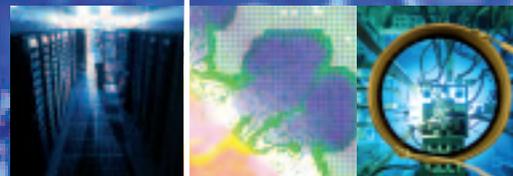


- 1 → L'atome
- 2 → La radioactivité
- 3 → L'homme et les rayonnements
- 4 → L'énergie
- 5 → L'énergie nucléaire : fusion et fission
- 6 → Le fonctionnement d'un réacteur nucléaire
- 7 → Le cycle du combustible nucléaire
- 8 → La microélectronique
- 9 → Le laser
- 10 → L'imagerie médicale
- 11 → L'astrophysique nucléaire
- 12 → L'hydrogène
- 13 → Le Soleil
- 14 → Les déchets radioactifs
- 15 → Le climat



DE LA RECHERCHE
À L'INDUSTRIE

16 → La simulation numérique



QU'EST-CE QUE LA SIMULATION
NUMÉRIQUE ?

- DES OUTILS EN QUÊTE DE PUISSANCE
- SIMULATION ET DÉFENSE
- SIMULATION ET INDUSTRIE
- SIMULATION ET RECHERCHE



© Commissariat à l'Énergie Atomique, 2007
Direction de la communication
Bâtiment siège
91191 Gif-sur-Yvette – www.cea.fr

ISSN 1637-5408.



La simulation numérique

QU'EST-CE QUE LA SIMULATION NUMÉRIQUE? 4

De la modélisation... ... à la simulation	5
Méthodes de calcul	6
Une autre approche du réel... ... avec encore quelques limites	9

DES OUTILS EN QUÊTE DE PUISSANCE

Du processeur...	11
... au supercalculateur	12
Architectures parallèles	13
Les grilles de calculs et de données	14
Les logiciels	15

SIMULATION ET DÉFENSE 16

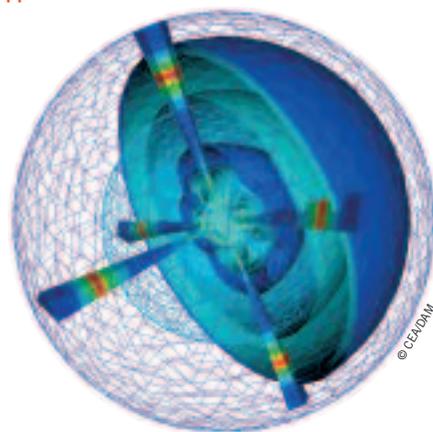
Reproduire le fonctionnement d'une arme	17
Phase expérimentale	18
Validation numérique globale	19

SIMULATION ET INDUSTRIE 22

Simulation en thermohydraulique	23
Interactions neutrons-matière	24
Matériaux, un véritable défi	26

SIMULATION ET RECHERCHE 27

Simuler la structure des protéines	28
Simuler l'Univers	30



Exemple de dépouillement
d'un tir laser sur une cible.

© C. Pichon/CEA, Dapine/CNRS - AP D. Aubert
CEA/Dapine - G. Holler/CEA/CEA, CEA



La simulation numérique est utilisée dans tous les domaines, comme ici en astrophysique, défense ou thermohydraulique, appliquée ou non à l'industrie nucléaire.

“Dans la logique de faire plus vite, mieux... et moins cher, la simulation numérique présente tous les atouts.”

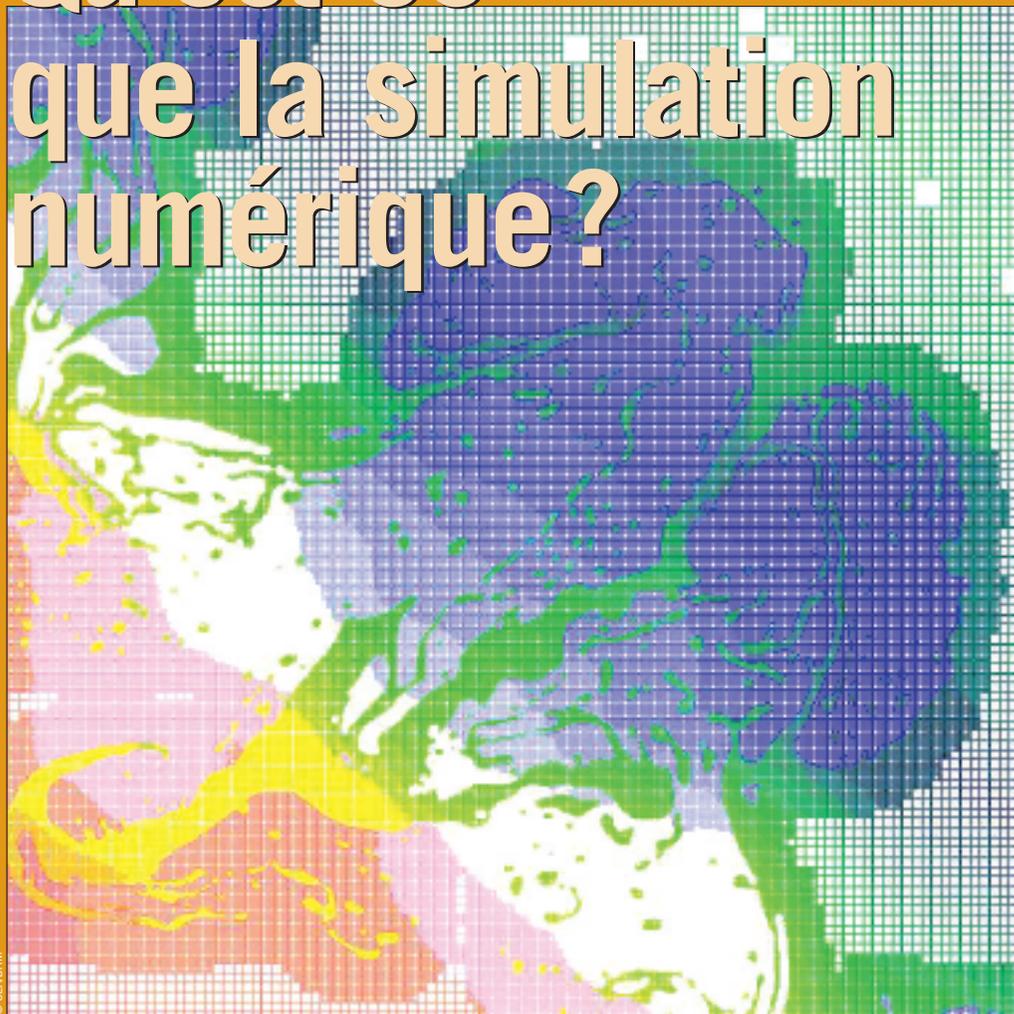
Un champ d'expérience infini

Aujourd'hui, la simulation numérique est utilisée dans de nombreux domaines de recherche et développement : mécanique, mécanique des fluides, science des matériaux, astrophysique, physique nucléaire, aéronautique, climatologie, météorologie, physique théorique, mécanique quantique, biologie, chimie... ainsi qu'en sciences humaines : démographie, sociologie... Elle intervient aussi dans des secteurs comme celui de la banque et des finances. Dans la logique de faire plus vite, mieux... et moins cher, la simulation numérique présente tous les atouts. De nouveaux enjeux sont apparus, d'ordre économique : réactivité, anticipation et compétitivité (gains de productivité). Mais aussi des enjeux de sûreté ou de sécurité par une meilleure compréhension des situations accidentelles dans des domaines aussi variés que le nucléaire, l'automobile ou l'aéronautique. Au CEA, la simulation numérique est un outil précieux

dans le cadre de ses programmes Défense et Énergie. Les études relatives aux technologies pour l'information et la santé s'appuient sur les recherches fondamentales. Ce sont ces trois aspects qui seront développés ici. Quelques analogies sont à éviter. Alors que la biologie s'appuie sur la simulation numérique pour concevoir, par exemple, la structure des protéines dans l'espace (voir page 28), la génomique utilise beaucoup de moyens informatiques pour ses besoins de fouille de données (*data mining*) et non de simulation numérique. La réalité virtuelle, bien qu'elle mette en œuvre des méthodes de simulation, a pour objectif de reproduire une apparence, de produire une image qui paraisse réelle. C'est assez éloigné de la simulation numérique qui tente de restituer le fonctionnement interne d'un système complexe.

MÉTHODE DE REPRÉSENTATION SUR ORDINATEUR,
LA SIMULATION NUMÉRIQUE PERMET DE MIEUX
COMPRENDRE LE RÉEL... ET DE CHERCHER
À LE PRÉDIRE.

Qu'est-ce que la simulation numérique ?



La simulation numérique désigne le procédé selon lequel on exécute un (des) programme(s) sur un (des) ordinateur(s) en vue de représenter un phénomène physique.

Les simulations numériques scientifiques reposent sur la mise en œuvre de modèles théoriques. Elles sont donc une adaptation aux moyens numériques des modèles mathématiques. Elles servent à étudier le fonctionnement et les propriétés d'un système et à en prédire l'évolution.

DE LA MODÉLISATION...

