l'effet de l'agitation thermique des noyaux cibles. Cet effet contribue à assurer la stabilité d'un réacteur nucléaire, en diminuant la réactivité de son cœur lors d'une élévation de sa température. **190, 206.**

DP_N : méthode de résolution de l'équation de Boltzmann utilisant un double développement du flux angulaire sur les harmoniques sphériques (l'un pour les directions avant, le second pour les directions arrières) afin d'en accélérer la convergence. **198.**

DRAM : *Dynamic Random Access Memory*. **18.**

DSA : *Diffusion Synthetic Acceleration*. **198, 202, 204.**

Dynamique moléculaire classique : méthode qui consiste à simuler l'évolution d'un système de particules (atomes ou molécules) au cours du temps. Elle utilise une discrétisation du temps (calcul pas à pas) pour intégrer les équations de la mécanique classique de Newton et nécessite de disposer d'un modèle donnant les forces d'interaction entre les atomes. **61, 71, 165, 177.**

Dynamique moléculaire quantique : par rapport à la dynamique moléculaire classique, la méthode pour calculer les forces d'interaction utilise les premiers principes de la mécanique quantique. **62, 149, 165.**

Dynamo : mécanisme physique transformant l'énergie mécanique en énergie magnétique. L'effet Dynamo explique l'origine du champ magnétique de la Terre, comme étant dû au mouvement convectif d'un fluide interne conducteur couplé à la rotation terrestre. **126.**

EDP : voir **Équations aux dérivées partielles***.

Effet de site : modification locale des ondes sismiques par réfraction ou résonance due à la configuration géologique d'un site. Les

effets de site (souvent, un piégeage des ondes dans un bassin sédimentaire) sont susceptibles d'amplifier les déplacements sismiques locaux, d'où la nécessité de les prendre en compte dans les études de sûreté. **94.**

Électrodynamique quantique : théorie quantique de l'interaction électromagnétique. Celle-ci met en jeu des particules portant une charge électrique, interagissant par échange de photons. **241.**

Éléments f : famille d'éléments de la table périodique possédant une configuration électronique avec remplissage partiel de la sous-couche 4f (pour les lanthanides) ou 5f (pour la plupart des actinides). Ces derniers (uranium, plutonium, neptunium, américium, curium) intéressent particulièrement la communauté nucléaire, car ils sont utilisés ou formés dans les réacteurs nucléaires. **165.**

Éléments finis : en analyse numérique, la méthode des éléments finis est utilisée pour résoudre numériquement des **équations aux dérivées partielles*** (EDP), en découpant le domaine d'intégration en petits domaines ou éléments selon un maillage, et en linéarisant l'EDP dans chacun des éléments. **67, 87, 93.**

Énergie noire : forme d'énergie hypothétique invoquée par les cosmologistes pour expliquer les observations sur l'expansion de l'univers. **138.**

Enstrophie : en mécanique des fluides, quantité définie comme la variance de la vorticit . L'enstrophie joue un r le important en turbulence bidimensionnelle, laquelle constitue une approximation de ph nom nes fondamentaux en physique de l'atmosph re. **234.**

Entr es-sorties : en informatique, se dit de ce qui relève des données d'entr e, n cessaires au calcul, et des donn es de sortie, r sultant du calcul. **23, 52, 238.**

 quation aux d riv es partielles (EDP) : en math matiques, plus pr cis ment en calcul diff rentiel, une  quation aux d riv es partielles (parfois appel e «  quation diff rentielle partielle » et abr g e en EDP) est une  quation diff rentielle dont les solutions sont les fonctions inconnues d pendant de plusieurs variables v rifiant certaines conditions concernant leurs d riv es partielles. **62.**

 quations de la cin tique : dans le contexte de la neutronique,  quations diff rentielles d crivant les  volutions temporelle et spatio- nerg tique des neutrons dans un milieu multiplicateur de neutrons. **203.**

 quation d' tat : en physique, et plus particul rement en thermodynamique, une  quation d' tat d'un syst me   l' quilibre thermodynamique est une relation entre diff rents param tres physiques (appel s « variables d' tat ») qui d terminent son  tat. Il peut s'agir, par exemple, d'une relation entre sa temp rature, sa pression et son volume.   partir de l' quation d' tat caract ristique d'un syst me physique, il est possible de d terminer la totalit  des quantit s thermodynamiques d crivant ce syst me et, par suite, de pr dire ses propri t s. **169.**

 quations d' volution : dans le contexte de la neutronique,  quations diff rentielles gouvernant les concentrations isotopiques du combustible nucl aire en fonction du temps. **205.**

 quation de Navier Stokes : syst me d' quations diff rentielles r gissant la dynamique des fluides. **217, 226.**

 quation de Schr dinger :  quation dont la solution fournit la **fonction d'onde*** d'un syst me quantique non relativiste, r gi par un **hamiltonien***, dans lequel les interactions entre les objets suppos s  l mentaires sont d crites en termes de potentiels. **150, 166.**

Ergodicité : une simulation **Monte-Carlo** est dite « ergodique » si toutes les configurations du système peuvent être atteintes. **70.**

Espace d'adressage : nombre maximum de mots ou d'instructions auxquels il est possible d'accéder directement par le micro-processeur. **23.**

Évolution : en physique des réacteurs, variation de la réactivité provoquée par les changements survenus dans la composition du combustible nucléaire au cours de son irradiation. **191, 205.**

Exascale : se dira d'un ordinateur capable de réaliser 10^{18} opérations par seconde. **234.**

Exome : partie du génome d'un organisme eucaryote constituée par les exons, c'est-à-dire les parties des gènes qui sont exprimées pour synthétiser les produits fonctionnels sous forme de protéines. **255.**

Facteur de point chaud : correspond à la valeur maximale normalisée de la puissance du cœur. **188.**

FD-SOI : *Fully Depleted Silicon on Insulator*. **18.**

Fermion : en physique des particules, un fermion est une particule de **spin*** demi-entier. Un fermion peut être une particule élémentaire, tel l'électron, ou une particule composite, tel le proton. **243.**

FFT : *Fast Fourier Transform*. Voir **Transformée de Fourier Rapide***. **112.**

Filtre de Chebyshev : fait partie de la famille des filtres polynômes. Sa fonction de transfert s'écrit sous la forme d'un rapport de polynômes complexes. **62.**

FinFET : *Field Effect Transistor* en forme d'aileron (Fin). **18.**

Flash (mémoire) : mémoire qui peut conserver l'information même après une coupure de courant. **18, 31, 54.**