Un modèle est la traduction d'un phénomène dans la langue des équations mathématiques. Il a longtemps été tiré d'observations soigneuses. À partir du XVII^e siècle, les modèles se sont de plus en plus souvent inspirés des expériences menées en laboratoire. Il arrive enfin qu'ils soient déduits de théories elles-mêmes conçues sans expérience, grâce à une démarche purement intellectuelle, l'« expérience de pensée » (la théorie de la relativité conçue par Albert Einstein en 1915 n'a pu être expérimentée qu'en 1919). Aujourd'hui, plusieurs théories physiques, comme la théorie des cordes, fournissent des modèles qu'il n'a pas encore été possible de valider par l'expérience. Pour certaines, d'ailleurs, aucun protocole expérimental ne pourra un jour les tester en totalité.

Il est, par ailleurs, souvent question d'« expérience numérique » pour souligner l'analogie entre la pratique d'une simulation et la conduite d'une expérience de physique.

La modélisation du phénomène étudié consiste à prendre en compte les principes fondamentaux, comme par exemple la conservation de la masse, de l'énergie, et à déterminer les paramètres essentiels à sa description à la fois simple et réaliste. En chaque point de l'objet considéré, plusieurs grandeurs physiques (position, vitesse, température...) décrivent son état et son évolution et permettent de caractériser entièrement son mouvement. Ces grandeurs ne sont pas indépendantes mais reliées entre elles par des équations, qui sont la traduction mathématique des lois de la physique régissant le comportement de l'objet.

Ce modèle n'est complet qu'une fois écrites les équations « environnementales » qui lient chaque objet du système aux autres objets qui l'entourent.

... À LA SIMULATION

Il n'y a qu'un pas entre équations et codes de simulation : le codage, appelé « discrétisation des équations ». Cette opération traduit les équations en langage informatique, le seul que comprenne l'ordinateur.

Simuler l'état de l'objet, c'est donc déterminer les valeurs numériques des paramètres en tous points. Comme il y a un nombre infini de points, donc une infinité de valeurs à calculer, cet objectif est inaccessible. Pour des raisons de faisabilité, il est admis de ne considérer qu'un nombre fini de points, le nombre d'opérations nécessaires devenant alors abordable pour un ordinateur. Le nombre effectif de points traités

dépendra de la puissance de ce dernier. La discrétisation du domaine physique consiste précisément dans cette réduction de l'infini au fini.

Modélisation et simulation vont donc toujours de pair. Elles s'appuient sur des méthodes mathématiques et informatiques spécifiques.

MÉTHODES DE CALCUL

Il existe deux approches principales pour résoudre numériquement les équations mathématiques d'un modèle. La méthode de



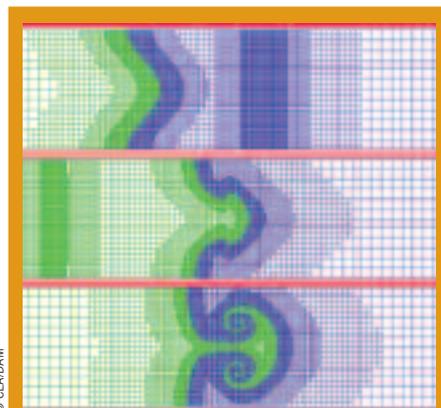
© Cern

Simulation de la désintégration d'un boson de Higgs calculée par la méthode de Monte-Carlo.

calcul déterministe, qui résout les équations après avoir discrétisé les variables, et la méthode de calcul statistique (ou probabiliste). Dans la première, l'objet est considéré comme un ensemble de petits volumes élémentaires contigus dénommé « maillage », par analogie avec la trame d'un tissu. Les paramètres de l'état de l'objet définis dans chaque maille du maillage sont reliés par des équations algébriques à ceux des mailles voisines. Ce sera à l'ordinateur de résoudre le système de relations obtenu.

Il existe de nombreuses méthodes déterministes : des volumes finis, des éléments finis, *level set*... dont l'utilisation dépend pour partie des équations considérées.

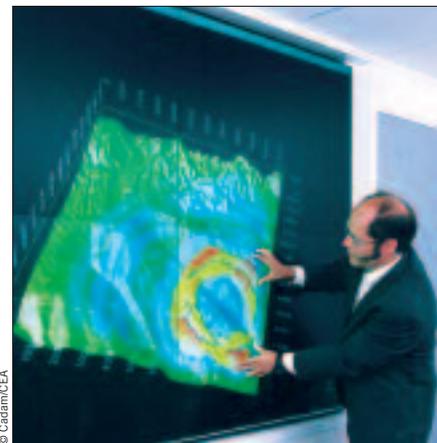
La deuxième méthode, dite de « Monte-Carlo », est particulièrement adaptée aux phénomènes caractérisés par une succession d'étapes lors desquelles chaque élément de l'objet peut subir



© CEADAM

UN MAILLAGE ADAPTABLE

Un raffinement progressif du maillage, le « remaillage adaptatif », consiste à ajuster la taille des mailles, par exemple en les rendant plus petites et plus serrées là où les phénomènes physiques sont les plus complexes et où les variations sont les plus importantes.



© Cadam/CEA

Visualisation sur un mur d'images d'une simulation sismique en baie de Nice.

différents événements possibles *a priori*. D'étape en étape, l'évolution de l'échantillon sera déterminée grâce à des tirages au hasard (d'où le nom de la méthode).

Les méthodes déterministes et de Monte-Carlo font l'objet de nombreuses études mathématiques pour préciser leur convergence en espace, c'est-à-dire la variation de la précision de l'approximation en fonction du nombre de mailles ou d'éléments de l'objet, ou leur convergence en temps, soit la variation de la précision en fonction du « pas de temps » de calcul.

Les outils de la simulation numérique sont donc des programmes informatiques exécutés sur des ordinateurs : ces logiciels de calcul ou « codes » sont la

Délai entre deux instants calculés

“Modélisation et simulation vont de pair, avec des méthodes mathématiques et informatiques spécifiques.”

traduction, à travers des algorithmes numériques, des formulations mathématiques des modèles physiques étudiés.

En amont et en aval du calcul, les logiciels effectuent la gestion de nombreuses opérations complexes de préparation puis de dépouillement des résultats. Les données initiales comportent la délimitation du domaine de calcul à partir d'une représentation approchée produite par le dessin et la CAO (conception assistée par ordinateur) des formes géométriques, suivie de la discrétisation sur un maillage, ainsi que des valeurs des paramètres physiques de ce maillage.

Les résultats des calculs proprement dits sont sauvegardés au fur et à mesure afin de constituer une base de données numérique.

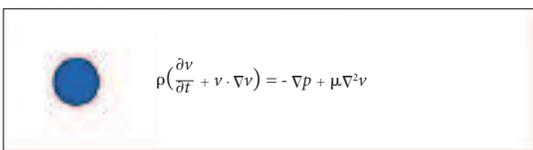
L'analyse des résultats repose sur l'exploitation de cette base : extraction sélective et transfert vers des interfaces graphiques qui permettent la visualisation par images de synthèse.

Enchaînements d'opérations logico-mathématiques nécessaires à l'accomplissement d'un calcul.

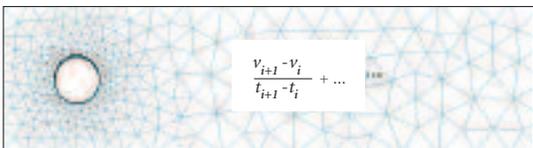
Domaine réel



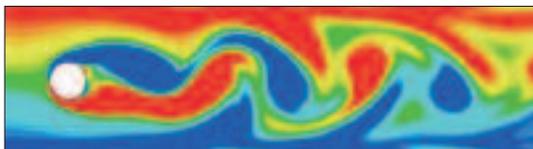
Modélisation



Résolution



Simulation



Expérimentation



ÉTUDE DE L'ÉCOULEMENT D'UN FLUIDE AUTOUR D'UN CYLINDRE

Les phénomènes physiques sont souvent complexes. Leur analyse nécessite la recherche d'un modèle mathématique représentatif de leur comportement.

Chaque loi physique est traduite par des équations mathématiques. Exemple : la vitesse.

Les équations obtenues sont souvent complexes. Il faut alors procéder à une résolution numérique qui passe par :

- une discrétisation du domaine physique (maillage),
- une discrétisation des équations $\Delta v \text{ à } (v_{i+1} - v_i)$

Les équations discrétisées sont résolues numériquement. Les résultats sont représentés graphiquement en tous points du maillage.

L'expérimentation reste nécessaire afin :

- de valider les modèles,
- d'en mesurer les paramètres d'entrée.

L'influence de certains paramètres physiques peut ainsi être analysée virtuellement sans avoir recours à un nombre important d'essais.

“Loin de supplanter l'expérimentation, la simulation donne une nouvelle prise sur le réel.”

La simulation numérique se concrétise lorsque l'on visualise le phénomène initial sur l'écran de l'ordinateur.

L'analyse critique des résultats, la vérification de la validité des modèles théoriques utilisés, la confrontation avec l'expérience doivent notamment faire partie intégrante de la démarche. Cette analyse comparative débouche sur des améliorations des modèles physiques, de leurs paramètres et des programmes informatiques de simulation.

UNE AUTRE APPROCHE DU RÉEL...

L'expérience alimente la simulation. Inversement, l'exploration des nombreuses solutions rendue possible par la simulation permet d'observer ou de prévoir des comportements inattendus, ce qui parfois suggère des expériences et fait donc progresser la connaissance de la physique. Ainsi, loin de supplanter l'expérimentation, la simulation donne une nouvelle prise sur le réel. La simulation numérique est la troisième forme d'étude des phénomènes, après la théorie et l'expérience. On la qualifie d'ailleurs souvent

d'« étude *in silico* », le silicium étant le matériau de base des ordinateurs. Le modèle prédictif et la simulation qui l'accompagne permettent d'anticiper le futur d'un système ou le comportement qui serait celui de ce système dans une configuration dans laquelle il ne s'est jamais trouvé. Prédire des situations inédites est l'un des intérêts essentiels de la simulation numérique.

... AVEC ENCORE QUELQUES LIMITES

Les limites de la simulation numérique sont de trois ordres.

Tout d'abord, certains phénomènes sont encore mal compris. Ils sont donc difficilement traduisibles en équations, qui sont le seul moyen de « dialoguer » avec l'ordinateur.

En outre, certains modèles requièrent des puissances de calcul indisponibles actuellement. Dans certains domaines, il est possible de simuler étape par étape alors que la totalité reste d'une inatteignable complexité. On a alors recours à des « codes systèmes » qui s'alimentent des codes simulant chaque composant à partir de modèles obtenus à l'aide d'équations.

Enfin, il existe une limite d'ordre théorique. Comme le nombre d'opérations nécessaires à la résolution d'un modèle croît exponentiellement en fonction du degré de précision que l'on demande, certains modèles mathématiques ne peuvent pas être résolus par un ordinateur en un temps raisonnable.

L'ESSOR DE LA SIMULATION NUMÉRIQUE DÉPEND DIRECTEMENT DES PROGRÈS DE L'INFORMATIQUE, UN OUTIL EN PERPÉTUELLE ÉVOLUTION.

Des outils en quête de puissance



“Pour permettre l'expansion de la simulation numérique, les ordinateurs ont nécessité d'importants progrès.”

L'essor de la simulation numérique est lié à l'ère de l'informatique. Certes, dans le passé, de grands scientifiques, tels Pythagore ou Blaise Pascal, ont simulé par la pensée et des calculs manuels certains phénomènes physiques. Mais ces simulations avaient une limite naturelle, celle de leur cerveau, et une limite temporelle : les calculs prenaient du temps. Ainsi, les premiers ordinateurs ont permis de multiplier les calculs tout en limitant leur durée. De fil en aiguille, les modèles physiques et numériques se sont précisés, permettant d'aller plus loin dans l'étude d'un phénomène ou d'un « objet ». Pour permettre cette expansion, les ordinateurs ont nécessité d'importants progrès tant en équipement informatique que logiciel.

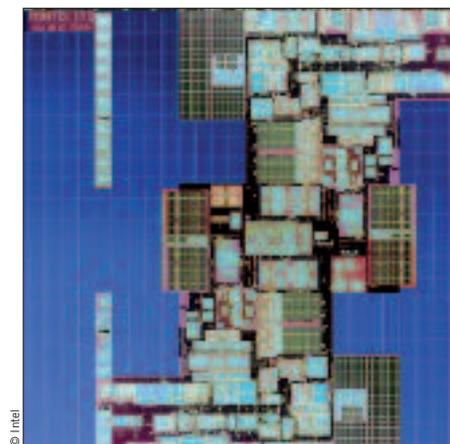
DU PROCESSEUR...

Le premier progrès concerne les **processeurs**.

Ceux-ci sont de deux sortes : scalaires et vectoriels.

Unités de base qui, déroulant un programme, effectuent les calculs.

Les processeurs scalaires exécutent des opérations élémentaires, comme l'addition de deux nombres. Les processeurs vectoriels effectuent des opérations d'ensembles de nombres, pour exemple l'addition deux à deux des nombres composants deux ensembles de 500 éléments. D'où leur intérêt pour la simulation numérique, car lors de l'exécution d'une telle opération un processeur vectoriel peut fonctionner à une vitesse proche de sa performance maximale (appelée « crête »).



Avec deux cœurs, le processeur Montecito d'Intel héberge jusqu'à 1,7 milliard de transistors et contient une mémoire cache de 24 Mo.

Ces deux types de processeurs sont complémentaires, car ils permettent de combiner des calculs de base et d'autres, plus complexes.

Les processeurs actuels permettent de hautes performances, avec une fréquence de fonctionnement élevée et l'exécution d'opérations parallèles, appelée « parallélisme ». Toutefois, l'augmentation de la fréquence est limitée par l'évolution des technologies micro-informatiques (conformément à la loi de Moore, voir livret n° 8

La microélectronique). Bien qu'exécutées en parallèle, certaines instructions sont dépendantes du résultat d'autres en cours de traitement..., ce qui peut limiter le parallélisme. La mise en œuvre simultanée de plusieurs processeurs accompagnée d'une programmation adéquate permet de pallier cette difficulté. À la charge du programmeur, donc, de morceler le programme en différentes parties indépendantes qui seront ensuite en communication sous forme d'algorithmes (voir page 6). La contrainte de cette technique est d'équilibrer les charges entre processeurs et de limiter le coût et la durée des communications.

Par ailleurs, l'augmentation de la puissance des ordinateurs a permis d'augmenter la finesse



Utilisation d'outils de management de projets et d'assistance à maîtrise d'ouvrage sur des ordinateurs de bureau.

de discrétisation (voir page 5), passant ainsi de quelques dizaines de mailles dans les années 1960 à plusieurs dizaines de milliers de mailles dans les années 1980, à des millions dans les années 1990 et... à des milliards aujourd'hui.

... AU SUPERCALCULATEUR

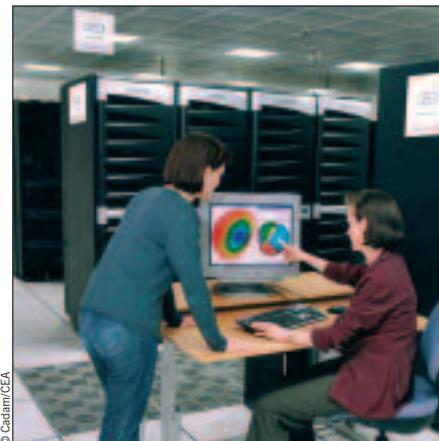
Les ordinateurs de bureau peuvent parfois suffire pour modéliser un phénomène simple ou élaborer une hypothèse.

Sa modélisation et sa simulation peuvent ensuite nécessiter une plus grande mémoire (comme dans les *clusters* de SMP – systèmes à mémoire partagée) pour affiner la programmation. Le recours à des supercalculateurs n'intervient qu'une fois le modèle établi et la programmation terminée.

Non seulement les supercalculateurs préparent les calculs, en analysent les résultats, mais ils permettent à l'utilisateur d'accéder à des grandes puissances de calcul, à une visualisation partagée des résultats et à une capacité de stockage inégalée. L'ensemble de ces équipements est relié par des réseaux informatiques, augmentant les informations et les débits compatibles avec les données produites de l'ordre d'un **téraoctet** de données pour une seule simulation. Les supercalculateurs atteignent aujourd'hui des puissances qui se chiffrent en **téraflops**.

Soit 10¹² octets.

Soit 1 000 milliards d'opérations par seconde.



© C. Dupont/CEA

Afin d'augmenter la capacité des équipements de simulation numérique, le CEA s'est doté fin 2001 d'un supercalculateur de 5 téraflops, porté fin 2005 à 50 téraflops.



© C. Dupont/CEA

ARCHITECTURES PARALLÈLES

Trois architectures permettent de mettre des processeurs en parallèle :

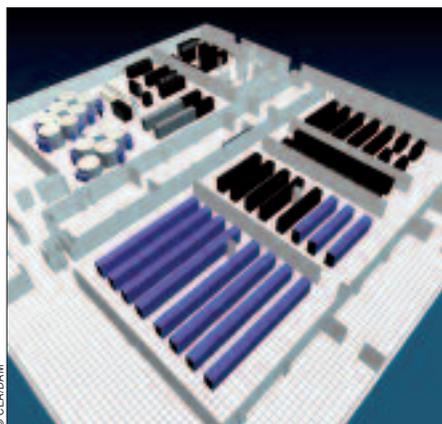
- les architectures vectorielles ;
- les grappes de processeurs scalaires à mémoire partagée. Ce système utilise comme principe des mini-ordinateurs – appelés « nœuds » – comportant plusieurs micro-processeurs qui partagent une mémoire commune. Ces mini-ordinateurs sont multiples et reliés entre eux par un réseau d'interconnexions hautes performances ;
- les grappes de PC. Elles sont peu adaptées à des environnements où de nombreux utilisateurs font beaucoup de calculs dits « implicites » qui couplent les processeurs entre eux et demandent des flux d'information d'un processeur à un autre en permanence. En revanche, des calculs lourds peuvent être faits

TERA-10 EN TÊTE DE CLASSE

Chaque année, des chercheurs de l'université de Mannheim, en Allemagne, et du *Lawrence Berkeley national laboratory*, aux États-Unis, établissent un palmarès mondial des supercalculateurs. Longtemps placées en fin de palmarès, l'Europe et la France faisaient office de « mauvais élèves ». La France, grâce au supercalculateur Tera-10, installé sur un centre CEA à Bruyères-le-Châtel (Essonne), occupait, en 2006, la deuxième place européenne et la septième place mondiale. Le calcul intensif est un des vecteurs de la compétitivité mondiale, ce que certains pays comme les États-Unis et le Japon ont bien perçu.

sur ces grappes de PC (génomique ou calculs paramétriques, par exemple).

Dans ces trois cas, des salles entières sont remplies d'ordinateurs qui fonctionnent soit pour le traitement en parallèle d'une seule application en utilisant toutes les ressources,



© CEADAM
Le projet Tera occupe quelque 2 000 m² : les alignements de processeurs au premier plan, les salles de gestion des données au second.