Flop (*Floating Point operation*) : opération en virgule flottante. **29, 112.**

Flops (*Floating Point operations per second*) : le nombre d'**opérations en virgule flottante par seconde** est une unité de mesure de la performance d'un système informatique. Les calculateurs les plus rapides actuels sont dans le domaine de la centaine de pétaflops (soit 10^{17} flops). **112, 206.**

Flux critique : forme abrégée pour densité de flux thermique critique. C'est la valeur de la densité du flux thermique à travers une paroi chauffante mouillée qui correspond soit à la **caléfaction***, soit à l'**assèchement*** de cette paroi. L'apparition du flux critique peut provoquer la crise d'ébullition. **215.**

Flux numérique : fonctions permettant de calculer les flux d'une quantité dans une maille à partir des valeurs de cette quantité dans cette maille et ses voisins. **64.**

FMA (*Fused Multiply Add*) : un FMA réalise en une seule opération assembleur. **25.**

Fonction d'onde : un des concepts fondamentaux de la mécanique quantique. Elle correspond à la représentation de l'état quantique d'un système. La probabilité de trouver une particule au voisinage de la position à l'instant t est alors proportionnelle au carré du module de sa fonction d'onde. Son évolution dans le temps et l'espace est décrite par l'équation de Schrödinger. **149.**

Force de Lorentz : force s'exerçant sur une particule chargée en mouvement dans un champ magnétique. **121.**

FPGA : *Field-Programmable Gate Array*. **21.**

Gamma : **photons** de haute énergie, émis en particulier lors de réactions nucléaires ou lors de la désexcitation des noyaux atomiques. **187.**

GENCI : Grand Équipement National de Calcul Intensif. **11, 238.**

Génomique : science du génome, c'est-à-dire de l'ensemble du matériel génétique d'un être vivant, codé dans son acide désoxyribonucléique (ADN). **249.**

Gluon : en physique des particules, le gluon est le boson médiateur de l'interaction forte. Les gluons confinent les **quarks*** ensemble en les liant très fortement. Ils permettent ainsi l'existence des protons et des **neutrons***, ainsi que des autres **hadrons***. **241.**

GPU (*Graphics Processing Unit*, ou carte graphique) : ensemble de processeurs spécialisé dans le calcul des images. Leur utilisation dans les jeux vidéo a stimulé leur développement. Ils possèdent essentiellement des fonctions de calcul, ne peuvent pas fonctionner de façon autonome et doivent être pilotés par un **processeur*** ordinaire (CPU). La communication entre le GPU et le CPU est le goulot d'étranglement qui limite souvent leur utilisation dans le calcul intensif. **21, 25-27, 57, 243.**

Graphe acyclique : graphe sans cycles. **68.**

GSFR (*Generalised Feedback Shift Register*) : générateur de nombres aléatoires. **205.**

Hadrons : en physique des particules, un hadron est une particule composée de particules subatomiques soumises à l'interaction forte. **241.**

Hamiltonien : opérateur énergie totale, somme des énergies potentielle et cinétique. Il gouverne l'évolution d'un système classique (équation de Hamilton) ou quantique (**équation de Schrödinger***). **62.**

Hardware : support matériel de l'informatique. **15.**

Harmoniques sphériques : en mathématiques, les harmoniques sphériques sont des fonctions harmoniques particulières, c'est-à-dire des fonctions dont le laplacien est nul. Les harmoniques sphériques sont particulièrement utiles pour résoudre des problèmes invariants par rotation, car elles sont les vecteurs propres de certains opérateurs liés aux rotations. **134.**

HFC : Haut Facteur de Conversion (facteur de conversion : rapport, pour un intervalle de temps donné, du nombre de nucléides fissiles produits au nombre de nucléides fissiles détruits). **207.**

HPC (*High Performance Computing*) : calcul haute performance.

Hyper-Threading : la technologie d'*Hyper-Threading* d'Intel permet à un unique processeur physique d'exécuter de multiples flux d'instructions (*threads*) simultanément, apportant potentiellement un débit accru et des performances améliorées (http://www.labo-microsoft.org/articles/web/hyper_threading/0/). **206.**

Intégrale de chemin : intégrale fonctionnelle, c'est-à-dire que l'intégrand est une fonctionnelle et que la somme est prise sur des fonctions, et non sur des nombres réels (ou complexes) comme pour les intégrales ordinaires. Les intégrales de chemin sont très utilisées en mécanique quantique. **243.**

Intergiciel : voir **Middleware***.

IPC : *Inter-Process Communication*. **205.**

Irradiation (en) : sous flux neutronique. **208, 209.**

ISA : *Instruction Set Architecture*. **38.**

ITER (*International Thermonuclear Experimental Reactor*) : machine à fusion à confinement magnétique du plasma (Cadarache, sud de la France). **121, 205.**

Itération externe : itération sur la source de neutrons. **192, 202.**

JIT (*Just In Time*) : se dit d'un système d'exécution supportant la compilation à la volée. **45.**

Krigeage : méthode d'estimation linéaire de variance minimale. **78.**

Laser MegaJoule : machine à fusion à confinement inertiel du plasma (région de Bordeaux, France). **205.**

Latin Hypercube Sampling : méthodes d'échantillonnage adaptées à la spécification de plans d'expériences numériques, maximisant la **discrédance*** des lois marginales. **76.**

LES (Large Eddy Simulation) : méthode approchée de modélisation de la turbulence en dynamique des fluides, consistant à prendre en compte de façon moyennée les petites échelles de la turbulence, et à ne traiter explicitement que les grandes structures. **134, 218, 223.**

LHC : *Large Hadron Collider*.

Limite diffusion (schéma vérifiant la) : schéma pour l'équation de transport qui, sur un maillage résolvant l'échelle de la diffusion, tend vers une discrétisation stable et consistante de l'équation de diffusion quand le libre parcours moyen tend vers zéro. **67.**

Limiteurs : limitation de la pente dans les reconstructions à l'ordre 2 pour éviter des oscillations parasites. **67.**

Logiciel : ensemble d'instructions données à un appareil informatique. **41.**

Logiciel de calcul : rassemblement dans un logiciel informatique, souvent appelé « code », sous forme d'expressions mathématiques codées, de la représentation simplifiée (modélisation) d'un système ou d'un processus afin de le simuler. **41.**

Loi de comportement : relation empirique ou semi-empirique entre une propriété (d'un matériau, par exemple) et un paramètre intrinsèque au matériau (composition chimique, micro structure...) ou extrinsèque, lié au milieu et aux conditions d'essais (température, pression...). **92.**