GRID'5000 AU PROGRAMME

Le ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche a lancé au niveau national un projet nommé « Grid'5000 ». La construction d'une grille informatique pourvue de 5 000 processeurs environ s'achèvera courant 2007. Sa puissance devrait atteindre plusieurs téraflops. Son objectif est triple :

- l'expérimentation de nouveaux algorithmes pour améliorer le calcul scientifique dans une telle architecture ;
- la maîtrise des communications, par la conception de nouveaux protocoles réseaux autres qu'internet, mais présentant une technologie similaire ;
- la conception de logiciels pour faciliter la programmation des grilles.

Ce projet est soutenu par des organismes de recherche tels que le CNRS, l'Inria, plusieurs universités, Renater, des conseils généraux et régionaux.

soit pour de multiples applications indépendantes, parallèles ou non, qui utilisent chacune une partie des ressources. Quant au stockage des données et à l'archivage, ils nécessitent une batterie de serveurs, d'armoires informatiques et de robots de stockage, qui doublent le volume des salles dédiées.

LES GRILLES DE CALCULS ET DE DONNÉES

Un autre moyen pour augmenter la puissance de calcul est de relier entre eux des ordinateurs répartis sur plusieurs sites. Ces équipements informatiques sont hétérogènes, de puissance inégale, avec des capacités de stockage variables. Il existe deux sortes de « grilles » :

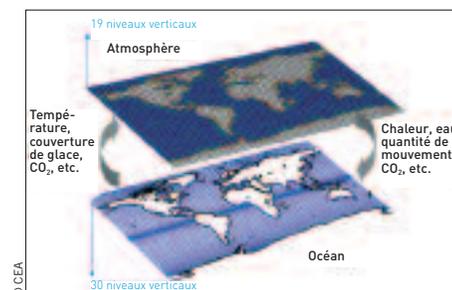
– Les grilles de calculs, représentées par la mise en commun d'un ensemble de super-calculateurs ou un très grand nombre d'ordinateurs délocalisés, reliés par un réseau (internet par exemple).

L'objectif de cette architecture est de mieux utiliser les ressources en répartissant les calculs sur un très grand nombre d'ordinateurs, pour un ensemble d'applications indépendantes. La performance est optimale lorsque l'on attribue à chaque ordinateur un programme spécifique.

– Les grilles de données pour la mise en commun des capacités de stockage, c'est-à-dire la répartition des données sur un très grand nombre de serveurs.

Bien entendu, les transferts de données et les calculs doivent s'effectuer dans un univers sécurisé, ce qui semble acquis grâce aux protocoles en place sur internet, mode de

“Plus les calculs des grandeurs seront détaillés, plus la puissance de calcul nécessaire sera grande.”



© CEA
Le couplage de grilles des composantes océanique et atmosphérique permet de représenter les phénomènes tropicaux et d'étudier les différents types de surface (glaces, terre, mer).

communication qui reste, pour l'instant, le plus performant.

Les deux grilles vont donc de pair, car il faut, dans un temps rapide, pouvoir accéder aux données et également exécuter des programmes plus ou moins complexes à partir de celles-ci avant d'en effectuer l'analyse.

LES LOGICIELS

Afin d'optimiser les performances des super-calculateurs ou des grilles informatiques et permettre de modéliser et simuler correctement un phénomène, les logiciels de simulation doivent être spécifiques de l'architecture de l'ordinateur. Il faut donc dès le départ prendre en compte les paramètres suivants :

- la définition de l'architecture informatique (spécifications, types d'ordinateur, systèmes d'exploitation, nature des connexions réseau, capacité de stockage, mémoire vive...);
- la conception de l'application en fonction du modèle et des points à étudier ;
- la programmation, qui permet de tirer parti du plus grand nombre de processeurs ;
- les protocoles de sécurité, pour garantir les transferts de données et la communication entre ordinateurs.

Dans un premier temps, le « modèle » est enregistré et un découpage des calculs est effectué, puis programmé en fonction des grandeurs à étudier indiquées par les chercheurs (physiciens, mathématiciens, biologistes, chimistes...). L'informaticien se charge ensuite de les traduire en valeurs informatiques exploitables par les processeurs. Plus le calcul de ces grandeurs sera détaillé, plus précis sera le résultat, mais aussi plus la puissance de calcul nécessaire sera grande.

Toutefois, la tendance est de favoriser le transfert technologique et de développer des logiciels qui permettent d'étudier des phénomènes physiques proches, transposables d'une thématique à une autre moyennant l'enregistrement d'un modèle et de paramètres adaptés. Ces logiciels sont ensuite mis à la disposition des chercheurs et des industriels.

UTILISÉE LA PREMIÈRE FOIS LORS DE LA SECONDE GUERRE MONDIALE, LA SIMULATION NUMÉRIQUE EST INITIALEMENT LIÉE AUX APPLICATIONS DE DÉFENSE.

Simulation et Défense



© CEA

1939-1945

La simulation numérique est apparue en même temps que l'informatique pour les besoins du projet Manhattan pendant la Seconde Guerre mondiale, afin de modéliser le processus de détonation nucléaire. Depuis, elle a évolué parallèlement à l'informatique.

1944

Colossus est une autre machine destinée au calcul intensif. Elle « cassait » les codes secrets nazis. Mais il s'agit d'une calculatrice spécialisée difficilement programmable.

1948

Naissance de Baby, le premier véritable ordinateur puisqu'il respecte le principe de programme enregistré en mémoire centrale.

L'histoire de la simulation numérique en quelques dates... L'histoire de la simu

En France, le programme Simulation naît en 1996, lorsque le président de la République décide l'arrêt définitif des essais nucléaires et signe le Traité d'interdiction complète des essais (Tice), ratifié en 1998 par le Parlement. Conçu pour permettre de garantir la fiabilité et la sûreté des armes nucléaires françaises sans nouveaux essais, ce programme s'articule autour de trois volets : la modélisation physique, la simulation et l'expérimentation par parties.

REPRODUIRE LE FONCTIONNEMENT D'UNE ARME

La simulation numérique permet de reproduire, par le calcul, les différentes étapes de fonctionnement d'une arme avec une capacité de prédiction largement accrue par rapport à la période où les essais étaient possibles. Il faut d'abord, à partir de l'ensemble des phénomènes physiques impliqués (mécanique des fluides, transport de neutrons...), étudier la façon dont ils s'enchaînent et se couplent, trouver des modèles plus précis et établir les équations mathématiques les représentant. Une fois le système d'équations posé, il faut analyser également les lois de comportement de la matière (équations d'état, sections efficaces neutroniques, coefficients de transport...) pertinentes dans ce domaine. Ces modèles décrivent

Mesures de la probabilité d'interaction d'un neutron avec les noyaux de la matière.

donc les étapes physiques (calculs d'énergie, de déformation des matériaux, de mélange de fluides, de rayonnements...) à l'œuvre dans une arme.



© CEADAM

La visualisation sur un « mur d'images » permet un travail collaboratif.

Des centaines d'ingénieurs informaticiens et numériciens écrivent des logiciels, soit des millions de lignes de codes développées à partir de modèles établis par autant de physiciens et validés *in fine* grâce aux expérimentations du passé. Avec les charges nucléaires (l'édifice explosif), dites « robustes », testées en 1995-1996, la France dispose d'une référence expérimentale peu sensible aux variations technologiques. La militarisation (c'est-à-dire l'adaptation de la charge à son emport) peut être alors effectuée sans essai, avec une modélisation des écarts engendrés par cette opération faite par la simulation.

Les modèles sont de plus en plus sophistiqués mais la contrainte de temps reste identique : il faut faire tourner ce simulateur en quelques semaines maximum. Il faudra donc, à l'horizon 2010, un ordinateur d'une puissance évaluée

1950

L'ordinateur devient un produit: 45 exemplaires de l'Univac 1 de Konrad Zuse sont livrés. En 1955, l'IBM 704, premier ordinateur commercial scientifique avec virgule flottante, apparaît aux États-Unis.

1957

La révolution CDC. La société Control Data Corporation va lancer une impressionnante série d'ordinateurs à vocation

scientifique: le CDC 1604, le CDC 6600, premier supercalculateur commercial. Celui-ci séduit les laboratoires américains et français impliqués dans le développement de l'arme nucléaire.

1969

L'architecte de CDC, Seymour Cray, lance le CDC 7600, dix fois plus puissant. L'air pulsé ne suffisant plus, ses modules sont refroidis par circulation d'un liquide.

1972

Création de Cray Research, qui se donne pour objectif de construire l'ordinateur le plus puissant du monde. Le Cray 1 devient LE supercalculateur vectoriel dès 1975.

1982

Arrivée de son successeur multiprocesseur Cray XMP, puis du Cray 2 en 1985. Celui-ci est si puissant qu'il est plongé directement dans un liquide réfrigérant: c'est le premier ordinateur aquarium.

1989

CDC reprend la première place avec l'ETA 10. Des offensives viennent du Japon, la notion de « parallélisme » apparaît, donnant lieu à de multiples prototypes d'Intel, nCube, BBN, Meiko... Après une phase de prolifération, la sélection naturelle fait son œuvre.

histoire de la simulation numérique en quelques dates... L'histoire de la simulation numérique en quelques dates... L'histoire de la simulation numérique en quelques dates...



© Cadam/CEA

Injecteur d'électrons de l'installation Airix et radiographie obtenue.

à 500 téraflops crête, soit cinq cent mille milliards d'opérations par seconde. C'est l'architecture parallèle qui a été retenue pour atteindre, par paliers, cet objectif: 5 téraflops en 2001, 50 en 2005 et 500 en 2010.

PHASE EXPÉRIMENTALE

La qualité et la capacité de prédiction de ces programmes seront vérifiées par des expériences de laboratoire réalisées sur deux instruments: Airix et le Laser mégajoule (LMJ). L'installation de radiographie pour l'imagerie X (Airix), mise en service en décembre 1999, permet de valider les calculs de simulation de la phase pyrotechnique (détonateur et explosif) du fonctionnement d'une arme. Les expériences menées sur Airix sont appelées « tirs froids »: les matières fissiles sont remplacées par des matériaux inertes au comportement mécanique et thermique similaire. Airix permet de caractériser, à échelle réelle, des phénomènes comme la compression de la matière ou la répartition de sa densité au cours de l'implosion déclenchée par la mise à feu de l'explosif.

© P.Stroppe/CEA



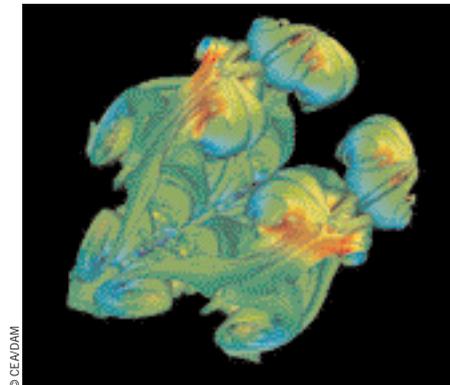
Contrôle de diagnostics à l'intérieur de la chambre d'expérience de la LIL.

La radiographie par rayons X permet de savoir ce qui se passe lorsque les matériaux sont comprimés à la vitesse de 2 à 3 km/s, durant quelque dix millièmes de seconde, et d'en connaître la configuration interne. Le second instrument, le Laser mégajoule (LMJ), qui est en cours de construction près de Bordeaux, sera capable de reproduire dans des microquantités de matière le processus physique de la fusion que l'on retrouve dans le fonctionnement d'une arme thermonucléaire. Le LMJ possédera 240 faisceaux; la Ligne d'intégration laser (LIL), avec actuellement 4 faisceaux, en est le prototype. Sur la LIL, la source laser produit un faisceau infrarouge d'une énergie d'un milliardième de

joule. Celui-ci est d'abord amplifié jusqu'à 1 J puis atteint 15 kJ en passant au travers de plaques de verre dopées au néodyme. Ce rayon est converti en un faisceau ultraviolet d'une énergie de 7,5 kJ. Alors seulement il entre dans la chambre d'expériences, une sphère de 4,5 mètres de diamètre. Dans le LMJ, les faisceaux devront tous converger, en même temps, sur une microbille contenant un mélange de deutérium-tritium pour déclencher la réaction de fusion.

VALIDATION NUMÉRIQUE GLOBALE

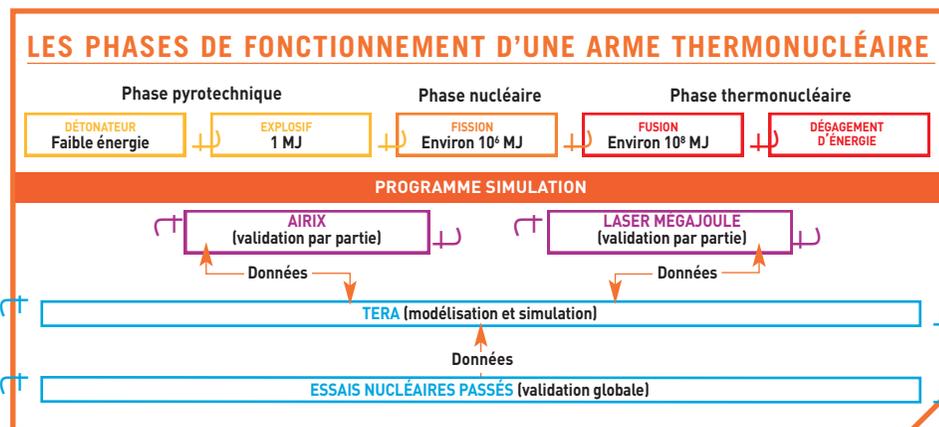
Après cette validation par parties, la qualité des logiciels sera vérifiée dans sa globalité sur le supercalculateur Tera. Les modèles obtenus doivent reproduire fidèlement certains essais



© CEADAM

Simulation du développement d'instabilités en 3 dimensions effectué sur Tera.

nucléaires passés, dont tous les résultats et données ont été conservés sous forme numérique.



années 90

Le parallélisme se banalise, le processeur vectoriel recule devant le microprocesseur. Mais on voit aussi se multiplier des solutions mixtes réunissant, via un réseau d'interconnexions par messages, des nœuds constitués de plusieurs processeurs couplés par mémoire partagée.

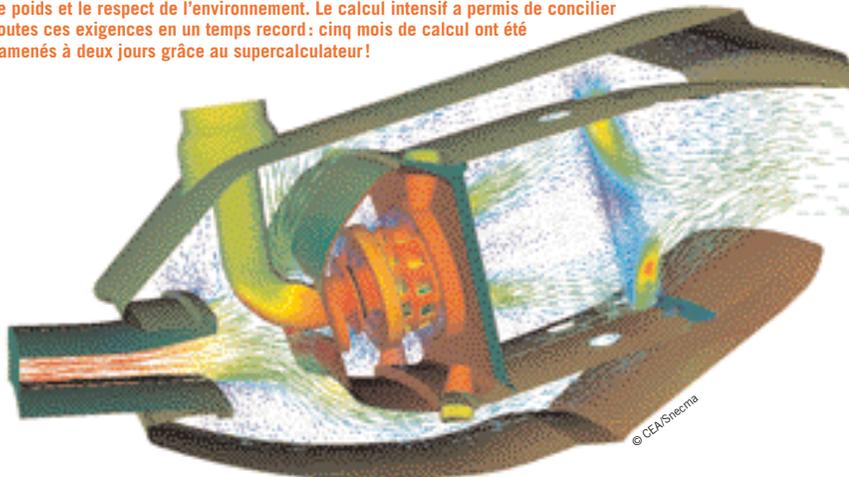
aire de la simulation numérique en quelques dates...

La gestion des données est aussi un point important : chaque jour, la machine produit plus de 3 téraoctets de données, c'est-à-dire de l'ordre d'un pétaoctet (10^{15} bits) par an. Comme il n'est pas envisageable de perdre les résultats de calculs qui ont duré plusieurs semaines sur des milliers de processeurs, des sauvegardes très régulières sont indispensables.

Depuis 2001, le CEA a ouvert ses puissants moyens de calcul à la communauté scientifique et au monde industriel. Il a mis à leur disposition en 2003 son Centre de calcul recherche et technologie (CCRT) sur le site de Bruyères-le-Châtel. Puis il a initié la création d'une technopole baptisée Ter@tec.

LE CCRT : CENTRE DE CALCUL POUR LE CEA ET SES PARTENAIRES

Tous les chercheurs du CEA bénéficient des moyens du Centre de calcul recherche et technologie, qui sont aussi mis à disposition de la communauté scientifique et de partenaires industriels tels EDF, le groupe Safran (Snecma, Turbomeca, Techspace Aero), l'Onera, le Cerfacs... À titre d'exemple, un turboréacteur conçu par la Snecma est un système très complexe dont les comportements mécaniques, aérodynamiques et thermiques doivent répondre à plusieurs contraintes aussi différentes que la performance, la fiabilité, la sécurité, le coût, le poids et le respect de l'environnement. Le calcul intensif a permis de concilier toutes ces exigences en un temps record : cinq mois de calcul ont été ramenés à deux jours grâce au supercalculateur !



Simulation d'une chambre de combustion de moteur d'avion. Visualisation de la vitesse d'écoulement des fluides.

TER@TEC, CŒUR DE LA SIMULATION HAUTE PERFORMANCE

Ter@tec est un pôle européen de compétence qui fédère les principaux acteurs de la simulation numérique haute performance. Cette structure facilite les échanges et les



Ter@tec offre à ses partenaires un accès à des moyens de calcul importants et diversifiés, du CEA et de HP et de Bull.

collaborations entre les chercheurs, les entreprises de l'informatique et les industriels. Créé par le CEA et les collectivités territoriales, il bénéficie de la compétence des équipes du CEA dans ce domaine. Au 1^{er} janvier 2007, Ter@tec rassemblait 43 partenaires*.

L'utilisation de la simulation haute performance et du calcul intensif est un enjeu stratégique, qui permet à la recherche de faire progresser les grands défis scientifiques et techniques et à l'industrie d'accroître sa compétitivité en concevant, en développant et en optimisant plus rapidement de nouveaux produits. Ter@tec répond à cet enjeu, dans des domaines aussi divers que l'électronique, l'aéronautique, la sûreté des réacteurs nucléaires, l'évolution des climats ou le comportement des matériaux.

À titre d'exemple dans le domaine de l'aéronautique, les ingénieurs du CEA et de Dassault ont utilisé Tera-10, le supercalculateur du CEA, pour mettre au point le Falcon 7X et réaliser ainsi un grand challenge (une simulation exceptionnelle, utilisant la plus grande partie du

calculateur). L'écoulement de l'air le long de la coque et des ailes, ainsi que le comportement des matériaux, ont été simulés de façon à améliorer l'aérodynamisme, optimiser la consommation de carburant et la manœuvrabilité de l'avion.