Lorentz (force de) : force s'exerçant sur une particule chargée en mouvement dans un champ magnétique. **121.**

Magnétohydrodynamique (MHD) : science traitant du mouvement des fluides conducteurs d'électricité (liquides, gaz ou **plasmas**) placés dans des champs magnétiques. **121, 137.**

Maillage : partition du domaine de calcul en sous domaines afin d'y résoudre les équations de la physique par approximation numérique. **87, 122.**

Matière noire : forme de matière hypothétique dont la présence dans l'univers semble nécessaire pour expliquer la dynamique des galaxies, des amas de galaxies et les propriétés des fluctuations du fond diffus cosmologique. **137.**

Matière baryonique : terme utilisé en astrophysique pour désigner la matière « ordinaire », constituant les noyaux atomiques. En pratique, cela correspond aux protons, et aux neutrons, auxquels on adjoint implicitement les électrons (qui ne sont pas des baryons, mais des leptons) qui composent les atomes et les molécules et toutes les structures visibles dans l'univers observable (étoiles, galaxies...). **137.**

Métadonnées : données associées à un fichier disque telles que son nom, sa date de création, son propriétaire, sa taille, etc. **52, 237.**

Méthodes de Galerkin : méthodes d'approximation variationnelle d'un problème aux limites. **65.**

Méthode itérative : méthode où la solution d'un système est obtenue comme limite d'un processus itératif (par opposition aux méthodes où elle est calculée « directement »). **68.**

Méthode de Monte-Carlo : méthode statistique d'approximation de la valeur d'une intégrale en utilisant un ensemble de points

aléatoirement distribués selon une certaine probabilité. Elle consiste à répéter l'attribution d'une valeur numérique dépendant du déroulement d'un processus où le hasard intervient puis à calculer une moyenne et sa dispersion statistique (traduisant sa précision) sur l'ensemble des valeurs obtenues. En théorie du transport des particules dans la matière, cette méthode consiste à simuler le cheminement d'un très grand nombre de particules en tenant compte exactement de la géométrie et des interactions nucléaires, puis à comptabiliser les résultats auxquels on s'intéresse. **68, 166.**

Méthode VVQ : il s'agit du processus de **Vérification***, de **Validation*** et de **Qualification*** permettant de garantir la fiabilité d'un code de calcul pour un domaine d'application donné. L'étape de vérification garantit l'implémentation correcte des modèles physiques et méthodes numériques. L'étape de validation permet d'éprouver la capacité du code à restituer des solutions physiquement pertinentes par confrontation de résultats de simulation à des données expérimentales. En l'absence de données expérimentales, les résultats sont parfois comparés à des résultats obtenus avec d'autres codes. **220.**

MIC : *Many-Integrated Core* (Intel). **206.**

Middleware (intergiciel ou logiciels médiateurs) : ensemble de logiciels, regroupés au sein de bibliothèques, permettant de développer efficacement des programmes. **11, 36.**

MIMD : *Multiple Instruction Multiple Data*. **27.**

MOC (Method Of Characteristics) : méthode des caractéristiques. En fonction du **maillage*** adopté, on distingue **caractéristiques courtes*** et **caractéristiques longues***. **201.**

Moment dipolaire : grandeur vectorielle qui caractérise l'intensité et l'orientation d'un dipôle. **177.**

MOX+ (combustible) : combustible nucléaire à base d'un mélange d'oxydes d'uranium (naturel ou appauvri) et de plutonium. L'utilisation de combustible MOX permet le **recyclage** du plutonium. **213.**

MPI : *Message Passing Interface*. **39, 54, 205, 238.**

Multithread : un processeur est dit « *multithread* » s'il est capable d'exécuter efficacement plusieurs **threads*** ou fils d'exécution simultanément. Contrairement aux systèmes multiprocesseurs (tels les systèmes multicœur), les **threads** doivent partager les ressources d'un unique cœur. **110.**

Mutation : altération de l'ADN d'un être vivant. **255.**

Neutrino : particule électriquement neutre et de masse très petite, soumise à l'interaction faible. Il est produit dans de nombreuses réactions nucléaires comme dans la désintégration *bêta*. **139.**

Neutron : particule fondamentale électriquement neutre, de masse $1,675 \cdot 10^{-27}$ kg. La nature de ce **nucléon** a été découverte en 1932 par le physicien britannique James CHADWICK. Les neutrons constituent, avec les protons, les noyaux des atomes et provoquent les **réactions de fission** des noyaux **fissiles** dont l'énergie est utilisée dans les réacteurs nucléaires. **187.**

Neutrons retardés* : **neutrons*** émis par les fragments de **fission** avec un retard de quelques secondes en moyenne après la fission. Bien que représentant moins de 1 % des neutrons émis, ce sont eux qui, par ce décalage dans le temps, permettent *in fine* le pilotage des réacteurs. **190.**

NIC : *Network Inter Connect*. **33.**

Nœud : assemblage de plusieurs microprocesseurs. **15.**

NUMA : *Non Uniform Memory Access*. **32.**

Ondes élastiques : ondes de pression et de cisaillement dans un solide élastique. **64.**

Ondes électromagnétiques : ondes portant un champ électrique et un champ magnétique variable, régies par les équations de Maxwell. **64.**

Ondes sonores : ondes de pression dans un gaz ou un liquide, régies par l'équation des ondes acoustiques. **64.**

Optimisation : méthode visant à rechercher les valeurs extrêmes d'une fonction. **72.**

Ordonnées discrètes : voir S_N^* .

OpenMP (*Open Multi-Processing*) : interface de programmation pour le calcul parallèle sur architecture à mémoire partagée. **205.**

Parallélisme : en informatique, le **parallélisme** consiste à mettre en œuvre des architectures d'électronique numérique permettant de traiter des informations de manière simultanée, ainsi que les algorithmes spécialisés pour celles-ci. Ces techniques ont pour but de réaliser le plus grand nombre d'opérations en un temps le plus petit possible. **41 et suivantes, 61 et suivantes.**

PCB (*Printed Circuit Board*) : carte supportant les composants et les circuits imprimés servant à faire communiquer des composants entre eux. **32.**

PCI : *Peripheral Component Interconnect*.

Peptide : polymère d'acides aminés reliés entre eux par des liaisons peptidiques. **182.**

Perte de charge : dissipation de l'énergie mécanique du fluide due à son frottement sur des obstacles (par exemple, les grilles et ailettes des assemblages des éléments combustibles dans les réacteurs nucléaires à eau sous pression). **215.**

PGAS : *Partitioned Global Address Space*.

Pion : particule formée d'un quark et d'un antiquark u et d , médiatrice de l'interaction forte entre deux nucléons. **244.**

Plan d'expériences : échantillon de simulations numériques. **76.**

P_N : méthode de résolution de l'équation de Boltzmann utilisant un développement du flux angulaire sur les harmoniques sphériques. **198.**

POD : acronyme signifiant « Probabilité de Détection ». **114.**

Polarisation : une liaison chimique est dite « polarisée » si le nuage électronique des électrons participant à la liaison est déformé par un champ électrique interne ou externe à la molécule. **177.**

Polynômes de Legendre : en mathématiques et en physique théorique, les polynômes de Legendre constituent l'exemple le plus simple d'une suite de polynômes orthogonaux. Ils ont de nombreuses applications pour la décomposition d'une fonction en série de polynômes. **134.**

Polynômes de Tchebychev : famille de polynômes orthogonaux, utile pour l'interpolation polynomiale de fonctions en analyse numérique. **134.**

Portée effective : distance caractéristique au-delà de laquelle deux particules cessent d'interagir. **247.**

Processeur : en informatique, composant qui exécute les instructions machine des programmes informatiques. Un processeur construit en un seul circuit intégré est un microprocesseur. **15, 23.**

Produits de fission* : **nucléides** produits directement ou indirectement par la **fission** nucléaire. **159, 190.**

Protéine : macromolécule constitutive des êtres vivants, formée d'une longue chaîne d'acides aminés assemblés selon un plan déterminé par un gène. La protéine est, en général, repliée, et la géométrie de ce **repliement*** influence son activité biologique. **178, 182.**

Qualification (d'un code de calcul) : ensemble des processus permettant de décréter un code de calcul et ses données de base bons pour le service, dans les limites d'un domaine de validité défini et avec des incertitudes maîtrisées. Ces processus incluent des preuves de qualité des données de base, ainsi que la **vérification*** et la **validation*** du code. **220.**

Quantiles : valeur d'une variable aléatoire liée à une probabilité de dépassement de seuil : la médiane est le quantile à 50 %. **76.**

Quark : en physique des particules, un quark est une particule élémentaire constitutive des **hadrons***. Les quarks s'attirent entre eux par une force fondamentale, l'interaction forte. **241.**

Quasar : région compacte entourant un **trou noir*** supermassif au centre d'une galaxie massive. Les quasars sont les objets les plus lumineux de l'univers. Leur source d'énergie provient du disque d'accrétion entourant le trou noir. **139.**

Radiographie : technique d'imagerie utilisant la formation sur un support sensible de l'image de la structure interne d'un objet ou d'une personne qui a été interposé entre ce support et un faisceau de rayons X, *gamma* ou de neutrons. **109.**

RAID : *Redundant Array of Inexpensive Disks*. **31, 35.**

RAM : *Random Access Memory*. **28, 35.**

RANS : dans le cadre du traitement de la turbulence en mécanique des fluides, l'utilisation de la décomposition de Reynolds appliquée aux solutions de l'équation de Navier-Stokes permet de simplifier le problème en faisant disparaître les fluctuations de périodes et d'amplitudes courtes. La méthode est connue sous le nom de « moyenne de Reynolds » ou sous le terme anglais de *RANS Reynolds Average Navier-Stokes*. **218, 223.**

Rayonnement cosmologique : fond de rayonnement dans lequel baigne l'univers, correspondant à un rayonnement de corps noir à la température de 2.7 K. Ce fond diffus cosmologique est le témoin de l'époque où le rayonnement électromagnétique était en équilibre thermique avec la matière, au début de l'expansion de l'univers. **140.**

Réactivité : quantité sans dimension permettant d'évaluer les petites variations du facteur de multiplication k des neutrons dans un cœur de réacteur, autour de la valeur critique et définie par la formule $\rho = (k-1)/k$. Sa valeur étant très petite, elle est généralement exprimée en cent millièmes, en prenant pour unité le « pcm » (pour cent mille). Dans un réacteur, la réactivité est nulle lorsqu'il est **critique**, positive s'il est **surcritique** et négative s'il est **sous-critique**. **78.**

Reconstruction à l'ordre 2 : approximation linéaire par morceaux d'une quantité reconstruite à partir de ses valeurs moyennes dans des mailles. **67.**

Registre : emplacement de mémoire interne à un processeur. Les registres se situent au sommet de la hiérarchie mémoire : il s'agit de la mémoire la plus rapide d'un ordinateur, mais dont le coût de fabrication est le plus élevé car la place dans un microprocesseur est limitée. **112.**

REP : Réacteur à Eau sous Pression. **213.**

Repliement : voir **Protéine***.

Représentation eulérienne : représentation où le point de vue de l'observateur est fixe dans l'espace, s'intéressant aux caractéristiques instantanées du mouvement de la matière. **66.**

Représentation lagrangienne : représentation où le point de vue de l'observateur suit la matière dans son mouvement. **66.**

Réseaux de neurones : modèles mathématique dont la conception est schématiquement inspirée des processus de traitement de l'information et d'apprentissage dans le cerveau. **78.**

Résonance : dans un processus de diffusion entre deux particules, une résonance désigne un état instable mais de durée de vie suffisamment longue pour qu'on puisse le voir comme un état lié. Presque tous les **hadrons*** sont en fait des résonances. Par exemple, une résonance *rho* (ou méson *rho*) est une particule hadronique de courte durée de vie, composée d'une paire quark-antiquark, et qui peut être considérée comme un état excité du **pion***. 245.

RNR : Réacteur à Neutrons Rapides. 189

RTL (*Register Transfer Level*) : représentation d'un circuit électronique au niveau des échanges logiques entre registres.

Scalabilité : version francisée de l'anglais « *scalable* » désignant la capacité d'une solution à passer à l'échelle. 206, 233.

Scalabilité faible : augmentation de la taille du problème à traiter avec l'augmentation du nombre de processus, le problème étant à taille constante par **thread***. Si le temps de calcul est constant alors la scalabilité faible est parfaite. La démarche est donc d'augmenter le nombre de **threads** pour résoudre des problèmes de plus grande taille. 206.

Scalabilité forte : la taille du problème à traiter est fixée et on augmente le nombre de **threads**. Une scalabilité forte parfaite correspond à une décroissance hyperbolique du temps de calcul avec le nombre de **thread***. La démarche est ici d'augmenter le nombre de **threads** pour calculer plus vite. 206.

Scalaire : en informatique, se dit d'un processeur qui ne réalise qu'une opération à la fois. par opposition à un processeur **vecteur***, capable de réaliser simultanément la même opération sur plusieurs données différentes. 233.