Côté recherche, la simulation numérique présente un autre avantage : elle permet de comprendre et d'étudier les phénomènes qu'on ne sait pas reproduire en laboratoire. Exemples : l'origine des galaxies, le fonctionnement du Soleil, ou encore la propagation d'un tsunami. Les chercheurs du CEA ont ainsi beaucoup travaillé sur le tsunami du 26 décembre 2004. Ils ont entré dans le supercalculateur les données physiques du tsunami (une faille de 1 000 km de long, qui s'est soulevée de 8 à 10 m en hauteur, sur une largeur de 150 km) ainsi que la carte des fonds de l'Océan Indien. Grâce à la simulation, les variations du niveau de l'eau et la propagation des vagues vers la terre peuvent être calculées en tous points. Si ces calculs permettent de mieux connaître le phénomène, ils permettent aussi de dresser des cartes de zones à risque, et de disposer d'un précieux outil de prévention.

Ter@tec fait partie intégrante du pôle de compétitivité System@tic Paris-Région, consacré aux logiciels et systèmes complexes.

* Airbus, Aria Technologies, Bertin Technologie, Bull, CEA, Cenaero, Centre scientifique et technique du bâtiment, Cerfacs, Cluster Vision, CNRS, Communication et Systèmes, Dassault Aviation, DataDirect Networks, Distène, Ecole centrale de Cachan, Ecole des mines de Paris, Ecole normale supérieure de Cachan, Electricité de France, ESI Group, Eurobios, Fluent, Fujitsu, HP France, IFP, Inria, Institut national des télécoms d'Évry, Intel, Numtech, Open Cascade, Oxalya, Principia, Safran, Serware, SGI, STMicroelectronics, Sun, Supeclec, Total, Transtec, Université de Versailles-Saint-Quentin, Communauté de communes de l'Arpajonnais, Ville de Bruyères-le-Châtel, Ville d'Ollainville.



Simulation aérodynamique d'un avion Falcon en 3D.



Modélisation du circuit de refroidissement dans une cuve de réacteur REP.



Reconstitution du tsunami de Sumatra de décembre 2004.

L'INDUSTRIE NUCLÉAIRE EST L'UNE DES APPLICATIONS MAJEURES DE LA R & D EN SIMULATION NUMÉRIQUE. AU BÉNÉFICE DE LA PERFORMANCE COMME DE LA SÛRETÉ.

Simulation et industrie



Au CEA, une des applications majeures de la R & D en simulation numérique concerne l'industrie nucléaire.

La simulation numérique permet de mieux répondre aux grands enjeux que représentent la compétitivité économique du nucléaire, la sûreté de fonctionnement et le développement durable (meilleure consommation des ressources, minimisation des déchets).

Le gain de compétitivité passe par un accroissement des performances : l'augmentation de la durée de vie de la cuve des réacteurs ou l'augmentation du taux de combustion du combustible nucléaire par exemple.

Le renforcement de la sûreté passe par une meilleure connaissance des marges de fonctionnement par rapport aux conditions accidentelles.

Le calcul des phénomènes physiques qui se produisent dans les installations nucléaires apporte une aide précieuse pour atteindre ces objectifs. L'approche est « multi-échelle » et débouche sur une meilleure connaissance des conditions de fonctionnement, à la fois globale (ensemble d'une installation) et détaillée (un composant comme une pompe ou un générateur de vapeur, ou un sous-ensemble d'un composant). Elle est aussi « multiphysique » dans la mesure où elle prend en compte l'interaction entre phénomènes physiques de nature variée.

Ces calculs doivent être validés par confrontation à des données expérimentales, qu'il s'agisse de programmes de recherche adaptés aux situations à traiter ou de données provenant des instal-

lations nucléaires elles-mêmes et mesurées en fonctionnement normal ou accidentel.

À cet égard, l'accident de Three Mile Island aux États-Unis en 1979, où un défaut de refroidissement a provoqué la fusion du cœur d'un réacteur, a permis de relever de nombreuses données reprises dans les études sur la sûreté. Compte tenu de la variété et de la complexité des phénomènes à simuler, le nucléaire est fortement consommateur de moyens de calcul. Des informaticiens, des physiciens, des numériques et des expérimentateurs conjuguent leurs forces pour développer, valider et maintenir ces logiciels (ou « codes ») de calcul.

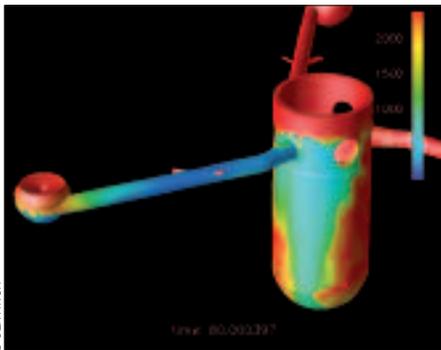
Citons par exemple trois domaines qui font l'objet d'études continues et de développement de logiciels utilisés par les différents acteurs du nucléaire tant au niveau national qu'international et mobilisent les plus fortes ressources en machines de calcul : la thermohydraulique, la neutronique, les matériaux.

SIMULATION EN THERMOHYDRAULIQUE

La thermohydraulique est une discipline qui combine thermique et hydraulique, c'est-à-dire qu'elle étudie les relations entre l'énergie thermique (chaleur) et un fluide (par exemple de l'eau, qu'il soit à l'état liquide, vapeur ou sous forme d'une combinaison de ces états).

On saisit l'importance de cette discipline pour les réacteurs nucléaires lorsqu'on sait que ceux-ci fonctionnent comme une chaudière. Pour les réacteurs à eau sous pression qui composent

“Mieux répondre aux grands enjeux que représentent la compétitivité économique du nucléaire, la sûreté du fonctionnement et le développement durable.”



Modélisation avec le code Trio-U des zones de mélange en différents points d'une maquette de réacteur.

le parc français, le principe est de faire circuler de l'eau dans un circuit primaire fermé. L'eau s'échauffe lors de son passage dans le cœur du réacteur (lieu des fissions d'atomes d'uranium dégageant une importante énergie), puis se refroidit dans les générateurs de vapeur, où la chaleur est transmise à un circuit secondaire. Dans ce dernier, l'eau se vaporise et entraîne une turbine associée à un alternateur qui produit le courant électrique. Ainsi, l'eau fait office de **caloporteur**.

Fluide qui transporte vers le circuit secondaire la chaleur créée dans le cœur.

La thermohydraulique étudie les fluides à toutes les échelles: du microscopique (une goutte d'eau ou une bulle de vapeur de quelques millimètres) au macroscopique (l'ensemble d'un réacteur nucléaire, couvrant plusieurs dizaines de mètres). Selon l'objectif poursuivi et

les contraintes imposées sur la précision requise, un calcul de thermohydraulique peut ou non combiner toutes ces échelles. Les calculs les plus fins sont aussi évidemment les plus longs.

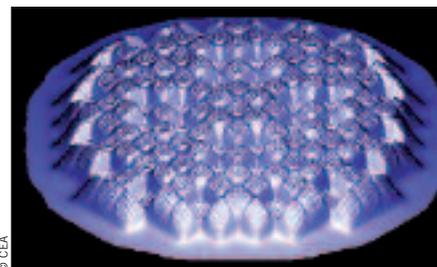
Les logiciels de thermohydraulique se fondent sur des modèles physiques qui s'expriment en équations et sont traduits en instructions logiques grâce à des méthodes numériques. Les modèles physiques sont établis à partir d'observations expérimentales. Les logiciels sont à leur tour qualifiés et validés par confrontation à des programmes expérimentaux. Ce sont:

- d'une part, des expériences « analytiques », permettant d'étudier des phénomènes physiques isolés dans une configuration géométrique simplifiée;
- d'autre part, des expériences « globales » mettant en jeu une combinaison de phénomènes physiques dans une configuration géométrique complexe.

INTERACTIONS NEUTRONS-MATIÈRE

La neutronique étudie le cheminement des neutrons lors des réactions de fission et de leur interaction avec la matière, en particulier dans les réacteurs nucléaires.

Rappelons que dans le cœur du réacteur sont insérés des crayons combustibles contenant de l'uranium et du plutonium. Des neutrons « bombardent » les noyaux d'uranium ou de plutonium, les cassent. Cette fission dégage d'importantes quantités d'énergie, ainsi que d'autres neutrons. Afin de réguler la produc-



© CEA

Répartition des flux de neutrons émis par le cœur d'un réacteur REP calculée grâce au code Cronos.

tion de neutrons et éviter que le cœur ne « s'emballé », des barres de contrôle ou des solutions font office d'absorbants de neutrons, ce qui permet de contrôler les réactions de fission. L'enjeu de la neutronique est de modéliser l'ensemble des interactions entre les neutrons et la matière. Il s'agit notamment de calculer non seulement la puissance totale d'un réacteur nucléaire mais aussi la puissance locale dans l'ensemble du cœur (représentant des milliards de noyaux d'uranium ou de plutonium). Pour les industriels qui demandent des logiciels aptes aux calculs fins et précis, l'objectif est de mieux connaître les marges de fonctionnement des réacteurs.

Les calculs utilisent des bases de données qui rassemblent les « données nucléaires de base », informations relatives à chaque interaction entre les neutrons et les noyaux des atomes. Ces données sont exploitées dans les équations de bilan des neutrons: d'une part, l'équation de Boltzmann qui décrit très précisément le bilan neutronique; d'autre part, l'équation de Bateman qui décrit l'évolution isotopique des milieux radioactifs soumis au flux de neutrons. L'équation de Boltzmann est d'abord résolue très finement sur un motif élémentaire dans



© L. Gobran/CEA

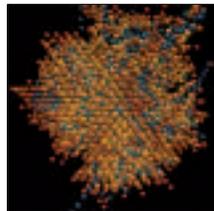
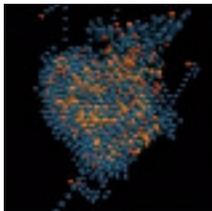
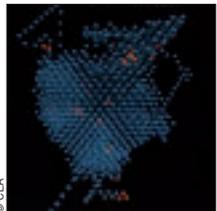
UNE SIMULATION AU SERVICE DES INDUSTRIELS ET DE LA SÛRETÉ NUCLÉAIRE

Le développement de la plupart des logiciels de simulation est soutenu et parfois coréalisé avec EDF, Areva et l'IRSN. Ces logiciels sont donc conçus pour servir à la fois d'outils pour la R & D et d'instruments pour des applications industrielles.

Certains d'entre eux sont livrés à des partenaires étrangers ainsi qu'à des industriels du monde non-nucléaire, car des disciplines comme la thermohydraulique ou la science des matériaux sont génériques, et des développements réalisés pour le nucléaire peuvent bénéficier à d'autres applications (comme le lanceur Ariane, par exemple).

une représentation énergétique et géométrique très détaillée et pour différentes configurations de fonctionnement. Puis, on en déduit les caractéristiques moyennes du motif ou d'un ensemble de motifs pour obtenir une représentation de tout le réacteur. C'est donc une démarche multi-échelle qui est mise en œuvre. Mais c'est aussi une démarche multiphysique, tous ces calculs de neutronique intégrant un couplage étroit avec la thermohydraulique, car le fluide environnant le combustible nucléaire modifie le spectre énergétique des neutrons.

“La prédiction du comportement des matériaux sous irradiation constitue un véritable défi.”



Simulation de la cascade de déplacements des atomes 0,7/2,5/10,3 picosecondes après une collision avec un neutron lors de l'irradiation d'un matériau.

MATÉRIAUX, UN VÉRITABLE DÉFI

Une des spécificités des matériaux du nucléaire est d'être soumis localement à des irradiations qui induisent une modification structurale à des températures très diverses. La prédiction du comportement des matériaux sous irradiation, qu'ils soient métalliques ou céramiques, constitue un véritable défi. On veut pouvoir anticiper l'évolution de leurs propriétés sur de longues durées: quelques années pour le combustible, quelques décennies pour la cuve et les internes des réacteurs, et quelques siècles pour les matériaux de confinement.

Prenons l'exemple des aciers d'une cuve de réacteur et de ses structures internes: ils sont soumis à un bombardement neutronique à des températures plus ou moins élevées. Ce jeu de billard atomique éjecte des atomes de leurs sites, créant parfois des défauts au sein de l'acier. La structure ainsi modifiée peut être fragilisée.

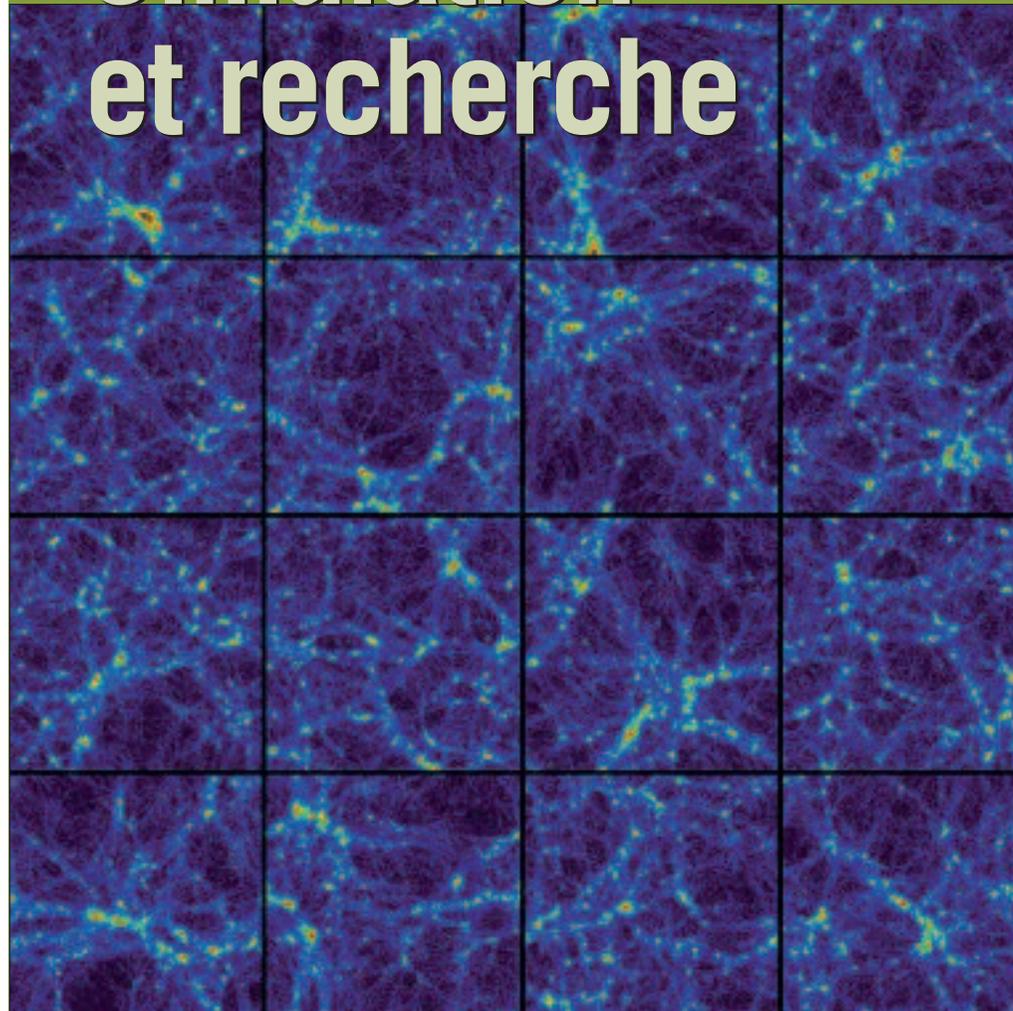
La simulation numérique s'avère un outil incontournable pour prédire le comportement de ces matériaux localement, globalement et sur de courtes ou très longues périodes.

Pour couvrir ces échelles de temps et d'espace, les outils de modélisation des matériaux se classent en quatre catégories qui concernent: la modélisation de la liaison chimique (modèles de cohésion), la modélisation à l'échelle atomique des événements rapides (dynamique moléculaire), la modélisation des cinétiques lentes de vieillissement (méthodes déterministes ou de Monte-Carlo) et le passage de la microstructure aux propriétés d'emploi.

L'ensemble des connaissances capitalisées dans ces outils permet d'avoir à disposition un véritable « laboratoire numérique ». Mais il est indispensable de valider ce laboratoire en comparant ces résultats à ceux obtenus par expérimentation sur des échantillons que l'on irradie sur mesure dans les réacteurs nucléaires de recherche comme ceux du CEA (Osiris aujourd'hui, le réacteur Jules-Horowitz dans le futur). La mise au point des modèles sous-jacents à ces outils s'appuie sur des irradiations de tout petits échantillons par des particules chargées disponibles sur des accélérateurs dédiés.

LE DOMAINE DE LA SIMULATION NUMÉRIQUE S'ÉTEND DE L'INFINIMENT PETIT À L'INFINIMENT GRAND.

Simulation et recherche



En médecine et en sciences humaines, le recours à la simulation numérique commence à s'étendre. Dans ces secteurs, les enjeux – d'ordre sociétal, sanitaire, mais également économique – sont de taille.

SIMULER LA STRUCTURE DES PROTÉINES

Dans le domaine de la santé, la connaissance des protéines et de leur structure est primordiale.

Molécules qui assurent la plupart des fonctions élémentaires d'une cellule.

Les protéines sont extrêmement importantes dans l'organisme car elles

interviennent dans la plupart des processus biologiques. Elles sont de plusieurs sortes :

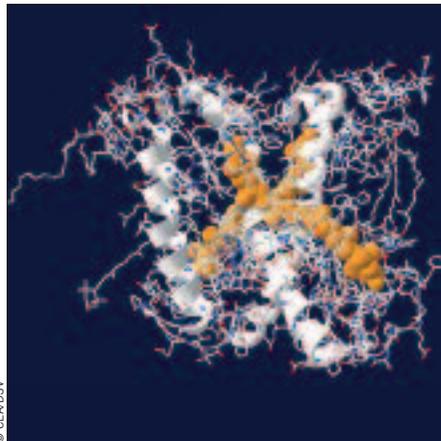
- les enzymes catalysent la majorité des réactions chimiques de la cellule,
- d'autres protéines interviennent dans la signalisation, la régulation du métabolisme ou la défense immunitaire.

Les protéines sont des polymères d'acides aminés, constitués en chaîne (chacune comportant quelques centaines d'acides aminés), liés les uns aux autres de façon très précise. Leur architecture est donc spécifique et peut prendre plusieurs formes : boucles, hélices... La fonction et les mécanismes d'action d'une protéine sont étroitement liés à son repliement tridimensionnel.

Déterminer la structure d'une protéine à partir de sa formule chimique passe d'abord par l'expérimentation.