Schéma de Yee : schéma différences d'ordre 2 généralisant le schéma saute-mouton aux équations de Maxwell. Ce schéma, inventé par YEE en 1966, est très largement utilisé. 64.

Section efficace* : aire équivalente d'interaction qui caractérise la probabilité que se produise une interaction d'un type déterminé entre une particule incidente, ou un rayonnement incident, et une particule cible, et qui permet d'évaluer le nombre d'interactions entre un flux de particules ou de rayonnement et un système de particules cibles. Pour les réacteurs nucléaires, on distingue principalement les réactions induites par les neutrons : fission, capture, et diffusion élastique. 188.

Séquençage (du génome) : détermination de la chaîne de bases de l'ADN d'un être vivant. 249.

SIMD : *Single Instruction Multiple Data*. 24, 234.

S_N : méthode aux ordonnées discrètes, discrétisation des directions dans la résolution de l'équation de Boltzmann (*angular segmentation method*, *N directions*). 192.

Software : mot anglais traduisible par **logiciel***, ensemble d'instructions données à un appareil informatique. 41.

Soluté : espèce chimique en solution. 177.

Solvant : substance, liquide ou supercritique à sa température d'utilisation, qui a la propriété de dissoudre, de diluer ou d'extraire d'autres substances sans les modifier chimiquement et sans lui-même se modifier. 177.

Solvation : réorganisation des molécules de **solvant*** autour des ions ou des molécules de **soluté***. 177.

Sous-maille : dans le cas d'un calcul sur un maillage, se dit d'un modèle à petite échelle (inférieure à la taille d'une maille) calculant de façon indépendante des moyennes de grandeurs à l'intérieur de chaque maille. 236.

Spallation : réaction nucléaire mettant en jeu un noyau lourd-cible et une particule, le plus souvent un proton, accélérée jusqu'à une énergie de quelques centaines de millions d'**électronvolts**. Par collisions successives sur les nucléons du noyau cible, la particule incidente éjecte entre autres un grand nombre de **neutrons***. Un proton de 1 milliard d'électronvolts projeté sur une cible de plomb peut ainsi produire de 25 à 30 neutrons. Il a été imaginé des systèmes exploitant ces réactions de spallation, soit pour transmuter directement des radionucléides de période longue en radionucléides de période plus courte, soit pour produire aussi de l'énergie (système hybride accélérateur-réacteur intrinsèquement sous critique). 189.

Spin : moment angulaire intrinsèque d'un objet quantique. On restreint parfois l'attribution du mot spin aux particules considérées comme élémentaires. 241.

SP_N : *Simplified P_N transport method*. 198, 203.

SRAM (*Static Random Access Memory*) : mémoire très rapide utilisée pour fabriquer les caches. 30.

SSD (*Solid-State Disk*) : « disque » utilisant de la mémoire non volatile au lieu de d'un support magnétique (plateaux). 18.

Switch : commutateur réseau permettant à plusieurs nœuds de calcul d'échanger des informations à très haute vitesse. 34.

Système d'exploitation (ou *Operating System* en anglais, que l'on rencontre souvent sous l'abréviation OS) : l'ensemble des programmes qui pilote les différents composants (disque dur, écran, processeur, mémoire, etc.) d'un appareil informatique et lui permet donc de fonctionner. 38, 39.

Taches solaires : concentrations de champ magnétique à la surface du soleil apparaissant sombres car plus froides que le milieu environnant. 126.

Taux de combustion* : au sens propre, il correspond au pourcentage d'atomes lourds (uranium et plutonium) ayant subi la fission pendant une période donnée (« taux de combustion de fission », en anglais *burnup fraction*). Couramment utilisé pour évaluer la quantité d'énergie thermique par unité de masse de matière fissile obtenue en réacteur entre le chargement et le déchargement du combustible (« taux de combustion massique »), il s'exprime en mégawatts-jour par tonne (MW·j/t). 197.

TCP (*Transmission Control Protocol*) : souvent associé à IP pour Internet Protocol (TCP/IP). 59.

TGCC : Très Grand Centre de Calcul, installé à Bruyères-le-Châtel, en France. 205.

Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) : pour reproduire avec précision la liaison chimique entre atomes il est nécessaire de traiter au niveau quantique les interactions entre noyaux atomiques et électrons. La DFT est une théorie de champ moyen couramment utilisée pour décrire des systèmes d'atomes (dans des molécules ou des matériaux) avec un grand nombre d'électrons, sans traiter explicitement l'interaction coulombienne entre ces derniers. En physique des matériaux, la DFT est utilisée pour étudier les structures et énergies de défauts cristallins : **défaut ponctuel** de type **lacune**, **interstitiel** ou antisites, **dislocations**, insertion de solutés ou de dopants. À partir des énergies obtenues par les codes de DFT, il est possible de remonter par différence avec l'état cristallin sans défaut aux énergies physiquement pertinentes : énergies de formation de défauts, de mise en solution de dopants, etc. En chimie théorique, la DFT est utilisée pour étudier la structure des atomes ou des molécules. 149.

Thermodynamique statistique : branche de la physique statistique dédiée aux systèmes en équilibre thermodynamique. 165.

Thermohydraulique : branche de la physique consacrée aux transferts de chaleur et à la mécanique des fluides. **213.**

Thread ou fil (d'exécution) ou tâche : c'est l'exécution d'un ensemble d'instructions du langage machine d'un processeur ([https://fr.wikipedia.org/wiki/Thread_\(informatique\)](https://fr.wikipedia.org/wiki/Thread_(informatique))). **28, 112, 205, 207, 233.**

Tier 0/1/2 : classification des ordinateurs selon leur puissance. Cobalt est une machine Tier1 du CCRT mise à la disposition des équipes du CEA et de ses partenaires industriels. **255.**

TOKAMAK : machine toroïdale axisymétrique permettant de confiner un plasma thermonucléaire au moyen de la combinaison de deux champs magnétiques. Le plus grand TOKAMAK au monde sera **ITER***, actuellement en construction sur le site de Cadarache. **121.**

Tomographie : procédé d'imagerie qui permet d'obtenir des vues d'un objet tridimensionnel selon des plans de coupe déterminés. **116.**

Transducteur (ou **traducteur**) : dispositif convertissant un signal physique en un autre. Par exemple, un cristal piézoélectrique peut être utilisé comme transducteur sonore. **109.**

Transformée de Fourier rapide (FFT) : algorithme permettant le calcul de la transformée de Fourier d'un signal. **112, 134.**