Pour cela, deux techniques sont utilisées :

- la cristallographie ou bio-cristallographie



© CEADSV

Simulation de protéine.

consiste à trouver le solvant dans lequel la protéine va cristalliser, puis à déduire sa structure en étudiant la déviation des rayonnements X sur ce cristal (diffraction des rayons X émis par un synchrotron) ;

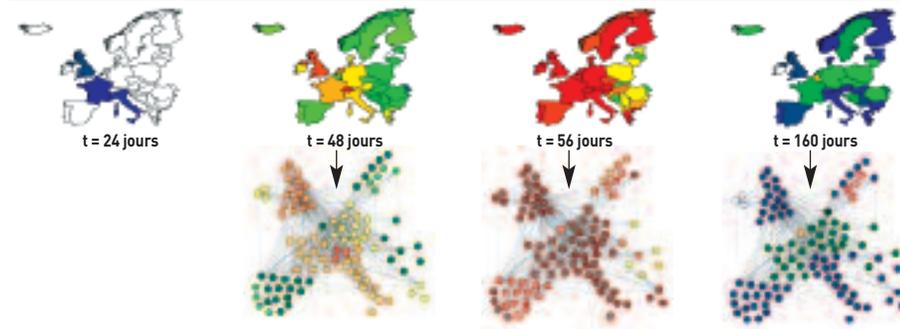
- la résonance magnétique nucléaire.

Ces deux techniques expérimentales ont permis de constituer une base de données riche de l'identité de plusieurs centaines de protéines, utilisée pour concevoir des modèles.

La modélisation doit suivre un processus rigoureux afin de déterminer les études et les calculs à effectuer, selon cinq étapes :

- la composition : le nombre, le type, le caractère chimique et l'environnement des molécules sont précisés ;

SIMULER LES ÉPIDÉMIES ET LES PANDÉMIES



Cette modélisation permet de comprendre la propagation d'un virus, humain ou animal (par exemple du sida, du Sras ou de la grippe aviaire) à l'échelle mondiale, et par conséquent de pouvoir la prévenir et de prendre les mesures indispensables pour éviter les épidémies et les pandémies. Le principe est de corréler les informations sur le lieu où le virus s'est déclaré, sa période d'incubation et les données des 4 000 principaux aéroports mondiaux : la fréquence

des vols, le nombre de passagers, les lieux de départ et ceux d'arrivée. Car le moyen le plus rapide pour la propagation d'un virus très contagieux, comme celui de la grippe, est le transport aérien. Grâce à ces informations, un modèle informatique est élaboré, puis le recours à un supercalculateur est indispensable compte tenu de la quantité de données et de calculs à effectuer pour identifier les voies préférentielles de propagation et tester des stratégies de contrôle de ces épidémies.

Dès la découverte des premiers cas de Sras (Syndrome respiratoire aigu sévère) en Chine en 2002, la modélisation et la simulation correspondante ont permis de prévoir la propagation de la maladie. Le modèle a été validé au fur et à mesure grâce aux données recueillies « sur le terrain », à savoir le nombre de personnes atteintes. L'épidémie a pu être contrôlée grâce à la mobilisation internationale dès 2003, ce qui a évité de nombreuses victimes.

© M.Barthélémy/CEA

- la nature des forces et leur énergie « potentielle » : la protéine est constituée en moyenne de 150 acides aminés, soit 1500 atomes de carbone, oxygène, azote, hydrogène et soufre assemblés les uns aux autres, qui interagissent par des forces. Les algorithmes utilisent cette énergie pour identifier les différentes configurations possibles de la protéine ;

- la sélection des conditions initiales : la position et la vitesse de chaque atome ;
- la simulation du comportement de la protéine : la résolution d'équations décrivant le mouvement des atomes. Sur de puissants ordinateurs, la simulation peut durer quelques semaines pour une molécule constituée de 50 000 atomes ;
- l'analyse des résultats en appliquant les outils

“La simulation permet de vérifier la cohérence globale du Meccano cosmique.”

statistiques. Elle doit relier les résultats obtenus par la simulation aux quantités qui sont mesurées par les expérimentations. Les chercheurs, grâce à des logiciels 3D ou de « conception assistée par ordinateur » (CAO), peuvent visualiser sur leur écran d'ordinateur ou sur des murs d'images le dépliement d'une protéine en plans fixes ou en version animée.

Les intérêts sont de mieux connaître certaines affections et de développer de nouveaux antibiotiques, médicaments, ou molécules biomimétiques.

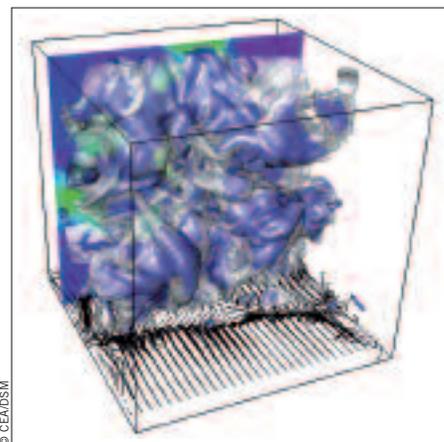
Molécules dont les propriétés essentielles de leur système biologique sont reproduites artificiellement.

SIMULER L'UNIVERS

En astrophysique, l'expérimentation en laboratoire est impossible. Les diverses observations des objets extraordinairement complexes que sont le système solaire, les étoiles, les galaxies, jusqu'à l'Univers dans sa globalité, sont donc complétées par la simulation numérique. Mieux comprendre l'Univers, sa formation, son évolution est une recherche longue et difficile, fondée sur des hypothèses qu'il faut tester, étudier, « disséquer » pour construire des modèles réalistes. Des processus individuellement complexes, comme l'expansion de l'Univers, la force de gravité, la mécanique des fluides autogravitants, la physique atomique doivent être traités de façon couplée. La simulation permet de vérifier la cohérence globale de ce Meccano cosmique. La génération d'un univers virtuel par la simulation numérique se

fonde d'abord sur les conditions initiales de l'Univers, telles qu'on les observe sur le fond diffus cosmologique.

La simulation permet ensuite de faire évoluer le système sur un certain nombre de pas de temps (en cosmologie, le pas de temps typique est de l'ordre d'un million d'années) tout au long de l'évolution de l'Univers. Les résultats sont ensuite comparés aux observations (le nombre, la forme et l'arrangement des galaxies). L'espace à étudier étant très vaste, les chercheurs doivent donc limiter leur champ de recherche à des zones réduites, mais qui nécessitent toutefois plusieurs milliards de mailles. Ces simulations gigantesques sont réalisées

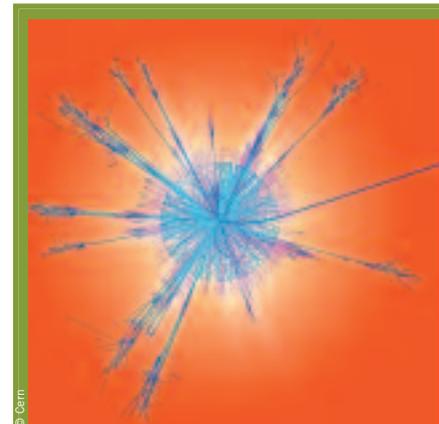


Simulation des turbulences du milieu interstellaire couvrant une région de 50 années-lumière réalisée avec le code Héraclès.

au sein de grandes collaborations nationales et internationales.

En octobre 2006, le passé de la galaxie d'Andromède a été découvert par une équipe internationale d'astrophysiciens. Edwin Hubble l'avait déjà observée en 1929 et en avait déduit la nature des galaxies et l'expansion de l'Univers. Puis une caméra infrarouge, installée sur le satellite Spitzer, a cartographié l'émission de poussières et de macromolécules. Ces observations successives ont permis de découvrir que la galaxie d'Andromède est constituée de deux anneaux : un grand externe et un plus petit interne. Pour remonter à l'origine de cette structure particulière, les chercheurs ont étudié une soixantaine de simulations numériques d'évolution des galaxies. Leur conclusion est que le disque de la galaxie d'Andromède a été percuté et traversé par une petite galaxie, presque en son centre, il y a 200 millions d'années. Ce choc a provoqué différentes ondes qui se sont répercutées dans son disque, comme des « ronds dans l'eau » lorsqu'on y jette un objet. Cette découverte permet de montrer que les galaxies continuent à interagir et à se modifier.

Galaxie spirale la plus proche de la Terre.



CHASSE AUX QUARKS

Cerner l'infiniment petit est l'objectif des détecteurs de l'accélérateur de particules installé au Cern à Genève (Suisse). Depuis longtemps, on pensait que l'atome était constitué de neutrons, de protons et d'électrons. Or, il s'avère qu'il existe des particules encore plus petites. Les quarks, contenus dans les protons, ont été découverts en 1969. Pour les étudier et mesurer précisément leur masse, le collisionneur LHC (Large hadron collider) provoquera la collision de protons, permettant de fabriquer 300 000 quarks par jour. Aussitôt produits, ceux-ci se désintègrent en différentes particules que le détecteur est censé arrêter et observer. Ainsi, il est possible de déduire la masse de la particule mère en mesurant l'énergie cinétique des particules filles. L'objectif est de remonter la piste du « Boson de Higgs », à l'origine de la masse de toutes les particules.

En amont de la conception de ce détecteur, des physiciens ont utilisé la simulation numérique pour optimiser son fonctionnement et, par conséquent, favoriser l'identification et la caractérisation des désintégrations de particules.

En aval, face au très grand volume de données à traiter, le Cern envisage de recourir à trois grilles de calcul, de capacité équivalente, dans le monde.