Transistor : composant électronique utilisé dans la plupart des circuits électroniques. C'est un dispositif semi-conducteur à trois électrodes actives, qui permet de contrôler un courant ou une tension sur l'électrode de sortie (le collecteur ou **drain**) grâce à une électrode d'entrée (la base ou grille). C'est un composant fondamental des circuits logiques. **15-18.**

Transmutation* : transformation d'un **nucléide** en un autre par une réaction nucléaire. **187.**

Trou noir : en astrophysique, un trou noir est un objet céleste si compact que l'intensité de son champ gravitationnel empêche toute forme de matière ou de rayonnement de s'en échapper. **139.**

Ultrasons : ondes sonores de haute fréquence (supérieure à 50 kHz). Facilement produits et détectés à l'aide de **transducteurs*** piézoélectriques, leur petite longueur d'onde rend les ultrasons intéressants pour sonder la matière et « voir » dans les milieux opaques, où la lumière ne peut pénétrer. **109.**

Validation (d'un code de calcul) : démarche permettant de s'assurer que les résultats d'une simulation numérique issue du code reproduisent l'expérience. **220.**

Vectoriel : en informatique, se dit d'un processeur capable de réaliser simultanément la même opération sur plusieurs données différentes, par opposition à un processeur **scalaire***, qui ne réalise qu'une opération à la fois. **233.**

Vent solaire : flot de particules transsonique émanant du soleil et prolongeant la **couronne** jusqu'aux confins du système solaire. **121, 129.**

Vérification (d'un code de calcul) : démarche permettant de s'assurer que les équations du modèle physique utilisé dans le code sont résolues correctement aux plans mathématique, numérique et informatique. La vérification peut comprendre la confrontation avec des cas de calcul solubles analytiquement, ou résolus par un code supposé de référence. **220.**

VIA : Connexion entre deux couches d'un circuit traversant le substrat de silicium. **19.**

Vidange du caloporteur : perte partielle ou totale du fluide caloporteur dans un réacteur nucléaire. **207.**

VLIW : *Very Long Instruction Word*.

Voxel : élément de volume mis en œuvre dans les représentations tridimensionnelles des objets. **116.**

VVQ : démarche de **Vérification***, de **Validation*** et de **Qualification*** d'un code de calcul. **220.**

Workflow : flux de traitement informatique. **237.**

Table des matières

Préface	7
Introduction	9
Les enjeux des sciences du numérique et du calcul haute performance	9
L'infrastructure et les méthodes de calcul	13
L'infrastructure de calcul	15
Les technologies des composants	15
La technologie et la course à la densité de calcul : améliorer la finesse de gravure ou empiler verticalement les motifs ?	15
Encadré : Le transistor MOS	16
La technologie et la course à l'efficacité énergétique.	19
La course à l'efficacité énergétique	19
L'interposeur, une réponse à l'accroissement des coûts de conception, à l'hétérogénéité, à la spécialisation ?	20
Encadré : La conception de circuits	21
Les composants au cœur du HPC	23
Les éléments de base	23
Les nœuds de calcul	32
Les systèmes de calcul	33
Encadré : La tolérance aux pannes	35
Les centres de calcul	36
L'intergiciel ou middleware	36
Encadré : La grille de calcul	37
Le système d'exploitation et les logiciels bas niveau	38
Le logiciel	41
Introduction	41
Le cycle de vie du logiciel	41
D'un choix de portabilité ou performance	
vers un concept de portabilité des performances	41
Les modèles de programmation	42
Le couplage de codes	46
Le processus de développement des logiciels	48
Le cycle de vie des données	51
Introduction	51
Encadré : Les mégadonnées, ou le big data	52
Les logiciels pour les entrées/sorties	52
L'analyse et le posttraitement des données	55
La visualisation des données	56
Méthodes numériques et algorithmiques	61
Adéquation et adaptation des algorithmes et des méthodes numériques aux machines de puissance actuelles et futures	61
Les méthodes numériques pour les champs continus dans l'espace	62
Généralités : les équations aux dérivées partielles, différences, éléments, volumes finis, estimation d'erreur	62
Champs continus régis par des équations linéaires : exemples de méthode de résolution des équations des ondes	64

Encadré : L'intégration en temps	65
<i>Champs continus régis par des équations non-linéaires :</i>	
<i>exemple de la simulation en mécanique des fluides et des structures</i>	66
Le grand nombre de dimensions	67
<i>Généralités : malédiction de la dimension et solutions possibles</i>	67
<i>Les méthodes déterministes et parallélisme pour l'équation de transport</i>	67
<i>Les méthodes de Monte-Carlo</i>	68
<i>La simulation d'un grand nombre de particules en interaction :</i>	
<i>dynamique moléculaire classique</i>	71
Les problèmes d'optimisation	72
<i>L'optimisation par algorithmes évolutionnaires</i>	72
<i>L'optimisation multiobjectifs</i>	73
Les incertitudes en simulation numérique	76
<i>La propagation d'incertitudes</i>	76
<i>L'analyse de sensibilité</i>	77
<i>Les méta-modèles</i>	78
<i>Uranie</i>	79

Exemples d'application des sciences du numérique et du calcul haute performance 81

Les structures en évolution dynamique, du séisme aux accidents industriels	83
Introduction générale	83
Simulation des séismes et de leurs conséquences	85
<i>Mégadonnées ou big data</i>	85
<i>La modélisation des structures géologiques</i>	87
<i>De la terre à la structure, un ensemble de méthodes numériques imbriquées</i>	88
<i>Quelques exemples de simulations sismiques</i>	93
Simulation des systèmes dynamiques fortement couplés	
sous chargement transitoires extrêmes	98
<i>Introduction</i>	98
<i>Discretisation et stratégie de résolution</i>	99
<i>Le passage à l'échelle sur les supercalculateurs</i>	101
Conclusions et perspectives	104
Encadré : L'interaction fluide-structure pour les transitoires accidentels	105
La simulation des Contrôles Non Destructifs	109
Contexte, enjeux	109
Les stratégies de modélisation	109
L'utilisation du calcul haute performance pour la simulation	
en contrôle non destructif	110
<i>Les stratégies de parallélisation au sein de la plateforme CIVA</i>	110
<i>L'accélération des calculs de champ ultrasonores</i>	
<i>avec des architectures avancées</i>	110
La probabilité de détection assistée par le modèle avec calcul distribué	113
<i>La distribution des calculs sur clusters Windows</i>	113
<i>Les calculs de POD pour simulation d'inspection par courants de Foucault</i>	114
L'accélération de reconstruction tomographique sur architectures GPU	116
<i>Les enjeux</i>	116
<i>Présentation des noyaux de calcul utilisés en tomographie</i>	116
<i>L'adaptation de la méthode de reconstruction pour GPU</i>	117
<i>Les perspectives sur la reconstruction tomographique</i>	118
Conclusion et perspectives	119
Turbulence et magnétisme dans les plasmas : des tokamaks au soleil	121
Introduction : certaines caractéristiques physiques communes,	
des approches numériques analogues	121
L'état de l'art de la physique des tokamaks	122
La machine électromagnétique solaire	125
Les travaux communs sur l'analyse complexe des plasmas simulés	130
Perspectives : développements propres et communs	131

Encadré : Le code GYSELA (<i>GYrokinetic SEmi-LAgrangian</i>)	132
Encadré : Le code JOREK	133
Encadré : Le code ASH (<i>Anelastic Spherical Harmonic</i>)	134
Des planètes aux galaxies : comment la simulation numérique aide à comprendre la formation des grandes structures dans l'univers	137
Introduction	137
La formation des structures dans l'univers : un problème multiéchelles et multiphysique	137
Méthodes et ressources	138
Les très grandes échelles de l'univers	138
<i>L'évolution des profils de matière noire des amas de galaxies les plus massifs de l'univers</i>	138
<i>Composition et évolution de l'univers : le rôle des neutrinos</i>	139
La formation et l'évolution des galaxies	141
<i>Les liens entre la structure des galaxies et la formation stellaire</i>	141
<i>La masse des galaxies régulée par les trous noirs centraux</i>	142
La formation des étoiles	142
<i>La turbulence MHD et la formation des filaments interstellaires</i>	142
<i>L'interaction entre une supernova et un nuage moléculaire</i>	143
L'évolution des disques protoplanétaires	144
La dynamique des étoiles et de leur environnement	146
Conclusion	147
Résolution de l'équation de Schrödinger pour les molécules et les matériaux : méthodes <i>ab initio</i> fondées sur la fonctionnelle de la densité	149
Introduction	149
Le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité	150
<i>Le théorème d'Hohenberg-Kohn</i>	151
La construction de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	151
<i>Les équations d'Euler-Lagrange pour une fonction d'onde</i>	151
<i>L'équation de Kohn-Sham</i>	152
Les codes de calcul DFT	152
<i>L'algorithme auto-cohérent pour le calcul des densités électroniques</i>	152
Les propriétés électroniques de la matière et des molécules	153
<i>La réponse linéaire (DFPT)</i>	153
Le transport électronique dans les matériaux	154
<i>Le formalisme NEGF</i>	154
<i>Effet de la température : la prise en compte du couplage électron-phonon</i>	156
La modélisation <i>ab initio</i> des actinides	157
<i>Propriétés thermodynamiques des composés d'actinides par dynamique moléculaire ab initio</i>	157
<i>Les corrélations électroniques dans les actinides</i>	158
L'étude des défauts d'irradiation dans les combustibles nucléaires par calculs de structure électronique <i>ab initio</i>	159
Conclusions et perspectives	162
Dynamique moléculaire : principes et applications aux éléments <i>f</i> en solution	165
Introduction	165
Le principe des simulations moléculaires	165
<i>La difficulté des représentations atomiques</i>	165
<i>L'intérêt des simulations moléculaires</i>	165
<i>Les simulations de type Monte-Carlo et la dynamique moléculaire</i>	166
La mise en œuvre des simulations de dynamique moléculaire	167
<i>Avant la simulation : création du système simulé, boîte de simulation initiale et potentiel d'interaction</i>	167
<i>Pendant la simulation : le calcul de la trajectoire</i>	168
<i>Après la simulation : calcul des grandeurs recherchées</i>	169
La modélisation multiéchelle	172
<i>La simulation moléculaire au service des sciences de l'ingénieur</i>	172
<i>Les dynamiques browniennes</i>	172

<i>Des simulations moléculaires grossières peuvent mener à des modélisations hydrodynamiques précises</i>	174
<i>Les modélisations à gros grain et le passage d'échelle</i>	175
Champs de force évolués, couplage multiéchelle et protéines	177
Les champs de force évolués	177
<i>La prise en compte des phénomènes de polarisation</i>	177
<i>Au-delà de la polarisation : le transfert de charge</i>	178
La dynamique moléculaire et les approches multiéchelles	179
Simuler efficacement une protéine en phase aqueuse	181
<i>Stabilité structurale d'une protéine et couplage multiéchelle</i>	181
<i>Le repliement d'un peptide à l'aide de simulations couplées</i>	182
<i>Les systèmes de grande taille et le parallélisme</i>	184
Neutronique et calcul intensif	187
Introduction	187
Encadré : Les équations bilan de la neutronique	188
Encadré : Échelles physiques impliquées en neutronique	189
Modélisation, approches calculatoires	189
Encadré : Sections efficaces et effet Doppler	189
<i>La voie déterministe</i>	190
Encadré : Exemple de discrétisation de l'équation de Boltzmann en régime stationnaire	192
<i>La voie probabiliste Monte-Carlo</i>	194
Encadré : Transport des neutrons dans la matière par la méthode de Monte-Carlo	195
L'ambition multiphysique pour la simulation des cœurs de réacteurs	195
Calcul intensif et transport déterministe	196
<i>Le schéma de calcul en deux étapes</i>	196
<i>Retour sur la résolution numérique de l'équation du transport multigroupe</i>	198
<i>La méthode de décomposition de domaine</i>	198
<i>Le parallélisme des « ordonnées discrètes* »</i>	201
<i>La décomposition de domaine et parallélisme hybride pour les calculs de motifs de grande taille</i>	202
<i>La cinétique : prise en compte de la dimension temporelle</i>	203
<i>Multidomaine / multiméthode</i>	203
Le calcul intensif et le transport probabiliste des neutrons dans la matière	204
<i>La simulation parallèle</i>	204
<i>La simulation parallèle à plus de 1000 processeurs : vers un nouveau paradigme algorithmique</i>	205
<i>PATMOS : un Monte-Carlo pour le calcul intensif</i>	206
<i>Des problématiques connexes</i>	207
Calcul intensif et études neutroniques	207
Conclusion	209
Dynamique des fluides : simulation de l'écoulement à travers les grilles d'assemblage de réacteurs à eau sous pression	213
Les enjeux de la modélisation thermohydraulique dans les réacteurs nucléaires	213
<i>Géométrie des assemblages</i>	215
<i>La problématique des écoulements dans les assemblages combustibles</i>	216
La modélisation des écoulements turbulents : les principales approches	217
<i>Le code TrioCFD</i>	220
Exemple d'application : analyse de l'écoulement dans un assemblage simplifié de REP en présence de grilles de mélange	221
<i>La présentation de l'expérience</i>	221
<i>Les objectifs de l'étude</i>	221
<i>Le schéma de calcul</i>	222
<i>Les résultats</i>	222
Conclusion	224

Modéliser le climat	225
Introduction	225
<i>La hiérarchie de modèles de climats</i>	225
<i>Équations et hypothèses</i>	226
Le système climatique	226
Les modèles de climat	227
<i>Des composantes de plus en plus fines pour les modèles de climat</i>	228
<i>Le couplage entre les composantes</i>	229
<i>La course à la résolution</i>	230
<i>Le système climatique est chaotique</i>	231
Le calcul haute performance pour les modèles de climats	232
<i>Pourquoi la modélisation du climat nécessite du calcul haute performance</i>	232
<i>La mise en œuvre du calcul haute performance dans le modèle de climat de l'institut Pierre-Simon de Laplace</i>	232
<i>Pour aller plus loin : DYNAMICO, un pas vers l'Exascale</i>	234
La paramétrisation des modèles de climats	236
<i>Entrées/sorties parallèles et post-traitement parallèle in situ pour les codes de modélisation du climat</i>	237
<i>La description externe des données et le système de workflow parallèle</i>	237
<i>Les serveurs d'entrées/sorties parallèles</i>	238
Des modèles pour comprendre et pour prédire le climat	239
<i>Appréhender le changement climatique</i>	239
La validation des modèles de climats	239
<i>Encadré : Les simulations du GIECC</i>	239
Conclusion	240
Calculer la structure en quarks des hadrons : la chromodynamique quantique sur réseau	241
Le problème de physique : hadrons, quarks et gluons	241
Simulation de la chromodynamique quantique sur réseau	242
Le problème du bruit	244
La diffusion pion-pion et la résonance	245
Conclusions et perspectives	247
Big data : l'exemple de la génomique	249
Introduction : évolution des technologies de séquençage et applications	249
<i>Génomique et big data : la problématique du stockage et de l'accessibilité des données</i>	250
<i>Les architectures de stockage</i>	251
<i>Génomique et big data : format et compression des données</i>	252
Le traitement des données : introduction	254
Le reséquençage : données et calcul haute performance pour le génome humain	255
<i>Historique et croissance des données</i>	255
<i>Les analyses informatiques en génomique humaine</i>	255
<i>Les perspectives : les partages de données</i>	256
Le traitement des données : le séquençage de novo et l'assemblage	257
Conclusion et perspectives	259
Conclusion	265
Glossaire – Index	271

Ont contribué à cette Monographie

Yves Bréchet, Haut-Commissaire
à l'énergie atomique (2012-2018)

Bernard Amadon, Catherine Andrieux,
Gilles Arnaud, Monique Arnaud, François
Artiguenave, Édouard Audit, Jean-Marc
Aury, Jean-Charles Barbe, Vincent
Bergeaud, Ulrich Bieder, Julien Bigot,
Bernard Bonin, Daniel Bouche, Frédéric
Bournaud, Allan-Sacha Brun, Émeric
Brun, Fabien Bruneval, Anne Burbeau,
Pierre Calmon, Christophe Calvin,
Patrick Carribault, Henri-Pierre Charles,
Guillaume Colin De Verdière, Laurent
Colombet, Frédéric Damian, Thierry
Deutsch, Cheikh Diop, Ivan Duchemin,
Jean-François Dufreche, Marc Duranton,
Denis Dutoit, Vincent Faucher, Évelyne
Foerster, Sébastien Fromang, Frank
Gabriel, Virginie Grandgirard, Pierre
Guichon, Frédéric Heitzmann, Patrick
Hennebelle, Erell Jamelot, François
Jollet, Gérald Jomard, Pierre Kestener,
Jacques-Charles Lafoucrière, Pierre Le
Ber, Claude Lebris, Amandine Le Brun,
Fausto Malvagi, Martial Mancip, Christian
Mariotti, Olivier Marti, Jean-Marc
Martinez, Michel Masella, Yann
Meurdesoif, Jean-Pierre Meyer, Igor
Mijarevic, Anne Nicolas, Yann-Michel
Niquet, Nathalie Palanque-Delabrouille,
Serge Pascal, Éric Pelletier,
Marc Perache, Gérald Samba,
Claude Scarpelli, Laurent Soulard,
Antoine Strugarek, François Triozon,
Daniel Verwaerde, Nicolas Wiat,
François Willaime.

Les sciences du numérique et le calcul haute performance

L'augmentation continue de la puissance de calcul des ordinateurs est en train de bouleverser la façon d'étudier les systèmes physiques complexes, en sciences et en technologie. Le calcul haute performance permet désormais de simuler bon nombre de ces systèmes en leur appliquant les lois physiques élémentaires, même si celles-ci sont transcrites dans des équations compliquées ou mettent en œuvre un grand nombre de variables. Cette évolution déplace le statut épistémologique de l'expérience. Certes, cette dernière reste indispensable à la validation des modèles et codes de calcul décrivant un système physique, mais la simulation une fois validée peut dans certains cas acquérir une valeur quasiment équivalente à celle d'un résultat expérimental, et peut être utilisée de la même manière pour explorer le comportement d'un système complexe sans qu'il soit nécessaire de recourir à des expériences intégrales coûteuses.

À elle seule, l'évolution des machines n'est pas suffisante pour assurer les progrès de la simulation et du calcul haute performance. Il faut accompagner les progrès du « hardware » par des avancées dans le domaine du « software » et des méthodes numériques de résolution des équations constitutives des modèles. Un des grands défis de la simulation est d'assurer la pérennité et la maintenance de codes et plates-formes de calcul dont la durée de développement est supérieure à la durée de vie des machines sur lesquelles ils tournent.

La présente monographie décrit le travail mené au CEA dans ce champ immense et pluridisciplinaire, qui associe informaticiens, numériciens et physiciens. Dans une première partie de l'ouvrage, le lecteur trouvera ce qui touche aux méthodes : architecture des machines, architecture logicielle, algorithmes et méthodes numériques. La seconde partie de l'ouvrage illustre par une dizaine d'exemples les applications du calcul haute performance dans les différents champs d'activité du CEA civil, depuis la dynamique des galaxies jusqu'à la génomique en passant par la simulation des réacteurs nucléaires, tout en mettant en évidence les similitudes des méthodes employées dans des domaines si divers.

22 €

ISBN 978-2-281-14377-5
ISSN 1950-2672

